

基于 Lab VIEW 7 Express 电导法测定弱酸 离解常数的虚拟仪器*

李将渊, 李元文, 王文彬

(西华师范大学 化学化工学院, 四川 南充 637002)

摘要: 利用自制的调理电路, 将常规的电导率仪、温度传感器与计算机连接, 运用 Lab VIEW 7 Express 开发了测定一元弱酸离解常数的虚拟仪器。该虚拟仪器不仅具有界面友好、操作简单、功能易扩展等优点, 还具有温度实时补偿的功能, 实现了实验数据自动采集、实时显示、数据处理和存储, 避免了常规人工操作的繁琐和人为误差, 提高了测试结果的准确性、重现性, 扩展了传统仪器的功能。应用实例表明, 测试结果令人满意。

关键词: Lab VIEW; 电导法; 离解常数; 虚拟仪器

中图分类号: TP 274 **文献标识码:** A **文章编号:** 0258-7971(2007)01-0067-05

Lab VIEW (Laboratory Virtual Instrument Engineering Workbench) 是美国国家仪器 (NI) 公司开发的广泛应用于仪器控制、自动化测试、数据分析处理等领域图形化编程语言, 其数据流图的编程方式, 模块化的子 VI (虚拟仪器, 下同) 及各种形象的控件按钮极大地提高了软件的开发效率, 是优秀的开发虚拟仪器软件, 在自动测控领域得到广泛的应用^[1,2]。

弱酸的离解常数是表征其性质和强度的重要物理化学常数, 在讨论弱酸问题时是不可缺少的常数, 在探讨药物作用的机理和设计化学分析方法中有重要的意义。利用电导法测定弱酸离解常数是化学测试中常用的方法, 在常规测定中人工记录和处理实验数据, 既繁琐又会引入人为误差。计算机辅助测定一元弱酸离解常数的研究也有报道^[3], 但其开发软件一般都是基于文本式的编程语言, 开发周期长, 功能也不易扩展, 且仅能对实验数据进行处理, 原始数据仍需要手工记录、输入。基于 Lab VIEW 7 Express 的能实现自动采集数据、实时显示、处理数据的电导法测定一元弱酸离解常数测试系统尚未见报道。本文采用现代虚拟仪器技术, 根据电导法测定一元弱酸离解常数的原理, 开发了基

于 Lab VIEW 7 Express 具有自动数据采集和处理等功能电导率虚拟仪器, 实现了测定一元弱酸离解常数数据的自动采集处理及结果报告等, 同时该系统还能实时跟踪被测体系的温度, 实时补偿测量体系温度波动引起的测量误差, 应用结果良好。

1 测试原理

一元弱酸离解平衡常数 K_c 与离解度 α , 溶液的浓度 c 和标准浓度 c^\ominus 的关系为: $K_c = (c^\ominus)^2 / (c - c^\ominus)$ 。根据奥斯特瓦尔德稀释定律可得

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m} + \frac{m c}{c K_c (m)^2},$$

式中 m 为溶液无限稀释摩尔电导率, 一般情况下其值可查得; m 为溶液摩尔电导率, 测得不同浓度时溶液的电导率 κ , 由 $m = \kappa / c$ 可求得 m ; 以 $1/m$ 对 $c m / (m)^2$ 或 $(m)^2 / m$ 对 $c m / c$ 作图, 得一直线, 由直线斜率即可求得 K_c 。

由于溶液电导率与其温度有关, 测试中温度的波动会造成结果误差。人工常规操作难以实现补偿由温度波动引起的电导率变化, 因为这需要准确同时跟踪测定温度与电导率数值, 并即时予以校正。

* 收稿日期: 2006-03-14

基金项目: 四川省教育厅项目资助 (川教[2005]198号); 西华师范大学重点项目资助 (200201)。

作者简介: 李将渊 (1950-), 男, 教授, 主要从事电化学与化学虚拟仪器方面的研究。

在作者开发的虚拟仪器中,通过温度传感器同步跟踪监测被测体系的温度,采用两路同时采集数据的方法,利用计算机强大的数据处理功能,实现了实时的温度补偿,提高了测量结果准确度和重现性。

2 系统硬件结构

系统硬件结构如图 1 所示,电导率模拟输出和温度传感器分别由调理线路()和调理线路()处理后,分别经数据采集卡 PCI2005 不同的 2 个通道同时采集,进入计算机。

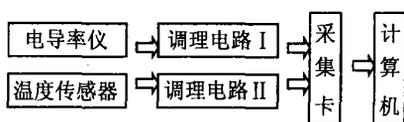


图 1 虚拟仪器系统结构

Fig. 1 The system structure of VI

2.1 电导率仪 作者采用的是上海精密科学仪器有限公司生产的 DDS-307 型数字电导率仪,该仪器备有外接记录仪的 0~10 mV 直流模拟输出信号,将此反映被测体系电导率变化值的直流模拟信号输入调理电路,经调理电路处理后进入采集卡一通道。其它有 mV 级模拟直流电压输出的电导率仪均可。

2.2 温度传感器 由于铂热电阻具有高稳定性、高性价比、使用方便简单以及在小范围内很好的线性关系等优点,采用了 Pt100 作为温度传感器。

2.3 调理电路 调理电路主要由 1 只低漂移 OP07 和 1 只高增益型 CA741 2 块集成运放组成,分别构成差动放大器和二阶有源低通滤波器,分别完成电导率仪输出信号的放大和滤波作用,提高了测试的精度和准确度。调理电路主要包括有 Pt100 和 3 只精密电阻组成的桥电路,由 1 只 OP27 和 2 只 OP07 组成的三运放精密放大电路和由 1 只 OP07 组成的二阶有源低通滤波电路 3 部分,完成非电量信号变换、放大和滤波^[4],本系统测温差精度可达 0.02。经调理电路和调理电路处理后的模拟信号分别接入数据采集卡 2 个输入端,即可实现测试体系的电导率和温度信号的计算机采集。

2.4 数据采集卡 考虑到性价比,该虚拟仪器采用北京阿尔泰科贸有限公司生产的基于 PCI 总线

数据采集卡,该卡可实现 16 通道单端或 8 路双端模拟输入和 1 路模拟输出,输入电阻为 100 M Ω ,输入模拟信号范围为 ± 10 V,采样频率最高可达 200 kHz,A/D 转换器的位数为 16。将卡插入计算机内置的 PCI 插槽,调用相应的驱动程序即可实现模拟信号的采集。对其它的国产卡,只需安装其驱动程序,在 LabVIEW 程序上略作调整也可使用。

2.5 计算机 有空闲 PCI 插槽,32 MB 以上内存,220 MB 硬盘,486/DX 及更高处理器,通常实验室的计算机均可达到要求,所用计算机在测试任务过程中,仍可作为 1 台通用的微机,执行其它任务。

3 LabVIEW 程序设计与实现

系统软件设计主要包括 PCI2005 双通道采集驱动程序设计、数据转换和实时显示程序设计、数据处理程序设计 3 部分,分别完成采集卡的驱动、数据转换和实时显示、实验数据的处理。

3.1 数据采集卡双通道采集程序设计 根据本测试系统的要求,需设计能实现双通道同时对体系的电导率值和温度进行采集的驱动程序,驱动程序调用 LabVIEW 中 Function > Advanced \gg CLF^[5] (Call Library Function Node) 函数来完成。由 7 个子框图组成的层叠顺序结构 (Stacked Sequence Structure) 函数完成 1 次采集卡的驱动,7 个子框图调用不同的函数分别完成采集卡参数设置、设备对象的初始化、启动 A/D 设备、读取 A/D 数据、暂停 A/D 设备、释放 A/D 部分和关闭设备的功能。在层叠顺序结构的第 1 子框图中设置好通道个数和每个通道的缓冲区大小后,将第 4 子框图中从缓冲区中读取的数据按其排列规则进行分离,即可得到每个通道对应数值。取每个通道所有数据的平均值作为一次测量结果,最后根据采集卡的位数和量程将其转化为电压值,这样提高了测量结果的准确性和稳定性。第 4 子框图程序如图 2 (限于篇幅,其它未给出)。

3.2 数据转换和实时显示程序设计 数据采集卡送入计算机的是代表电导率和温度的电压信号,在测试过程中需要实时显示的物理量电导率和温度,在数据处理时也必需是电导率值和温度值,因而虚拟仪器应当首先完成数据物理量标称值的转化,再判断测试任务是否完成,最后将数据实时显示、存储。

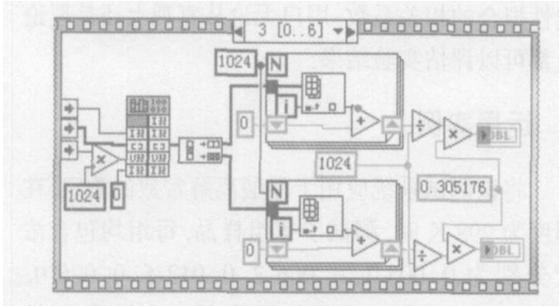


图 2 双通道采集程序

Fig. 2 Program of double channels acquisition

3.2.1 数据转换程序设计 将采集卡双通道采集的电压信号分别转换为电导率值和温度值,转换子 VI 如图 3 所示.由数据采集卡采集的两路电压信号与 Formula Node 的输入端口相连,在 Formula Node 中放置已准确校正好的电压与电导率及电压与温度的函数关系式.同时将 Formula Node 放在 Case Structure 结构中,Case Structure 的 Selection Terminal 端口与控件量程相连,每一个 Subdiagram 对应着电导率仪在不同量程时电压与电导率及电压与温度的校正关系式,这样即可完成在不同量程下电压向电导率和温度的转换.

3.2.2 自动判断程序设计 根据测试原理,每次测量时需分别测出几个不同浓度样品的电导率.对某一浓度样品的测量,系统应具有自动判断被测体系是否已达平衡、测试数据是否可靠,并提示用户换样的功能.为此,作者设计了自动判断子 VI,其程序框图如图 4 所示.测量时在用户设定的采样间隔下平行采样 5 次,若其中最大相对误差不超过 0.01%,则被测体系处于平衡状态,利用控件的属性节点控制 While Structure 的运行和换样指示灯的状态,并取此 5 次测量的平均值作为测量值.此外,用户还可以手动控制采样的停止,方便用户在测试出现异常时控制仪器的运行,增强了虚拟仪器的灵活性和实用性.

3.2.3 数据显示程序设计 实现数据显示的子 VI 如图 5 所示.从初始条件的控件 Cluster 中分离出被测物的浓度和被测物质的编号,由 Case Structure 自动得到被测物质无限稀释摩尔电导率,再根据测得电导率值,计算出 c_m/c 和 $(\kappa_m)^2/\kappa_m$,分别作为 X, Y 值,由控件 XY Graph 实时显示,这样用户可根据实验数据线性的情况,方便直观地对实验情况进行初步的评估.

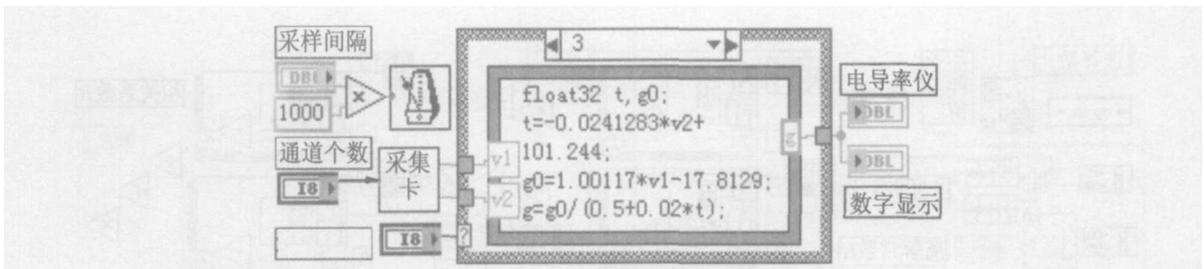


图 3 数据转换 VI

Fig. 3 The subVI of data transforming

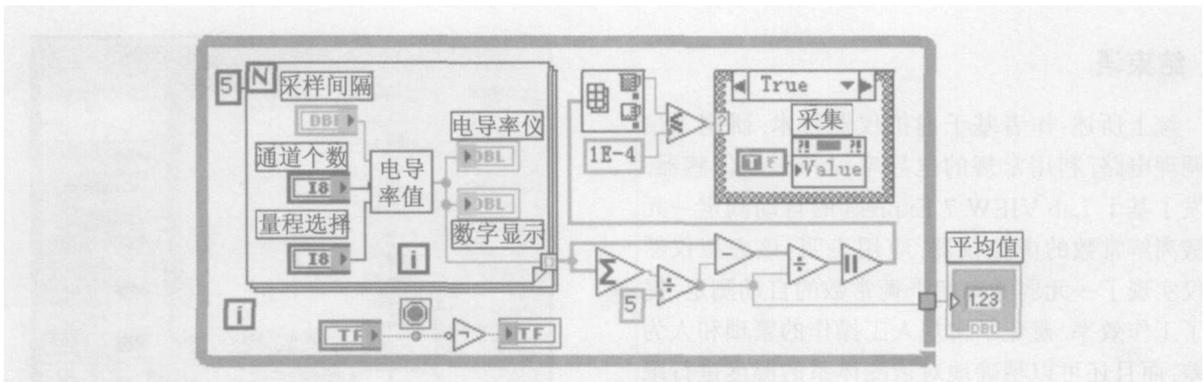


图 4 自动判断 VI

Fig. 4 The subVI of automatically judging

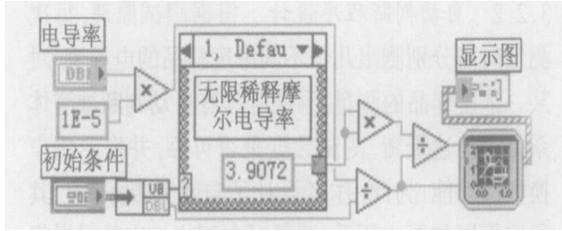


图 5 数据显示子 VI
Fig. 5 The subVI of data displaying

将上述 3 个子 VI 按顺序相连,放入 While Structure 中即可完成数据的转化和显示,为便于控制,将此 While Structure 放入 Event Structure 结构中,作为该结构的一个子事件,同时在 Event Structure 外嵌套 While Structure 结构,保证程序的连续运行,直到测试任务结束.

3.3 数据处理程序设计 数据处理程序如图 6 所示.程序中采用最小二乘直线拟合方法,由直线斜率即可求得弱酸离解平衡常数,直线拟合由函数 Functions >> Analyze >> Mathematics >> Clrve Fitting >> Linear Fit 完成.原始数据与拟合后的数据分别经函数 Bundle 绑定后,再由函数 Build Array 产生 1 个簇数组,由控件 XY Graph 显示,同时还给出

线性拟合的相关系数,用户无论从直观上还是理论上都可以评估实验结果.

4 运用实例

将该测试系统应用于醋酸离解常数的测定,在温度为 298 K 时,测试了 4 组样品,每组均包含浓度分别为 0.003 1,0.006 2,0.012 5,0.025 0,0.050 0 mol/L 和 0.100 0 mol/L 的 6 个样品.数据采集操作面板如图 7 (图中 X 为 c_m/c , Y 为 $(c_m)^2/c$),图中的实验曲线是实验 2 采集的数据,该曲线是由原始数据经线性转化后得到的,这样有利于用户随时观察实验结果,并可用内置的数据处理程序对实验数据进行处理.溶液电导率数据及实验结果与文献[6]比较如表 1 所示.前 3 组实验数据采用了温度补偿,第 4 组实验数据未采用温度补偿,可见,采用温度补偿能减小测量误差,而相同实验由人工读数和处理所得结果误差通常在 3% 以上.另外,从图 7 也可以看出:用 LabVIEW 开发的虚拟仪器面板动感强,人机交互界面友好,操作十分简便.

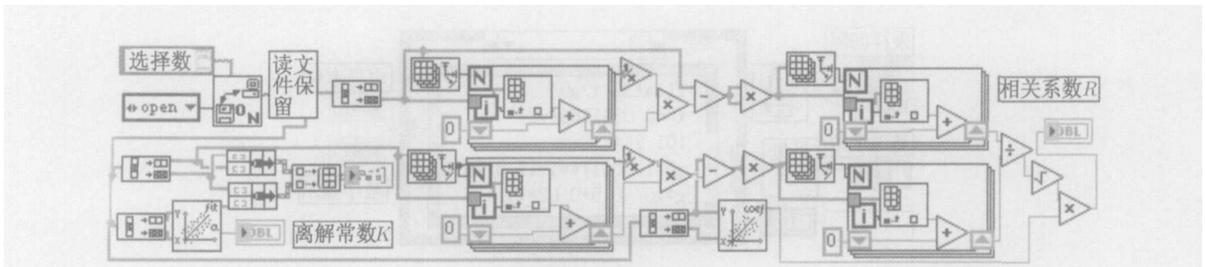


图 6 数据处理程序
Fig. 6 Program of data processing

5 结束语

综上所述:作者基于虚拟仪器技术,研制了信号调理电路,利用常规的电导率仪和温度传感器,开发了基于 Lab VIEW 7 Express 的自动测定一元弱酸离解常数的虚拟仪器.应用表明:该虚拟仪器不仅实现了一元弱酸离解平衡常数的自动测定,提高了工作效率,避免了常规人工操作的繁琐和人为误差,而且还可以精确地对被测体系的温度进行跟踪测量,及时补偿被测体系温度波动引起的测量误差,提高了测试结果的准确性和重现性.此外,Lab VIEW 开发的虚拟仪器还具有开发效率高、功能易

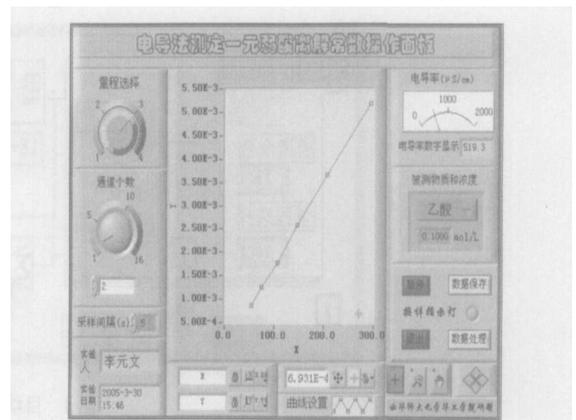


图 7 操作面板
Fig. 7 The operating panel

表 1 醋酸解离常数测定结果

Tab. 1 Determinating results of acetic acid dissociation constant

| $c/$ (mmol · L ⁻¹) | $\kappa / (\mu\text{s cm}^{-1})$ | | | |
|-----------------------------------|----------------------------------|-------|-------|-------|
| | 实验 1 | 实验 2 | 实验 3 | 实验 4 |
| 3.1 | 86.7 | 86.0 | 85.8 | 87.9 |
| 6.2 | 125.3 | 125.6 | 126.8 | 127.4 |
| 12.5 | 177.9 | 178.2 | 178.5 | 180.5 |
| 25.0 | 259.1 | 259.3 | 260.6 | 266.9 |
| 50.0 | 367.3 | 367.2 | 368.8 | 369.5 |
| 100.0 | 519.5 | 519.3 | 519.8 | 525.3 |
| $\kappa \times 10^{-5}$ | 1.817 | 1.817 | 1.821 | 1.846 |
| 相对误差/ % | 0.94 | 0.94 | 1.17 | 2.56 |

扩展、面板动感强,人机交互界面友好,操作简便等优点。显然,该虚拟仪器稍加扩展系统的软件部分,就可以实时动态跟踪测定溶液的电导率,应用于 1 型难溶盐的溶度积的测定以及化学反应动力学研究等测试任务中。本文构建虚拟仪器的方法,也可用于扩展和提升其它常规化学物理仪器的性能,实现自动化测试。

参考文献:

[1] 周箭. 虚拟仪器及其技术研究[J]. 浙江大学学报:工

学版,2000,34(6):686.

[2] 杨乐平,李海涛,赵勇. LabVIEW 高级程序设计[M]. 北京:清华大学出版社,2003.

[3] 龙彦辉,向明礼,高彦荷. 电导率仪法测定醋酸解离平衡常数[J]. 重庆工学院学报,2001,15(5):98-100.

[4] 秦世才,王朝英. 集成运算放大器应用原理[M]. 天津:天津科学技术出版社,1981.

[5] National Instruments Corporation. LabVIEW User Manual[R],2003.

[6] 武汉大学. 分析化学[M]. 第 4 版. 北京:高等教育出版社,2000.

Virtual instrument based on LabVIEW 7 express for determinating dissociation constant of weak acid by conductivity

LI Jiang-yuan, LI Yuan-wen, WANG Wen-bin

(College of Chemistry and Chemical Engineering, China West Normal University, Nanchong 637002, China)

Abstract: The virtual instrument based on LabVIEW 7 Express for determinating the dissociation constant of monoatomic weak acid was developed by connecting the general conductivity meter and temperature sensor with computer by homemade adjusting circuit. The virtual instrument not only has advantages of friend interface, easy operation, easy expandability of function, etc, but also has the function of real-time temperature compensation. The automatical acquiring, real-time displaying, processing and saving of experimental data are realized. By this method, the complexity of manual operating and personal error are avoided; the accuracy and repeatability of testing result are improved; the function of traditional instrument is also expanded. The application results are satisfactory.

Key words: LabVIEW; electric conductivity; dissociation constant; virtual instrument