

应用PAD编程技术处理蔗糖水解实验数据

郑 向 敏

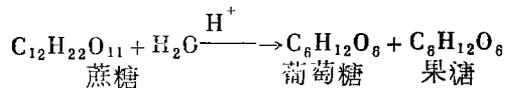
(应用化学系)

摘要 旋光度法测定蔗糖水解反应速度常数是动力学的一个典型的实验。本文应用软件工程方法——PAD编程技术，对蔗糖水解实验数据进行计算机处理，不仅可以减少手工处理实验数据的繁琐过程和所引进的人为误差、提高效率 and 实验精度，而且可同时获得图形与数据并存的处理结果。计算机处理的结果直观透明，而且与文献值完全吻合。

关键词 蔗糖，水解，编程，PAD

1 实验原理与分析

蔗糖水解反应



是一个典型的假(准)一级反应。理论上，水解反应速率与蔗糖、水以及作为催化剂的 H^+ 浓度有关，但由于实验中溶剂水的量远大于蔗糖而可视为常数，故实际上可按一级反应处理。当反应温度与氢离子浓度一定时，反应的速度常数为一定值并可利用旋光度法进行测定。

蔗糖及其水解产物果糖和葡萄糖都具有手性分子结构，而且它们溶解时仍保留其旋光性。当使一束偏振光通过这些旋光物质时，这些物质可使偏振光的振动面发生左旋或右旋。处于溶液相中的这些物质的旋光能力可以用比旋光度来度量：

$$[\alpha] = \frac{a \times 100}{L \cdot C}$$

式中， a 为物质的旋光度，可由实验测得； L 为溶液的厚度(dm)； C 为100ml溶液中所含溶质的克数。

在蔗糖水解反应中，蔗糖的 $[\alpha]_D^{20} = 66.37^\circ$ ，葡萄糖的 $[\alpha]_D^{20} = 52.7^\circ$ ，果糖的 $[\alpha]_D^{20} = -92^\circ$ 。可见，果糖的左旋性远大于葡萄糖的右旋性。因此，当水解反应进行时，随着蔗糖的减少和果糖的增多，体系的右旋数值逐渐减少，至零后变为负值而成为左旋。水解过程旋光度的变化情况可用图1示之。图中 a_0 为反应开始时蔗糖的右旋光度， a_∞ 为水解完毕后体系

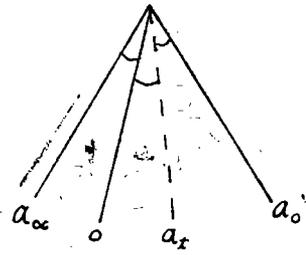


图1 蔗糖水解过程旋光度变化

的左旋光度, a_t 为反应在 t 时体系的旋光度。

根据反应动力学, 蔗糖水解反应的速度方程为

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A$$

或

$$\ln \frac{C_A}{C_{A,0}} = -kt, \quad (1)$$

式中 $C_{A,0}$ 为蔗糖的初始浓度, C_A 为反应时间为 t 时蔗糖的浓度, k 为水解反应速度常数。考虑到蔗糖水解测定在同一仪器、同一光源、同一长度旋光管中进行时, 体系旋光度变化

与反应物——蔗糖的浓度变化呈线性关系, 即有

$$C_{A,0} \propto a_0 - a_\infty,$$

$$C_A \propto a_t - a_\infty,$$

故式(1)可写成

$$\ln(a_t - a_\infty) = -kt + \ln(a_0 - a_\infty). \quad (2)$$

因此, 若在不同的水解反应时间 t 下测得一组蔗糖水解反应的旋光度 a_t 后, 以 $\ln(a_t - a_\infty)$ 对 t 作图, 可得一直线, 由直线斜率可求水解反应速度常数 k 。利用式 $t_{1/2} = \ln 2/k$ 而求水解过程的半衰期 $t_{1/2}$ 。

2 PAD编程与PAD图

通常, 蔗糖水解实验数据的处理是根据实验数据进行手工作图后由直线斜率进行计算, 其步骤繁琐冗长且易引入人为的误差。本文应用目前较新的一种软件设计表现法——问题分析图(Problem Analysis Diagram, 简称PAD)^[1, 2], 进行程序设计, 编制了一个处理蔗糖水解实验数据的PAD图, 并在IBM-PC/XT机(配有PAD系统)上进行运算处理。

若令 $Y = \ln(a_t - a_\infty)$, $B = \ln(a_0 - a_\infty)$, $K = -k$, $X = t$, 则式(2)可写成

$$Y = Kx + B \quad (3)$$

的线性方程形式。式(3)的系数可利用最小二乘法求出

$$K = \frac{n \left[\sum_{i=1}^n x_i y_i \right] - \left[\sum_{i=1}^n x_i \right] \left[\sum_{i=1}^n y_i \right]}{n \left[\sum_{i=1}^n x_i^2 \right] - \left[\sum_{i=1}^n x_i \right]^2}, \quad (4)$$

$$B = \frac{\left[\sum_{i=1}^n y_i \right] - K \left[\sum_{i=1}^n x_i \right]}{n}, \quad (5)$$

式中, n 为实验数据的组数。

根据上述数学模型, 并令 $aL = a_\infty$, $t(1/2) = t_{1/2}$, 应用PAD编程技术可以方便地编制出处理蔗糖水解实验数据, 作出 $\ln(a_t - a_\infty) - t$ 图形, 打印出水解反应速度常数 k 和半衰期 $t_{1/2}$ 的通用PAD图(图2)。

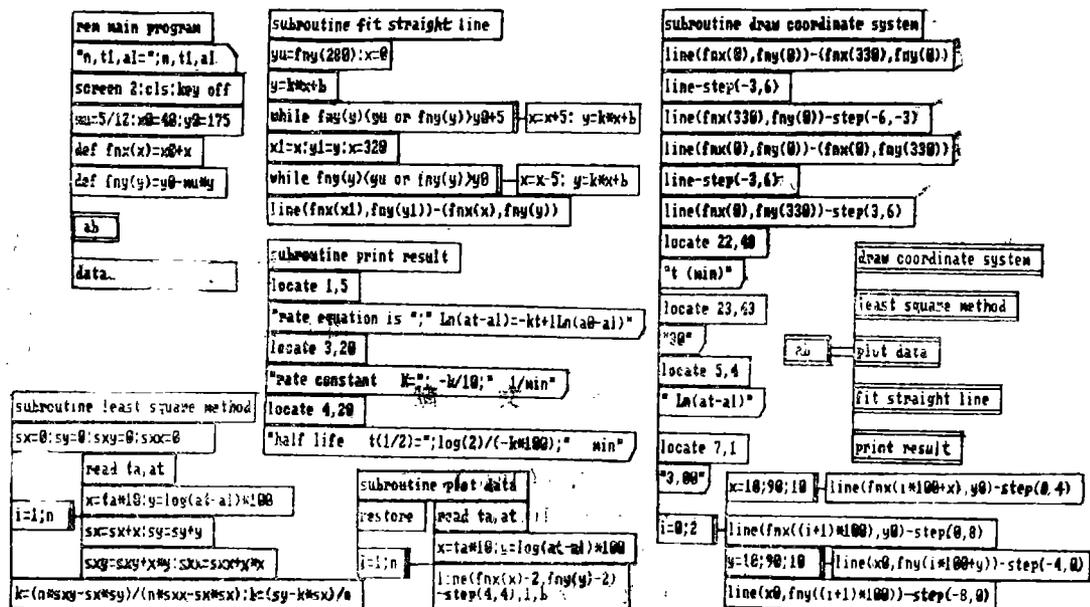


图2 处理蔗糖水解反应实验数据的PAD图

由图2可见，整个PAD图是由一个主程序结构和五个子程序结构所构成。五个子程序的功能分别为：定坐标系与画作标轴（draw coordinate system），最小二乘法求直线方程系数（least square method），在坐标系中打印出实验数据点（plot data），模拟直线（fit straight line），计算结果打印（print result）。整个程序结构逻辑简洁透明，易读、易记、易理解。只要将图2键入计算机，在PAD系统支持下，计算机就能自动编译出源程序并进行运算，输出运算结果。

3 运算与结果

表1列出了蔗糖水解反应在不同反应时间 t 下所测得的一组实验数据 a_t 值。将表1中的实验数据填入图2 PAD中的data语句并键入计算机，运算结果如图3所示。

表1 蔗糖水解反应实验数据^[8]

旋光管长度为22cm,		$a_{\infty} = -4.33,$		$T_1 = 313.2K,$		$C_{H^+} = 1.8mol/l$	
$t(\text{min})$	5	10	15	20	25	30	
a_t	8.85	4.10	1.05	-0.60	-1.75	-3.00	

由图3可以看出，应用PAD编程技术所编制的处理蔗糖水解反应实验数据的PAD图，以计算机自动编译代替人工编译源程序，避免了人工编译源程序时将会遇到的许多麻烦，提高工作效率。运算后输出的结果图形与数据并现，清晰明了，且处理结果与文献值^[3]完全

吻合。

run

$n, t1, a1 = 6, 313.2, -4.33$

rate equation is $\ln(a_t - a_1) = -kt + \ln(a_0 - a_1)$

rate constant $k = 8.791948E-02$ 1/min

half life $t(1/2) = 7.883886E-03$ min

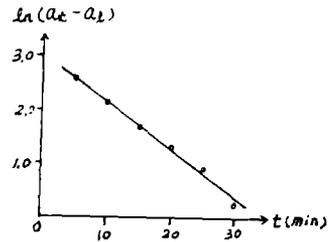


图3 运算结果

参 考 文 献

- [1] 严桂兰, 刘甲耀, 软件工程讲座, 福建电脑, 4 (1986), 42.
 [2] Zheng Xianmin, PAD programming and Its Application in Chemistry, *J. Chem. and Compu. Sci.*, 29 (1989), 60-66.
 [3] 理科化学教材编审委员会物理化学编审组, 物理化学教学文集, 高等教育出版社, (1986).

Processing Experiment Data of Sucrose Hydrolysis by PAD Programming

Zheng Xianmin

(Department of Applied Chemistry)

Abstract In chemical kinetics, the measurement of velocity constant of sucrose hydrolysis by polarimetry is a typical experiment. For more precise and efficient processing the experiment data of sucrose hydrolysis, a software engineering method-PAD programming is applied in this paper. This technique is advantageous not only in simplifying the manual procedures and avoiding artificial error but also in obtaining precise results of gsphtcs and data conforming with that from literatures.

Key words sucrose, hydrolysis, programming, problem analysis diagram