



海洋化学中的统一化、标准化问题

马克美 韩舞鹰

问 | 题
— · —
讨 | 论

(中国科学院南海海洋研究所)

本文就海洋化学的统一化和标准化谈一些看法。

一、实验室相互校准的问题

近年来，海洋化学调查和监测蓬勃开展，建立了许多机构，投入了大量人力物力，“文献性”成果不少，但这些成果参考价值如何，却很难评价。这里有种种原因。其中一条是，这些成果难以验证、难以比较。因此没有一系列相互校准，便无法评价，成果也难以应用。

国外很早就注意到实验室相互校准的问题，到1978年12月31日国际海洋考察理事会已经进行了四次海水痕量金属互相校准^{〔2〕}（由于情报有限，计划开展的第5次以取样和贮存方法为主的相互校准还不了解）。参加第4次相互校准的共17个国家63个实验室（向组织者报告分析资料的42个实验室，一个实验室被分配的样品变质，其余的实验室没有报告自己的结果）。从第4次相互校准的总结报告看到，因

为污染原因，铅和锌的相互校准没有得出什么结论。铜、镉、铁、锰、镍的分析与过去同类校准（Bewer 和 Spencer, 1970; Jounes, 1977）实验室之间的比较有明显改进，分析精度也有较大提高。极限精度的标准相当于大陆架水域目前已确定的金属浓度的三分之一。酸化和冷冻样品之间存在差别。对镉来说，电化学方法和原子吸收法所得结果有较大差别。由于海水样品中金属实际浓度不能证实，需要一个可靠的参考值，但这次标准只有铅有参考值，即加里福尼亚技术研究所 C.C. 帕特森博士用同位素稀释质谱分析法测定冷冻样品的结果。其余金属分析结果的参考值是精度和回收率。综观国际痕量金属相互校准工作，我国各实验室之间的相互校准工作必须开展。

二、资料处理的规范化问题

海洋化学调查是对发生在海洋中的过程，以一定的时间和空间进行采样，希望能根据有

限的离散采样值序列来恢复海洋过程，除了分析的精度外，样品的采集、数据和信息的处理是很重要的，但在这方面，我国目前还是很不统一的。如采集的标准层深度，过去海洋调查是采用1936年国际海洋物理科学协会(IAPSO)所推荐的深度，但现在进行的海岸带调查，调查海区水很浅，标准层的选择，各单位都不一致；污染调查中常用的所谓表、中、底层，各单位理解也不一致。除了在很浅的海区，样品采集的深度大多都不在要求的标准深度。如何进行深度订正，如何由实测深度的数据求得标准深度资料，方法也同样很不统一。这些方法之间的误差有时会大于分析的误差。在河口、海区，水动力条件变化很大，这时同样的资料，采用不同的方法绘制平面图会得到甚至相反的结论。资料整理时，往往由于选用不同的公式和表格，就造成较大的出入。溶解氧饱和度计算即是一个明显例子。按照海洋调查规范所推荐的海水氧溶解度表计算海水样品氧的饱和度，数值全部偏高。这些例子还可以举出不少。总之由于资料整理不统一，有时会使资料的代表性和资料之间的对比失去意义。

三、海洋化学单位、符号 的标准化问题

为统一科学语言和书写法，以尽可能避免混淆，使科学家之间相互得到最好的交流，各科学领域的标准化是非常重要的。在米制基础上发展起来的国际单位制(SI)早在四十年代就已开始倡建，暨今，经三十余年七次国际计量大会的努力才得以发展成现在的形式。现SI已得到绝大多数国家积极推广，其中包括曾极力反对的原采用英制的国家。为推行国际单位制，我国专门成立了中国国际单位制推行委员会，并于1981年3月31日出版了《中华人民共和国计量单位名称与符号方案第一版》。此方案的总则上写明：“本方案以国际单位制为基础”。今后在我国各个科学领域都应推行国际单位制，教育部所出版的教材中亦应如

此。

国际上，海洋学领域单位、符号的统一工作，多由国际海洋物理科学协会(IAPSO)承担。1964年，联合国教科文组织(UNESCO)、国际海洋物理科学协会、国际海洋考察理事会(ICES)和国际海洋研究科学委员会(SCOR)联合成立海洋学常用表和标准联合专家组(JPOTS)。1979年，以法国海洋研究所专家、IAPSO计量顾问、计量工作组主席M. Meneche为首的计量工作组，编写了适用于海洋学的《计量报告》^[3]。其中P.J. Wanglrsky负责海洋地球化学和化学海洋学部分。该计量报告已于第17届大会上原则通过。这就大大促进了国际单位制在海洋学领域的进行。

目前我国海洋化学界在推行国际单位制上存在不少问题，需要引起注意^[1]。下面谈谈与海洋化学有关的几个方面。

1. 一些概念问题

密度：在过去的一些文献中，密度和比重是两个混淆的量。今后需永远放弃比重和相对密度的概念，只用海水质量密度的概念。其物理符号为ρ，单位用千克每立方米，单位符号为kg/m³。在海洋学上，海水密度不是经过测量而是通过经验公式由盐度、温度、压力计算得到的。这些参数的符号或数值在符号ρ后硬性规定顺序为S，T，P，即ρ(S，T，P)。盐度值的因数是10⁻³，温度用摄氏度(°C)，压力用兆帕斯卡(MPa)。如按上述顺序和单位，则海水密度表达式的单位不必写上，如ρ(35.12，3.52，28.80)。

摩尔：1971年第14届国际计量大会通过了国际理论和应用物理协会、国际理论与应用化学协会和国际标准化组织提出的建立一个物质的量的单位这一提议。物质的量的单位摩尔或简称摩，单位符号为mol。摩尔定义：

(1) 摩尔是一系统物质的量，该系统中所包含的基本单元数与0.012千克碳-12的原子

1) 辛学毅，1981。海洋科技资料(3):103—117。

数目相等。

(2) 使用摩尔时，基本单元应予指明，可以是原子、分子、离子、电子及其它粒子或是这些粒子的特定组合。

碳-12是指碳的最轻的同位素，其原子量值为12。

摩尔成为国际单位制七个基本单位中的一个。今后旧的如克原子、克分子等都已作废。物质的量的单位用摩尔，符号为 mol。在物理化学中使用质量摩尔浓度有好处，在海水化学中使用体积摩尔浓度将是有益的。但对海水中的痕量成份，用质量摩尔浓度或体积摩尔浓度表达浓度会产生误解，因为这些术语会联想到物质的物理和化学状态。目前痕量成份使用的浓度单位，如毫克每升，ppm，ppb，ppt 等都应取消，而以克每立方分米为单位。

升：体积单位升是一个使用非常广泛的单位。1901年，第三屆国际计量大会中规定一千克纯水在其最大密度时所占体积为一升。此体积为 0.9997 dm^3 。升和 dm^3 是两个极其接近但不等值的体积单位，特易造成混乱。考虑到升在民间的习惯使用，我国把升作为与国际单位制并用的单位。但1964年第12届国际计量大会已废除升的原来定义。升作为立方分米的同义词，工作小组建议在科学著作中，在精密计算时不再使用，而应当用 dm^3 。

氯度和盐度：1901年，Sorensen和Knudsen给出了第一个盐度定义，到后来由于盐度计的出现，1966年，一些重要的海洋学组织通过了盐度的第二个定义，即是以 R_{15} 的五价多项式表示的样品浓度。这个盐度定义仍未能摆脱氯度这个纽带，因此，由UNESCO, ECES, SCOR及IAPSO等联合组织的JPOTS分别于1977, 1978和1979年的国际会议上，提出了盐度新定义（符号为 S），即在一个大气压（即 101325 帕斯卡）和 15°C 时，海水的电导率与在同温（1968年国际实用温标）、同压下，标准氯化钾溶液（所含 KCl 的质量分数是 32.4356×10^{-3} ）的电导率比值。用比值 K_{15} 按下式确定海水样品的实用盐度：

$$S \times 10^3 = a_0 + a_1 K_{15}^{\frac{1}{3}} + a_2 K_{15} + a_3 K_{15}^{\frac{3}{2}} + a_4 K_{15}^{\frac{5}{3}} + a_5 K_{15}^{\frac{3}{2}}$$

国际海洋学表第三卷已给出了用盐度新定义计算盐度的表。UNESCO 等组织已通知各国的海洋学组织，从1982年1月1日起，使用新的海洋学表和方程^[4, 5]。

盐度是海水的一个最基本的物理化学性质，盐度新定义的诞生，对海洋学研究会产生重大影响。

2. 一些单位问题

一些过去习惯用的单位，在国际单位制中已不再使用，有些虽然还使用，但其含义已变化了，下面举一些例子。

压力：在海洋化学中常用单位有巴、标准

表 1

量	符号	定义和说明	国际单位制单位
组分 B 物质的量的浓度	C_B	组分 B 物质的量除以混合物的体积	$\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$
组分 B 质量浓度	P_B	组分 B 的质量除以混合物的体积	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
溶质组分 B 的质量摩尔浓度	m_B	某溶液中溶质组分 B 物质的量除以溶剂的质量	$\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$
组分 B 的摩尔分数	X_B	组分 B 物质的量与混合物的量之比	—
组分 B 的质量分数	W_B	组分 B 的质量与混合物的质量之比	—
组分 B 的体积分数	ϕ_B	组分 B 的体积与混合物的体积之比	—
溶质组分 B 的摩尔比	γ_B	溶质组分 B 物质的量与溶剂物质的量之比	—

表 2

例		规则(或注意事项)
错误写法	正确写法	
每立方米摩尔	摩尔每立方米	组合单位中文名称要与国际符号表示顺序一致,除号对应名称为“每”。无论分母中有几个单位,“每”字只出现一次
米的三次方	三次方米	乘方形式的单位名称,顺序是指数名称在前、单位名称在后
5米	5 m	只有在中、小学课本和普通书刊中可把单位的中文简称用作符号
$m_{O_2} = 5g$ $e^{1/2}$	$m(O_2) = 5g$ $exp x^{1/2}$	避免次级下标或上标
$C = 2 mol$ KCl/m^3 摄氏20度	$C_{KCl} = 2 mol \cdot$ m^{-3} 20摄氏度	单位名称或符号必须作为一个整体使用,不得拆开
1万米	10千米 (10km)	亿(10^8)和万(10^4)是我国习惯用数词,仍可使用,但不是词头,不得和SI单位构成倍数或分数单位
$a/b/c$	$(a/b)/c$ 或 $a/(b/c)$	同一表达式中分线不得多于一个,除非用括号区分
.042 3,456.1437	0.042 3 456.143 7	小数点位于第一个数字之前,小数点前加零。小数点前后数码,以三个数码为一组排列,用空格分开,不用逗号
质量单位是 kg	质量单位是 千克	单位符号前没有数值,必须使用单位名称

大气压、托、毫米汞柱、工程大气压、毫米水柱等。现在国际单位制中压力的单位是帕斯卡 pascal 或简称“帕”, 符号 Pa。国际计量总局把巴和大气压作为暂时和国际单位制并用的单位, 我国方案则几乎保留了全部的压力单位^[1], 但工作小组却建议海洋界不再以大气压作压力单位。这个术语用作等于 101325 Pa 的标准压力。在用水银压力表读出压力时, 因为方便, 可用毫米汞柱, 但在最终结果时仍使用帕斯卡。在海洋学上, 压力一词既可表示海洋中某点的总压力, 也可表示海洋中某点超过大气压力部分, 两者都用符号 P。为避免混淆, 今后压力一词表示总压力, 而用海压表示超出大气压的压力。

长度 μ: 这个单位及其符号已由 1967 年第 13 届国际计量大会第 7 项决议撤消, 同一长度的单位名称和符号是微米或 nm。

动力高度、动力深度、符号 D、单位“动力米”: 这些都废弃不用, 而只使用重力势、重力势差, 等重力势面等。

在海洋化学上使用的溶液浓度的单位(见表 1)。

表中第四列中记号“—”是指与国际单位制单位相同的无量纲的量。

由表可见, 原来海洋化学中常用的浓度单位如克-原子/升、克-分子/立方米应改为摩尔每立方米。国际单位制是一贯单位制, 因此氯度和盐度这两个量必须是两种质量的比, 这两种质量都必须用同一单位, 故盐度的单位要由克/千克改为千克/千克。今后氯度、盐度的符号是 Cl 和 S (不是 Cl% 和 S%)。按照一贯制的原则, 原来常用的%, % 用 10^{-2} 和 10^{-3} 来代替; ppm, ppb 等用 10^{-6} , 10^{-9} 来表示; 溶解在海水中的气体浓度过去常用毫升/升, 今后则统一为摩尔每立方米。

3. 使用问题

国际单位制的使用有许多严格的规则, 在此仅举几例(见表 2)。

国际单位制的推行, 带来有利的一面, 但也有使用不习惯的一面, 有些看来尚有待改进

和统一。如温度的单位, 长期习惯用“度”, 现用“摄氏度”或“开尔文”就是一例。对一些暂时和国际单位制并用的单位, 我国的方案和国际海洋学界意见还不是 (下转第 42 页)

(上接第64页)

一致的，因此需要我国海洋学界有一个统一的意见。

上述三个问题，都是涉及面很广的问题，不是某一个单位或某一海洋专业范围完全能解决的，希望能引起海洋化学以及海洋学界的注意和重视。

参 考 文 献

[1] 中国国际单位制推行委员会，1981。中华人民共和国计量单位名称与符号方案（第一版）。

- [2] Bewers, J.M., 1981. ICEC Cooperative Research Report (105): 78—94.
- [3] IAPSO, 1979. Working Group Symbols Units and Nomenclature in Physical Oceanography. SUN Report IAPSO Publication Scientifique 31: 56.
- [4] UNESCO, 1981. Technical Papers Marine Sciences. №36 10th Report of JPOTS.
- [5] UNESCO, 1981. International Oceanographic Tables Vol. 3.