

Sumario

SUMARIO	1
A. COMPONENTES DEL AGP	3
A.1 Forma química del residuo	3
A.2 Cápsulas metálicas	3
A.3 Arcilla compactada	3
A.4 La geosfera	4
A.5 La biosfera	4
B. TÉCNICA BET	5
C. ESPECTROMETRÍA DE MASAS CON PLASMA DE ACOPLAMIENTO INDUCTIVO (ICP-MS)	8
C. 1 Funcionamiento	8
D. RESULTADOS BLANCO	11
E. ESPECIFICACIONES DE LOS MATERIALES Y EQUIPOS	13
E.1 Columna cromatográfica	13
E. 2 Tubos para bomba peristáltica	15
E. 4 Reductores de presión para gases puros y mezclas	15
E. 5 Filtros	15
F. PROGRAMA HIDRA-MEDUSA	16





A. Componentes del AGP

A.1 Forma química del residuo

La primera barrera la constituye la forma fisicoquímica del residuo, al que también se denomina término fuente. Como se ha comentado anteriormente, proviene básicamente del CG, que en el caso español, al operar las centrales nucleares en proceso abierto, será CG sin reprocessar, del tipo reactor de agua presión (PWR) ó de agua en ebullición (BWR), en ambos casos de agua ligera, cuya matriz es dióxido de uranio (UO_2) en aproximadamente un 98 %. Este óxido es un material cerámico muy estable, poco soluble, resistente tanto a la radioactividad como a las elevadas temperaturas.

A.2 Cápsulas metálicas

La cápsula de almacenamiento, de acero al carbono en el concepto definido por Enresa, se ha diseñado para garantizar un aislamiento durante un periodo mínimo de 1000 años, aunque cálculos realistas indican que no se habrá degradado en su totalidad hasta pasados unos 10000 años. Para ello ha de ser capaz de soportar los procesos de corrosión y poder disipar el calor generado por los propios residuos. También es necesario destacar que los óxidos de hierro formados por la corrosión de la cápsula contribuirán a aumentar la seguridad del repositorio una vez falle este confinamiento, puesto que estas especies ayudan a mantener el carácter reductor de las aguas subterráneas, factor que estabiliza el UO_2 como se discutirá en detalle más adelante, y tienen una elevada capacidad de retención de los radionucleidos (RN) por absorción.

A.3 Arcilla compactada

Las bentonitas son arcillas ricas en minerales expandibles y que debido a sus favorables condiciones físicas, mecánicas y químicas es concebida como material de relleno y sellado en los almacenamientos de residuos radioactivos. Entre sus propiedades destacan las excelentes propiedades de sellado, plasticidad, baja permeabilidad y su gran capacidad para retardar el transporte mediante difusión de la mayoría de radionucleidos disueltos. Una vez que los radionucleidos lleguen a la barrera, el tiempo que tardan en atravesarla dependerá en primer lugar, del mantenimiento de sus propiedades de permeabilidad,



hinchamiento y retención y en segundo lugar, de las propiedades químicas de estos. En el punto posterior se describirá más detalladamente el funcionamiento a largo plazo de esta barrera., los procesos q tienen lugar y sus consecuencias.

A.4 La geosfera

La barrera geológica está basada en la naturaleza de la formación geológica hospedante del repositorio. Esta barrera confiere estabilidad mecánica al sistema de almacenamiento, regula la cantidad y características del agua que puede alcanzar al resto de barreras (minimiza un flujo bajo, lento y estable) y sobre todo, retarda al máximo, la migración de los radionucleidos hacia la biosfera. Las características principales que debe presentar son la ausencia de caminos preferentes de circulación, estabilidad química y mecánica y gran capacidad de retención. Una formación geológica se considera “adecuada” cuando es estable tectónica y geoquímicamente, poco permeable, con elevada o suficiente capacidad de retardo a la migración de radionucleidos, y con posibilidad de cuantificar y predecir su funcionamiento a largo plazo. Actualmente se están considerando y estudiando como barreras geológicas las formaciones arcillosas y graníticas.

La barrera geológica es el último y más importante impedimento para la migración de los radionucleidos.

A.5 La biosfera

La biosfera es el receptor final de los radionucleidos que hayan podido liberarse del repositorio después de atravesar el conjunto de barreras artificiales y naturales interpuestas. Los radionucleidos irán moviéndose a través de las aguas subterráneas y los materiales sólidos hasta alcanzar el dominio de la interfase geosfera- biosfera constituida por los suelos, acuíferos superficiales, ríos, lagos y mares y todos los seres vivos asociados a estos sistemas.

Es por tanto en la biosfera donde, a partir de los ejercicios de evaluación de la seguridad, se analiza y se cuantifica el impacto ambiental que puede generar un repositorio al hombre, a los seres vivos, y en general al medioambiente.



B. Técnica BET

Uno de los factores importantes que influyen en la velocidad de disolución de un sólido es su área superficial específica, cuanto mayor es ésta mayor número de puntos de coordinación existirán en la superficie del sólido y mayor capacidad de adsorción o coordinación tendrá el sólido.

La adsorción es un proceso que se lleva a cabo en la interfase sólido-gas,

los átomos de la superficie del sólido atraen y retienen moléculas del gas, estas moléculas se mantienen unidas mediante 'Fuerzas de Van Der Waals' (fisorción). En la fisorción una vez que se ha formado la primera monocapa de gas en la superficie del sólido, las interacciones intermoleculares entre el gas de la monocapa y las restantes moléculas de gas pueden conducir a la formación de una segunda capa. Las Isotermas de Langmuir y Freundlich suponen la formación de una sola capa, sin embargo Brunner, Emmett y Teller (B.E.T.) modificaron las expresiones de Langmuir y Freundlich con la posibilidad de que existiera adsorción de multicapas.

Las medidas se realizaron a una T constante, lo que se mide experimentalmente es el volumen de gas adsorbido por una cantidad de adsorbente, o la variación de peso que experimenta el adsorbente cuando ha estado en contacto con el adsorbato. En nuestro caso se basa en la adsorción de gas N_2 .

La ecuación que describe la adsorción de un gas en la superficie de un sólido es:

$$\frac{P/P_0}{V \cdot (1 - P/P_0)} = \frac{1}{V_m \cdot C} + \left[\frac{C-1}{V_m \cdot C} \cdot \frac{P}{P_0} \right] \quad \text{Ec. 1}$$

Donde

V : volumen (a T y P estándar) de un gas adsorbido a la presión P.

P_0 : presión de vapor del gas licuado a la T de adsorción.

V_m : volumen de gas para formar una monocapa a T y P estándares.



C : constante relacionada con la energía de adsorción.

El área superficial de una muestra puede expresarse en función del gas adsorbido para formar una monocapa:

$$S = V_m A N / M \quad \text{Ec. 2}$$

Donde,

A: nº de Avogadro.

M: volumen molar del gas.

N: área de cada molécula de gas adsorbida.

Teniendo en cuenta en la ecuación 1 que $C \gg 1$, entonces la ecuación pasa a:

$$\frac{P/P_0}{V \cdot (1 - P/P_0)} = \frac{1}{V_m} \cdot \left[\frac{1}{C} + \frac{P}{P_0} \right] \quad \text{Ec. 3}$$

Si $P/P_0 \gg 1/C$, entonces :

$$\frac{P/P_0}{V \cdot (1 - P/P_0)} = \frac{1}{V_m} \cdot \frac{P}{P_0} \quad \text{Ec. 4}$$

Teniendo en cuenta las ecuaciones 1 y 4 obtenemos la siguiente expresión:

$$S = V_m \cdot A \cdot N / M = V \cdot A \cdot N \cdot (1 - P/P_0) \quad \text{Ec. 5}$$



Donde vemos que el área superficial se puede determinar midiendo el mismo volumen de gas adsorbido (o desorbido, debe ser el mismo).

El adsorbente mas utilizado es el N_2 . Pero cuando se trata de medir áreas superficiales muy pequeñas se obtiene respuestas anómalas del detector que limitan la precisión de las determinaciones. Estas señales anómalas se producen por la separación de los dos componentes de la mezcla gaseosa. Algunos autores resuelven el problema modificando la geometría de la celda donde se pone el adsorbato o bien utilizan otra mezcla gaseosa de 0.1% Kr en He para conseguir una P/P_0 de 0.3, la cual se considera apropiada para obtener una monocapa de gas en la superficie del sólido. En nuestro caso se determinó el área en una celda en forma de U y utilizando N_2 como adsorbente.



C. Espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo (ICP-MS)

C. 1 Funcionamiento

El equipo de ICP-MS proporciona un análisis inorgánico. La mayor parte de los elementos de la tabla periódica se pueden ionizar en un ICP y ser detectados posteriormente en el espectrofotómetro de masas (los elementos que no se pueden determinar son H, C, N, O, F y gases nobles). Esta técnica proporciona información elemental (análisis cualitativo, semicuantitativo y cuantitativo) y medida de relaciones isotópicas mediante Espectrofotometría de Masas con fuente de Plasma de Acoplamiento. La principal característica de esta técnica es que posee unos límites de detección de unas pocas ppb-ppt que la hace ideal para el análisis de elementos traza.

En la figura C.1 se muestran los componentes principales de un sistema ICP-MS

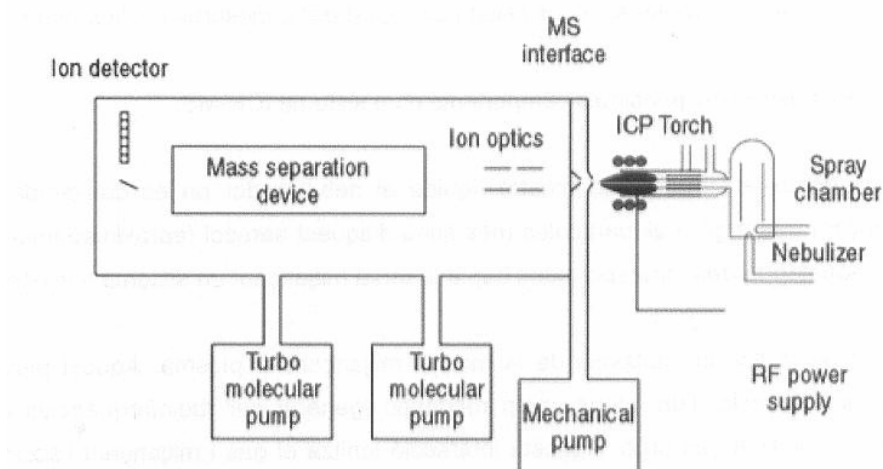


Fig. 0.1. Esquema del sistema de inyección del ICP-MS

Ion detector - Detector de iones

Ion optics – Óptica de iones

Mass separation device – Aparato de separación de masas



Mechanical pump – bomba mecánica

Nebulize – nebulizador

RF Power supply – fuente de energía

Spray chamber – cámara atomizadora

Turbo molecular pump – Bomba turbo molecular

La técnica consiste en introducir la muestra líquida al nebulizador donde es convertida en un aerosol mediante gas argón. Las partículas más finas de este aerosol (aproximadamente 1-2 % de la muestra) son separadas y transportadas hacia la antorcha mediante un sistema de inyección.

En la antorcha se produce la ionización de la muestra mediante el plasma. El plasma de acoplamiento inductivo es una descarga sin electrodos de un gas a presión, que se mantiene mediante la energía acoplada a ella a través de un generador de radiofrecuencias. Esta interacción ioniza el gas y mediante la acción de una chispa se forma un plasma de elevada temperatura ($\sim 2000^\circ\text{C}$) en el extremo de la torcha.

Una vez la muestra ha sido ionizada, los iones obtenidos son dirigidos hacia el espectrofotómetro de masas mediante un sistema óptico de lentes que operan a un determinado voltaje y en condiciones de vacío ($\sim 10^{-2}$ torr). Dentro del espectrofotómetro de masas (que opera a un vacío de $\sim 10^{-6}$ torr) se da lugar la separación de los diferentes analitos en función de su relación carga/masa (q/m).

Finalmente, los iones impactan sobre el detector generando una señal eléctrica que es amplificada y registrada dentro del proceso de análisis.

C. 1 Determinación de muestras

Para la determinación de uranio en nuestras muestras utilizamos un análisis cuantitativo mediante calibrado con patrón interno de Rodio Rh. Se preparó una serie de disoluciones patrón de concentración creciente de Uranio y se les añadió Rh como patrón interno a todas ellas al mismo nivel de concentración, se hizo lo mismo con las muestras.



El calibrado se realiza dividiendo la señal obtenida para el uranio entre la obtenida para el Rh, la representación da lugar a una recta, a partir de la cual por interpolación de los valores obtenidos para las muestras obtendremos sus concentraciones. El aparato utilizado para los análisis fue Perkin Elmer ELAN 6000.



D. Resultados Blanco

En la Tabla D.1 se muestran los resultados obtenidos de la disolución considerada como blanco.

Muestra	Tiempo (h)	[U(VI)] (mol/L)	Log U
M1	0,4	5,9E-07	-6,23
M2	1,6	1,6E-07	-6,80
M3	1,6	2,5E-07	-6,60
M4	1,8	8,3E-07	-6,08
M5	2,6	1,9E-07	-6,72
M6	2,6	3,0E-07	-6,53
M7	2,8	2,5E-07	-6,60
M8	3,5	1,3E-07	-6,88
M9	3,7	1,8E-07	-6,74
M10	3,8	1,6E-07	-6,80
M11	4,7	2,8E-07	-6,55
M12	5,6	2,1E-07	-6,67
M13	5,7	2,2E-07	-6,66
M14	6,6	2,2E-07	-6,65
M15	6,8	2,5E-07	-6,60



M16	7,7	2,3E-07	-6,64
M17	7,8	2,0E-07	-6,70
M18	8,7	2,6E-07	-6,59
M19	8,8	2,3E-07	-6,64
M20	9,7	2,1E-07	-6,67

Tabla D.1. Resultados para el Blanco



E. Especificaciones de los materiales y equipos

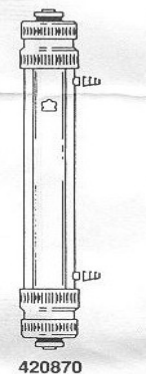
E.1 Columna cromatográfica

V. Ordering Information

COLUMNS WITH SAFETY/WATER JACKET

Standard column supplied complete with a 20μ polyethylene bed support, an acrylic jacket and $1/4''$ -28 fittings.

Article No.	Column I.D. x Length (cm)
420870-1500	1.0 x 15
420870-3000	1.0 x 30
420870-6000	1.0 x 60
420870-1000	1.0 x 100
420870-1200	1.0 x 120
420870-1510	2.5 x 15
420870-3010	2.5 x 30
420870-6010	2.5 x 60
420870-1010	2.5 x 100
420870-1210	2.5 x 120
420870-1520	4.8 x 15
420870-3020	4.8 x 30
420870-6020	4.8 x 60
420870-1020	4.8 x 100
420870-1220	4.8 x 120

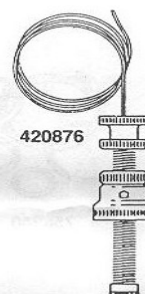


420870

FLOW ADAPTER

Use with 420870 columns. Constructed with PTFE tubing, an acetal body, PTFE/propylene o-ring seal, and a 20μ polyethylene bed support.

Article No.	Fits Column Sizes (cm)	Tubing O.D. (in.)
420876-0000	1.0	1/16"
420876-1620	2.5	1/16"
420876-0020	2.5	1/8"
420876-0040	4.8	1/8"



420876

PACKING RESERVOIR

Use with 420870 columns. Supplied complete with fitting for connection to threaded columns. Top has a $1/4''$ -28 fitting.

Article No.	Nominal Cap. (mL)	Fits Column Sizes (cm)
420877-0000	150	1.0
420877-0020	500	2.5
420877-0040	2000	4.8



420877

END FITTING, PTFE

For use with 420870 columns. Supplied with a 20μ polyethylene bed support and a $1/2''$ -20 female thread. Requires a 420804 CTFE thread adapter to use flangeless fittings.

Article No.	Fits Column Sizes (cm)
420832-4100	1.0
420832-4110	2.5
420832-4120	4.8



420832

THREAD ADAPTER, CTFE

Converts the female $1/2''$ -20 fittings on 420830 and 420870 columns to a female $1/4''$ -28 thread. Two thread adapters are supplied with each 420830 and 420870 column.

Article No.	Male to Female	Pkg. Qty.
420804-0001	$1/2''$ -20 to $1/4''$ -28	2
420804-0601	$1/2''$ -20 to M-6 Metric	2



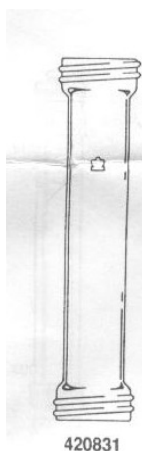
420804



BED SUPPORT, POLYETHYLENE

Package of 10. Includes one PTFE 40 mesh support screen. Supplied as standard equipment on 420830 and 420870 CHROMAFLEX columns.

Article No.	Pore size (μ)	Fits Col. Dia. (cm)	Fits Flow Adapter (cm)
420811-2010	20	1.0	—
420811-2011	20	—	1.0
420811-2020	20	2.5	2.5
420811-2040	20	4.8, 10.0	4.8, 10.0



420831

COLUMN ONLY

Glass only, without end fittings, for 420830 and 420870 columns.

Article No.	Column I.D. x Length (cm)	Nom. Column Vol. (mL)
420831-1500	1.0 x 15	12
420831-3000	1.0 x 30	24
420831-6000	1.0 x 60	47
420831-1000	1.0 x 100	78
420831-1200	1.0 x 120	94
420831-1510	2.5 x 15	74
420831-3010	2.5 x 30	147
420831-6010	2.5 x 60	294
420831-1010	2.5 x 100	490
420831-1210	2.5 x 120	589
420831-1520	4.8 x 15	271
420831-3020	4.8 x 30	543
420831-6020	4.8 x 60	1085
420831-1020	4.8 x 100	1808
420831-1220	4.8 x 120	2170



758240
758260

O-RING, KALREZ®

The perfluoroelastomer o-ring is the most versatile o-ring available. Chemical resistance is similar to PTFE, but mechanical properties are similar to Viton®. Temperature limits are -40°C to 315°C. Density is 2.02 and the color is black. Supplied in packages of one.

Article No.	Size	Fits Flow Adapters (cm)
758240-0010	010	1.0
758240-0116	116	2.5
758240-0222	222	4.8

O-RING, TFE/PROPYLENE

The TFE-propylene o-ring is derived from a modified structure of tetrafluoroethylene and propylene copolymers. For use with acetonitrile, isopropanol and methanol. Temperature limits are -45°C to 204°C. Density is 1.68 and the color is black.

Article No.	Size	Fits Flow Adapters (cm)
758260-0010	010	1.0
758260-0116	116	2.5
758260-0222	222	4.8



E. 2 Tubos para bomba peristáltica

REFERENCE: **070534-171 / ENE10-SC0017**

FORMULATION: **TYGON R3607**

ID: **1,52mm** WALL: **0'86mm**

COLOR CODE: **YELLOW/BLUE**

E. 4 Reductores de presión para gases puros y mezclas

MODELO: HBS 300/6

P. ENTRADA MÁXIMA: 200 bar

P. SALIDA: 0,5 a 6 bar

CAUDAL MÁXIMO: 3 Nm^3/h de N_2

TEMPERATURA DE SERVICIO: -20 °C a +50 °C

E. 5 Filtros

REF. ALBET-AC-020-13-BL

CELLULOSE ACETATE MEMBRANE FILTERS

White, Plain, Non sterile

Ø: 13 mm

Diameter pore (μm): 0,2

Qty: 100 units



F. Programa Hidra-Medusa

El programa HYDRA-MEDUSA es una herramienta de gran utilidad para obtener diagramas de equilibrio a partir de las constantes de equilibrio. Estos datos están almacenados en una base de datos electrónica.

El software utilizado es de uso libre y está disponible en la red, en la dirección

<http://w1.156.telia.com/~u15651596/>

A continuación se adjuntan los manuales de aplicación necesarios para el uso del

programa:

HYDRA:

Introduction

What are Chemical Equilibria?

MEDUSA

INPUT-SED-PREDOM

Make your 1st diagram

Moving around

The Database

Adding Data

Installing and Uninstalling

Author

Acknowledgments



Introduction

HYDRA can create input data files for MEDUSA, a program which is used to create chemical equilibrium diagrams. HYDRA can create these data files from equilibrium constants available in electronic databases.

Supplied binary database files. The user may add personal logK-data. → HYDRA:

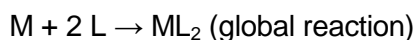
User determines which chemical components to extract from the databases. → Data-file → input file to MEDUSA.

What are Chemical Equilibria?

Chemical equilibrium is the state of a reaction system when the rate of product formation equals the rate of product decomposition. The equilibrium constant (or formation constant), K , is equal to the ratio between the forward and reverse rate constants. Equilibrium constants depend on temperature, pressure, ionic strength (for aqueous solutions), etc, and can be determined from:

- kinetic experiments (concentrations versus time),
- equilibrium measurements (emf, spectrophotometry, etc),
- thermodynamic calculations ($\text{DGr} = -RT \ln K$).

There are many literature sources of equilibrium constants and of thermodynamic data For a global reaction (the sum of single-step reactions) between a central group, M (for example a metal ion) and a ligand L :



the equilibrium constant is often denoted by the Greek letter "beta" (β_2 for the last reaction listed above). ML , ML_2 , etc, are called complexes. Originally they were called complex ions, but also neutral aqueous species may be complexes. Equilibrium diagrams are based on:

- the values for the equilibrium constants,
- the stoichiometric coefficients for the corresponding reactions,
- constraints on total concentrations, etc.



Chemical equilibrium diagrams can be easily obtained with MEDUSA.

MEDUSA

MEDUSA is a Windows interface to the MS-DOS programs INPUT-SED-PREDOM, which perform the calculations needed to create chemical equilibrium diagrams.

MEDUSA can display several diagrams simultaneously, and the user can print them with any installed Windows printer driver. MEDUSA can also call HYDRA to create diagrams based on equilibrium constants retrieved from an electronic database.

Input data files may be modified with MEDUSA. It is possible to:

- Delete either a chemical component or some complexes
- Exchange a component for a complex

Input, Sed and Predom

INPUT, SED and PREDOM are a software package to draw chemical equilibrium diagrams. These FORTRAN programs were reported in:

I.Puigdomenech: INPUT, SED, and PREDOM: Computer programs drawing equilibrium diagrams, Technical report TRITA-OOK-3010 (ISSN 0348-825X), Sept.1983, 12 pp., Royal Institute of Technology, Dept. Inorg. Chemistry, S-100 44 Stockholm.

MEDUSA is a Windows interface to INPUT, SED & PREDOM

This software has its origin in the work of others. Specially, many plotting ideas are from the SOLGASWATER code, and the chemical equilibrium compositions are calculated with the HALTAFALL algorithm (for PREDOM) and the SOLGASWATER algorithm (SED and PREDOM2).

Reference to the SOLGASWATER program:

Eriksson, G.: An algorithm for the computation of aqueous multicomponent, multiphase equilibria, Anal. Chim. Acta, 112 (1979) 375-383. The original FORTRAN source code for the SOLGASWATER program may be obtained from: Dept. of Inorganic Chemistry, Umeå University, S-901 87 Umeå, Sweden

References to the HALTAFALL program:



Ingri, N., Kakolowicz, W., Sillén, L. G. and Warnqvist, B., High-speed computers as a supplement to graphical methods -- V. HALTAFALL, a general program for calculating the composition of equilibrium mixtures, *Talanta*, 14 (1967) 1261-1286. Errata: 15 (1968) xi-xii.

Warnqvist, B. and Ingri, N., The HALTAFALL program -- some corrections, and comments on recent experience, *Talanta*, 18 (1971) 457-458.

Ekelund, R. and Sillén, L. G. and Wahlberg, O., Fortran editions of Haltafall and Letagrop, *Acta Chem. Scand.*, 24 (1970) 3073.

Make your 1st Diagram with HYDRA & MEDUSA

Follow these simple steps:

- 1) Start HYDRA and click on "Fe" in the periodic table. Click on "Fe 2+" in the list of available components. Both "H+" and "Fe 2+" will be given in the list of selected components. Click on the pull-down menu "File / Save and Exit". Click on the MEDUSA button to make a diagram. Enter a file name (for example "IRON2").
- 2) The MEDUSA main window will appear. Click on the pull-down menu "Run / Make a Diagram". A new window appears to select what type of diagram is wanted. Click on the Diagram button in the upper-left corner of the window. The calculations will be done with an MS-DOS program. When the calculations are finished the diagram is displayed in a window:

Moving Around

With the mouse:

Click on an element to display its components (either metal ions or ligands).

Click on a component to select it. Click on a selected component to un-select it.

Click on the menu "File / Search Complexes" to search the database. Point to a complex, and information appears on the status line at the bottom: reaction, equilibrium constant, and reference.

With the keyboard:

Within the periodic table you can move with the Ctrl-arrow keys (hold down the Ctrl key and hit the arrow keys to move up/down, right/left). Page-up and -down will move up and down a row. The Home and End keys move within a row. Ctrl-Home and Ctrl-End will move to the first and last element respectively.



The components-lists and the complex-list have a "hot" key which is shown with an underlined letter in the caption text. Enter the letter to jump to the corresponding list. The space-bar acts as mouse button: for example, click on a component to selected it. The menus have "hot"-key combinations (shown with an underlined letter): holding down the Alt-key and pressing the "hot" letter-key will select the menu item.

Databases

File Names: A database consists of two parts:

An elements-file has information on which components should be listed under a given chemical element. For example, one might add a new ligand: glycinate, which should be listed under the element carbon. The program has no way of knowing this unless you enter the information in the element-file.

A logK-file includes stoichiometry and logK values for reactions. The binary database supplied with HYDRA consists of files Complex.elb and Complex.db. They can not be changed.

Adding Data

New components and new logK-values may be added to the database by selecting the pull-down menu "Options / Data / Add data!" of HYDRA. The files New-Data.elm and New-Data.txt are then created.

Two types of data are needed:

Information on which components should be listed under a given chemical element. For example, you might want to add a new ligand, like glycinate, which you want listed under the element carbon. The program has no way of knowing this unless you enter the information in the element-file.

The stoichiometry for the reaction and the logK value at 25°C.

Removing or Changing data

Removing and changing data is based on having a database which is read by HYDRA after all other databases. The order in which databases are searched can be changed using the pull-down menu "Options / Data / Database files". The order is important because for two complexes with the same name (but different logK value), only the last one will be retained.

Single User (there is a copy of HYDRA/MEDUSA installed on your computer):



change a logK-value by entering the new value using the menu "Options / Data / Add data!". The element-file New-Data.elm and the logK-file New-Data.txt are then created and these files are read after the binary database supplied with HYDRA. For two complexes with the same name (but different logK value), only the last one read will be retained..

remove components from the list for an element by adding a new component with the same name but preceding the name with a "@" (in menu "Options / Data / Add data!"). For example, adding "@Fe 2+" linked to "Fe" removes Fe(II) from the components available for iron.

remove complexes by adding a new species with the same name but inserting a "@" at the beginning of the name. For example, to remove the species "FeOH 2+" just add a species named "@FeOH 2+". The logK value is not used, because the species will be removed.

Running on a Network server:

each user may change or remove data as indicated above. The database New-Data is then saved on an individual directory.

If HYDRA has been installed on a server and all users run the same EXE-file: Collective changes and deletions of data may be accomplished as follows. Create the database New-Data as indicated above for a single user. These files (New-Data.elm and New-Data.txt) are then copied to the directory where HYDRA.EXE is located, and they are renamed to Hydr-New.elm and Hydr-New.txt. The data are then automatically used for all users.

If an "ini"-file (HYDRA.INI) is found in the directory where the application is located (that is, where HYDRA.EXE is found) then this file is always used to read database names and other options. The user's "ini"-file (in %HOMEDRIVE%) then supplies only the default directory.

Create your own databases

File Names: A database consists of two parts:

An elements-file has information on which components should be listed under a given chemical element. For example, one might add a new ligand: glycinate, which should be listed under the element carbon. The program has no way of knowing this unless you enter the information in the element-file.

A logK-file includes stoichiometry and logK values for reactions. The two database files (the element-file and the logK-file) are plain text files and must have the same name but different extensions: ELM for the element-file, and either of: TXT, SKV, or CSV for the logK-file. For example, a database could consist of the two files: glycine.elm and glycine.txt



Which Databases? Any number of databases may be read by HYDRA. Use the pulldown menu "Options / Data / Database files" to add or remove databases.

What Order? The order in which the databases will be searched can be changed using the pull-down menu "Options / Data / Database files" of HYDRA. The order is important because for two complexes with the same name (but different logK value), only the last one will be retained.

Installing and Uninstalling

Distribution and unpacking: The software is distributed through the internet as a selfextracting archive file (Eq-Calcs.exe). Download and run this file to extract the software files into directory c:\medusa (or another destination of your choice).

Installing: Run "c:\medusa\setup.exe" to install the software. SETUP will unpack all files and it will make a "program group" with necessary icons (shortcuts). Optionally it will also associate ".plt" and ".dat" files with MEDUSA. Running on a Network server: Environmental Variables, INI-files, etc

Two ".ini"-files keep track of user's preferences and default directory (MEDUSA.INI and HYDRA.INI). These files are created in the directory specified by the environmental variable %HOMEDRIVE% if it is defined, otherwise the Windows directory is used (or the directory where the application is located, if the Windows directory is not found).

HYDRA: if an ".ini"-file (HYDRA.INI) is found in the directory where the application is located (that is, where HYDRA.EXE is found) then this file is always used to read database names and other options. The user's ".ini"-file (in %HOMEDRIVE%) then supplies only the default directory.

Temporary files are created in a subdirectory (MEDUSA.TMP) of the directory specified in the environmental variable %TEMP% (or %TMP%). If they are not defined the temporary subdirectory is created in the Windows directory.

File associations: Files with extension ".plt" and ".dat" may be automatically associated with MEDUSA when running the setup program. However, these associations might be in conflict with other software. How to remove file associations:

Windows 3.1 and 2000: Use the program "RegEdit" (which is installed with Windows). Important: read the help-file for RegEdit and documentation before using it! For Windows 3.1: create a "start diskette"! (you should be able to start the computer from a diskette, in case you make a mistake and create some serious problem).



Windows 95 & 98: start the Windows Explorer, pull-down the "View | Options"-menu, select the "File Types" tab. scroll to find the "PLT File" and "DAT File" file types and press the Delete button on each. click OK to return to the Explorer.

Uninstalling: delete the icons in the Program Manager (Windows 3.1) or in the Start menú (Windows 95/98). remove file associations as indicated above, delete the MEDUSA-directory, with all its files, and sub-directories.

Visual Basic Files - HYDRA and MEDUSA are Visual Basic programs. The following files belong to Visual Basic: vbrun300.dll, shell.dll, commdlg.dll, cmdialog.vbx, threed.vbx. These files are copied to the Medusa directory during installation.

The Author

HYDRA has been developed with Visual-Basic by gnasi PuigdomenechInorganic ChemistryRoyal Institute of Technology (KTH)SE-100 44 Stockholm, Sweden. And reported in: Puigdomenech I. (2000) "Windows software for the graphical presentation of chemical speciation", in: 219th ACS National Meeting. Abstracts of Papers, Vol.1. American Chemical Society, San Francisco, CA, March 26-30, 2000. Abstract I&EC-248.

Acknowledgements

HYDRA was inspired on the CEC program & database (for MS-DOS) created by Mingsheng Wang, and Prof. Mamoun Muhammed from Materials Chemistry, KTH. Moreover, ideas have been taken from a prototype program by Andrey Zagorodny (also from Materials Chemistry).

Thanks are due to the chemistry teaching staff of KTH: Olle Wahlberg, Joan Lind, Gabor Merenyi, Märtha Åberg, Tom Wallin, and many others.

