

Přepočty jednotek v analytické geochemii

Koncentrace

Hmotnostní zlomek

$$c_m = \frac{m_i}{\sum_i m_i}$$

$$c_m[\%] = \frac{m_i}{\sum_i m_i} \cdot 100$$

Hmotnostní koncentrace

$$c_m = \frac{m_i}{V} [\text{mg l}^{-1}]$$

ppm (part per million)

$$c_m [\text{ppm}] = \frac{m_i}{\sum_i m_i} \cdot 10^6 \cong \text{ng l}^{-1} \cong 0 \cdot \text{hm.}\%$$

ppb (part per billion)

$$c_m [\text{ppb}] = \frac{m_i}{\sum_i m_i} \cdot 10^9 \cong \mu\text{g l}^{-1}$$

molarita

$$M_i = \frac{n_i}{V_{\text{roztok}}} [\text{mol l}^{-1}]$$

molalita

$$M_i = \frac{n_i}{W_w} [\text{mol kg}^{-1}]$$

aktivita

$$a_i = M_i \gamma_i$$

plyny - parciální tlak

$$P_i = P_{\text{Tot}} X_i$$

X_i – molární zlomek $n_i/\Sigma n_i$

aktivita plynu $a_i \sim P_i$

Ekvivalenty

$$\text{ekv} = M_i Z_i$$

Nesymetrický elektrolyt



$$M_{\text{Na}^+} \neq M_{\text{CO}_3^{2-}}$$

Ekvivalenty dovolují porovnat koncentrace anionů a kationů

$$\text{ekv}_{\text{Na}^+} = \text{ekv}_{\text{CO}_3^{2-}}$$

Příklad:

V 1 litru vody rozpustíme 0,1 mol Na_2SO_4 a 0,2 molu CaCl_2 . Jaké je složení roztoku?

Soli silných kyselin a zásad – 100% disociované

Roztok:

$$M_{\text{Na}^+} = 0,2 \text{ mol l}^{-1}, M_{\text{Ca}^{2+}} = 0,2 \text{ mol l}^{-1}, M_{\text{SO}_4^{2-}} = 0,1 \text{ mol l}^{-1}, M_{\text{Cl}^-} = 0,4 \text{ mol l}^{-1}.$$

$$\text{ekv}_{\text{Na}^+} = 0,2 \text{ ekv l}^{-1}, \text{ekv}_{\text{Ca}^{2+}} = 0,4 \text{ ekv l}^{-1}, \text{ekv}_{\text{SO}_4^{2-}} = 0,2 \text{ ekv l}^{-1}, \\ \text{ekv}_{\text{Cl}^-} = 0,4 \text{ ekv l}^{-1}.$$

$$0,6 \text{ ekv}_{\text{kationty}} = 0,6 \text{ ekv}_{\text{anionty}}$$

Z roztoku není zřejmé, z jakých solí vznikl!

Jmenované složky - většinou kompletní analýza

Bilance nábojů (podmínka elektronegativity) - nejlepší test
kompletnosti a přesnosti analýzy

Porovnání sumy **ekvivalentů kationů** v 1 litru roztoku/vody s
celkovou sumou **ekvivalentů anionů**:

$$\text{Charge imbalance (\%)} = \left| \frac{\sum meq_{\text{cations}} - \sum meq_{\text{anions}}}{\sum meq_{\text{cations}} + \sum meq_{\text{anions}}} \right| \times 100$$

Vzorek vody musí být elektricky neutrální!!!

suma ekvivalentů se musí rovnat sumě ekvivalentů anionů.

Obvykle není chyba v bilanci nábojů větší než 5 %.

Příklad:

	mg/l	M	mmol/l	náboj	meq/l
Ca ²⁺	42.5	40.08	1.06	2	2.12
Mg ²⁺	3.21	24.31	0.13	2	0.26
Na ⁺	13.7	22.99	0.60	1	0.60
K ⁺	1.18	39.1	0.03	1	0.03
				Σ	3.01
Cl ⁻	31.2	35.45	0.88	-1	-0.88
SO ₄ ²⁻	39	96.06	0.41	-2	-0.81
HCO ₃ ⁻	79.9	61.02	1.31	-1	-1.31
NO ₃ ⁻	1.3	62	0.02	-1	-0.02
				Σ	-3.02

$$\text{náboj. nerovnováha} = \frac{3,02 - 3,01}{3,02 + 3,01} 100 \cong 0,2 \%$$

Chyba v bilanci nábojů $> 15 \%$ - problém

Důvody nábojové nerovnováhy:

1. Velké analytické chyby ve stanovení majoritních složek
2. Některé z hlavních složek nebyly stanoveny (vyjímka, většinou stanoveny předpokládané majoritní ionty)
3. Chemické reakce během analýzy (odplynění CO_2 , srážení kalcitu)
4. Nesprávné valence při výpočtu nábojové bilance (typicky, důlní vody, problém Fe a Mn).

Pravidlo při chybách v nábojové bilanci:

- pokud je velká, nemusí to být nutně chyba analýzy
- pokud je malá, není to důkaz přesnosti analýzy

přepočty chemických analýz

- výsledky chemických analýz jsou uvedeny v hmotnostních procentech
 - hm.% zohledňují údaje o obsahu daného prvku a také i o jeho atomové hmotnosti
 - součet hm.% všech prvků v analyzovaném materiálu by měl být 100 hm. %
 - pokud není některý prvek analyzován je suma hm. % nižší (H, B, B, Li, C...)
 - amfiboly ~ 98 hm.%, slídy ~ 96 hm.%, turmalíny ~86-88 hm.%, kalcit ~ 56 hm.%,
- suma hm.% reálných analýz 99-101
 - způsobeno např. fluktuací přístroje, kvalitou povrchu vzorku atd.
 - pokud jsou sumy vyšší nebo nižší o 1,5 hm.% a více je třeba zvážit, zda se nejedná o špatnou analýzu
 - pozor na nižší sumy metamiktních vzorků

přepočty chemických analýz

- pokud analyzujeme kovy, slitiny, sulfidy, chloridy, fluoridy, atd. uvádíme analýzu v **hmotnostních procentech prvků**
- pokud analyzujeme oxidické fáze uvádíme analýzu v **hmotnostních procentech oxidů**
 - měříme pouze obsahy prvků (Si, Al, Fe, atd), ale kyslík dopočítáme podle stechiometrie

přepočty chemických analýz

- mol – jednotka počtu částic (atomů, molekul)
- 1 mol – 6.022×10^{23}
- 1 mol Al_2O_3 obsahuje 2 moly Al a 3 moly O

- molární hmotnost – hmotnost 1 molu látky (atomů, molekul) [g/mol]
- hmotnost 1 molu Si 32,065 g
- hmotnost 1 molu Pb 207,2 g
- hmotnost 1 molu Al_2O_3 101,96 g a skládá se z $2 \times 26,98$ g (Al) a $3 \times 15,9994$ g (O)