

MUNI | RECETOX

# Hydrosféra – vlastnosti vody

Doc. Ing. Branislav Vrana, PhD.  
branislav.vrana@recetox.muni.cz

RECETOX  
Přírodovědecká fakulta  
Masarykova univerzita  
Brno, Česká republika



# MUNI | RECETOX

**Jak to, že voda,  
která je tak důležitá pro život,  
že život bez ní není možný,  
má tak nízkou cenu,  
zatímco diamanty,  
pro život naprosto zbytečné,  
mají cenu tak vysokou ?**



Vlastnosti vody

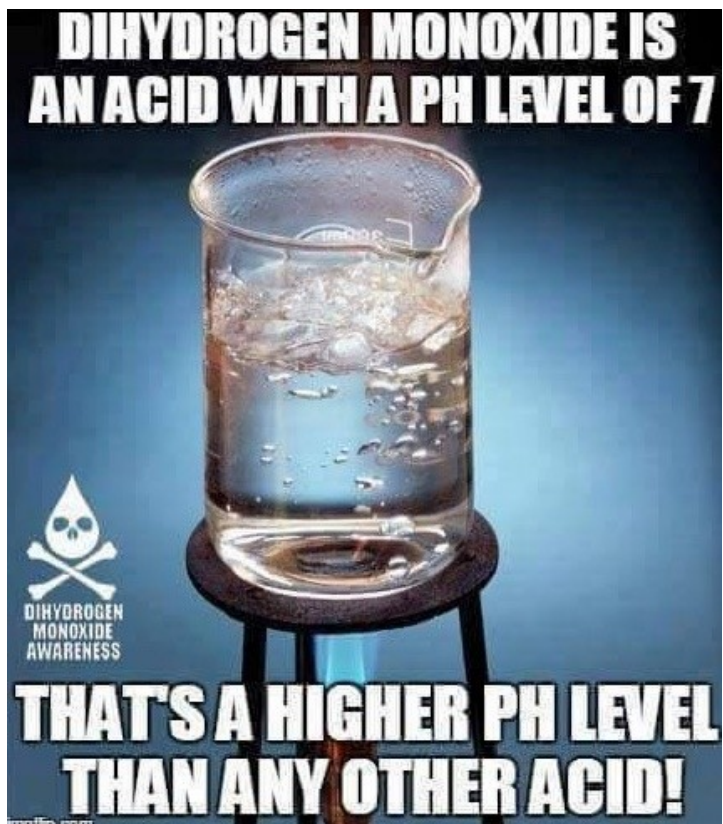


Typy vod



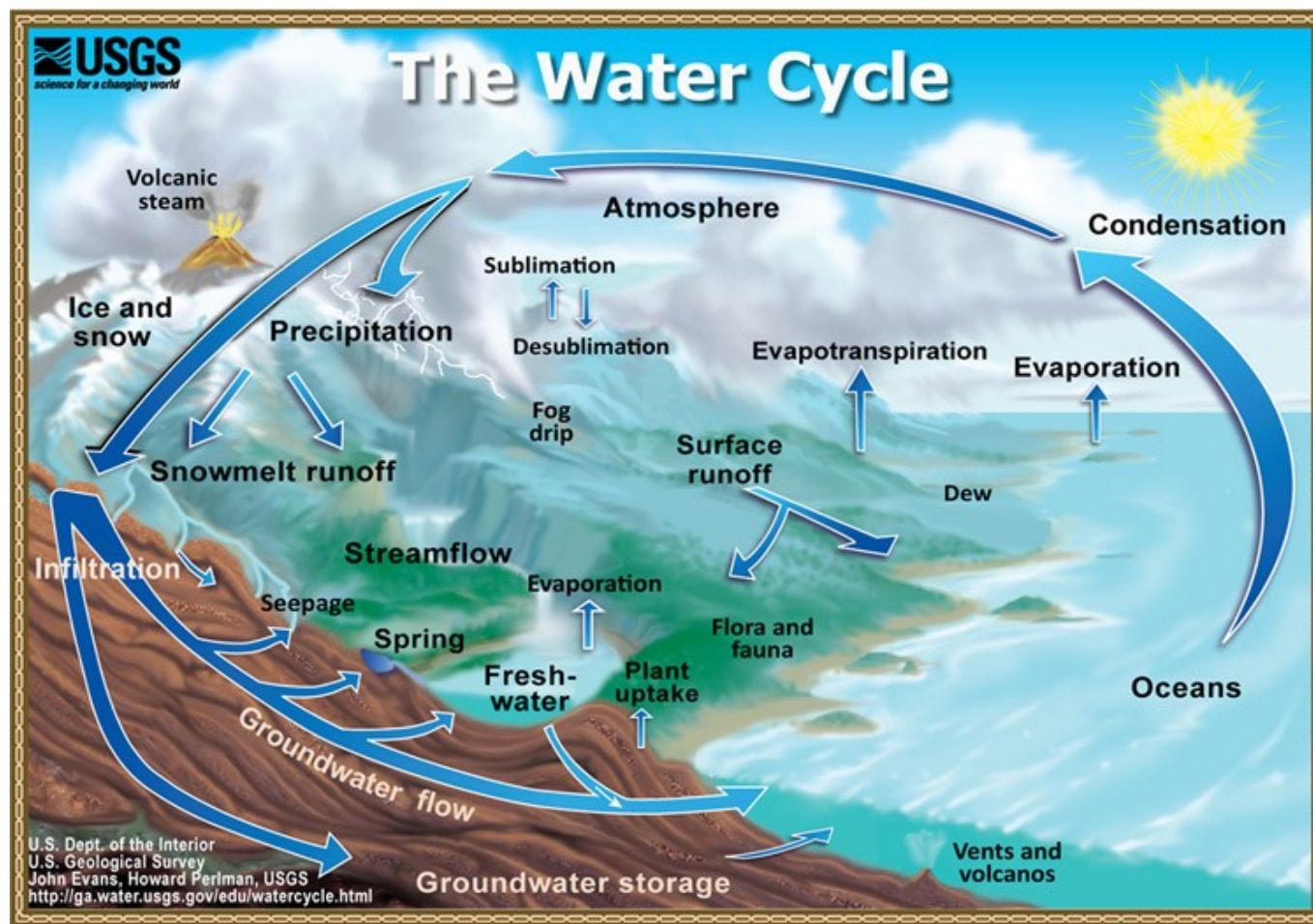
Chemické složení vod





Nebezpečný dihydrogen monoxid šíří hrůzu. Studenti jej chtějí zakázat

# Koloběh vody



## Vlastnosti vody

Vlastnost	Působení a význam
Vynikající rozpouštědlo	Transport živin a odpadů, umožňuje průběh biogeochemických procesů
Vysoká dielektrická konstanta	Vysoká rozpustnost iontových sloučenin
Vysoké povrchové napětí	Kontrolní faktor pro fyziologii; kapky a povrchy
Transparentní pro viditelné a blízké UV záření	Bezbarvá dovoluje fotosyntézu ve vodném prostředí
Největší hustota v kapalném stavu při 4 °C	Led plave, izolace od promrznutí, udržení stratifikace
Vysoké výparné teplo	Určuje režim přenosu vody mezi atmosférou a vodou
Vysoké teplo tání	Stabilizace teplotního režimu při promrzání
Vysoká tepelná kapacita	Stabilizace teplotních podmínek

# Vlastnosti vody

Vlastnost	Těžká voda D <sub>2</sub> O	Normální voda H <sub>2</sub> O
Teplota tání [°C]	3,82	0
Teplota varu (při p <sub>n</sub> = 101,325 kPa) [°C]	101,42	100
Maximální hustota [g cm <sup>-3</sup> ]	1,1072	1,0
Maximální hustota při [°C]	11,2	3,98
Hodnota pK <sub>v</sub> (při 25 °C)	14,869	14,0
Hodnota pH (při 25 °C)	7,41	7,00

# Vlastnosti vody

Voda  $\text{H}_2\text{O}$  – oxidan, oxid vodný,  
dihydrogenmonoxid

Bezbarvá, čirá kapalina bez chuti a zápachu

Směs izotopů:

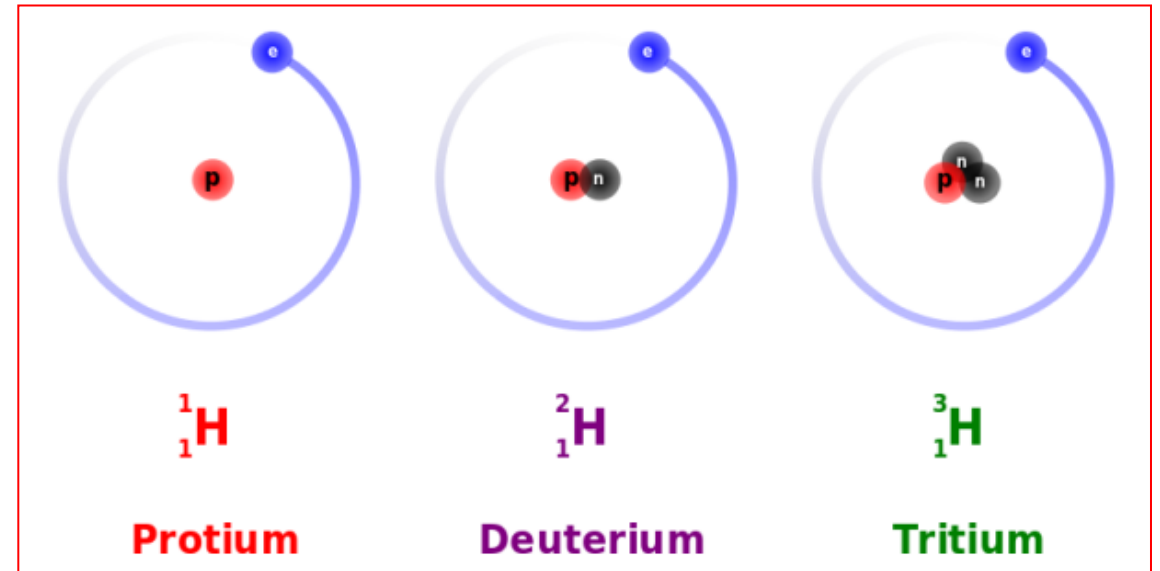
vodíku –  $^1\text{H}$ ,  $^2\text{H}$  (deuterium),  $^3\text{H}$  (tritium)

kyslíku –  $^{14}\text{O}$ ,  $^{15}\text{O}$ ,  $^{16}\text{O}$ ,  $^{17}\text{O}$ ,  $^{18}\text{O}$ ,  $^{19}\text{O}$

převládá molekula  $^1\text{H}_2^{16}\text{O}$

Těžká voda –  $\text{D}_2^{16}\text{O}$  – výzkum pohybu, geneze  
a stáří podzemní vody, zastoupení – cca 0,015  
%

Super těžká voda -  $\text{T}_2^{16}\text{O}$  – slabě radioaktivní  
– T je b zářič





## Vlastnosti vody

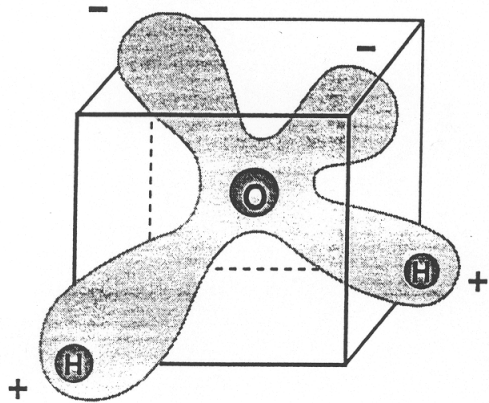


Figure 1.3. Electron cloud depiction for the  $\text{H}_2\text{O}$  molecule (Horne, 1969).

Charakter molekul vody:

- 1) Mezi atomy H a O je kovalentní vazba
- 2) Molekula existuje v  $\text{sp}^3$  hybridizaci – centrální atom O je ve středu tetraedru, 2 atomy vodíku (2 vazby) a 2 elektronové páry jsou ve vrcholech tetraedru

# Vlastnosti vody

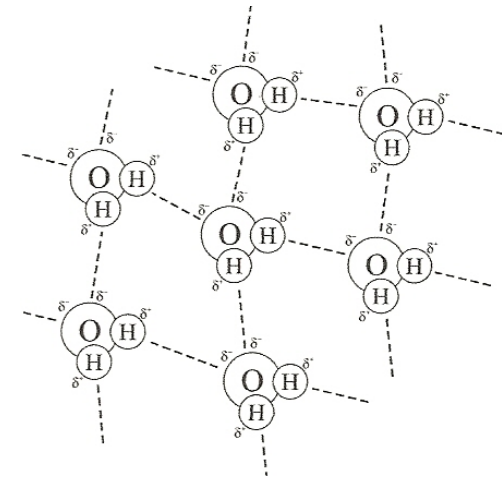
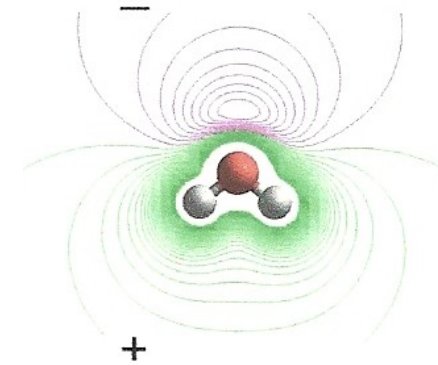
**Charakter molekul vody:**

**3) Molekula vody tvoří dipóly – důvodem je rozdíl v elektronegativitě O (3,44) a H (2,1)**

**4) Molekuly vody vytváří pomocí vodíkových můstků (vazeb) ( $d = 156 \text{ pm}$ ,  $E = 96 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) tzv. shluky (clustery, asociáty)**

**Příčiny vzniku vodíkových můstků:**

- 1) Dipólový charakter molekul**
- 2) Van der Waalsovy síly**



# Fyzikálně-chemické vlastnosti vody, funkce vody v organismu

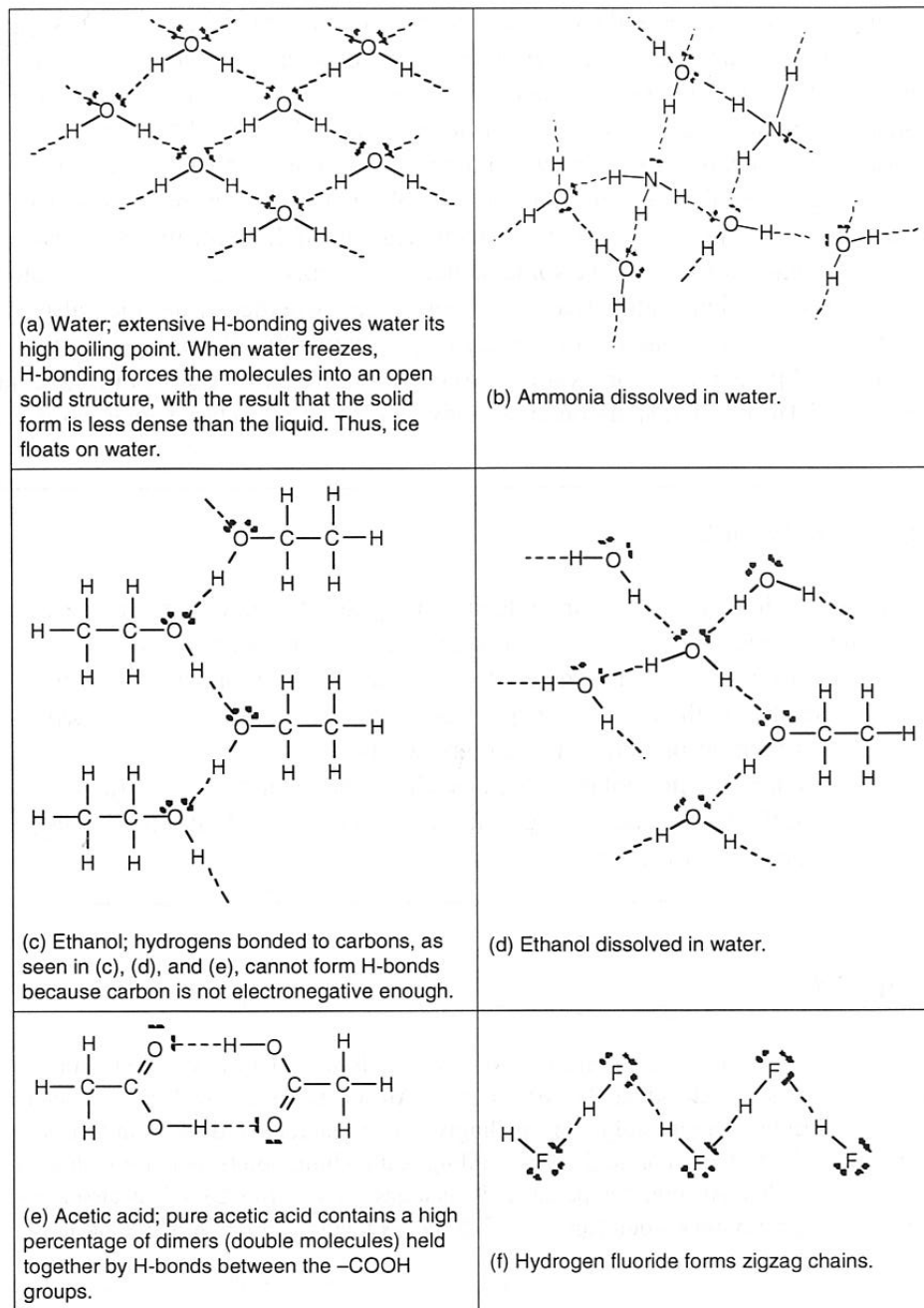
Vysoká polarita

Elektronegativní O → vazebné úhly  $104,5^\circ$

**Vysoká relativní permitivita** (asi 80) = zeslabuje el. vedení  
→ vazebné síly polárních molekul → dobré polární rozpouštědlo, hydrolýza elektrolytů, ...

Vodíkové vazby

**Nevazebná interakce** mezi parciálním nábojem na O a H → **tetraedrická struktura** → stabilní kapalná fáze; teplem se rozpadá na kompaktnější clusterovou strukturu → nejvyšší hustota vody je při  $3,98^\circ\text{C}$  - zachování života ve vodě, ...



## Příklady vodíkových vazeb mezi různými molekulami

**Unikátní vlastnosti vody způsobené přítomností vodíkových můstků – příklad BV:**

Sloučenina	Vzorec	Bod varu [°C]
Dimethylether	$\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$	36
Methanol	$\text{CH}_3\text{-OH}$	56
Voda	$\text{H}_2\text{O}$	100

FIGURE 2.5 Examples of hydrogen bonding among different molecules.

# Vlastnosti vody

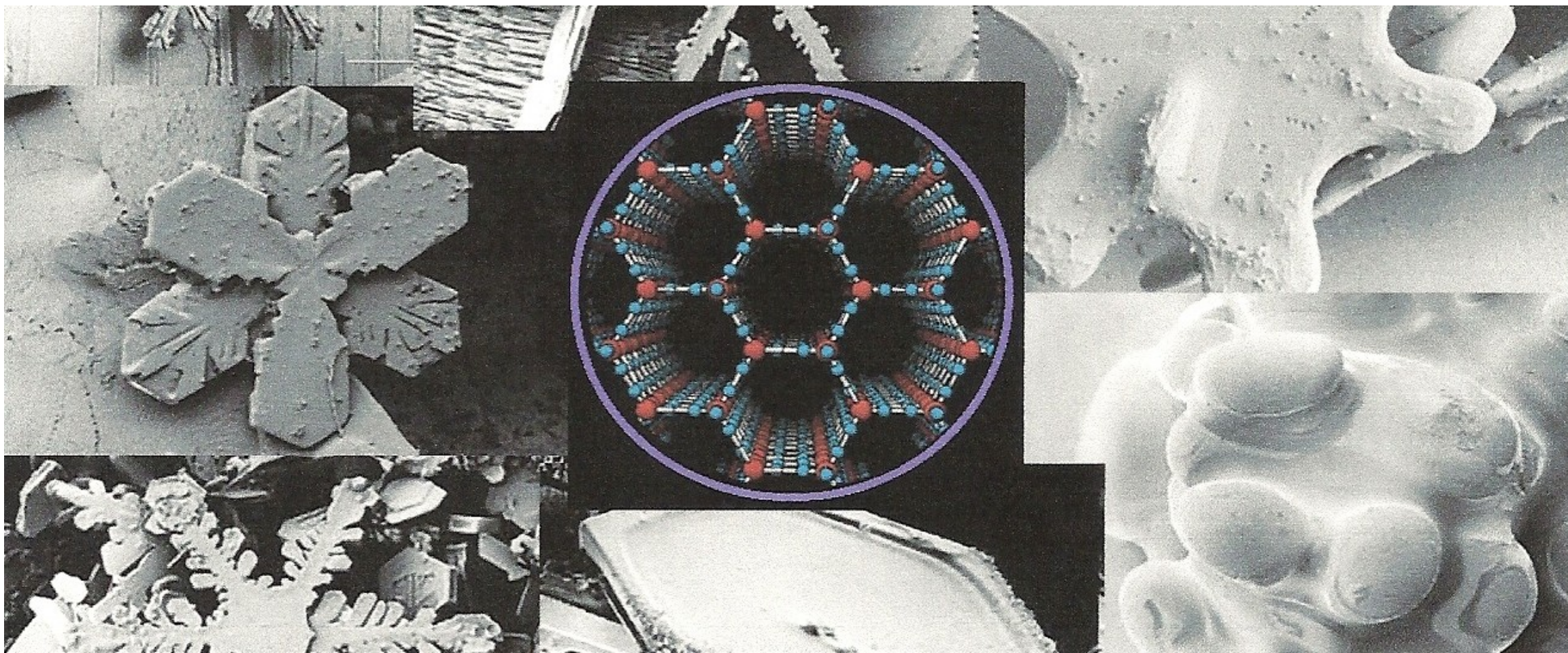
## Charakter molekul vody:

Asociáty molekul vody mají přechodný charakter, jejich tvorba a rozbíjení závisí na změnách tepelné energie.

## Skupenství:

- 1) **Plynné** – molekuly jsou izolovány, vodíkové můstky nevznikají
- 2) **Kapalné** – cca 3,5 vodíkových můstků na molekulu vody – přiblížení molekul vody – **nárůst hustoty**
- 3) **Pevné** – 4 vodíkové můstky na každou molekulu vody – hexagonální uspořádání krystalické mřížky ledu (existuje řada dalších modifikací mřížky) – **nárůst objemu** o cca 9% oproti kapalné fázi

# Vlastnosti vody



# Vlastnosti vody

**Charakter molekul vody:**

**4) Vazba O-H má polární charakter – polární molekula H<sub>2</sub>O je polární rozpouštědlo – dobře rozpouští polární a iontové sloučeniny (podobné rozpouští podobné) – dochází k jejich disociaci, ionizaci nebo štěpení.**

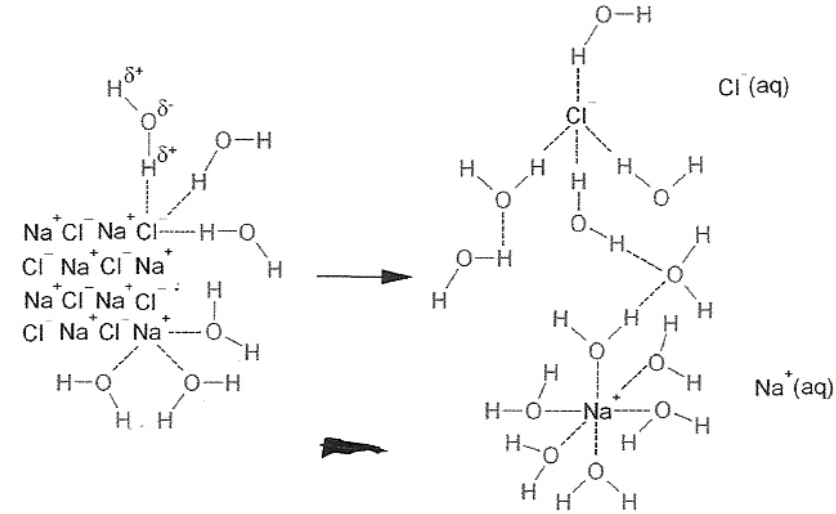
**Uvolněné ionty následně podléhají hydrataci – interakce ion – dipól.**

**V případě polárních sloučenin je jejich rozpustnost ve vodě dána tvorbou vodíkových můstků.**

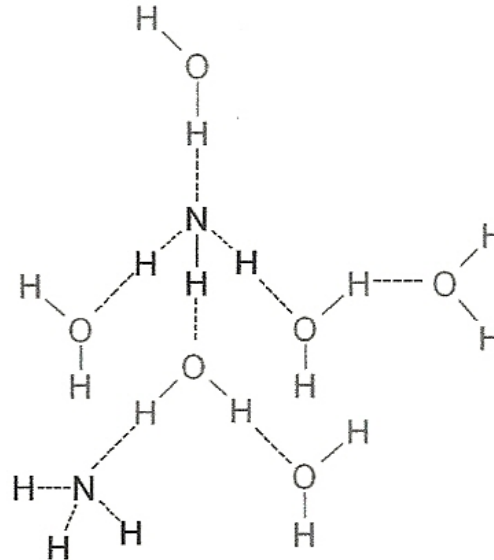
**V přírodě voda obsahuje vždy příměsi, čistou je jen v okamžiku svého „zrodu“ – při kondenzaci v atmosféře.**

# Vlastnosti vody

**Hydratace iontové  
sloučeniny** - např. NaCl –  
interakce ion ( $\text{Na}^+$  a  $\text{Cl}^-$ ) –  
dipól  $\text{H}_2\text{O}$



**Hydratace polární  
sloučeniny** - např.  $\text{NH}_3$  –  
tvorba vodíkových  
můstků





# Vlastnosti vody

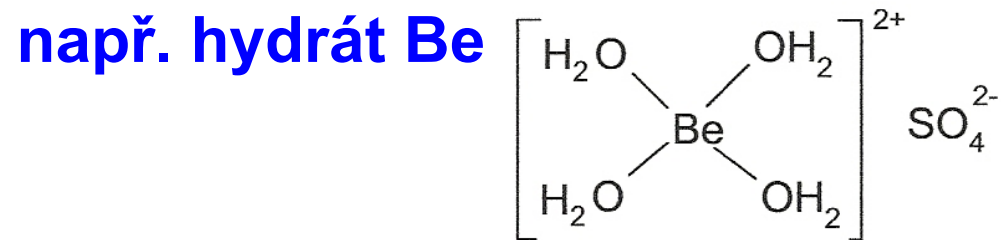
## Charakter molekul vody:

### 5) Tvorba hydrátů – solí krystalizujících z roztoků hydratovaných kationtů a aniontů

Voda je v hydrátech vázaná:

a) slabou vazbou v krystalové mřížce, tzv. krystalová voda – křemičitany, hlinitany, atd.

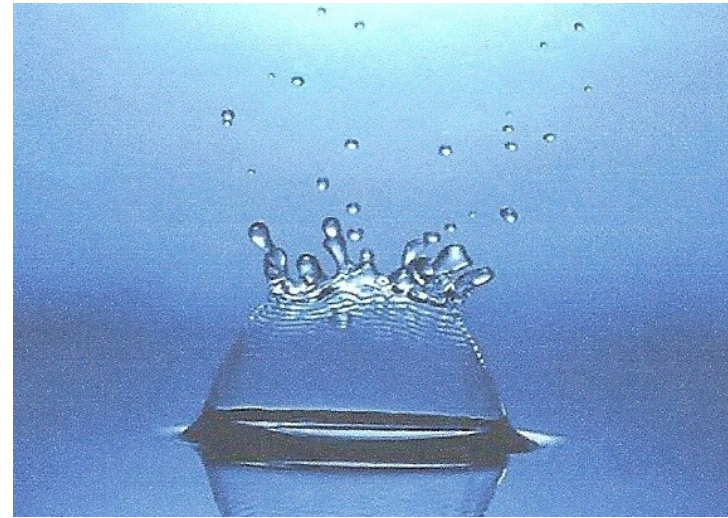
b) silnou donor-akceptorovou (koordinací) vazbou –



# Vlastnosti vody

## Fyzikální charakteristiky vody:

- 1) Tepelné vlastnosti
- 2) Hustota
- 3) Viskozita
- 4) Povrchové napětí



# Vlastnosti vody - tepelné

Tepelné vlastnosti vody:

## Trojný bod

$T = 0,001 \text{ } ^\circ\text{C}$ ,  $p = 0,61173 \text{ kPa}$

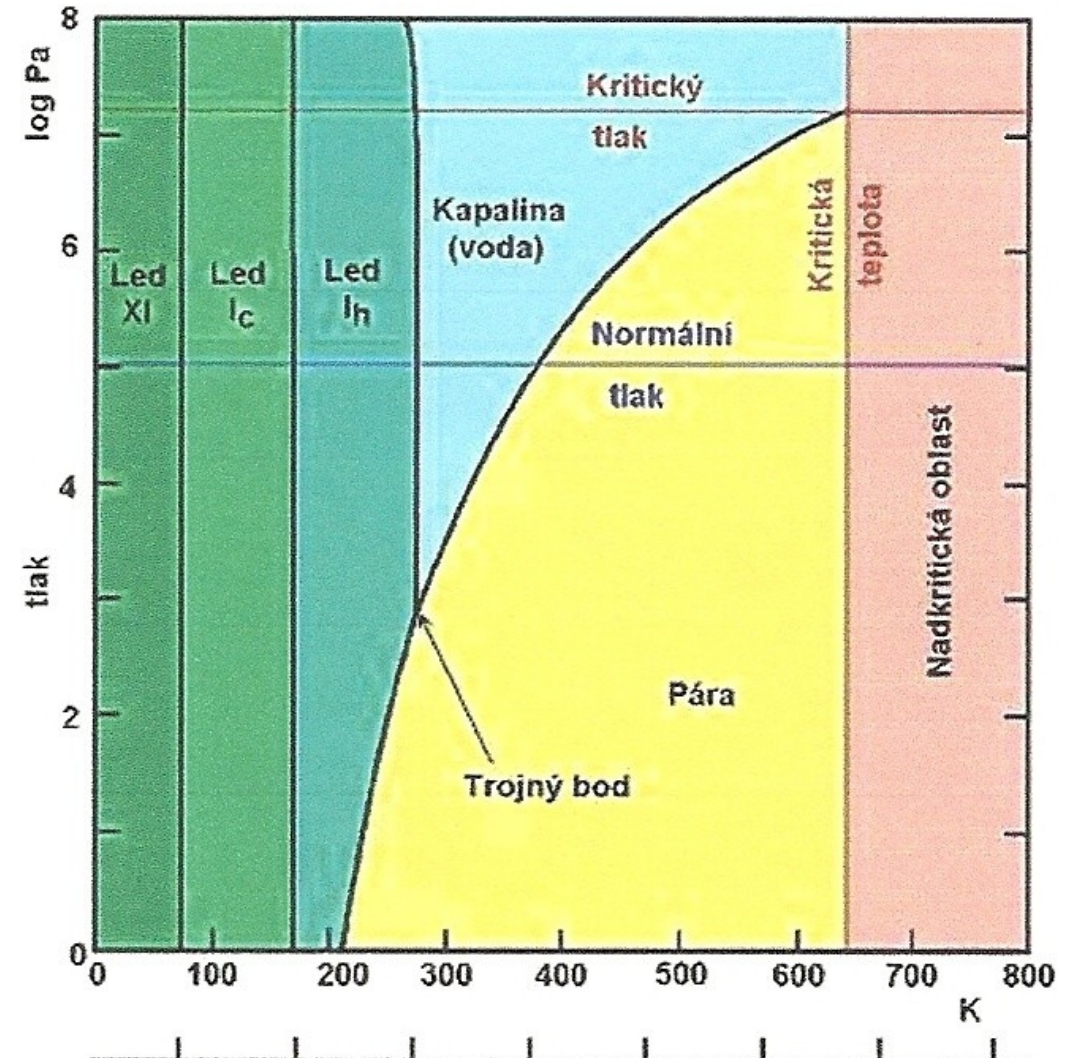
Rovnovážný stav kapalná, pevná a plynná fáze

## Kritický bod

$T = 374 \text{ } ^\circ\text{C}$ ,  $p = 22\,140 \text{ kPa}$

Látka se již vyskytuje pouze v plynné fázi.

Zvýšením tlaku ji nelze zkapalnit



# Vlastnosti vody - tepelné

## Tepelné vlastnosti vody:

### Vysoká měrná tepelná kapacita - vysoká hodnota

- velká tepelná setrvačnost vody (zadržuje teplo)
- Vliv na klima
- Transport tepla (ústřední topení)

## Teplo

Část vnitřní energie, kterou systém vymění (přijme nebo odevzdá) při styku s jiným systémem, aniž by docházelo ke konání práce

Látka (18 °C)	C [J kg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]
Voda	4 180
Ethanol	2 460
Olej	2 000
Kyslík	917
Hliník	896
Železo	450
Měď	383
Stříbro	235
Platina	133
Zlato	129

# Vlastnosti vody - tepelné

Tepelné vlastnosti vody

**Měrné skupenské teplo [ $\text{J kg}^{-1}$ ]**

**Tání ( $l_t$ )** je teplo, které přijme 1 kg pevné látky, jestliže se při teplotě tání celý přemění na kapalinu téže teploty.

**Varu ( $l_v$ )** je teplo, které přijme 1 kg kapalně látky, jestliže se při teplotě varu celý přemění na plyn téže teploty.

**Kondenzace ( $l_k$ )** je teplo, které odevzdá 1 kg plynu, jestliže se přemění na kapalinu téže teploty.

Látka	$l_t$ [ $\text{kJ kg}^{-1}$ ]	Látka	$l_v$ [ $\text{kJ kg}^{-1}$ ]
Hliník	399	Hliník	10 500
Led	334	Železo	6 340
Železo	289	Voda	2 257
Ethanol	108	Ethanol	879
Zlato	64	Vodík	454
Rtuť	11,8	Rtuť	301

# Vlastnosti vody - tepelné

## Tepelné vlastnosti vody

**Var** – skupenská přeměna, při které se kapalina mění na plyn v celém svém objemu (ne pouze na povrchu jako při vypařování)

**Teplota varu ( $T_v$ )** – teplota, při které se právě vyrovná tlak par kapaliny s tlakem okolního plynu

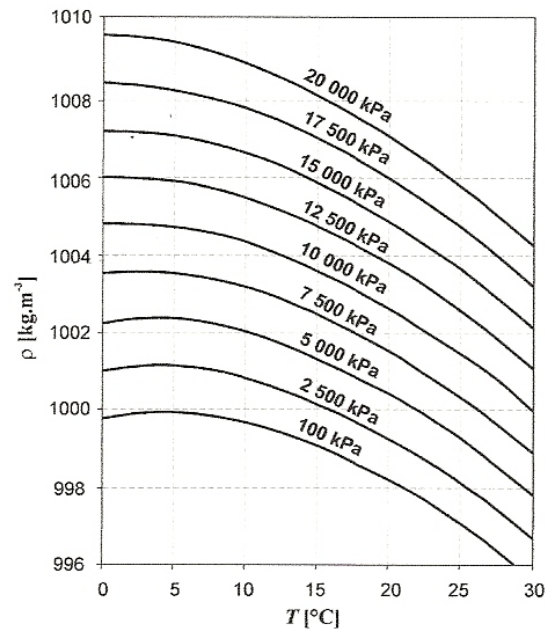
Látka	$T_v$ [°C]
Wolfram	5 500
Železo	2 750
Hliník	2 470
Rtuť	357
Voda	100
Ethanol	78,3
Vodík	- 253



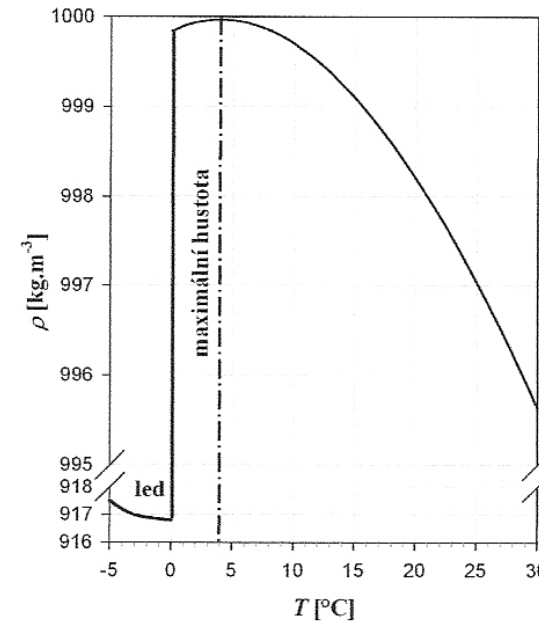
# Vlastnosti vody - hustota

## Hustota $\rho$ [kg m<sup>-3</sup>]

- Mění se s teplotou a tlakem
- Maximální hodnota 999,973 kg m<sup>-3</sup> (minimální objem) při  $T = 3,98$  °C a  $p = 101,325$  kPa



Závislost hustoty vody na teplotě při různých hodnotách tlaku



Závislost hustoty vody na teplotě při tlaku 101,325 kPa

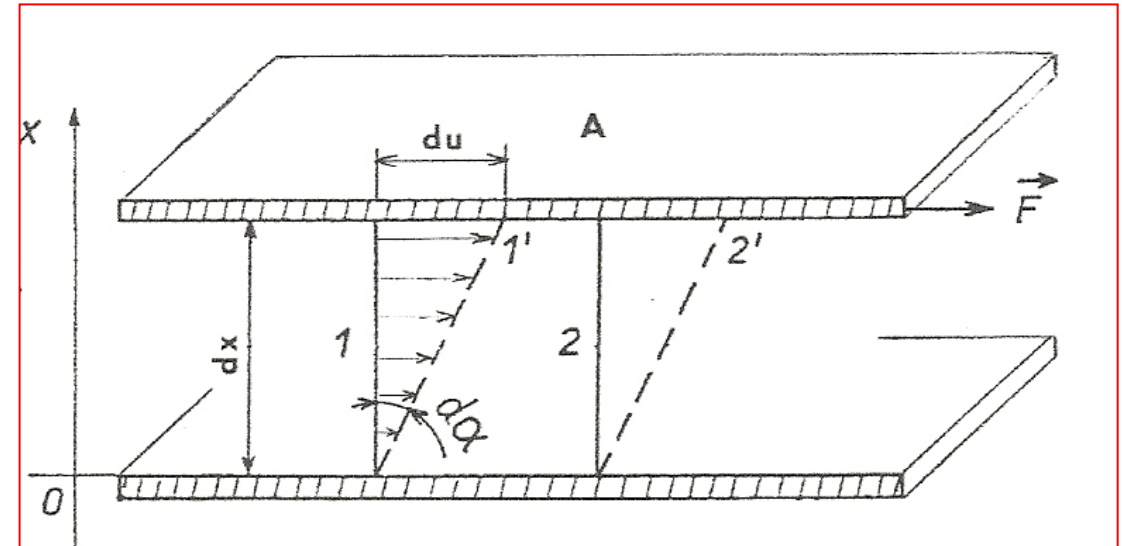
## Vlastnosti vody - viskozita

**Dynamická viskozita** ( $\eta$ ) - udává poměr mezi tečným napětím ( $\tau$ ) a změnou rychlosti ( $u$ ) v závislostech na vzdálenosti ( $z$ ) mezi sousedními vrstvami proudící kapaliny (gradientu rychlosti) – charakterizuje vnitřní tření newtonovské kapaliny

**Newtonův zákon**  $\tau = \eta \cdot \frac{du}{dz}$   
 $\eta = [\text{N s m}^{-2}], [\text{Pa}\cdot\text{s}]$

$\frac{du}{dz}$  – gradient rychlosti –  $G$  (smyková rychlost  $g$ ) (růst rychlosti ve směru na ní kolmém)

$\tau$  – tečné napětí



Rychlostní profil toku v kapalině mezi nepohyblivou a pohybující se deskou

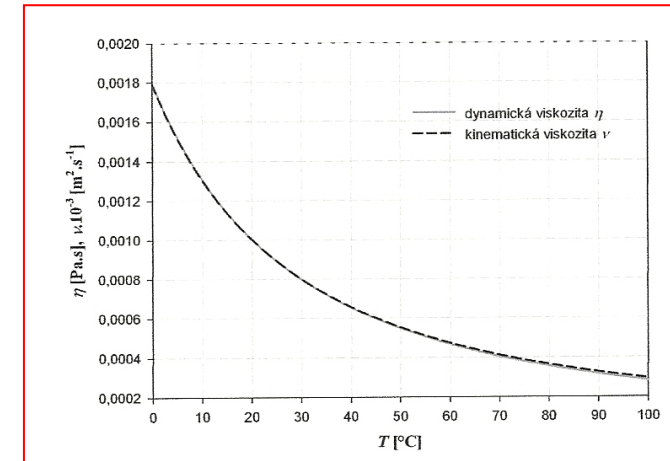


# Vlastnosti vody - viskozita

**Kinematická viskozita ( $\nu$ )**  
(součinitel kinematické viskozity) – podíl dynamické viskozity ( $\eta$ ) a hustoty kapaliny ( $\rho$ )

**Viskozita** je látkovou charakteristikou, její hodnota závisí na teplotě a tlaku.

**Viskozita** kapalin klesá s teplotou a roste s tlakem (s výjimkou nízkých teplot)



Závislost dynamické a kinematické viskozity vody na teplotě

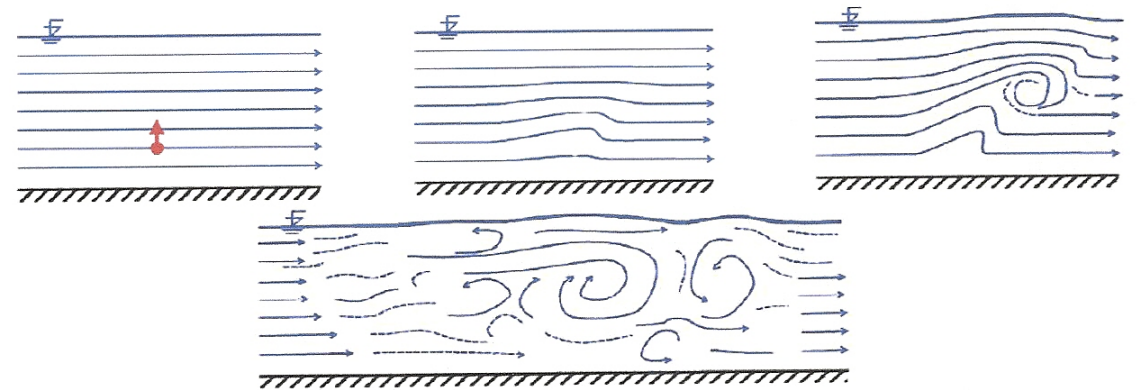
Látka (18 °C)	Kinematická viskozita [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ]
Voda	$1,06 \cdot 10^{-6}$
Benzen	$7,65 \cdot 10^{-6}$
Benzín	$7,65 \cdot 10^{-7}$
Glycerin	$1,314 \cdot 10^{-3}$
Chloroform	$3,89 \cdot 10^{-6}$
Nitrobenzen	$1,72 \cdot 10^{-5}$
Topný olej	$5,2 \cdot 10^{-5}$
Motorový olej	$9,4 \cdot 10^{-5}$
Rtuť	$1,16 \cdot 10^{-7}$
Petrolej	$2,06 \cdot 10^{-6}$

# Vlastnosti vody – proudění

Proudění tekutin

**Laminární** (vrstevnaté) –  
částice kapaliny se pohybují v  
paralelních drahách

**Turbulentní** – nepravidelný a  
neuspořádaný pohyb částic  
kapaliny, časové a prostorové  
fluktuace vektoru rychlosti,  
uvnitř proudu dochází k  
míchání



# Vlastnosti vody - proudění

Kritérium charakteru proudění – **Reynoldsovo číslo**

**Re < 2 320 - laminární (kruhovém potrubí)**

**Re > 4 000 - turbuletní (v kruhovém potrubí)**

$$Re = v * L / \nu$$

Kde:

**v** = charakteristická  
rychlost, např.  
průřezová

**L** = charakteristická délka,  
např. průměr potrubí

**$\nu$**  = kinematická viskozita



# Fyzikálně-chemické vlastnosti vody

## funkce vody v organismu

**Velké povrchové napětí**

**Solvatační (hydratační) obal**

**Shluk molekul vody okolo polárních molekul, iontů a smáčivých povrchů**

**1 nebo více vrstev - zvýšená hustota, jiné mechanické vlastnosti**

**Vysoká měrná tepelná kapacita**

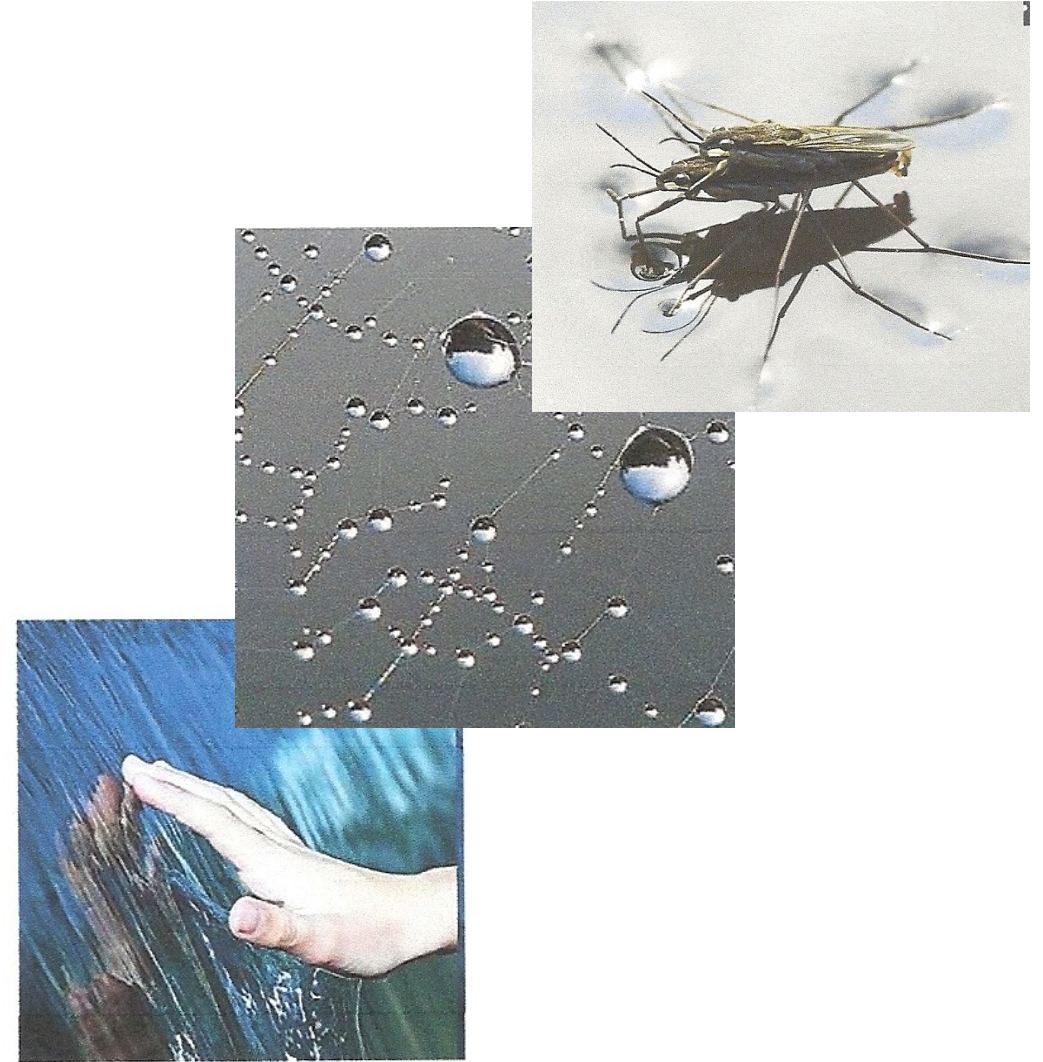
↪ **Tepelně stabilizační funkce – zpomaluje ochlazování i ohřívání**

↪ **Odpařování vody => termoregulační ochlazování**

# Vlastnosti vody – povrchové napětí

## Povrchové napětí

- 1) Síla, která působí ve směru tečny k povrchu na úsečku jednotkové délky – **mezifázové napětí** v systémech kapalina/plyn
- 1) Efekt, při kterém se povrch kapalin snaží **minimalizovat svou plochu**, resp. zaujmout energeticky nejvýhodnější stav (pokud by na kapalinu nepůsobily vnější síly, měla by kulovitý tvar)



# Vlastnosti vody – povrchové napětí

## Povrchové napětí

$$\gamma = dF / dl \quad [\text{N}\cdot\text{m}^{-1}]$$

Kde:

$dF$  – přírůstek elementární kohézní síly působící ve směru tečny k povrchu kapaliny (koheze – soudržnost látky – působení přitažlivých sil mezi molekulami látky)

$dl$  – úsečka procházející povrchem kapaliny

Látka (18 °C)	$\gamma$ [N m <sup>-1</sup> ]
Aceton	23,3
Benzen	28,9
Ethanol	22,55
N-hexan	18,4
N-pentan	16,0
Rtuť	476
Voda	72,75

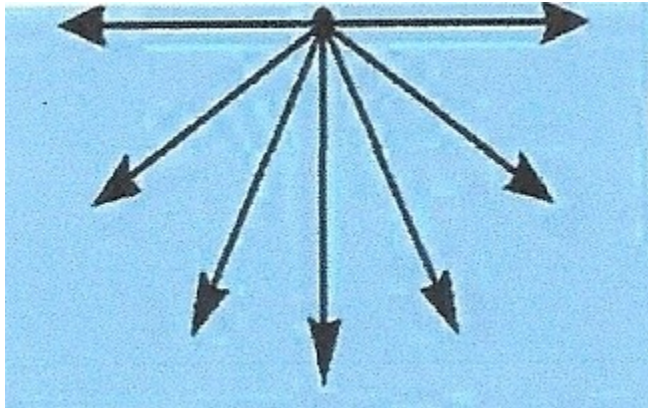
$$\gamma = f(\text{druh kapaliny nebo plynu a } T)$$



# Vlastnosti vody – povrchové napětí

## Příčiny povrchového napětí

- 1) **Přitažlivé interakce (síly)** mezi molekulami tekutiny – jsou silnější než síly mezi molekulami plynu nebo molekulami kapaliny a plynu
- 2) **Změna v symetrii částic** kapaliny na povrchu ve srovnání s vnitřkem kapaliny a vnitřkem plynu



Povrchové napětí působí v rovině povrchu, ne kolmo k němu



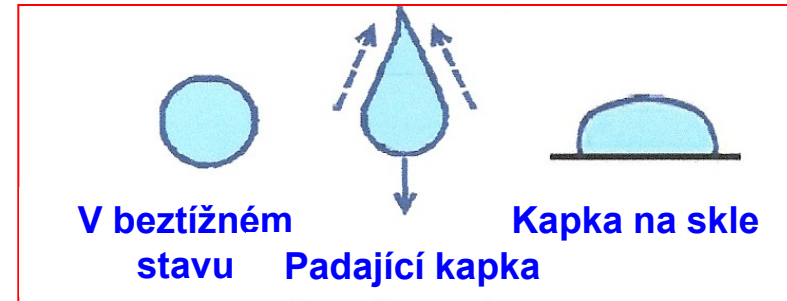
Mýdlo, saponáty – snížení přitažlivých interakcí mezi molekulami vody – snížení povrchového napětí – projevuje se tvorbou pěny

# Vlastnosti vody – povrchové napětí

Povrchové napětí v praxi

Styk kapaliny se vzduchem

- 1) Kapky vody
- 2) Vzduchové bubliny ve vodě – kulový tvar
- 3) Mastnota na hladině – ropná skvrna





# Povrchové napětí a jeho biofyzikální význam

**Fázové rozhraní** = hraniční vrstva mezi dvěma fázemi →  
nerovnoměrné působení kohezních sil → povrchové napětí  $\sigma$ .

**Síla  $F$  působící** rovnoběžně s povrchem kapaliny na délkovou jednotku  $l$  myšleného řezu.

**Plošná hustota povrchové energie  $E$**  (energie uvolněná zmenšením povrchu na nulu)

$$\sigma = F/l = E/S \quad [\text{N}\cdot\text{m}^{-1} = \text{J}\cdot\text{m}^{-2}]$$

Práce potřebná k překonání kohezních sil při zvětšování povrchu kapaliny

Závislé na teplotě – s rostoucí teplotou klesá → slábnutí kohezních sil

Snaha o nejmenší povrch – koule

# Povrchové napětí a jeho biofyzikální význam

- ↪ Způsobuje tlak uvnitř kapaliny – při rovné hladině malý –  
zvětšuje se zakřivením
- ↪ Youngův-Laplaceův vzorec:  $\Delta p = 2\sigma/r$   
r = poloměr křivosti hladiny
- ↪ Jevy u stěny nádoby
- ↪ Podle poměru kohezních a adhezních (přilnavých) sil
  - adheze > koheze
    - kapalina smáčí povrch konvexní
    - kapilární elevace
      - vysoušení porézními hmotami
  - koheze > adheze
    - kapalina nesmáčí povrch => konkávní
    - kapilární deprese

# Vlastnosti vody – povrchové napětí

## Styk kapaliny s pevnou stěnou

Kombinace přitažlivých interakcí mezi molekulami kapaliny (**kohézní síly**) a mezi povrchovými molekulami kapaliny a stěny (**adhézní síly**) – **adheze** (vzájemná přilnavost dvou různých látek).

# Vlastnosti vody – povrchové napětí

## 1) Nelpící kapalina – kapilární deprese a vypouklý meniskus

Adheze < koheze

Pokles hladiny kapaliny v kapiláře pod hladinu kapaliny v nádobě (např. Hg ve skleněné kapiláře)

$$h \cdot (\rho_A - \rho_B) \cdot g = \frac{2\gamma}{r} = -\frac{2\gamma}{R} \cdot \cos \theta$$

Kde:

$h$  = rozdíl hladin kapaliny v široké nádobě a kapiláře

$\rho_A$  a  $\rho_B$  jsou hustoty fází A a B

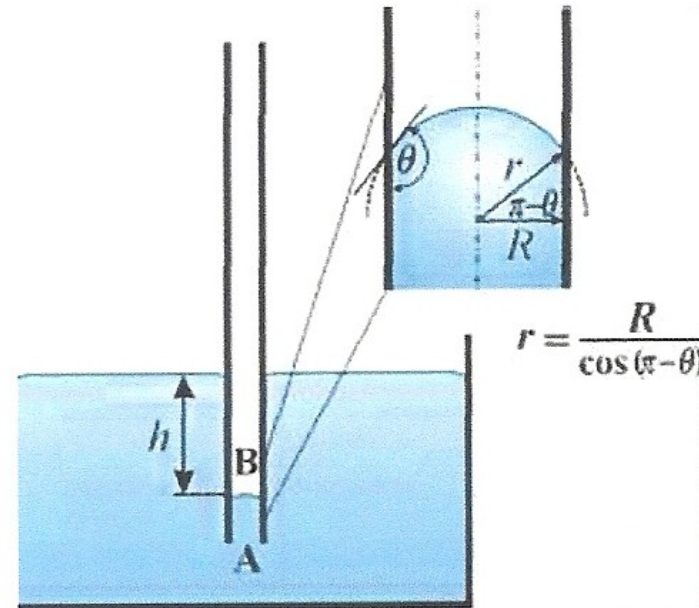
$\gamma$  = mezifázové rozhraní

$g$  = tíhové zrychlení

$r$  = poloměr menisku

$R$  = poloměr kapiláry

$\theta$  = úhel smáčení ( $90^\circ > \theta > 180^\circ$ )



# Vlastnosti vody

## 2) Lpící kapalina – kapilární elevace a vydutý meniskus

Adheze > koheze

### Vzestup kapaliny v kapiláře nad hladinu kapaliny v nádobě

$$h \cdot (\rho_A - \rho_B) \cdot g = \frac{2\gamma}{r} = \frac{2\gamma}{R} \cdot \cos\theta$$

Kde:

$h$  = výška sloupce kapaliny v kapiláře

$\rho_A$  a  $\rho_B$  jsou hustoty fází A a B

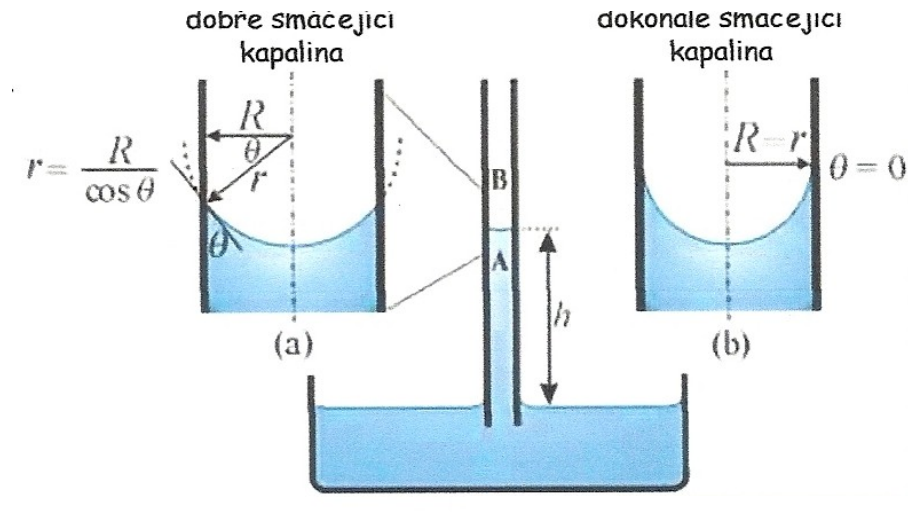
$\gamma$  = mezifázové rozhraní

$g$  = tíhové zrychlení

$r$  = poloměr menisku

$R$  = vnitřní poloměr kapiláry

$\Theta$  = úhel smáčení ( $0^\circ > \Theta > 90^\circ$ )



# Vlastnosti vody – povrchové napětí

## Vliv teploty na povrchové napětí

- Klesá s teplotou a při kritické teplotě je nulové

## Etvösöva rovnice – závislost povrchové napětí na teplotě

$$\gamma \cdot \left( \frac{M}{\rho_f} \right)^{2/3} = k \cdot (T_c - T)$$

$k$  – empirická konstanta

$\rho_f$  – hustota kapaliny

$T_c$  – kritická teplota

$T$  – teplota

$M$  – molární hmotnost kapaliny (směsi)

Pro vodu v rozmezí  $T = 0$  až  $30$  °C byl odvozen interpolační vztah ( $T$  je teplota ve °C):

$$\gamma = 75,621 - 0,15 \cdot T - 1,0266 \cdot 10^{-4} \cdot T^2$$

# Povrchově aktivní látky

## Tenzidy

- ↪ Hydrofobní a hydrofilní část → usazují se na fázovém rozhraní → jeho obohacení oproti objemu → změna kohezních sil → pokles  $\sigma$

## Malé ionty

- ↪ V objemu jsou o málo víc než na povrchu → zvýšení  $\sigma$

Povrchová koncentrace (adsorpce)  $\Gamma$

Látkové množství v jednotkové ploše rozhraní

Gibbsova adsorpční rovnice

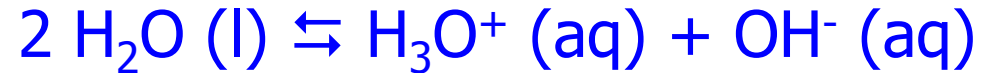
$$\Gamma = -c / R * T * \Delta\sigma/\Delta c \rightarrow \Delta\sigma = - \Gamma * R * T * \Delta c/c$$

## Emulgátory

- ↪ Rozbíjení kapek tuku ve vodě → překonání povrchového napětí
- ↪ Tenzid napětí snižuje → usnadňuje emulgaci
- ↪ Žlučové kyseliny, bílkoviny v mléce, ...

# Vlastnosti vody – disociace vody

Disociace (autoprotolýza) vody:



Voda má amfoterní charakter – chová se jako kyselina i zásada

Rovnovážná konstanta:  $K = [\text{H}_3\text{O}^+] * [\text{OH}^-] / [\text{H}_2\text{O}]^2$  ( $3,23 * 10^{-18}$ )

Iontový součin vody:  $K_V = [\text{H}_3\text{O}^+] * [\text{OH}^-]$  – závislý na T, při T = 25 °C  
 $K_V = 1,2 * 10^{-14} \text{ mol}^2 \text{ l}^{-2}$

Pro chemicky čistou vodu platí  $[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-]$ ,  $K_V = [\text{H}_3\text{O}^+]^2$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = K_V^{1/2} = 10^{-7} \text{ mol l}^{-1}$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-] = 10^{-7} \text{ mol l}^{-1}$$



# Fyzikálně-chemické vlastnosti vody, funkce vody v organismu

## Autoprotolýza vody



## Voda v organismu

- v těle asi 80%-53% podle věku
- volná x vázaná voda (solvatační obaly, hydrofilní povrchy)

## Funkce:

- Rozpouštědlo, vznik elektrolytu → vedení proudu, biomembrány
- Prostředí reakcí
- Reaktant i produkt mnoha reakcí (hydrolýza, hydratace, ... ; dýchací řetězec)
- Umožňuje transportní procesy – tělní tekutiny (difúze, makroskopický transport)
- Termoregulace – dobrá tepelná vodivost, vysoká kapacita
- Hydratační obaly → stabilizace biopolymerů a funkčních molekulárních struktur

# Vlastnosti vody - pH

**pH vody** (potential of hydrogen)

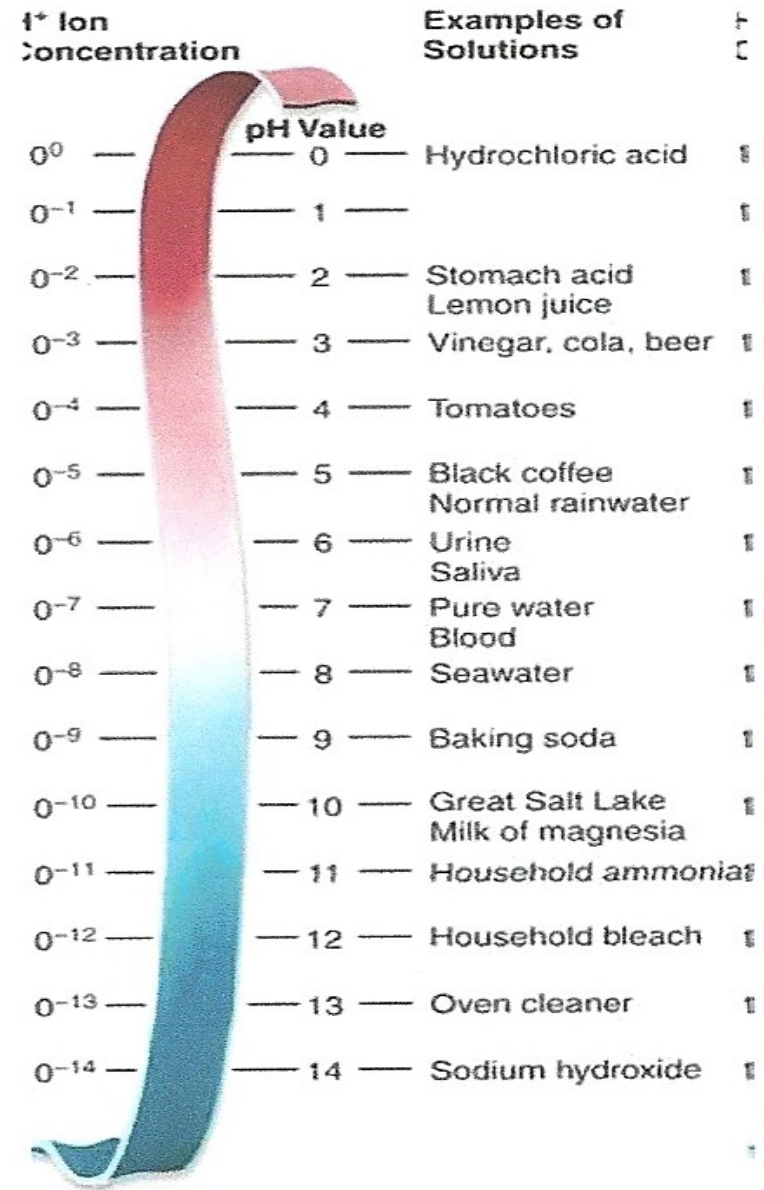
- Vyjadřuje koncentraci  $\text{H}_3\text{O}^+$  iontů

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+]$$

**Kyselé roztoky** – převládají  $\text{H}_3\text{O}^+$  ionty, protože  $[\text{H}_3\text{O}^+] > 10^{-7} \text{ mol l}^{-1}$  a  $[\text{OH}^-] < 10^{-7} \text{ mol l}^{-1}$

**Zásadité roztoky** – převládají ionty  $\text{OH}^-$ , protože  $[\text{OH}^-] > 10^{-7} \text{ mol.l}^{-1}$  a  $[\text{H}_3\text{O}^+] < 10^{-7} \text{ mol l}^{-1}$

Výsledné  $K_V$  je stále  $10^{-14} \text{ mol}^2 \text{ l}^{-2}$



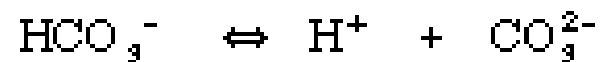
# Základy geochemie vody

## Kyseliny, báze, soli

### Silné kyseliny a báze



### Slabé kyseliny a báze



### Rovnovážné konstanty

$$K_{a1} = \frac{[\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}_2\text{CO}_3]}$$

### Plyny



### Pravidla pro rozpustnost

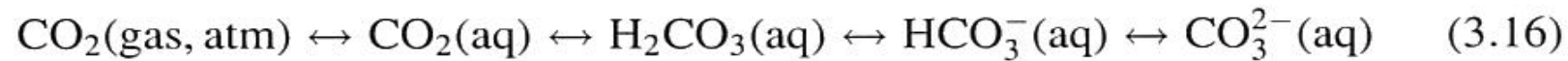
„Podobné rozpouští podobné.“

Látky, které se rozpouští ve vodě mají podobnou „molekulární strukturu“ jako voda.

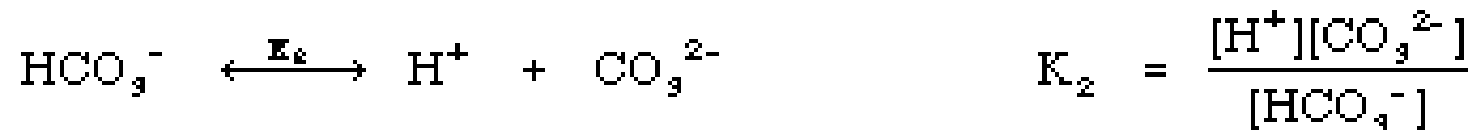
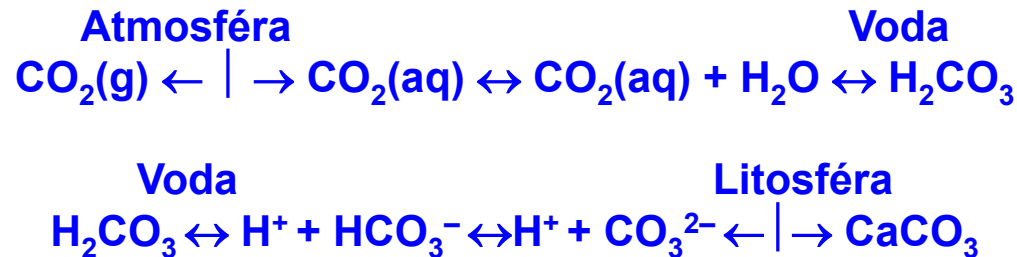
# Karbonátový systém

## Nejdůležitější rovnováha

The equilibria among only the carbon species (omitting the  $H^+$  species) are



These dissolved carbon species are sometimes referred to as dissolved inorganic carbon (DIC).

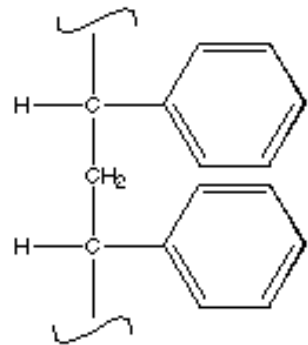


# Rozpustnost

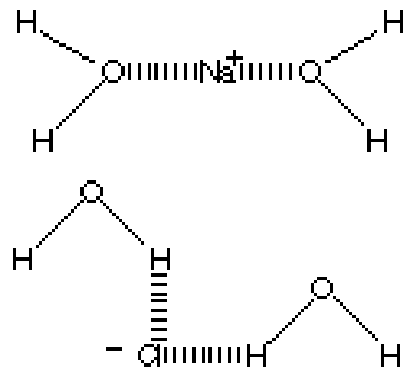
## Ropné látky



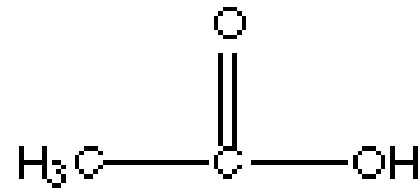
## Umělé hmoty (polystyren)



## Halit (NaCl)



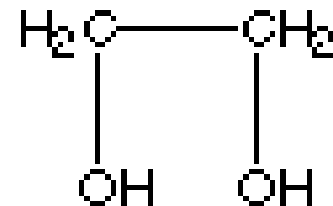
## Kyselina octová



## Ethanol



## Ethylenglykol



## Karbonáty



$$K_{sp} = [\text{Ca}^{2+}] [\text{CO}_3^{2-}] = 4.47 \times 10^{-9}$$

# Oxidace a redukce

## Redox



$$\Delta G = -nF DE$$

$$\Delta G = DG + RT \ln P$$

$$E = E - RT/nF \ln P$$

$$E = E + RT/nF \ln a_{\text{ox}}/a_{\text{red}}$$

$$E = E + 0,0592/n \log a_{\text{ox}}/a_{\text{red}}$$

$$K = [\text{Fe}^{2+}] / \{[\text{Fe}^{3+}] [\text{e}^-]\}$$

$$p\varepsilon = -\log a_{\text{e}^-}$$

$$\log K = \log [\text{Fe}^{2+}] / [\text{Fe}^{3+}] + p\varepsilon$$

$$p\varepsilon = \log K - \log [\text{Fe}^{2+}] / [\text{Fe}^{3+}]$$

$$p\varepsilon = \log K \text{ a obecně } p\varepsilon = 1/n \log K$$

$$p\varepsilon = p\varepsilon - \log [\text{Fe}^{2+}] / [\text{Fe}^{3+}]$$

$$p\varepsilon = F Eh / (2,303 RT)$$

**vysoké  $p\varepsilon$  – oxidační podmínky**

**nízké  $p\varepsilon$  – redukční podmínky**

**$p\varepsilon$  vody v rovnováze se vzduchem je  
+ 13,58**

# Oxidace a redukce

## Oxidační stav je důležitý

Hg,  $\text{HgCH}_3^+$ ,  $\text{Hg}(\text{CH}_3)_2$  methylrtuť je mnohem toxičtější než ryzí Hg  
 $\text{Cr}^{\text{VI}}$  je mnohem toxičtější než ostatní formy ( $\text{Cr}^{\text{III}}, \text{IV}$ )

## Oxidační stavy ve sloučeninách

H vřdy 1<sup>+</sup>  
O vřdy 2<sup>-</sup>  
alkalické kovy vřdy 1<sup>+</sup>  
alkalické zeminy vřdy 2<sup>+</sup>

## Dusík

$\text{N}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{NO}_3^-$

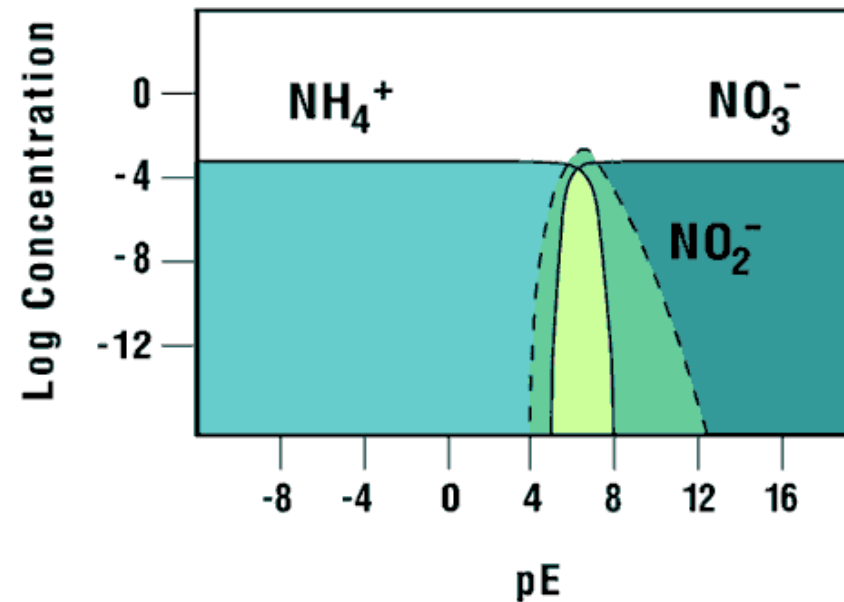
## Síra

$\text{H}_2\text{S}$ , S,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{SO}_3$ ,  $\text{SO}_3^{2-}$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$

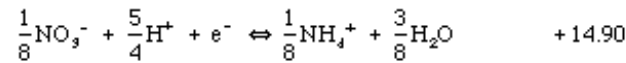
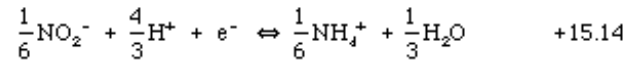
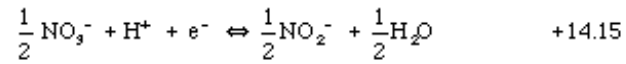
## Uhlík

$\text{CH}_4$ ,  $\text{CH}_2\text{O}$ , C, CO,  $\text{CO}_2$

pE diagram ukazuje nejstabilnější formy v určitém vodném prostředí



# Oxidace a redukce



$$pE = pE^\circ + \frac{1}{n} \log \frac{\text{Reactant}}{\text{Products}}$$

$$\text{NO}_3^- / \text{NO}_2^- \quad pE = 14.15 + \log \frac{(\text{NO}_3^-)^{\frac{1}{2}} (\text{H}^+)(e^-)}{(\text{NO}_2^-)^{\frac{1}{2}} (\text{H}_2\text{O})^{\frac{1}{2}}} = +14.15 - pH$$

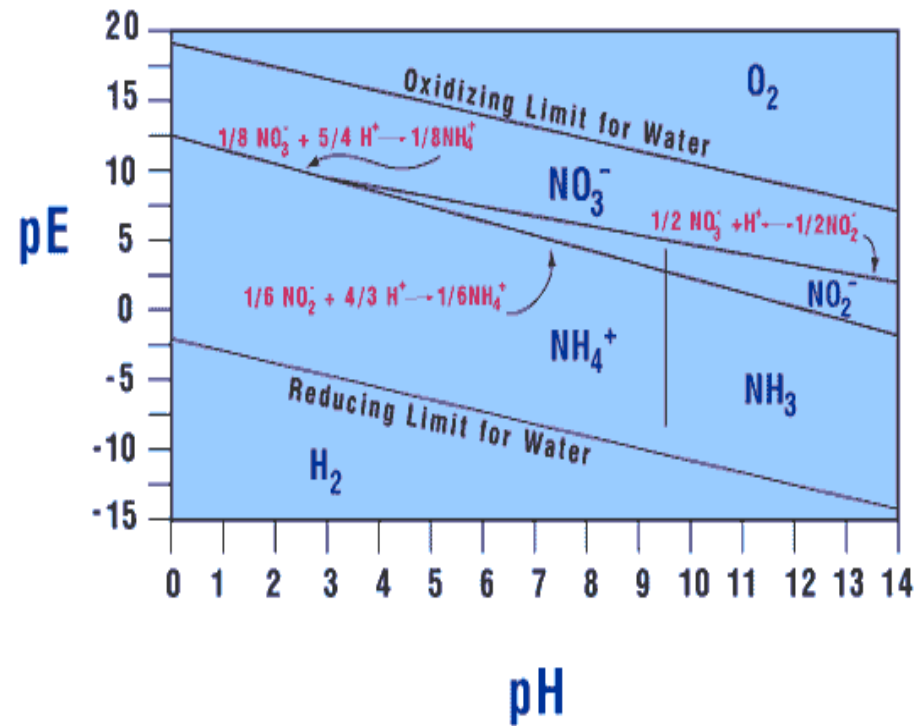
$$\text{NO}_2^- / \text{NH}_4^+ \quad pE = +15.14 + \log \frac{(\text{NO}_2^-)^{\frac{1}{6}} (\text{H}^+)^{\frac{4}{3}} (e^-)}{(\text{NH}_4^+)^{\frac{1}{6}} (\text{H}_2\text{O})^{\frac{1}{3}}} = +15.14 - \frac{4}{3} pH$$

$$\text{NO}_3^- / \text{NH}_4^+ \quad pE = +14.90 + \log \frac{(\text{NO}_3^-)^{\frac{1}{8}} (\text{H}^+)^{\frac{5}{4}} (e^-)}{(\text{NH}_4^+)^{\frac{1}{8}} (\text{H}_2\text{O})^{\frac{3}{8}}} = +14.90 - \frac{5}{4} pH$$

**Ve vodném prostředí často závisí forma určité látky pH a pE**

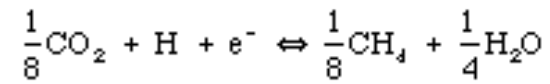
s protony:

$$pE_w = pE + \log [\text{H}^+]^n = pE - n \cdot 7 \quad (\text{pro } pH = 7)$$





# Oxidace a redukce

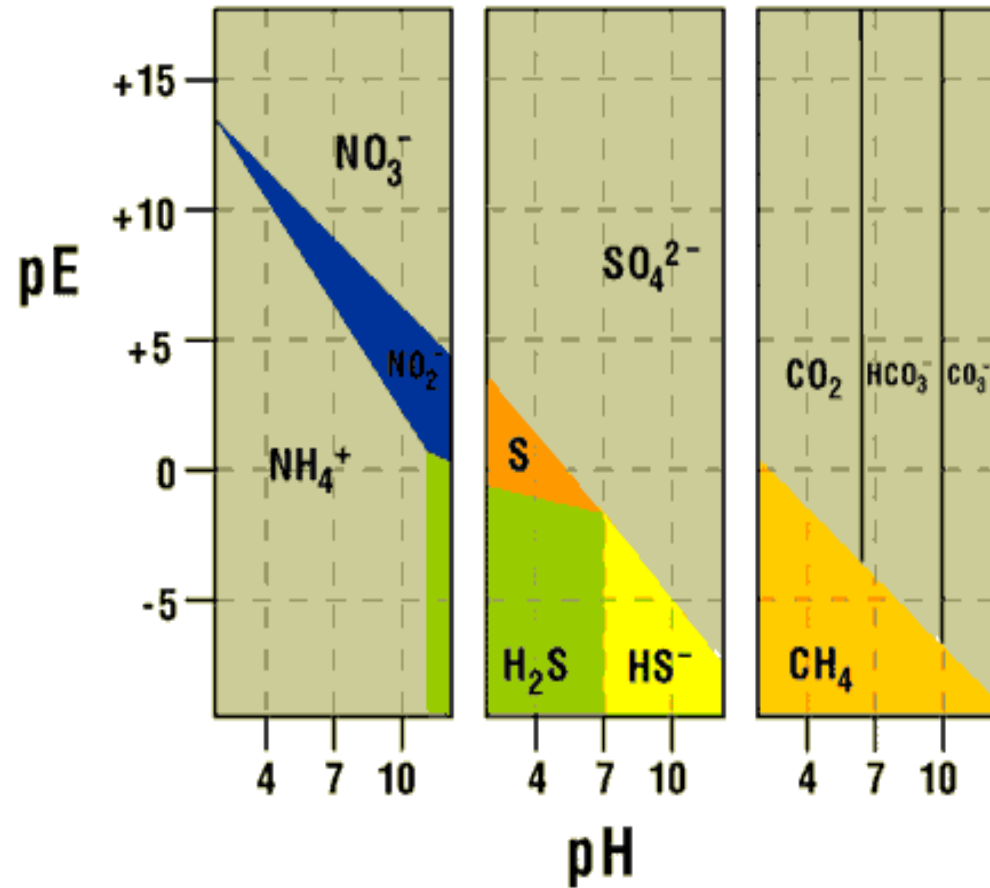


$$pE^\circ = +2.87$$

$$pE = pE^\circ + \log \frac{\text{Reactants}}{\text{Products}}$$

$$pE = +2.87 + \log \frac{1}{[\text{H}^+]} = 2.87 - (\log[\text{H}^+])$$

$$pE = 2.87 - (\text{pH}) = 2.87 - \text{pH}$$



# Eh-pH a pe-pH diagramy

## Eh-pH



$$E_h = E_h^\circ + 0,0592/2 \log \{ [p_{\text{O}_2}]^{1/2} [\text{H}^+]^2 \} / [\text{H}_2\text{O}]$$

$$E_h = E_h^\circ + 0,0592/2 \log [p_{\text{O}_2}]^{1/2} + 0,0592 \log [\text{H}^+]$$

$$E_h = E_h^\circ + 0,0592/2 \log [p_{\text{O}_2}]^{1/2} - 0,0592 \text{pH}$$

## pe-pH

$$K = [\text{H}_2\text{O}] / \{ [p_{\text{O}_2}]^{1/2} [\text{e}^-]^2 [\text{H}^+]^2 \}$$

$$\log K = \log [\text{H}_2\text{O}] - 1/2 \log p_{\text{O}_2} + 2 \text{pe} + 2 \text{pH}$$

$$\text{pro } 25 \text{ C, } 0,1 \text{ MPa: } \log K = 41,56$$

$$\text{pe} = 20,78 - \text{pH}$$

