
Obsah

1. Úvod	5
1.1. Seznam symbolů a jejich význam.	6
2. Přírodní systém voda—hornina—atmosféra; zjednodušení přírodních podmínek při rovnovážných výpočtech	11
3. Fyzikálněchemické základy	15
3.1. Přírodní voda jakožto roztok; jednotky koncentrace	15
3.2. Fugacita, aktivita, fugacitní a aktivní koeficienty	18
3.3. Rovnovážná konstanta a produkt rozpustnosti	34
3.4. Oxidačně redukční potenciál	37
3.5. Termodynamické funkce	44
3.5.1. Entalpie (H)	44
3.5.2. Entropie (S).	49
3.5.3. Volná energie (G)	51
3.6. Termodynamické kritérium pro zjišťování chemické rovnováhy	54
3.7. Vztah mezi volnou energií a rovnovážnou konstantou	56
3.8. Vliv změn teploty a tlaku na rovnovážnou konstantu	58
3.9. Vztah mezi volnou energií, standardním oxidačně redukčním potenciálem a rovnovážnou konstantou	63
3.10. Souhrn nejdůležitějších formulí a převodových vztahů.	64
4. Koncentrace vodíkových iontů a oxidačně redukční potenciál ve vodách; měření pH a Eh	68
4.1. Měření aktivity vodíkových iontů	68
4.1.1. Chování skleněné elektrody	70
4.1.2. Chování referenční elektrody.	71
4.1.3. Měření pH v terénu	71
4.1.4. Příprava pufrů pro měření pH v terénu	74
4.1.5. Stanovení alkality při měření pH v terénu	75
4.2. Měření oxidačně redukčního potenciálu.	77
4.2.1. Chování platinové elektrody	77

4.2.2.	Chování referentní elektrody kalomelové	78
4.2.3.	Měření Eh v terénu	78
4.2.4.	Příprava referentního roztoku pro měření Eh v terénu	83
4.2.5.	Stanovení železa při měření Eh v terénu	84
4.2.6.	Stanovení rozpuštěného kyslíku při měření Eh v terénu.	84
5.	Početní řešení chemických rovnováh ve vodách	86
5.1.	Karbonátová rovnováha	86
5.1.1.	Kalcit v čisté vodě	89
5.1.2.	Systém kalcit—voda; na systém působí pevně daný tlak CO_2	94
5.1.3.	Případ, kdy je známa koncentrace rozpuštěných látek ve vodě a její pH	95
5.1.4.	Rovnováha ve vodě, která byla původně ve styku s CO_2 v půdě, potom byl účinek atmosféry vyloučen a voda přišla do styku s kalcitem.	98
5.1.5.	Alkalita, jakožto základní hodnota při výpočtu karbonátových rovnováh	100
5.2.	Oxidačně redukční rovnováha	105
5.2.1.	Hydroxid železitý v čisté vodě	108
5.2.2.	Systém voda—hydroxid železitý—siderit; na systém působí pevně daný parciální tlak CO_2	111
5.2.3.	Systém voda—hydroxid železitý—pyrit; voda obsahuje rozpuštěné druhy síry, které odpovídají určitému parciálnímu tlaku síry nad systémem	115
5.2.4.	Voda o určitém pH a Eh s obsahem iontů disociované kyseliny uhličitě a rozpuštěných iontových druhů obsahujících síru a železo ve styku s hydroxidem železitým, sideritem a pyritem	116
5.3.	Tvorba komplexů v přírodních vodách	120
6.	Grafické vyjadřování rovnovážných stavů	130
6.1.	Eh—pH diagramy	131
6.2.	Diagramy stability s proměnnými aktivitami a parciálními tlaky.	136
6.3.	Diagramy s izoliniemi aktivit	138
6.4.	Grafy indexů nasycení	140
7.	Použití rovnovážných výpočtů při řešení geochemie vod	143
7.1.	Oxidačně redukční zonálnost vod sulfidických rudních ložisek	143
7.2.	Chemická rovnováha ve vodách uhelných důlních oblastí	150
7.3.	Chemická rovnováha vod uranových ložisek	152
7.4.	Karbonátová rovnováha v sintrující vodě povrchového toku	154
7.5.	Karbonátová rovnováha v podzemních vodách vápencové oblasti	160

7.6.	Chování dolomitu v přírodních vodách	163
7.7.	Chování železa v přírodních vodách	165
7.8.	Stabilita minerálů železa v anaerobním, mořském prostředí.	170
7.9.	Chování manganu v přírodních vodách	172
7.10.	Chování kyseliny křemičité v přírodních vodách	174
8.	Závěr	179
9.	Dodatek	180
9.1.	Jednotky a konstanty použité při výpočtech	180
9.2.	Termodynamické funkce chemických látek, které vystupují v rovnicích textu (Latimer 1952), není-li udáno jinak	180
9.3.	Počtetní operace s exponenty a logaritmy při základu 10	184
10.	Literatura	185