



58. ročník

2021/2022

ŠKOLNÍ KOLO

Kategorie E

Teoretická část – Zadání

20 bodů



ANORGANICKÁ CHEMIE

6 BODŮ

Autor	Mgr. et Bc. Erik Kalla <i>Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Brno Fakulta chemická, Vysoké učební technické v Brně</i>
Recenze	Jakub Štěpánek <i>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze</i>

Milí soutěžící,

i letos se v rámci anorganické chemie dozvíte něco o technologii výrob nejvýznamnějších anorganických látek. Tématem letošního ročníku je anorganická chemie a technologie hliníku a křemíku. Na začátku bych chtěl upozornit, že se nebude jednat jen o technologii hliníku, křemíku a nejvýznamnějších sloučenin těchto prvků, ale i klasickou anorganiku těchto 2 prvků, včetně chemických rovnic a všemožných základních výpočtů. Níže uvádím alespoň několik bodů, se kterými byste se měli seznámit a bezpečně ovládat.

- Základní postupy a procesy při výrobě hliníku, křemíku a jejich průmyslově využívaných sloučenin, včetně chemických rovnic
- Anorganická chemie hliníku a křemíku, od halogenidů, přes oxidy a kyseliny až po hlinitany, hlinitokřemičitany, zeolity, spinely apod.
- Základní minerály hliníku a křemíku, zejména pak ty, které se používají v technologii výrob
- Základní buňky krystalů a výpočty související
- Výpočty z obecné chemie uplatnitelné v anorganické chemii a technologii

Kapitolu věnující se problematice buněk krystalů je obstojně popsána v doporučené literatuře 1 (kapitola 6), nicméně doporučuji studovat i z internetových zdrojů, jako jsou prezentace apod, kde bývají často některé problémové části popsány lépe. Literatura týkající se technologie je spíše pro inspiraci, je možno použít jakoukoliv technologicky zaměřenou knihu.

Hodně zdaru a nadšení při řešení všech úloh vám přeje autor. ☺

Doporučená literatura:

- 1) C. E. Housecroft, A. G. Sharpe, Anorganická chemie, 4. vydání, VŠCHT Praha 2014, kapitoly 6, 13 a 14
- 2) J. Toužín, Stručný přehled chemie prvků, 1. vydání, Masarykova univerzita, Brno 2008, kapitoly 5 a 6
- 3) J. Neiser, Obecná chemická technologie, 1. vydání, Státní pedagogické nakladatelství, Praha 1981
- 4) F. Hovorka, Technologie chemických látek, 1. vydání, VŠCHT Praha 2005
- 5) F. Jursík, Anorganická chemie kovů, 1. vydání, VŠCHT Praha 2002
- 6) B. Kratochvil, Úvod do krystalochemie, 1. vydání, SNTL 1987
- 7) Jakékoliv další internetové nebo knižní zdroje zaměřené na anorganickou chemii a technologii hliníku a křemíku

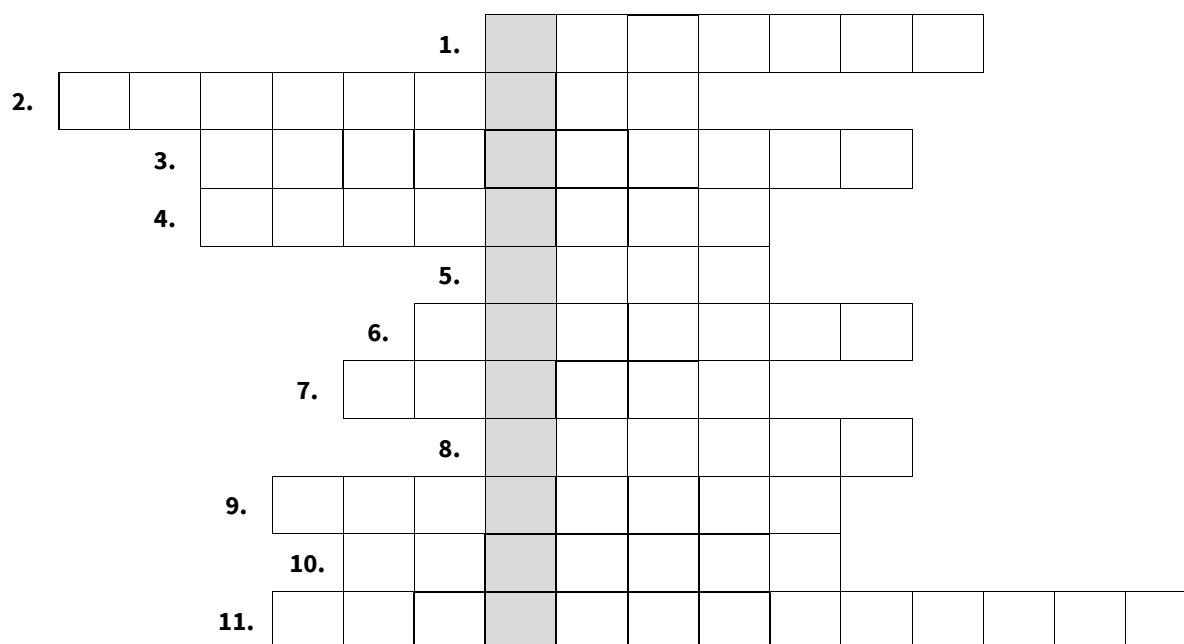


Úloha 1 Anorganicko-technologické pojmy

2 body

Vzhledem k tomu, že vás v letošní anorganické části olympiády čeká chemie hliníku a křemíku a jejich technologie, zaměřte se v první úloze na několik pojmů, které byste určitě měli dále ovládat a seznámit se s nimi – nyní ve formě křížovky.

- 1) **Doplňte do křížovky pojmy dle legendy, uveďte tajenku a k pojmu v tajence uveďte chemický vzorec a název (nikoliv triviální).**



Legenda:

1. $M^{\text{III}}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}$
2. Termický proces měnící chemické složení tuhého materiálu za současného uvolnění plynu
3. Slinutí
4. Křemičitany s dvojitými řetězci
5. Hydratovaný oxid křemičitý
6. Hexafluorohlinitan sodný
7. Surovina na výrobu hliníku
8. Spodní část hutní (vysoké) pece
9. Orthorombický SiO_2
10. Triviální název formy hliníku používaná jako stacionární fáze při kolonové chromatografii FCC
11. $\text{Fe}_2\text{O}_3 + 2 \text{Al} \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 + 2 \text{Fe}$

**Úloha 2 Čištění vody****3 body**

Možná jste se již setkali s procesem, který popisuje úpravu povrchové vody tak, aby byla vhodná ke konzumaci – stane se z ní tedy voda pitná. Proces sestává z několika různých kroků, z nichž z chemického hlediska nejzajímavější je tzv. flokulace. Při té dochází přidáním soli k vodě při určitém pH k tvorbě tzv. flokulí – někdy označováno jako tzv. vločkový mrak.

- 1) Vyhledejte ve vhodné literatuře postup úpravy povrchové vody na pitnou. Následně napište souvislý text, pojednávající o této problematice, zakomponujte zde slovo flokulace, dále v textu uplatněte a objasněte slova koagulace, číření, filtrace a desinfekce.**
- 2) Uveďte alespoň 2 negativní vlastnosti vody způsobené přítomností iontů železa/manganu.**

Železa je možno zbavit se tzv. provzdušňováním.

- 3) Uveďte rovnici provzdušňování, pokud budete brát v úvahu jako výchozí látku hydrogenuhličitan železnatý.**
- 4) Jaké hlinité a železitě soli se při úpravě vody v procesu flokulace používají? Napište příslušné rovnice, které vystihují flokulaci.**
- 5) Při jakém pH se přidává hlinitá, a při jakém železitá sůl?**

Vločkový mrak tvoří bílou sraženinu látky **X** (obsahující hliník), která, podobně jako samotný Al vykazuje amfoteritu.

- 6) Napište iontové rovnice popisující amfoteritu látky X, produkty pojmenujte systematickým názvoslovím (jedná se o koordinační sloučeniny) a uveďte, jak se barevně změní/co se stane s bílou sraženinou látky X.**

**Úloha 3 Křemík X krát jinak****1 bod**

Tak jako téměř každá technologická metoda, i výroba křemíku má svoje mouchy v podobě vzniku jedovatých vedlejších sloučenin. Takzvaný technický křemík, používaný např. v hutnictví, se získává z oxidu křemičitého redukcí koksem. Při této redukcí se však oxid křemičitý míchá s železným šrotem za vzniku ferrosilicia – slitiny křemíku a železa. Jinou možností je redukce karbidem vápenatým.

- 1) Napište rovnice vzniku technického křemíku (bez uvažování železa) oběma metodami – tj. redukcí koksem i karbidem. Jaká jedovatá vedlejší sloučenina vzniká? Uveďte název i vzorec.**

Vysoce čistý křemík, používaný např. při výrobě tranzistorů, se získává redukcí hexafluorokřemičitanu draselného sodíkem. Tento křemík je následně přečištěn a takovýto křemík obsahuje pouze 10^{-9} % nečistot.

- 2) Napište rovnici vzniku velmi čistého křemíku redukcí sodíkem.**
- 3) Jak se nazývá proces, při kterém křemík podléhá čištění za vzniku superčistého křemíku s velmi nízkým procentuálním obsahem nečistot?**
- 4) Při redukcí karbidem vápenatým vzniklo $200\,000\text{ dm}^3$ plynu (ideální plyn, standardní podmínky, tj. $101,325\text{ kPa}$, 25 °C). K výrobě křemíku bylo přitom použito $0,5\text{ t}$ rudy. Ruda obsahuje 10% hlušiny, která je inertní vůči redukcí. Došlo k redukcí veškeré rudy? Pokud ne, kolik % zůstalo v původním stavu?**

**ORGANICKÁ CHEMIE****6 BODŮ**

Autor **Jiří Doležel**
University College London, Londýn

Recenze **Ing. Petra Měnová, Ph.D.**
Ústav organické chemie a Ústav učitelství a humanitních věd, VŠCHT Praha

Milé soutěžící, milí soutěžící,

v letošní sekci organické chemie budou centrem zájmu dvě velká témata: organické sloučeniny síry a analýza organických látek pomocí infračervené spektroskopie (zkráceně IČ či IR spektroskopie). Pro úspěch ve všech kolech bude třeba i základní znalosti pravidel psaní rezonančních struktur látek a reakčních mechanismů. Při studiu organické chemie síry se zaměřte především na:

- určování oxidačních čísel a základní názvosloví organických sloučenin síry
- acidobazické reakce sirných funkčních skupin, např. deprotonace thiolu
- substituční reakce na atomu síry, např. příprava sulfidů, chlorace sulfonových kyselin
- oxidace organických sloučenin síry, např. syntéza sulfoxidů
- adice organických sloučenin síry, např. při formaci dithianů či konjugované adici
- eliminační reakce organosirných funkčních skupin
- příprava a reakce aromatických sloučenin síry, např. sulfonace (NENÍ třeba znát chemii heterocyklických sloučenin síry)
- využití organických sloučenin síry v syntéze, například při Swernově oxidaci, Juliově olefinaci či transformaci karbonylových sloučenin na epoxidy
- průmyslové přípravy a využití organických sloučenin síry, např. jako potravinových aditiv

Některé z reakcí zmíněné výše a analýza látek pomocí IR spektroskopie jsou nad rámec středoškolského učiva, a je tedy nutné další studium této problematiky (viz doporučená literatura). Při studiu IR spektroskopie není třeba se učit rozmezí jednotlivých vibrací funkčních skupin, s tím vám pomůže tabulka, která bude k dispozici v každém soutěžním kole.

Přejeme mnoho úspěchů ve všech kolech Chemické olympiády. Chemii zdar!

**Doporučená literatura:**

- 1) A. Janeczková, P. Klouda: Organická chemie, 2. vydání, Nakl. Pavel Klouda 2001, str. 55-58, 130-133.
- 2) J. McMurry: Organická chemie, český překlad 8. vydání, Nakl. VUTIUM 2015, str. 372-379, 493-497, 500-501, 543, 555, 586-589, 644-645, 697, 728, 839.
- 3) J. Svoboda a kol.: Organická chemie I, Vyda. VŠCHT Praha 2005, str. 56-58, 143, 148-153, 208-209, 218-219, 230-231, 249-250. Dostupné online: https://vydavatelstvi.vscht.cz/katalog/publikace?uid=uid_isbn-978-80-7080-561-9&fbclid=IwAR16u-4RdHdAjUN6wLtCYBVHWHWkecCe1yOSB79LasEAkoUA6dG4S0iuy80Y
- 4) J. Svoboda, Organická syntéza, Vyd. VŠCHT Praha 2017, str. 113-115 123-124, 172-174, 189-190, 229-230, 310, 312. Dostupné online z: https://vydavatelstvi.vscht.cz/katalog/publikace?uid=uid_isbn-978-80-7080-990-7
- 5) K. Kalný, V. Janda: Technologie pro 4. ročník SPŠCH a pro 5. ročník SPZ, SNTL 1982, str. 71-77, 153.
- 6) L. Beníšek, V. Janda: Organická technologie pro 4. ročník SPŠ chemických, SNTL 1978, str. 77-82, 122, 283.
- 7) S. Böhm, S. Smrčková-Voltrová, Strukturní analýza organických sloučenin, Vyd. VŠCHT Praha 1995, str. 108-120.

Tabulka vlnočtů vibračních skupin pozorovatelných IR spektroskopií			
Druh vazby	Název funkční skupiny	Struktura funkční skupiny	Vlnočť vibrace / cm⁻¹
Jednoduchá vazba s atomem vodíku	Uhlovodík	sp ³ -C-H	2960-2850
	Amin	-N-H	3500-3200
	Alkohol ¹	-O-H	3600-3200 (široký)
Dvojně vazby a podobné	Alken	-C=C-	1680-1620
	Enon	-C=C-C=O	1640-1590
	Aromát	-	1600, 1580, 1500
	Nitro	-NO ₂	1560, 1390
Látky obsahující karbonylovou skupinu	Keton ²	R ¹ -C(O)-R ²	1715 ± 10
	Aldehyd	-CHO	+ 15
	Karboxylová kyselina	-COOH	+ 0
	Acylochlord	-COCl	+ 85
	Ester	-COOR	+ 25
	Anhydrid	(RCO) ₂ O	+ 35, + 110
	Amid	-CONH ₂	- 65
	Aryl keton	Ar-C(O)-R	- 25
	Enon	-C=C-C=O	- 35

¹ Pík hydroxyskupiny v IR spektru je obvykle široký.

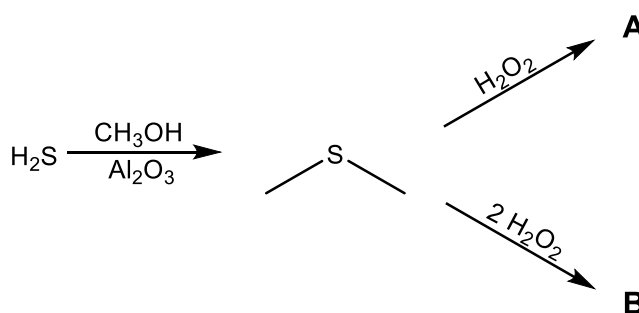
² Pro výpočet vlnočtu vibrace funkční skupiny obsahující karbonylovou skupinu se vlnočť vibrace ketonu bere jako základní hodnota, ke které se přičítá či odečítá hodnota uvedená u dané funkční skupiny. Například vlnočť pro vibraci esteru je (1715 + 25) ± 10, tedy 1750-1730 cm⁻¹.



Úloha 1 Oxidace dimethylsulfidu

3 body

Průmyslově se dimethylsulfid vyrábí reakcí sulfanu s nadbytkem methanolu v přítomnosti oxidu hlinitého jako katalyzátoru. Tuto látku lze následně pořídit do jakékoliv výzkumné laboratoře, kde slouží k několika účelům. Tam se však potýká s problémem pomalé oxidace vzdušným kyslíkem na další produkty. Tyto oxidační produkty lze připravit i cíleně, např. oxidací dimethylsulfidu 1 ekvivalentem či 2 ekvivalenty peroxidu vodíku.

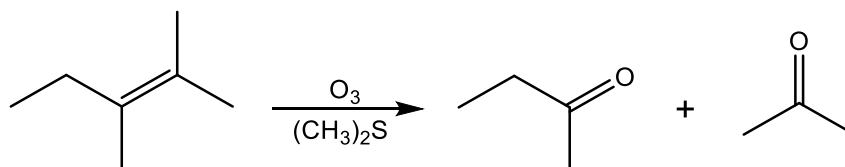


- 1) Napište struktury látek A a B. U dimethylsulfidu i u každého z produktů určete oxidační čísla atomů síry.
- 2) Uveďte názvy funkčních skupin obsahujících síru v produktech A a B.

Produkt **A** má všestranné využití v laboratoři, ať už jako rozpouštědlo či reakční činidlo. Používá se například při Swernově oxidaci, při které v prvním kroku dochází k adici látky **A** na karbonylovou skupinu jednoho z dalších reaktantů.

- 3) O jaký typ rozpouštědel se z pohledu polaritý jedná?
- 4) Při psaní mechanismu Swernovy oxidace se využívá zwitterionická rezonanční struktura látky **A**. Uveďte nejstabilnější zwitterionickou rezonanční strukturu látky **A**.

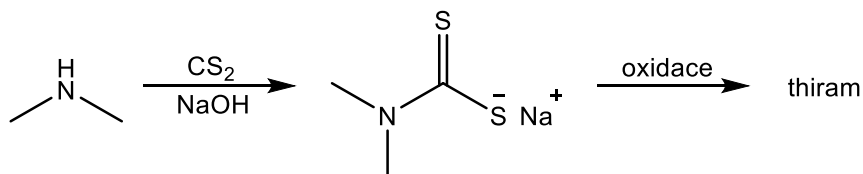
I samotný dimethylsulfid lze použít jakožto reakční činidlo. Příkladem takového využití je reakce, při které dochází ke štěpení dvojné vazby působením ozonu a dimethylsulfidu (viz níže). Produkty reakce jsou dvě látky obsahující karbonylovou skupinu.



- 5) Jaký je obecný název této reakce? Jakou funkci v reakci plní dimethylsulfid?

**Úloha 2 Aditiva polymerů obsahující síru****1,5 bodu**

Urychlovače vulkanizačního procesu jsou typicky látky obsahující v molekule atomy dusíku a síry. Jednou z takových látek je i tetramethylthiuramdisulfid (zkráceně **thiram**). Prvním krokem jeho přípravy je syntéza dimethyldithiokarbamátu sodného (viz níže), následovaná jeho oxidací na thiram.



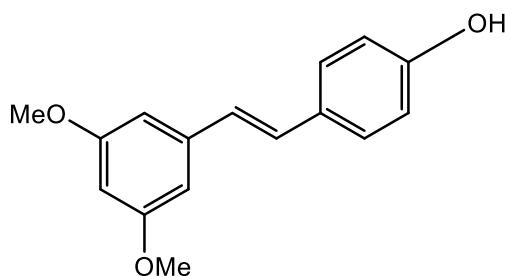
- 1) Vysvětlete, co je to vulkanizace.
- 2) Napište vyčíslenou rovnici oxidace dimethyldithiokarbamátu sodného na thiram. Náповěda: při oxidaci dochází ke změně oxidačního čísla jednoho z atomů síry z -II na -I.

Dimethyldithiokarbamát sodný však nenalézá využití pouze jako meziprodukt pro přípravu aditiva polymerů. Lze jej použít i jako ligand (chelatační činidlo) pro tvorbu komplexů s přechodnými kovy, například s železem.

- 3) Ve struktuře dimethyldithiokarbamátu vyznačte, která část molekuly umožňuje dimethyldithiokarbamátu se chovat jako ligand v komplexech s přechodnými kovy.

**Úloha 3 Pterostilben a IR spektroskopie****1,5 bodu**

Pterostilben (viz struktura níže) se v přírodě nachází v rostlinách, například v bobulích vinné révy a dalších plodech. Tato látka však vykazuje protizánětlivé a antimikrobiální účinky, čímž se stala centrem zájmu několika výzkumných skupin. V laboratoři lze ověřit strukturu látek několika způsoby, přičemž jednou z nich je právě IR spektroskopie.



- 1) Jaké píky lze pozorovat v IR spektru pterostilbenu? Uveďte názvy funkčních skupin společně s rozmezí vlnočtů těchto skupin.



FYZIKÁLNÍ CHEMIE

8 BODŮ

Autoři

Ing. Jiří Kolář

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Ing. Jakub Kubečka

University of Helsinki

Recenze

Radek Matuška

Střední průmyslová škola chemická Brno, Vranovská, p. o.

Milí soutěžící,

V letošní fyzikálně-analytické části se budeme zabývat iontovými rovnováhami, aktivitou iontů a rozpustností látek. Určitě se vám vyplatí obeznámit se s řešením bilančních rovnic pro určení pH. Také se budeme věnovat iontoměničům a jejich využití v chromatografii nebo při čištění vody. Ionovou výměnu lze někdy aproximovat pomocí adsorpce, proto se nezapomeňte podívat i na adsorpční izotermy. Nemusíte se ale učit složité vzorce nazpaměť, vše by mělo být odvoditelné ze zadání.

Doporučená literatura:

- 1) D. A. Skoog, D. M. West, F. J. Holler, S. R. Crouch: Analytická chemie, 9. vydání, VŠCHT Praha 2019, kapitoly 9, 10, 11, 31 a 33.
- 2) F. Helfferich: Ion Exchange, Dover 1995, kapitoly 1, 2 a 4.
- 3) J. Vacík: Přehled středoškolské chemie, 3. vydání, SPN 1995, kapitola Rovnovážné stavy.
- 4) E-zdroje: http://dardel.info/IX/IX_Intro.html, <http://dardel.info/IX/reactions.html>

**Vzorečkovník**

Definice p(čehokoliv):	$p(\text{čehokoliv}) = -\log(\text{čehokoliv})$
Aktivita:	$a_i = \gamma_i \cdot c_i$
Relativní koncentrace:	$c_i = \frac{c_{\text{mol},i}}{c_{\text{ref}}} = [i]$
Iontová síla:	$I = \frac{1}{2} \cdot \sum_i c_{\text{mol},i} z_i^2$
Rovnovážná konstanta:	$K = \prod_i a_i^{\nu_i}$
Debye-Hückelova rovnice:	$-\log_{10} \gamma_i = \frac{0,5 \cdot z_i^2 \cdot \sqrt{I}}{1 + 3,3 \cdot \alpha_i \cdot \sqrt{I}}$
Debye-Hückelův limitní zákon pro zředěné roztoky:	$-\log_{10}(\gamma_i) = A z_i^2 \sqrt{I} \quad A = 0,509 \text{ dm}^{3/2} \text{ mol}^{1/2}$
Langmuirova izoterma:	$c_s = c_{s,\text{max}} \cdot \frac{K \cdot c_m}{1 + K \cdot c_m}$
Stavová rovnice ideální ho plynu:	$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$
Krychle:	$A = 6 \cdot a^2 \quad V = a^3$
Válec:	$A = 2\pi \cdot r^2 + 2\pi \cdot r \cdot h \quad V = \pi \cdot r^2 \cdot h$
Koule:	$A = 4\pi \cdot r^2 \quad V = \frac{4}{3} \pi \cdot r^3$
Termodynamická teplota:	$T/\text{K} = T/^\circ\text{C} + 273,15$
Avogadrova konstanta:	$N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Molární plynová konstanta:	$R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

**Úloha 1 Iontový dril****6 bodů**

V této úloze si zopakujete iontové rovnováhy, naučíte se je řešit a ujasníte si, jaký je rozdíl mezi koncentrací a aktivitou. Vše si procvičíte na sloučenině tak důležité, že by bez ní zkrachovalo celé zemědělství i válečný průmysl.

- 1) Napište rovnovážnou iontovou reakci, která se ustálí ve vodě po rozpuštění amoniaku (reakce vody s amoniakem). Vyznačte, která ze sloučenin vystupuje jako kyselina, a která jako zásada. Zároveň označte, která z nich je příslušná konjugovaná kyselina/báze.**
- 2) Jak se jmenuje teorie kyselin a zásad, na základě které jste se rozhodli?**
- 3) Dalším velice důležitým vztahem je autoprotolýza vody, napište tuto rovnovážnou reakci. Jak nazýváme částice, které mohou přijmout i poskytnout H^+/OH^- , a mají tedy obojí charakter kyseliny i zásady.**

V tabulkách uváděné rovnovážné konstanty jsou tzv. termodynamické a v příslušné rovnici by místo koncentrací, měly správně figurovat aktivity jednotlivých částic. Budeme předpokládat, že aktivita látky a_i je lineárně závislá na její koncentraci c_i :

$$a_i = \gamma_i \cdot c_i,$$

Kde γ_i je aktivitní koeficient. Formálně je rovnovážná látková koncentrace c_i bezrozměrné číslo vztažené ke standardní (referenční) koncentraci $c_{ref} = 1 \text{ mol dm}^{-3}$, tedy:

$$c_i = \frac{c_{\text{mol}} / \text{mol dm}^{-3}}{c_{\text{ref}} / \text{mol dm}^{-3}}$$

Pro aktivity čistých látek volíme jako referenční stav tuto látku za teploty a tlaku systému, a proto je aktivita čistých látek rovna jedné (např. čisté rozpouštědlo nebo sůl v pevném skupenství). Avšak, dovolujeme vám upustit od tohoto formalismu a koncentrace nejsou potřeba převádět na bezrozměrné, ale stačí uvažovat standardní koncentrační jednotky $\text{mol dm}^{-3} = \text{M}$.

Příslušný podíl koncentrací umocněný na reakční koeficienty se pak označuje jako koncentrační rovnovážná konstanta K_c a obecně se může lišit od té termodynamické K , která je právě funkcí aktivit těchto látek, nikoliv jejich koncentrací. Důležité však je, jak moc a kdy můžeme uvažovat jejich rovnost, protože zanedbáním aktivit se výpočet značně zjednoduší.

- 4) Pro obě výše zmíněné reakce запиšte vztahy pro termodynamické rovnovážné konstanty jakožto funkce aktivit jednotlivých látek. A napište, čemu je roven podíl termodynamické a koncentrační rovnovážné konstanty: K_1/K_{c1} a K_2/K_{c2} .**

V tabulkách bychom však našli pouze rovnovážnou konstantu K_a pro disociaci amonného kationtu.

- 5) Rovnicí popište, jak souvisí rovnovážná konstanta reakce z 1. otázky K_1 s konstantou K_a a iontovým součinem vody K_w ?**

Kromě rovnovážných rovnic jsou zapotřebí ještě 2 důležité bilance. A to bilance celkové koncentrace amoniaku (tj. NH_3 a NH_4^+) a celkového náboje v roztoku.

- 6) Obě bilance запиšte. Bude se v těchto bilancích vyskytovat aktivita?**



Nyní budeme nejprve předpokládat, že máme ideální roztok (tj. aktivitní koeficienty γ_i jsou rovny jedné).

7) Vypočítejte koncentraci OH^- iontů, pokud máme 0,001M roztok amoniaku a $\text{p}K_a(\text{NH}_4^+) = 9,245$. Pro přesné řešení je nezbytné vyřešit soustavu 2 rovnovážných rovnic a 2 bilancí, která povede na kubickou rovnici. Některé členy však lze zanedbat. Použijte následující zjednodušení:

- $[\text{OH}^-] \gg [\text{H}_3\text{O}^+] \approx 0$; $[\text{OH}^-] \approx [\text{NH}_4^+]$; $[\text{NH}_3] \approx c(\text{NH}_3)$;
- $[\text{OH}^-] \gg [\text{H}_3\text{O}^+] \approx 0$; $[\text{OH}^-] \approx [\text{NH}_4^+]$ (řešení vede na kvadratickou rovnici)
- bez zjednodušení (řešení vede na kubickou rovnici, můžete použít např. WolframAlpha)

8) Přesnost jednotlivých aproximací porovnejte jako relativní odchylku od koncentrace spočítanou v c). Pokud c) nespočítáte, použijte výsledek z b).

Přítomnost většího množství iontů v roztoku může způsobovat, že se ionty navzájem ovlivňují, a tak hodnota aktivitního koeficientu závisí na iontové síle roztoku, která vyjadřuje kolik iontů a jak moc nabitých se v roztoku nachází:

$$I = \frac{1}{2} \cdot \sum_i c_i \cdot z_i^2$$

kde c_i je koncentrace příslušného iontu a z_i jeho celkový elementární náboj. Vlastní aktivitní koeficient je pak definován pomocí Debyeovy-Hückelovy rovnice:

$$-\log_{10} \gamma_i = \frac{0,5 \cdot z_i^2 \cdot \sqrt{I}}{1 + (3,3/\text{nm}) \cdot \alpha_i \cdot \sqrt{I}}$$

kde α_i je efektivní průměr hydratovaného iontu v nm.

Dále uvažujte, že: $\alpha(\text{Na}^+) = 0,45$ nm, $\alpha(\text{Cl}^-) = 0,3$ nm, $\alpha(\text{H}_3\text{O}^+) = 0,9$ nm, $\alpha(\text{NH}_4^+) = 0,25$ nm, $\alpha(\text{OH}^-) = 0,35$ nm.

9) Vypočítejte, jakou iontovou sílu bude mít 0,1M roztok NaCl.

10) Spočítejte nyní koncentrací OH^- iontů v roztoku 0,001M amoniaku, který je navíc 0,1M roztokem NaCl. Pro odhad iontové síly roztoku uvažujte pouze příspěvky z NaCl. Získanou koncentraci porovnejte s výsledkem z otázky 7b). Srovnání vyjádřete jako relativní odchylky koncentrace iontů OH^- vztahované k 7b).

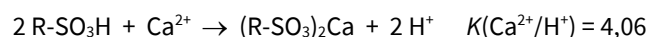
**Úloha 2 Iontoměniče****2 body**

Iontoměniče nachází široké uplatnění při separaci iontů, změkčování vody, katalýze atd. Obvykle se jedná o hlinito-křemičitany či organické polymery, jejichž struktura je chemicky modifikována přidáním kyselých nebo bazických funkčních skupin.

1) Přiřadte k jednotlivým funkčním modifikacím iontoměniče, zda se jedná o slabě kyselý / silně kyselý / slabě zásaditý / silně zásaditý / chelatotvorný iontoměnič.

- | | |
|---|---|
| a) R-SO ₃ H | e) R-AsO ₃ H ₂ |
| b) R ₂ NH ₂ ⁺ | f) R-CH ₂ -N(CH ₂ -COOH) ₂ |
| c) R-N ⁺ (CH ₃) ₃ | g) S ⁺ R ₃ |
| d) R-COOH | |

Jednotlivé částice mají k iontoměniči různou afinitu, která se kvantifikuje pomocí rovnovážné konstanty reakce mezi ionty v roztoku a v ionexu. Pro zjednodušení vynecháme interakci s vodou a budeme psát namísto H₃O⁺ jen H⁺. Například pro ionex se sulfonovou skupinou



V reakci vždy vystupují dva různé ionty, proto se rovnovážná konstanta této reakce někdy označuje jako selektivita či relativní afinita.

2) Napište vztah pro rovnovážnou konstantu $K(\text{Ca}^{2+}/\text{H}^+)$. Aktivitu složky vyjádřete jako $a_i = \gamma_i \cdot c_i$. U nábojově neutrálních molekul můžete uvažovat aktivitní koeficient roven jedné.

Obvykle se tabelují rovnovážné hodnoty pouze pro výměnu H⁺/OH⁻ za daný ion, protože z nich pak lze libovolnou další konstantu dopočítat.

3) Ze znalosti rovnovážných konstant $K(\text{Ca}^{2+}/\text{H}^+) = 4,06$ a $K(\text{Na}^+/\text{H}^+) = 1,56$ dopočítejte hodnotu $K(\text{Ca}^{2+}/\text{Na}^+)$.