

VÝUKA CHEMIE

SolEq™ (SOLUTION EQUILIBRIA) – SOFTWARE BALÍK PRO VÝUKU ZÁKLADŮ CHEMICKÝCH ROVNOVÁH A JEJICH APLIKACÍ*

PŘEMYSL LUBAL a JOSEF HAVEL

Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno
lupal@chemi.muni.cz, havel@chemi.muni.cz

Došlo 2.4.04, přepracováno 17.8.04, přijato 15.9.04.

Klíčová slova: species, speciální modelování, rovnovážné konstanty, databáze, výuka, SOLEQ tutoriál

Věnováno prof. RNDr. Lumíru Sommerovi, DrSc, k jeho 75. narozeninám.

Obsah

1. Úvod
2. Přehled
3. Závěr

1. Úvod

Výuka teoretických základů analytické chemie v základním kurzu analytické chemie probíhá podle všeobecně uznávané učebnice¹ a jiných dostupných materiálů^{2–7}, kdy jádrem výuky je výklad základních principů chemických rovnováh. Podrobná znalost homogenních (acidobazické, komplexotvorné, redoxní) a heterogenních (srážecí) rovnováh je nutná pro pochopení obtížnějších partií klasické chemické analýzy (gravimetrie, volumetrie). Většina dostupných učebnic a skript analytické chemie v českém jazyce bohužel neodráží moderní trendy ve výuce analytické chemie, které jsou patrné z nejnovějších vydání učebnic^{8–11}. Tyto učebnice jsou doplněny materiály (obrázky, schémata, tabulky, příklady s výsledky, simulace závislostí např. titračních křivek v EXCELUTM, aj.) přístupnými jak pro učitele, tak hlavně pro studenty. Tento trend je obecný ve výuce jiných odvětví chemie, např. fyzikální chemie¹² nebo biochemie¹³. Jiný přístup je vydávání 15-svazkové anglicky psané Encyklopedie analytické chemie¹⁴ jak v tištěné, tak v elektronické podobě

šířené na CD nebo pomocí internetu. Encyklopedie je moderní verzi 10-dílné anglicky psané Encyklopedie analytické vědy¹⁵ nebo naší dvoudílné Analytické příručky¹⁶, kdy každou kapitolu pojednávající o určitém tématu analytické chemie lze použít i pro výuku. Vydávání učebnic v elektronické podobě umožňuje využití hypertextových odkazů běžných u elektronických dokumentů přístupných na webu. Existují příklady přístupných zdrojů na webu pro výuku analytické chemie^{17–19}. Tvorba elektronických textů přináší možnost tvorby dynamických dokumentů s jejich rychlou aktualizací nezávislou na době jejich vydávání.

Znalost principů chemických rovnováh je nutná také pro výklad pojmů species, speciace prvků, speciální analýza^{20–23}. Chemická species podle Mezinárodní unie pro čistou a užitou chemii (IUPAC)^{21,23} je specifická forma prvku definována svým izotopickým složením (např. ²³⁹Pu vs. ²⁴⁰Pu), elektronovým nebo oxidačním stavem (např. Pu³⁺ vs. Pu⁴⁺) resp. molekulární strukturou či strukturou komplexu. Speciální analýza je analytická činnost identifikace anebo měření množství jedné nebo více chemických species ve vzorku^{21,23}, kdežto speciace (prvků) je stanovení distribuce prvku ve formě chemické species v daném systému^{21,23}. V současnosti je znalost koncentrací jednotlivých forem chemických prvků a látek přítomných v chemickém systému za daných experimentálních podmínek vyžadována praxí, např. pro studie biogeochemických cyklů chemických sloučenin nebo toxicity a ekotoxicity vybraných prvků v životním prostředí (těžké kovy, aktinoidy, aj.), výzkum vlivu technologických výrob na životní prostředí nebo klinickou analýzu. V biochemii či farmakologii je např. nutné znát, jakým způsobem nasazení léčiv nebo použití diagnostických látek a radiofarmak, z nichž některé mají komplexační vlastnosti, ovlivní koncentrace majoritních i minoritních látek v těle^{24–28}. V materiálové chemii nebo nanochemii můžeme optimalizovat přípravu nových látek „šitých na míru“ volbou vhodných reakčních podmínek (poměr komponent, teplota, tlak, aj.), které určují zastoupení jednotlivých species v roztoku^{29–33}.

Speciální analýza může být realizována dvěma přístupy^{20–23}:

1. Spojená aplikace pokročilých separačních technik s následným využitím některé ze spektrálních metod, které umožňují jednoznačnou identifikaci chemické species – tzv. „hyphenated“ (kombinované) techniky. Patří mezi ně většinou chromatografické nebo elektromigrační techniky se spektroskopickou detekcí (např. HPLC/GC/MS, CE-MS, GC-FTIR, LC-NMR, aj.^{11,22,23}). Spojení těchto pokročilých technik sebou přináší znásobené vyšší finanční nároky na instrumen-

* Demonstrační verze programu je přístupná na internetové stránce <http://www.acadsoft.co.uk>. Zde je uveden i aktuální ceník s možností výrazných slev pro multilicenci

taci. Levnější variantou může být aplikace jednoduché separační techniky, která se použije pro oddělení nízkomolekulárního analytu od matrice pomocí ionexové (např. NAFIONové) nebo dialyzační membrány či ultrafiltrační aparatury, následované analytickou technikou (AAS, AES např. ICP nebo ICP-MS, polarografie, potenciometrie za použití ISE, aj.) pro stanovení koncentrace chemické species iontu kovu. V případě redoxní speciace radionuklidů (např. Pu se může vyskytovat za jistých experimentálních podmínek současně ve čtyřech oxidačních stavech – Pu(III), Pu(IV), Pu(V), Pu(VI)^{34,35}) může být separačním krokem kapalinová extrakce nebo koprecipitace^{22,36}. Problémem může být finanční nebo časová náročnost chemické speciální analýzy, dále mez detekce použité analytické metodiky, která se zvyšuje v přítomnosti interferentů v daném systému např. pro biotekutiny. Často v důsledku aplikace separační techniky a následné analýzy použité pro stanovení určité chemické species dochází k posunu rovnováhy a změně zastoupení jednotlivých species ve vzorku zejména v případě tzv. labilních komplexů. Tyto techniky proto mají uplatnění většinou v analýze inertních komplexů např. (bio) makromolekulárních sloučenin a jejich komplexů nebo toxických organometalických sloučenin^{22,23}.

- Analýza systému pomocí analytických technik umožňující stanovení celkové koncentrace analytu, resp. celkové koncentrace inertních a labilních komplexů. Stanovení analytické koncentrace všech přítomných látek v chemickém systému slouží jako vstupní data pro výpočet koncentrací jednotlivých forem analytu (chemická species) příslušným programem při znalosti jejich stechiometrie a rovnovážných konstant, které jsou korigovány na experimentální podmínky (teplota, iontová síla, aj.)^{36,37}.

Pro speciální modelování je základním předpokladem, že daný systém je v chemické rovnováze nebo je uzavřený (jeho složení se nemění s časem v důsledku chemické reakce nebo výměny s okolím). Jestliže tato podmínka není splněna, pak k tomu ještě přistupuje nutnost znalosti rychlostních konstant chemických reakcí (event. jejich závislost na teplotě a tlaku). Pokud není systém uzavřený, pak je nutné znát hodnoty toků z/do systému resp. rychlost výměny látek s okolím^{20,37}. Výsledky speciálního modelování v systému jsou citlivé na hodnoty vstupních parametrů (znalost správného chemického modelu, hodnot rovnovážných konstant a vlivu vnějších experimentálních podmínek na jejich hodnoty, aj.)^{37–47}. Chemický model obsahující všechny species správné stechiometrie a rovnovážné konstanty popisující jejich vznik jsou nejvíce citlivými parametry pro správné výsledky získané speciálním modelováním^{37–47}. Proto se některé organizace zabývají výběrem a kritickým zhodnocením dat dostupných v literatuře, které jsou následně vkládány do různých databází. Příkladem databází rovnovážných konstant jsou IUPAC databáze^{48–51} nebo kritická databáze amerického Národního ústavu pro standardy a technologii (NIST)^{52,53}. Jiným případem jsou termodynamické databáze Agentury

pro jadernou energii (TDB NEA) organizace OECD využitelné pro modelování chemických procesů v životním prostředí, kterých se zúčastňují radionuklidy např. uran⁵⁴, americium⁵⁵, technecium⁵⁶, neptunium⁵⁷, plutonium⁵⁷, aj. Aktuálně se řeší např. IUPAC projekt „Chemical Speciation of Environmentally Significant Heavy Metals and Inorganic Ligands“⁵⁸. Všechny výše uvedené databáze jsou v současnosti dostupné i v elektronické formě.

Aby bylo možné provádět kvalifikovaně speciální modelování v praxi, je nutné zavést výuku jeho základů do programů studia chemie na našich vysokých školách. Jednou z možností je nasazení programového balíku „SolEq™ (Solution Equilibria)“ do výuky. SolEq byl vytvořen týmem vědců z Komise pro rovnovážná data Analytické sekce Mezinárodní unie pro užitou a čistou chemii (IUPAC, cit.⁵⁹) a je zatím jediný svého druhu ve světě. V tomto článku se budeme věnovat popisu tohoto softwarového produktu.

2. Přehled

SolEq se dodává na jednom CD se snadnou možností instalace. Běží na počítačích vybavených operačními systémy Windows 95/98/NT/XP. Skládá se ze dvou hlavních částí: speciální modelování a podpůrné moduly, které jsou zaměřeny na výuku základů homogenních i heterogenních rovnováh (acidobazické, komplexotvorné, redoxní, srážecí) v roztocích. 30 tutoriálů a 6 interaktivních modulů je rozděleno podle obtížnosti probírané látky do 3 úrovní. Tutoriály mají jednotný strukturovaný formát hypertextové elektronické učebnice („softbook tutorials“, obr. 1) se zabudovanými cvičeními (obr. 2). SolEq umožňuje procvičovat dané partie probírané látky tak, že se student přemísťuje mezi textem, cvičeními, doprovodným software „Species“ (pro výpočty distribučních diagramů) a „ML-minidatabáze“ (pro výběr rovnovážných konstant nutných pro výpočet distribučních diagramů, viz obr. 1). Všechna cvičení jsou propojena hypertextově se zpracovanými řešeními a odpověďmi na otázky.

Tutoriál je koncipován jako výukový text s problémovými otázkami (okruh jednotlivých modulů je uveden v tab. I). Pro řešení jednotlivých úkolů jsou propojeny speciální výpočty distribučních diagramů (program „Species“) s databází rovnovážných konstant (protonizační konstanty, konstanty stability, součiny rozpustnosti, aj.), která je minimální verzí známé IUPAC databáze^{48–51}. Tato databáze obsahuje výběr 18 000 rovnovážných konstant pro reakci mezi iontem kovu (protonem) a ligandem (3150 ligandů, 2900 protonačních konstant, 1900 konstant stability pro Cu²⁺ a 1100 pro Zn²⁺) nutných pro speciální výpočty. Dále existuje možnost korekce rovnovážných konstant přímo v databázi na jinou hodnotu iontové síly a teploty³⁷. Program „Species“ umožňuje generovat distribuční diagramy pro homogenní i heterogenní systémy (pevná fáze, sraženina-roztok), bohužel není možné provádět výpočty distribučních diagramů za účasti elektronů (redoxní systémy) nebo plynů (plyn-roztok). V tomto případě lze doporučit volně šířitelný program MEDUSA⁶⁰.

Tabulka I
SolEq moduly

Výukové moduly (tutoriály)

Úvod

1. Úvod do tématu roztokových rovnováh ($\log K$, ΔG , ΔH , ΔS)

Základy homogenních rovnováh

Úroveň 1

2. Kyseliny a báze (protonace, disociace kyselin, hydrolyza bázi)

3. Pufrý (vlastnosti, příprava, pufrční kapacita)

4. Úvod do komplexotvorných reakcí (základy)

5. Komplexotvorné reakce (mono- a polydentální ligandy)

6. Konstanty stability (postupné, K_n , celkové β_n); použití rovnovážných konstant $\beta_{p,q,r}$

Úroveň 2

7. Vícesytné (polyprotické) kyseliny

8. Redoxní rovnováhy (vyčíslování rovnic, E , pE , Nernstova rovnice)

9. Potenciometrické titrace (redoxní titrace, např. Ce^{4+}/Fe^{3+})

10. Termodynamika (ΔG , ΔH , ΔS , vliv teploty a iontové síly)

11. Speciace (návod pro provedení a interpretaci výpočtů)

12. Cheláty (chelátový efekt, dentátnost, rozměr chelátového kruhu, aplikace)

13. Makrocikly (makrocyclický efekt, donorové atomy, kryptáty a kalixareny)

Úroveň 3

14. Elektronová aktivita (koncepty, pE - $\log(c)$, výpočty)

15. Selektivita (termodynamická, HSAB klasifikace)

Aplikace homogenních rovnováh

Úroveň 2

16. Speciace kovů v přírodních vodách (modelování Cu^{2+} , Zn^{2+} , Pb^{2+})

17. Speciace kovů v mořské vodě (iterativní výpočetní metody)

18. Kyselý déšť (kvantitativní analýza rovnováh v něm probíhajících)

19. Stopové prvky v krevní plazmě (nízkomolekulární ligandy a proteiny)

20. Chelatační terapie (použití chelátů k odstranění toxických kovů)

Úroveň 3

21. Rovnováhy CO_2 v mořské vodě (rozpuštěnost CO_2 ve vodě, efekt pH)

Základy heterogenních rovnováh

Úroveň 2

22. Rozpuštěnost a součin rozpustnosti (molekulové a iontové sloučeniny)

23. Komplexotvorné rovnováhy a rozpustnost (efekt komplexace a pH na rozpustnost)

24. Srážecí titrace (odměrná analýza)

Aplikace heterogenních rovnováh

Úroveň 2

25. Rozpuštěnost minerálů v komplexotvorných prostředích (simulace půdního zvětrávání)

26. Zpracování půdy kontaminované kovy (cheláty, elektrokinetické jevy)

27. Rovnováhy v jezerech (příklad jezero Baringo v Keni - speciace kovů na úrovni makrokoncentrací a mikrokoncentrací)

Titrační simulace

21. Simulace acidobazických titračních křivek se simultánní speciací

22. Simulace komplexotvorných titračních křivek se simultánní speciací

Softwarové balíky

ML-Database – databáze konstant stabilit pro 18 000 rovnováh ion kovů-ligand, vybraná podmnožina konstant z IUPAC Databáze konstant stabilit

Buffers – pro vysvětlení vlastností a kapacity pufrů, pro výpočty s pufrý

Species – pro speciální výpočty v multikomponentních multifázových systémech

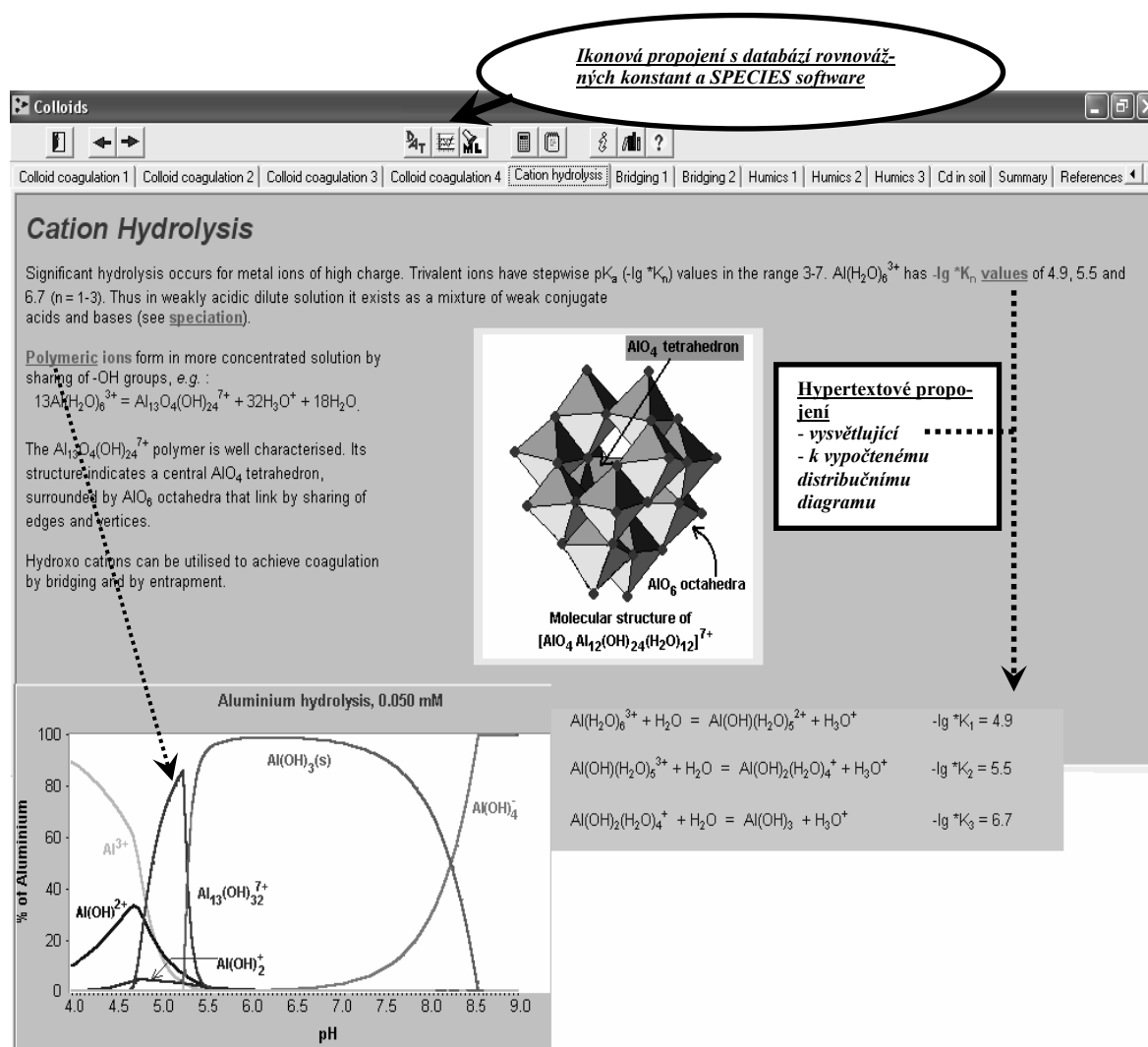
Titration City – pro simulaci křivek acidobazických, chelatometrických, redoxních a srážecích titrací

Acid/Base Titrations – k vytvoření a zobrazení titračních a speciálních křivek v reálném čase

Metal/Ligand Titrations – k vytvoření a zobrazení titračních a speciálních křivek v reálném čase

KvI, SIT – k odhadu vlivu iontové síly na hodnotu rovnovážné konstanty pomocí Daviesovy rovnice (pro oblast nízkých iontových sil) a Teorie specifických interakcí iontů (pro oblast vysokých iontových sil)

KvT – k odhadu vlivu teploty na hodnotu rovnovážné konstanty pomocí van't Hoffovy rovnice



Obr. 1. Typická ukázka stránky softwarového tutoriálu; téma „Hydrolyza kationtů“

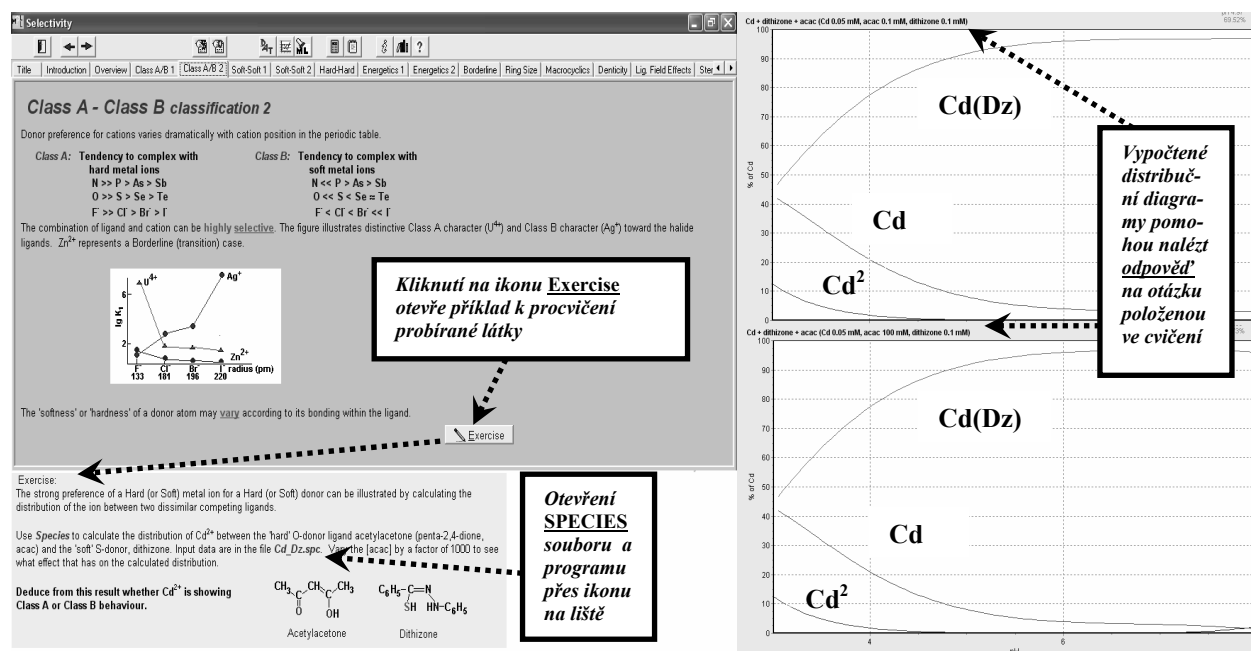
Ten je však na rozdíl od Species omezen počtem komponent a rovnováh, které může souběžně řešit. Pomocí problémových otázek a cvičení instalovaných přímo v programu si student může ověřit své nabyté znalosti. Zde jsou uvedeny příklady vzorových otázek.

- Do jaké kategorie patří ion Cd^{2+} podle teorie HSAB? Student zodpoví dotaz výpočty distribučních diagramů pro Cd^{2+} jako funkce pH v přítomnosti dvou významných analytických činidel, dithizonu (difenylthiokarbazonu) a acetylacetonu (2,4-pentadionu) v milimolárních koncentracích (viz obr. 2).
- Za jakých podmínek můžeme pozorovat záporný chelátový efekt? Student zodpoví dotaz výpočtem distribučního diagramu pro ionty Zn^{2+} v systému Zn^{2+} -ethylen-diamin-triethylentetramin.
- Jaká je minimální koncentrace kyanidových iontů použitých pro titraci Ca^{2+} iontů ($c = 1$ mM) stanove-

ných chelatometricky ($c_{EDTA} = 1$ mM) při současném maskování Zn^{2+} iontů ($c = 1$ mM)?

- Lze použít gadolinový komplex makrocyclického derivatizovaného cyklenového ligandu s pendantskými octanovými funkčními skupinami (DOTA) v terapeutickém množství jako kontrastní činidlo pro zobrazování pomocí metody magnetické resonance bez obav, že by DOTA vážala ionty Ca^{2+} v krevní plazmě?
- Budou ionty Cu^{2+} (1 mM) zcela komplexovány v 1 mM roztoku cyklamu, jestliže triethylentetramin se bude v roztoku nacházet v 1000-násobném přebytku?

Pro analytickou praxi má velký význam simulace titračních křivek (dokonce i v reálném čase – viz obr. 3) spojených se současným kreslením distribučních diagramů. Toto interaktivní propojení usnadní lepší pochopení probírané látky. Součástí systému je i program „Buffer“ s příslušným modulem, který umožňuje výpočty



Obr. 2. Ukázka možnosti procvičované látky pomocí cvičení a problémových úkolů vestavěných v tutoriálu

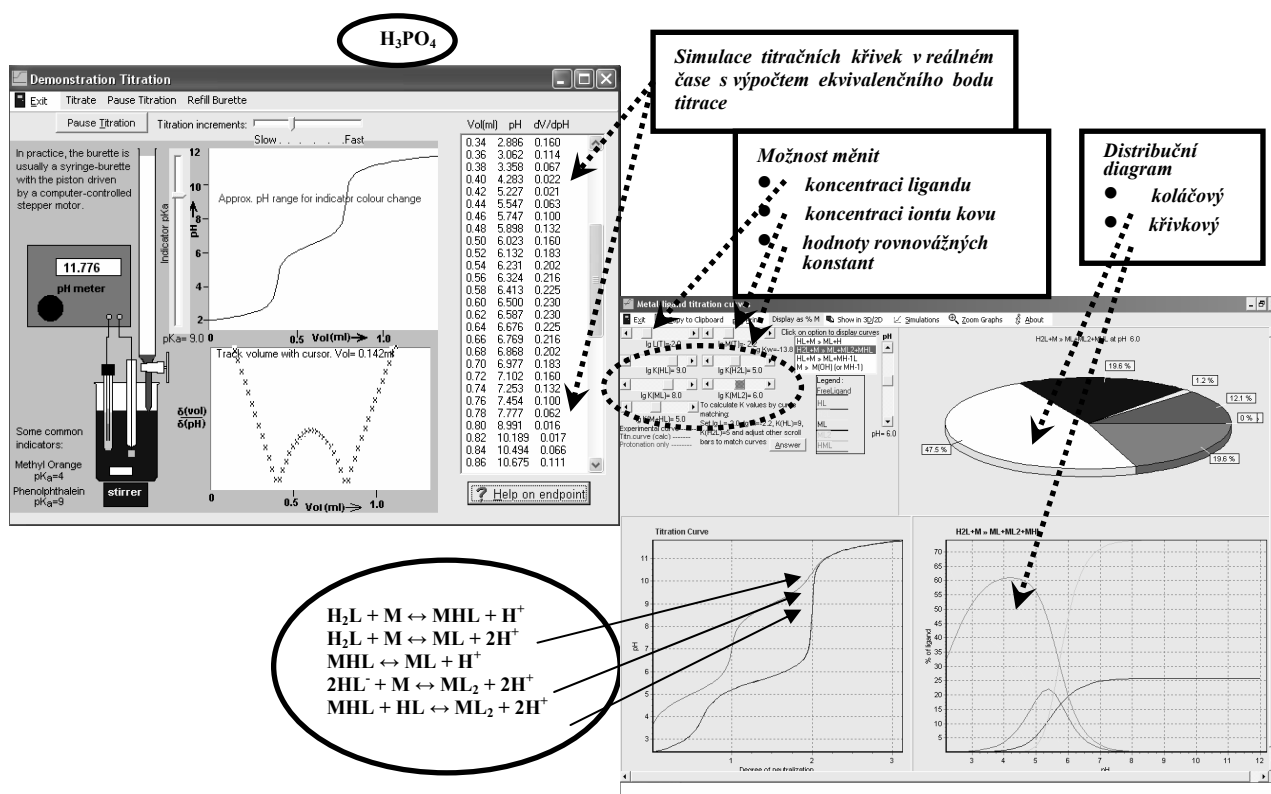
s procvičováním pro acidobazické pufrы.

Aplikační moduly (většinou úrovně obtížnosti 2 a 3) jsou zaměřeny na využití znalostí nabytých v modulech základní úrovně. Moduly pro aplikace homogenních rovnováh „Speciace kovů v přírodních a mořských vodách“, „Kyselý déšť“, „Speciace oxidu uhličitého v mořské vodě“ (chemie životního prostředí), „Stopové kovy v krevní plazmě“ a „Chelatační terapie“ (bioanorganická chemie) jsou vhodnými příklady z praxe pro procvičování látky na konkrétních případech. Podobně jsou v SolEq implementovány moduly pro aplikace heterogenních rovnováh „Rozpuštění minerálů v roztocích komplexotvorných činidel“, „Zpracování půd kontaminovaných těžkými kovy“, „Koloidy“ a „Speciace těžkých kovů v jezezech“ (chemie životního prostředí, geochemie). Tyto moduly na interdisciplinární úrovni zajišťují aktuálnost uvedených příkladů.

Tento výukový software má samozřejmě i několik nedostatků, o kterých je nutné se zmínit. SolEq nabízí mnoho tutoriálů různé obtížnosti, které nelze využít pouze v jednom předmětu. Tutoriály o nižší úrovni je možné využít pro přednášky v bakalářském studiu, kdežto tutoriály o vyšší úrovni v kurzech magisterského a doktorandského studia. Program je dostupný pouze v anglickém jazyce a je výhodný pro nenásilné seznamování s anglickou odbornou terminologií, pokud jsou studenti adekvátně seznámeni s terminologií českou. Jelikož software využívá několik simulačních programů (např. pro titrační křivky nebo distribuční diagramy), je možné pozorovat pro výpočty pomocí software „Species“, že někdy při zadání některých obvyklých parametrů (nulová koncentrace – nutno nahradit koncentrací 10^{-8} mol·dm⁻³), dojde k přete-

čení/podtečení výpočtu v důsledku dělení nulou. Také křivky v některých distribučních diagramech nejsou vykresleny s dostatečnou přesností (např. v případě acidobazické rovnováhy jednosytné kyseliny se křivky zastoupení obou forem mají protínat při pH = pK_a a jejich zastoupení má odpovídat 50 %), což může být způsobeno problémy s grafikou. Některé doplňkové reference k probíraným tématům jsou staršího data. Symboly použité ve výkladu nejsou vždy dostatečně definovány nebo jejich definice dostatečně přístupné v textu. Navíc v programu neexistuje možnost posouvat jednotlivá okna tak, aby bylo možné současně pracovat s několika okny současně. Závislost log (K) jako funkce logaritmu iontové síly (použití Daviesova vztahu pro nízké hodnoty iontových sil roztoků) není obvyklá, ale autoři pracují na odstranění tohoto nedostatku aplikací Teorie specifických iontových interakcí (SIT, cit. ^{61,62}) pro extrapolaci rovnovážných konstant na roztoky o vyšší hodnotách iontových sil.

To jsou ale pouze okrajové připomínky, které nesnižují kvalitu uvedeného produktu a lze doufat, že v dalších verzích budou odstraněny. Renomovaní autoři vytvořili jeden z nejlepších programových balíčků pro výuku rovnováh dostupných v současnosti na trhu. Software nabízí kompromis mezi praktickým pohledem a teoretickou stránkou vzdělávání v chemii. Výběr probíraných témat je zajímavý a obsažný, ale ne zase příliš detailní, takže uspokojí všechny zájemce o rychlou informaci. Systém je vhodný jak pro interaktivní výuku přímo v přednáškách či seminářích, tak pro opakování některých částí ke zkoušce či v dalším průběhu studia nebo v praxi v případě celoživotního vzdělávání.



Obr. 3. Ukázka možností simulace titračních křivek a distribučních diagramů v reálném čase

3. Závěr

SolEq je programový balík vytvořený pro výuku rovnováh v bakalářském programu (základní kurz analytické chemie). Může být využit také v magisterském a doktorském programu (např. pokročilé kurzy „Modelování chemických systémů v roztocích“, „Metody studia rovnováh a kinetiky reakcí“ nabízené na pracovišti autorů). Systém pokrývá pomocí jednotlivých modulů principy a aplikace acidobazických, redoxních, srážecích a komplexotvorných rovnováh v homogenních i heterogenních systémech. SolEq dále nabízí výpočetní software pro aplikaci rovnovážných principů na reálné systémy (speciální programy, databáze, programy pro korekci na iontovou sílu a teplotu, aj.). 30 výukových textů je vzájemně propojeno s 6 výpočetními subsystémy pomocí lištových funkcí a hypertextových propojení, které usnadňují práci a zvyšují přehlednost. Prezentace obrázků a grafů je informativní a dobře srozumitelná. Výukové materiály („tutorials“) mají odpovídající délku a náročnost a některé z nich lze exportovat ve formě souboru formátu Word. SolEq lze použít pro podporu výuky v rámci přednášek a laboratorních cvičení nejen analytické chemie, ale i speciálních přednášek z koordinační chemie, chemie životního prostředí nebo speciálního modelování.

Práce byla podporována grantem „Modelování chemických systémů v roztocích“ Fondu rozvoje vysokých škol 522/2003/F6a.

LITERATURA

- Šucha L., Kotrlý S.: *Teoretické základy analytické chemie*. SNTL, Praha 1971.
- Šucha L., Kotrlý S., v knize: *Analytická příručka I*. Zýka J. (ed.). SNTL, Praha 1988.
- Holzbecher Z., Jeník J., Šucha L., Vlácil F., Vrbský J.: *Analytická chemie*. SNTL, Praha 1968.
- Holzbecher Z., Churáček J.: *Analytická chemie*. SNTL, Praha 1987.
- Sommer L.: *Základy analytické chemie I*. VUTium, Brno 1998.
- Volka K., Fogl J., Popl M., Suchánek M.: *Analytická chemie*. VŠCHT, Praha 1995.
- Renger F., Kalous J.: *Analytická chemie I*. Univerzita Pardubice, Pardubice 2004 (Beta elektronická verze <http://www.upce.cz/~kalch/>, staženo 1.4.2004).
- Harris D. C.: *Quantitative Analytical Chemistry*. W. H. Freeman, New York 2003 (<http://www>).

- whfreeman.com/qca, staženo 1.4.2004).
9. Christian G. D.: *Analytical Chemistry*. J. Wiley, New York 2004 (<http://he-cda.wiley.com/WileyCDA/HigherEdTitle/productCd-0471214728,courseCd-CH0900.html>, staženo 1.4.2004 – seznam uvedených internetových odkazů).
 10. Skoog D. A., West D. M., Holler F. J., Crouch S. R.: *Fundamentals of Analytical Chemistry with Infotrac*. Brooks Cole, Stanford 2003.
 11. Kelner R., Mermet J.-M., Otto M., Widmer H. M. (Eds.): *Analytical Chemistry*. J. Wiley-VCH, Weinheim 1998.
 12. Atkins P., de Paula J.: *Physical Chemistry*. Oxford University Press, New York 2001.
 13. Tymoczko J. L., Berg J. M., Stryer L.: *Biochemistry*. W. H. Freeman, New York 2002 (<http://bcs.whfreeman.com/biochem5>, staženo 1.4.2004).
 14. Meyers R. A. (Ed.): *Encyclopedia of Analytical Chemistry*. J. Wiley, New York 2001 (<http://www.wiley.co.uk/eac/>, staženo 1.4.2004).
 15. Worsfold P. J., Haswell S., Werner H., Macrae R., Wilson I., Townshend A. (Eds.): *Encyclopedia of Analytical Science*. Academic Press, New York 1995 (<http://www.elsevier.com/reference/analytical>, staženo 1.4.2004).
 16. Zýka, J. (Ed.): *Analytická příručka*. SNTL, Praha 1988.
 17. <http://www.chem.vt.edu/chem-ed/>; staženo 1.4.2004.
 18. <http://www.spectroscopynow.com/Spy/basehtml/SpyH>; staženo 1.4.2004.
 19. <http://jchemed.chem.wisc.edu/index.html>; staženo 1.4.2004.
 20. Buffle J.: *Complexation Reactions in Aquatic Systems. An Analytical Approach*. Ellis Horwood, Chichester 1990.
 21. Templeton D. M., Ariese F., Cornelis R., Danielsson L.-G., Muntau H., van Leeuwen H. P., Lobinski R.: *Pure Appl. Chem.* 72, 1453 (2000).
 22. Ure A. M., Davidson C. M. (Eds.): *Chemical Speciation in the Environment*. Blackwell Science, Oxford 2002.
 23. Cornelis R. (Ed.): *Handbook of Elemental Speciation: Techniques and methodology*. J. Wiley, New York 2003.
 24. Jackson G. E.: *Polyhedron* 9, 163 (1990).
 25. Jackson G. E., Singh M.: *Polyhedron* 9, 505 (1990).
 26. Tweedle M. F., Hagan J. J., Kumar K., Mantha S., Chang C. A.: *Magn. Res. Imaging* 9, 409 (1991).
 27. Sarka L., Burai L., Brücher E.: *Chem. Eur. J.* 6, 719 (2000).
 28. Kotek J., Lubal P., Hermann P., Císařová I., Lukeš I., Godula T., Svobodová I., Táborský P., Havel J.: *Chem. Eur. J.* 9, 233 (2003).
 29. Domínguez J. M., Botello-Pozos J. C., López-Ortega M. T., Ramírez M. T., Sandoval-Flores G., Rojas-Hernández A.: *Catalysis Today* 43, 69 (1998).
 30. Choy J.-H., Han Y.-S., Kim S.-J.: *J. Mater. Chem.* 7, 1807 (1997).
 31. Choy J.-H., Han Y.-S., Kim S.-J.: *J. Mater. Chem.* 7, 1815 (1997).
 32. Wahlberg S., Grenthe I., Muhammed M.: *NanoStructured Mat.* 9, 105 (1997).
 33. Zhang Z., Wahlberg S., Wang M., Muhammed M.: *NanoStructured Mat.* 12, 163 (1999).
 34. Choppin G. R., Bond A. H., Hromadka P. M.: *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 219, 203 (1997).
 35. Choppin G. R.: *Radiochim Acta* 91, 645 (2003).
 36. Wymer R. G. (Ed.): *Evaluation of Speciation Technology, Workshop Proceedings*. Tokai-mura, Ibaraki, Japan, 26-28.10 1999, OECD NEA Paris 2001.
 37. Grenthe I., Puigdomenech I. (Eds.): *Modelling in Aquatic Chemistry*. OECD NEA, Paris 1997.
 38. Meloun M., Havel J., Högfěldt E.: *Computation of Solution Equilibria. A Guide to Methods in Potentiometry, Extraction and Spectrophotometry*. Ellis Horwood, Chichester 1988.
 39. May P. M., Murray K.: *Talanta* 38, 1409 (1991).
 40. May P. M., Murray K.: *Talanta* 40, 819 (1993).
 41. May P. M., Murray K.: *J. Chem. Eng. Data* 46, 1035 (2001).
 42. Duffield J. R., Marsicano F., Williams D. R.: *Polyhedron* 10, 1105 (1991).
 43. Duffield J. R., Marsicano F., Waters M., Williams D. R.: *Polyhedron* 10, 1113 (1991).
 44. Duffield J. R., Johns J. R., Marsicano F., Williams D. R.: *Polyhedron* 10, 1121 (1991).
 45. Meinrath G.: *Fresenius' J. Anal. Chem.* 368, 574 (2000).
 46. Meinrath G.: *Fresenius' J. Anal. Chem.* 369, 690 (2001).
 47. Bion L.: *Radiochim. Acta* 91, 633 (2003).
 48. Silén L. G., Martell, A. E. (eds.): *IUPAC Stability Constants (Special Publication No. 17)*. Royal Chemical Society, London 1964.
 49. Silén L. G., Martell, A. E. (eds.): *IUPAC Stability Constants (Special Publication No. 25)*. Royal Chemical Society, London 1964.
 50. Högfěldt E. (ed.): *IUPAC Stability Constants (Inorganic Ligands)*. Pergamon/IUPAC, London 1982.
 51. Perrin D. (ed.): *IUPAC Stability Constants (Organic Ligands)*. Pergamon/IUPAC, London 1982.
 52. Martell A. E., Motekaitis R. J.: *Determination and Use of Stability Constants*. VCH, Weinheim 1988.
 53. Martell A. E., Smith R. M., Motekaitis R. J.: *NIST Critically Selected Stability Constants of Metal Complexes (Version 7)*. NIST, Gaithersburg 2003.
 54. Grenthe I. (ed.): *Chemical Thermodynamics of Uranium*. Elsevier, Amsterdam 1992.
 55. Silva R. J. (ed.): *Chemical Thermodynamics of Americium*. Elsevier, Amsterdam 1995.
 56. Rard J. A. (ed.): *Chemical Thermodynamics of Technetium*. Elsevier, Amsterdam 1999.
 57. Lemire R. J. (ed.): *Chemical Thermodynamics of Neptunium and Plutonium*. Elsevier, Amsterdam 2001.

58. <http://www.iupac.org/projects/1999/1999-050-1-500.html>; staženo 1.4.2004.
59. <http://www.iupac.org/divisions/V/index.html>; staženo 1.4.2004
60. http://www.met.kth.se/matchem/Photo_Instruments/medusa.html; staženo 1.4.2004.
61. <http://www.iupac.org/projects/2000/2000-003-1-500.html>; staženo 1.4.2004.
62. http://www.iupac.org/publications/ci/2002/2406/projects_2000-003-1-500.html; staženo 1.4.2004.

P. Lubal and J. Havel (*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Brno*):
SolEq™ Software Package for Teaching of Chemical Equilibria and their Applications

The significance and problems of chemical modelling in chemical analysis are discussed. SolEq™ is a software package made for teaching of chemical equilibria, which covers, in individual modules, principles and applications of acid-base, oxidation-reduction, precipitation and complex-forming equilibria in homogeneous and heterogeneous systems. Main features of the program as well as its potentials and weakpoints are described in detail.