

---

## DISKUSE

---

### Několik poznámek k výuce chemie

Uvítal jsem krátkou informaci Lubala a Havela týkající se výuky základů chemických rovnováh výpočetním programem SolEq (IUPAC) uveřejněnou v prvním čísle Chemických Listů 2005 v oddílu Výuka chemie. V této informaci je sice podán rozsáhlý přehled literatury z oboru analytické chemie zabývající se touto otázkou, avšak podle mého názoru byly poněkud zanedbány obory, kde již po velmi dlouhou dobu, v podstatě od poloviny minulého století, je speciální analýza poměrně běžnou součástí řešení různých výzkumných a provozních problémů a je k dispozici řada výpočetních programů pro řešení chemických rovnováh. Kromě toho v některých oborech jsou přednášky a semináře z aplikace chemických rovnováh již delší dobu součástí výuky na některých vysokých školách. Proto bych chtěl z historického hlediska chybějící údaje doplnit.

Za klasický přístup lze považovat knihu Garrelse a Christa<sup>1</sup> zabývající se aplikací řešení chemických rovnováh v podzemních vodách. V České republice prosazoval tento přístup Pačes<sup>2</sup>. Důvod, proč právě v hydrogeochemii a hydrogeologii má výpočet speciace prvků takový význam, spočívá v tom, že jedině podrobným řešením chemických rovnováh lze získat správnou představu o tom, které minerály se budou za daných podmínek z vody vylučovat nebo naopak rozpouštět, za jakých podmínek může dojít ke kolmataci vrtů apod. Tím byla v podstatě poprvé z praktického hlediska narušena primitivní představa, že v roztocích jsou přítomné převážně jen jednoduché kationty a anionty. Dále se ukázalo, že toxicita některých kovů na vodní organismy závisí především na koncentraci jednoduchých iontů, nikoli na koncentraci komplexních forem. V tomto směru měla zásadní význam učebnice hydrochemie Stumma a Morgana<sup>3</sup>, která vyšla celkem ve třech vydáních. Na tuto knihu pak navazovaly učebnice či monografie obdobného typu vydávané v pozdějších letech.

Pokud se týká výuky hydrochemie v ČR, pak význam a řešení chemických rovnováh je např. zahrnuto v přednáškách a seminářích některých oborů na Přírodovědecké fakultě KU (geochemie, hydrogeologie) a také na VŠCHT (obor technologie vody), kde již v osmdesátých letech minulého století byly studentům přednášeny základy a význam řešení chemických rovnováh ve vodách. Pro

tento účel byla vydána učebnice hydrochemie<sup>4</sup> obsahující samostatnou kapitolu zabývající se tímto tématem.

Také programy pro numerický výpočet chemických rovnováh ve vodách jsou poměrně starého data. Lze se zmínit např. o programu COMICS<sup>5</sup> nebo o programu Morela a Morgana<sup>6</sup>, publikovaných na zlomu šedesátých a sedmdesátých let minulého století. V současné době je k dispozici řada výpočetních programů komerčně dostupných, z nichž některé lze však získat i zdarma. V současné době je k dispozici více jak 10 výpočetních programů pro chemické simulace procesů probíhajících v přírodních a užitkových vodách, které se liší především zadáváním vstupů. Jako příklad uvádím výpočetní programy WATEQ a PHREEQ (U.S. Geological Survey), MINTEQA (Environmental Protection Agency, USA), MINEQL, AQUACHEM aj.

Proto jsem v této oblasti uvítal probuzení IUPAC, sestavení programu SolEq a zejména vytvoření nezbytné databáze rovnovážných konstant, na které závisí správnost vypočtené speciace.

Pavel Pitter  
Pavel.Pitter@vscht.cz

### LITERATURA

1. Garrels R. M., Christ C. L.: *Solutions, Minerals, and Equilibria*. Harper and Row, New York 1965.
2. Pačes T.: *Chemické rovnováhy v přírodním systému voda-hornina-atmosféra*. Ústřední ústav geologický, Praha 1972. Viz také Sborník geologických věd, řada HIG, sv. 10, str. 73 (1972).
3. Stumm W., Morgan J. J.: *Aquatic Chemistry. An Introduction Emphasizing Chemical Equilibria in Natural Waters*. Wiley, New York 1970. Třetí vydání vyšlo v roce 1996.
4. Pitter P.: *Hydrochemie*. SNTL, Praha 1981. Třetí vydání vyšlo ve Vydavatelství VŠCHT v roce 1999.
5. Perrin D. D., Sayce I. G.: *Talanta* 14, 833 (1967).
6. Morel F., Morgan J.: *Environ. Sci. Technol.* 6, 58 (1972).