

PRENOS HMOTY A ENERGIE

ZÁKONY ZACHOVANIA

Koncentrácia v kvapalinách a v pevných látkach

Pojem **koncentrácia, c** , má niekoľko významov. Vo fyzike spravidla znamená **počet častíc v objemovej jednotke látky**. Touto objemovou jednotkou je najčastejšie **cm^3** alebo **m^3** . V prípade kvapalín a pevných látok, koncentrácia súvisí s **hustotou** danej látky a s **Avogadrovým číslom** nasledovne:

M g látky 1 mól obsahuje N_A častíc
 ρ g látky 1 cm^3 obsahuje c častíc

$$\text{Z toho } c = N_A \frac{\rho}{M} = \frac{\rho}{M u} \text{ rozmerová kontrola}$$

V prípade kvapalín a pevných látok možno tento výraz vždy vyčísliť, keďže kvapaliny a pevné látky sú **nestlačiteľné**, a teda ich **hustota, ρ** , je vždy definovaná.

Koncentrácia v plynach

Plyny sú stlačiteľné a zaujmú vždy celý objem, ktorý majú k dispozícii. Platí stavová rovnica ideálneho plynu:

$$\frac{pV}{T} = \textit{konšt}$$

Ich hustotu vieme definovať len pri určitom definovanom tlaku a definovanej teplote. Spravidla je to 0°C a atmosférický tlak 1 atm. Za týchto podmienok, **1 mól ľubovoľného plynu zaberá objem 22.4 litra**. Pre koncentráciu teda dostaneme:

22.4 litra		22.4×10 ³ cm ³		1 mól plynu		N _A častíc
		1 cm ³				c častíc

$$c_{[\text{častíc}/\text{cm}^3]} = \frac{N_A}{22.4 \times 10^3}$$

Príklad: vypočítajte približne hustotu vzduchu

TRIM Setup Window

Read Me **TRIM (Setup Window)** **Type of TRIM Calculation**

TRIM Demo ? **DAMAGE** Ion Distribution and Quick Calculation of Damage ?

Restore Last TRIM Data ? **Basic Plots** Ion Distribution with Recoils projected on Y-Plane ?

ION DATA ?

Symbol	Name of Element	Atomic Number	Mass (amu)	Energy (keV)	Angle of Incidence
PT H	Hydrogen	1	1.008	10	? 0

TARGET DATA ?

Target Layers

Add New Layer ?

Layer Name	Width	Density (g/cm3)	Compound	Corr	Gas
X Layer 1	10000	Ang	0.00121	1	☒

Input Elements to Layer

Add New Element to Layer **Compound Dictionary**

Symbol	Name	Atomic Number	Weight (amu)	Atom Stoich or %	Damage (eV) Disp	Latt	Surf
X PT O	Oxygen	8	15.999	2	20.00	28	3 2
X PT N	Nitrogen	7	14.007	8	80.00	28	3 2

Special Parameters

Name of Calculation: H (10) into Layer 1

Stopping Power Version: SRIM-2008

AutoSave at Ion #: 10000

Total Number of Ions: 99999

Random Number Seed:

Plotting Window Depths: Min 0 Max 10000

Output Disk Files

☐ Ion Ranges

☐ Backscattered Ions

☐ Transmitted Ions/Recoils

☐ Sputtered Atoms

☐ Collision Details

☐ Special "XYZ File" Increment (eV)

Resume saved TRIM calc. ?

Save Input & Run TRIM

Clear All

Calculate Quick Range Table

Main Menu

Problem Solving

Quit

Príklad: vypočítajte približne hustotu vzduchu (15 min)

$$c = N_A \frac{\rho}{M} = \frac{N_A}{22.4 \times 10^3} \quad \rho = \frac{M}{22.4 \times 10^3}$$

$$\rho = \frac{0.2 \times 31.998 + 0.8 \times 28.014}{22.4 \times 10^3} = 0.0012862 \text{ g/cm}^3$$

Clipboard		Font		Alignment		
E3		f _x		=D3/22.4/1000		
	A	B	C	D	E	F
1	15.999	31.998	0.2	6.3996		
2	14.007	28.014	0.8	22.4112		
3			1	28.8108	0.001286196	
4						

Údaje o atómových hmotnostiach získame z Mendelejevovej PTP

Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period																		
1	1 H 1.008																	2 He 4.0026
2	3 Li 6.94	4 Be 9.0122											5 B 10.81	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180
3	11 Na 22.990	12 Mg 24.305											13 Al 26.982	14 Si 28.085	15 P 30.974	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.948
4	19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.63	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.798
5	37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.96	43 Tc [97.91]	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
6	55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	* 71 Lu 174.97	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.21	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po [208.98]	85 At [209.99]	86 Rn [222.02]
7	87 Fr [223.02]	88 Ra [226.03]	** 103 Lr [262.11]	104 Rf [265.12]	105 Db [268.13]	106 Sg [271.13]	107 Bh [270]	108 Hs [277.15]	109 Mt [276.15]	110 Ds [281.16]	111 Rg [280.16]	112 Cn [285.17]	113 Uut [284.18]	114 Fl [289.19]	115 Uup [288.19]	116 Lv [293]	117 Uus [294]	118 Uuo [294]
*Lanthanoids			* 57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm [144.91]	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.05		
**Actinoids			** 89 Ac [227.03]	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np [237.05]	94 Pu [244.06]	95 Am [243.06]	96 Cm [247.07]	97 Bk [247.07]	98 Cf [251.08]	99 Es [252.08]	100 Fm [257.10]	101 Md [258.10]	102 No [259.10]		

Koncentrácia látok vo vode

V **environmentalistike** sa **koncentrácia** najčastejšie používa na vyjadrenie množstva nejakej znečisťujúcej látky – **polutantu** v inej látke, typicky vo vode alebo vo vzduchu.

V **prípade vody** sa koncentrácia obvykle vyjadruje v **hmotnostných jednotkách vzhľadom na jednotkový objem zmesi**, napríklad mg/l, mg/m³, g/m³, µg/l a podobne. Alternatívne môžeme vyjadriť koncentráciu látky v kvapaline ako pomer jej hmotnosti vzhľadom na celkovú hmotnosť zmesi v jednotkách „**parts per milion**“ (**ppm**) alebo „**parts per billion**“ (**ppb**). Keďže hustota vody je 1 g/cm³ = 1 kg/l = 1000 kg/m³, platia jednoduché prevodové vzťahy:

$$1 \text{ mg/l} = 1 \text{ mg/1 kg} = 1 \text{ ppm}$$

$$1 \text{ µg/l} = 1 \text{ µg/1 kg} = 1 \text{ ppb}$$



Zloženie minerálok a minerálnych vôd

Nemusí vždy ísť iba o koncentráciu znečisťujúcich látok. Rovnakým spôsobom udávame napríklad aj koncentráciu minerálnych látok a solí v minerálnych vodách.

<http://www.copijeme.sk/mineralne-vody>



Baldovská ®

Charakteristika

Kyselka bohatá na minerály. Obsahuje vápnik, horčík a hydrogénuhličitaný. Prírodná minerálna voda – sýtená. Prírodná minerálna voda – jemne perlivá s čiastočne odstráneným oxidom uhličitým.

Upravená povolenou oxidačnou technológiou vzduchom obohateným o ozón.

Zloženie (mg/l)

Na ⁺	Ca ²⁺	Mg ²⁺	K ⁺	NH ₄ ⁺	NO ₃ ⁻	SO ₄ ²⁻	Cl ⁻	F ⁻	HCO ₃ ⁻	NO ₂ ⁻	Celkové rozpustené látky
85	362	82,7	18	0,72	1,83	205	69,9	0,85	1 354	<0,01	2 189

www.baldovska.sk

Koncentrácia znečisťujúcich látok vo vzduchu

V prípade vzduchu (alebo všeobecne plynov), koncentrácia polutantov sa vyjadruje pomerom objemových jednotiek. 1 ppm teda znamená jednu objemovú jednotku polutantu na milión objemových jednotiek zmesi. Inou alternatívou je udanie hmotnosti polutantu na jednotkový objem zmesi, napríklad mg/m^3 , $\mu\text{g}/\text{m}^3$. Prepočet získame nasledovne:

$$\begin{array}{l} 22.4 \text{ m}^3 \text{ polutantu} \dots\dots 1 \text{ kmól} \dots\dots\dots M \text{ kg} \\ C \text{ ppm} \dots\dots \frac{10^{-6} C \text{ m}^3}{1 \text{ m}^3} \dots\dots\dots \frac{X \text{ kg}}{1 \text{ m}^3} \end{array}$$

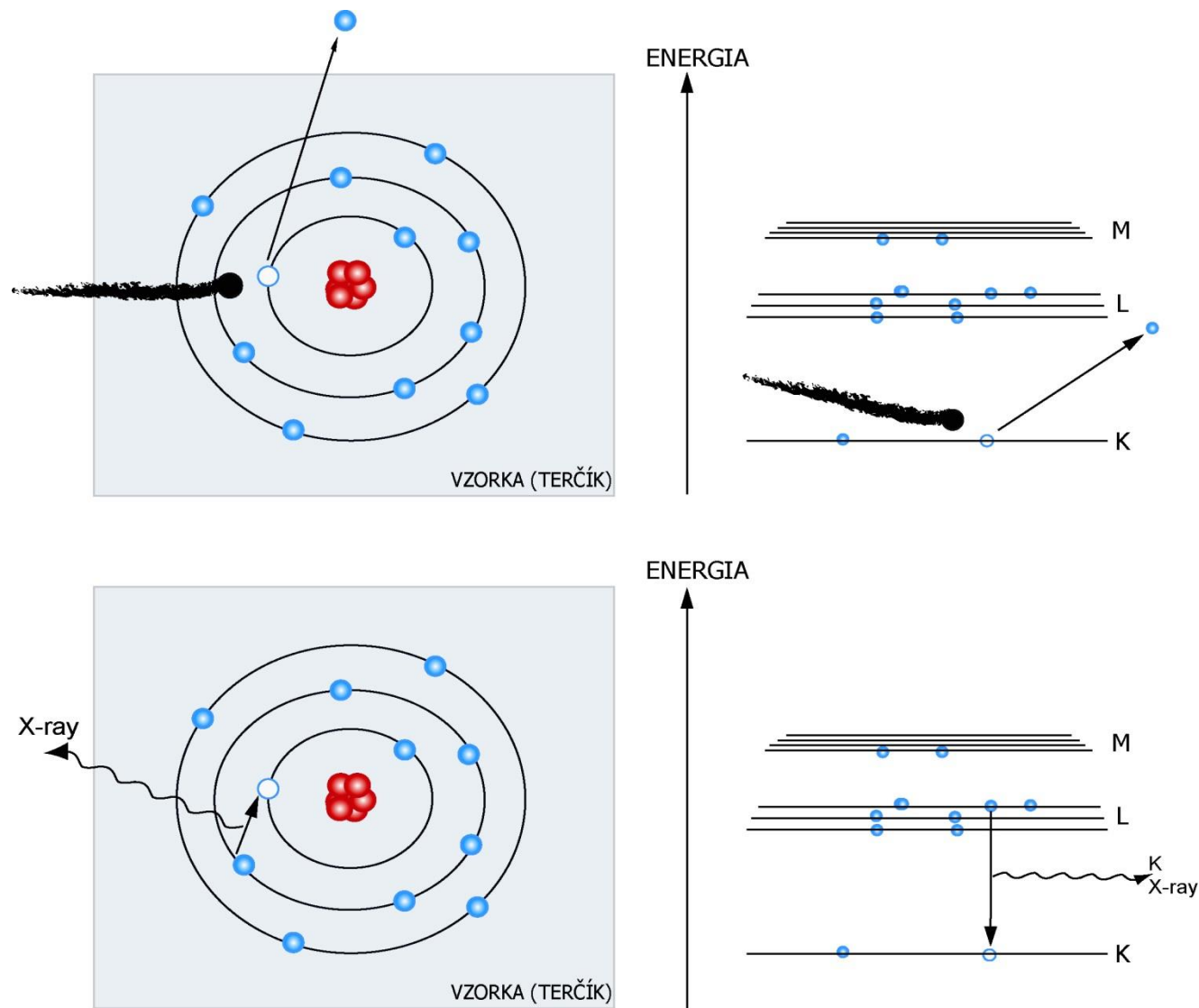
$$X[\text{mg}/\text{m}^3] = \frac{C[\text{ppm}] \times M}{22.4}$$

$$X[\text{mg}/\text{m}^3] = \frac{C[\text{ppm}] \times M}{22.4} \times \frac{273}{T[\text{K}]} \times \frac{p[\text{Pa}]}{10^5}$$

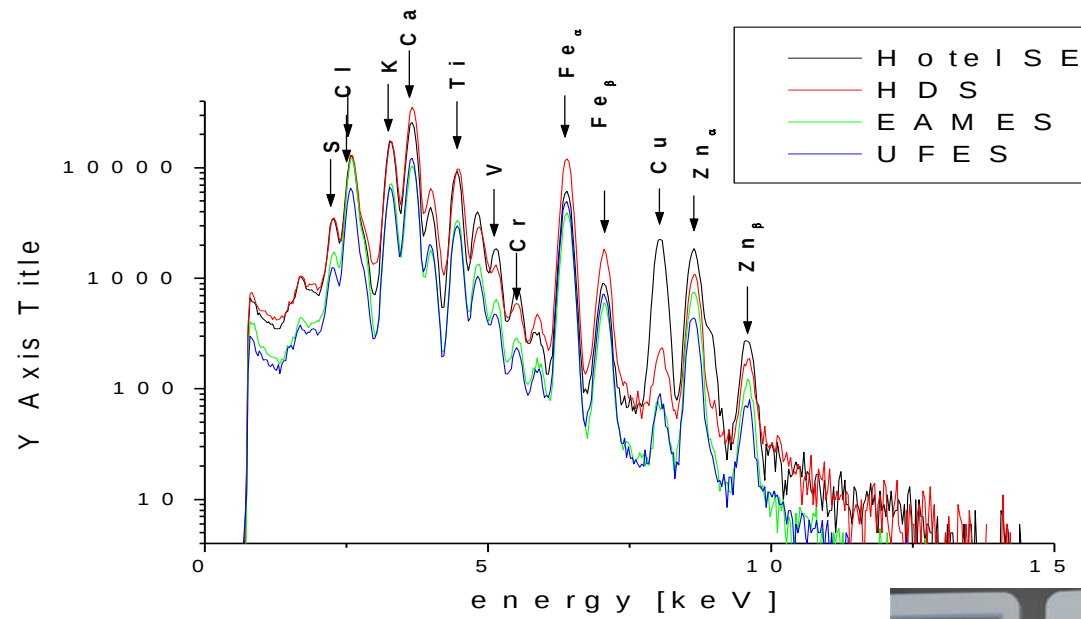
Iný možný význam ppm – particles per million (30 min)

[illegible]

Metódy PIXE a RFA



Metóda PIXE a RFA



Zákony zachovania

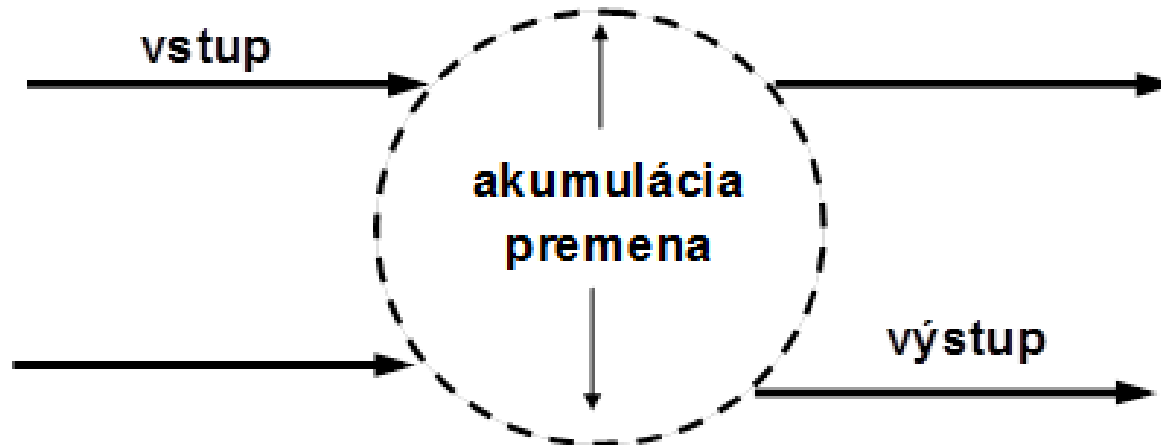
Ak chceme pochopiť **a kvantifikovať** transport látok a energie v životnom prostredí, vychádzame z niekoľkých základných fyzikálnych zákonov princípov:

Zákona zachovania energie vysvetliť

Zákona zachovania hmoty – súvisí so zákonom zachovania energie, keďže hmota a energia sú si podľa Einsteinovho vzťahu rovnocenné. Ak uvažujeme procesy, pri ktorých **nedochádza** ku premene hmoty na žiarenie a naopak, zákon zachovania hmoty prakticky znamená zákon zachovania látkového množstva, resp. zákon zachovania hmotnosti.

Zákony termodynamiky – prvá a druhá veta termodynamická

Hmotnostná rovnováha – všeobecná schéma



Kvalitatívne môžeme hmotnostnú rovnováhu vyjadriť ako:

$$\text{Vstup} = \text{výstup} + \text{premena (rozklad)} + \text{akumulácia (záchyt)}$$

Za účelom kvantitatívnej analýzy budeme rozlišovať niekoľko prípadov.

Ustálený stav, konzervatívna látka (45 min)

Ustálený stav, **rovnovážny stav**, **stav dynamickej rovnováhy**, ... znamená, že **koncentrácia** (alebo jej podobná veličina) v sledovanom systéme (objekte) je konštantná, t.j. **nemení sa s časom**. Matematicky to vyjadruje podmienka $\frac{dC}{dt} = 0$.

Ak je navyše látka **konzervatívna**, t.j. **nepodliehajúca premene (rozkladu)**, musí v ustálenom stave platiť rovnováha medzi vstupom a výstupom danej látky do a von zo sledovaného prostredia (objektu):

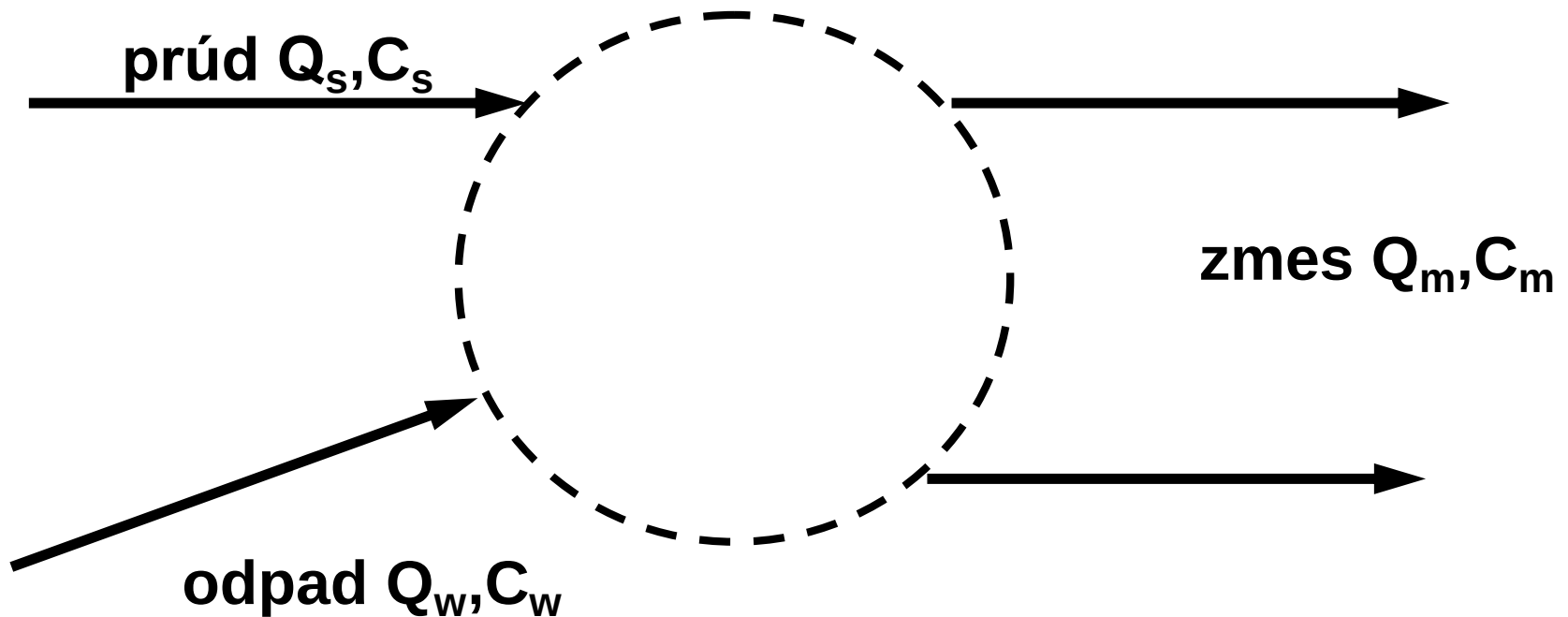
Vstup = výstup

Množstvo vstupujúcej resp. vystupujúcej látky vypočítame ako **súčin toku** (objem/čas) a **koncentrácie** (hmotnosť/objem):

$$C_1 Q_1 + C_2 Q_2 = C_?(Q_1 + Q_2)$$

Diagram stacionárneho stavu s konzervatívnym polutantom

$$C_s Q_s + C_w Q_w = C_m Q_m = C_m (Q_s + Q_w)$$



Dopravná zápcha

Porušenie tejto rovnováhy vedie ku zániku stacionárneho stavu, čoho dôsledkom je napríklad kumulácia polutantu (t.j. nárast jeho koncentrácie) v sledovanom objekte s časom. Týmto veľmi jednoduchým modelom môžeme napríklad popísať aj vznik dopravnej zápchy. Riešme príklad s reálnymi hodnotami.



Model versus realita

Aj keď je hustota dopravy jedným z hlavných faktorov, prečo dopravné zápchy vznikajú, ani zďaleka nie je jediným. Ďalším z nich je správanie sa šoférov a ich odhad. Tým, že nedokážu plynule udržiavať rovnakú rýchlosť a vzdialenosti medzi vozidlami, sa cestná premávka výrazne spomaľuje.

Problému sa venoval tím japonských vedcov. V rámci experimentu požiadali šoférov, aby za sebou jazdili v kruhu konštantnou rýchlosťou 30 kilometrov za hodinu a aby medzi vozidlami udržiavali rovnomerné vzdialenosti. Takéto zadanie šoféri nedokázali splniť a už po chvíli sa celý systém rozpadol. Najskôr len mierne spomalenie jedného vozidla viedlo k dozadu sa šíriacej vlne, ktorá vyústila až do zastavenia iných áut o niekoľko metrov ďalej.

To je napríklad vysvetlením, prečo vznikajú zápchy v oboch diaľničných smeroch, keď je haváriou zablokovaný len jeden – vodiči z opačnej strany **spomalia a pozerú sa, čo sa deje**. Vlna brzdenia spôsobí, že o niekoľko desiatok metrov budú iní vodiči nútení zastaviť úplne. Na prvý pohľad „bez príčiny“. Riešenie? Zrejme iba plne automatizované autá, ktoré šoférujú roboty.

Toto spomalenie v našom modeli predstavuje porušenie rovnováhy medzi vstupom a výstupom.

Ustálený stav v prípade nekonzervatívnej látky

Pod pojmom **nekonzervatívna látka** budeme rozumieť látku, ktorá podlieha rozpadu (premene), pričom tento rozpad môže byť spôsobený procesmi:

- Chemickými;
- Biologickými;
- Jadrovými;
- Inými.

Princíp hmotnostnej rovnováhy v takomto prípade bude:

Vstup = výstup + premena (rozklad)

Premena sa modeluje ako: $\frac{dC}{dt} = -KC$

kde K je **reakčný koeficient [1/čas]**

Riešením tejto rovnice je $C = C_0 e^{-Kt}$, pričom C_0 je počiatočná koncentrácia v čase $t=0$.

Ustálený stav v prípade nekonzervatívnej látky (60 min)

Ak je objem skúmaného objektu V , potom celkové množstvo látky v tomto objekte bude CV a jej úbytok za jednotku času KCV .
Hmotnostná rovnováha bude:

$$\text{Vstup} = \text{výstup} + KCV$$

Aplikácie:

- Staré environmentálne záťaže;
- Uhlíkové datovanie;
- Iné.

Príklad: ako dimenzovať kapacitu jedálne

Vstup: počet ľudí prichádzajúcich do jedálne za jednotku času [min];

Reakčný koeficient: prevrátená hodnota priemerného času jedenia;

Sledovaná veličina: počet ľudí v jedálni, N ;

Ustálený stav: počet ľudí v jedálni sa nemení = dynamická rovnováha medzi prichádzajúcimi a odchádzajúcimi ľuďmi;

Zdokonalenie modelu = uváženie aj výstupného člena.

Prechodný jav – funkcia odozvy

Ak nás zaujíma aj **prechodný jav, t.j. zmena (nárast, pokles) koncentrácie v čase**, musíme písať rovnicu hmotnostnej rovnováhy s uvažovaním všetkých možných procesov (t.j. členov) takto:

$$V \frac{dC}{dt} = S - QC - KCV$$

Vysvetliť význam jednotlivých členov a urobiť rozmerovú kontrolu.

Riešením tejto rovnice je funkcia:

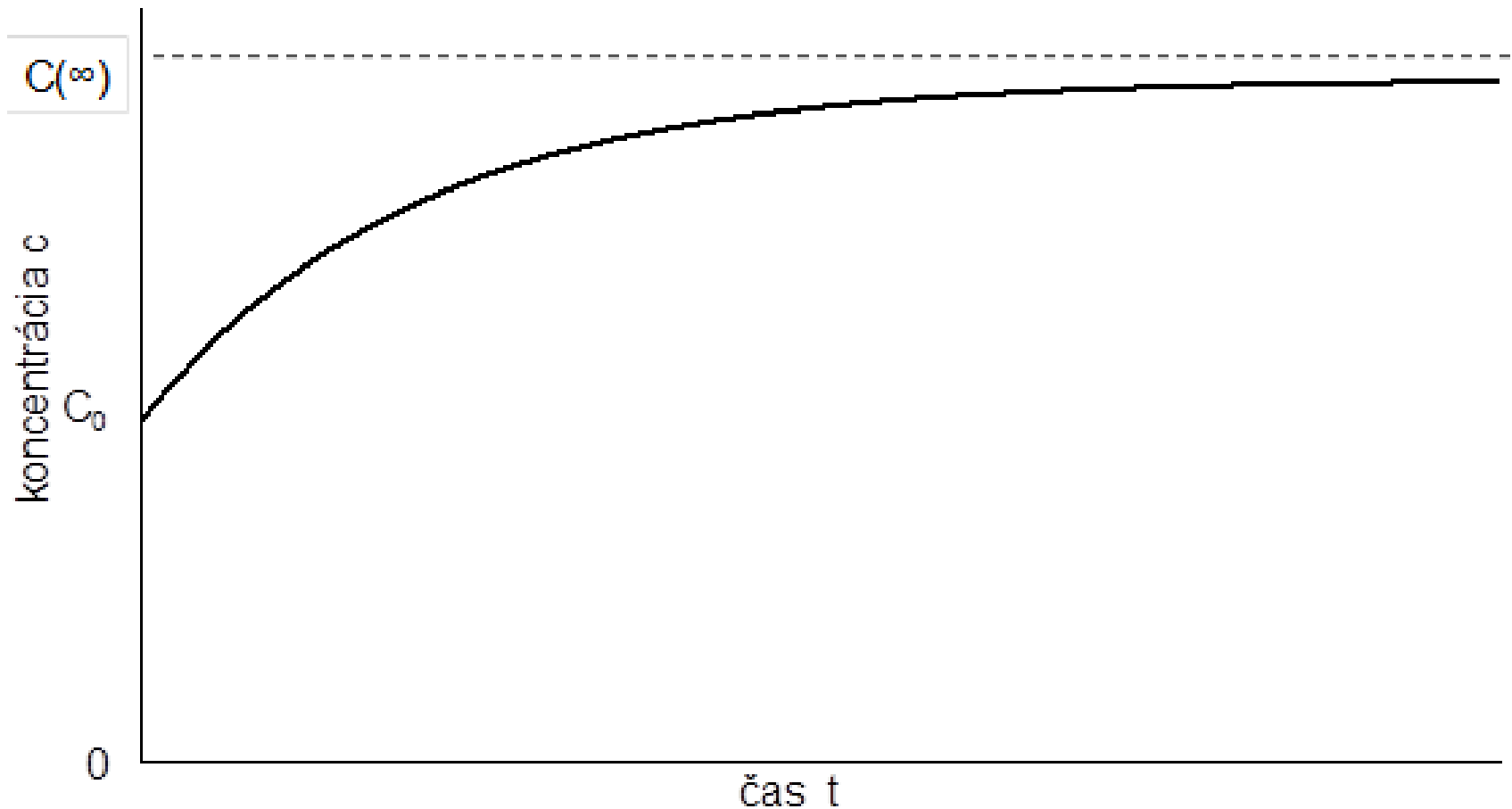
$$C(t) = (C_0 - C_\infty)e^{-\left(K + \frac{Q}{V}\right)t} + C_\infty$$

pričom pre koncentráciu v ustálenom stave platí:

$$C_\infty = \frac{S}{Q + KV}$$

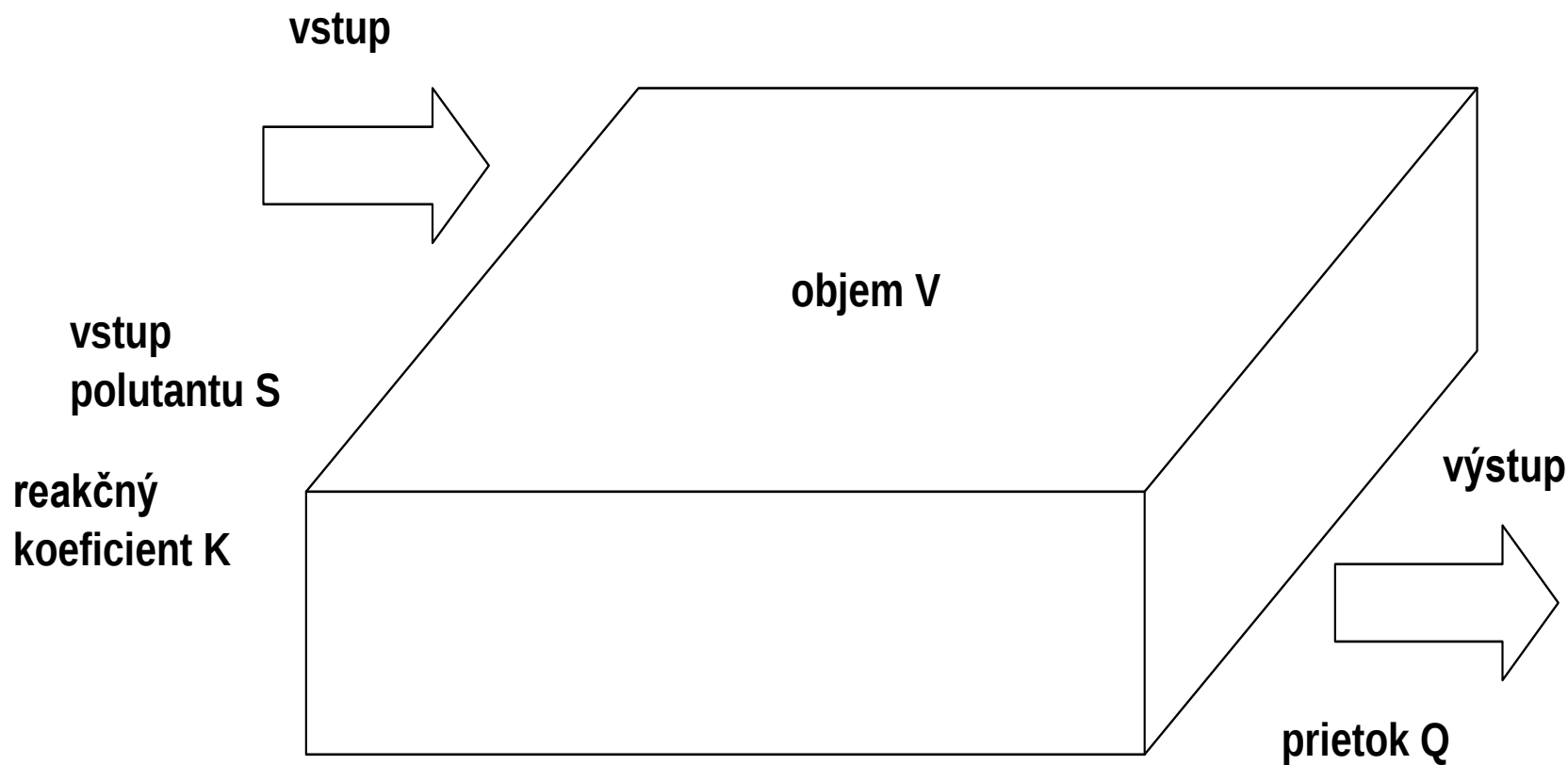
Rozmerová kontrola

Prechodný jav – funkcia odozvy



Čo myslíte, môže byť počiatočná koncentrácia **vyššia** ako ustálená?
Ako by vyzeral graf, keby zdrojový člen S bol nulový?

Priestorový model



$$V \frac{dC}{dt} = S - QC - KCV$$

$$S = QC_{\infty} + KC_{\infty}V$$

$$C = f(t)$$

$$\text{Vstup} = \text{výstup} + \text{premena (rozklad)}$$

Príklad – odsávanie exhalátov z cestných tunelov



$$Q = \frac{S - KC_{\infty}V}{C_{\infty}}$$

Podobne, ako sme vyšetrovali tok látok, môžeme kvantitatívne analyzovať aj **tok energie**. **Energiu** definujeme ako schopnosť (možnosť) nejakého systému konať prácu. Ak hmota aj energia môžu prenikať cez jeho hranice, hovoríme o **otvorenom systéme**. Ak energia môže prenikať cez hranice systému, ale hmota nie, hovoríme o **uzavretom systéme**. Vo všeobecnosti platí (**zákon zachovania energie**):

$$Energia_{vstup} = Energia_{výstup} + zmena vnútornej energie$$

kde vnútorná energia znamená energiu akumulovanú v systéme. Táto vnútorná energia môže byť akumulovaná v rôznych formách, pričom pre účely environmentalistiky je najdôležitejšia a najčastejšia práve forma **tepla**. V takom prípade platí:

$$Energia_{vstup} = Energia_{výstup} + mc\Delta T$$

kde m je hmotnosť, c je **špecifické teplo** a T je teplota.

Vysvetliť aj pojem **skupenské teplo topenia** a **tuhnutia**.

Energetická rovnováha v otvorených systémoch

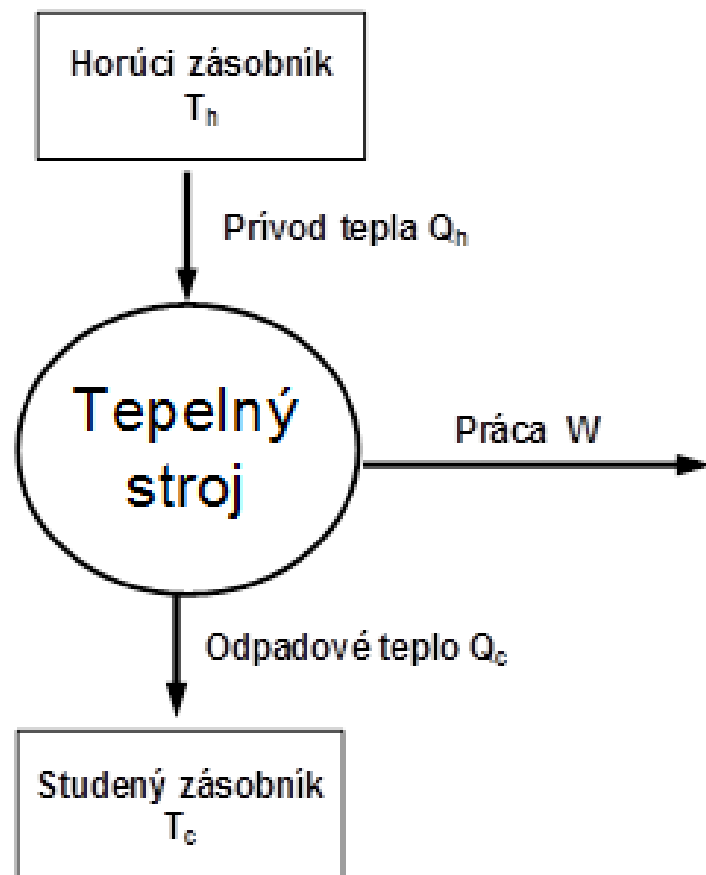
V otvorených systémoch, kedy dochádza aj k toku látky, vieme vyjadriť zmenu vnútornej energie za jednotku času ako:

$$\text{Zmena vnútornej energie} / \text{čas} = \dot{m}c\Delta T$$

kde $\dot{m}$ je tok média cez hranice systému. V zásade v ekosystémoch môže ísť o **vyhrievacie médium** (napríklad vykurovanie skleníkov, bytových domov a podobne) alebo o **chladiace médium** (chladenie tovární, elektrární a podobne).

Druhá veta termodynamická

Druhá veta termodynamická v zásade hovorí, že neexistuje systém, ktorý by dokázal premeniť všetku tepelnú energiu na mechanickú prácu. Uviest' aj ďalšie možné interpretácie.



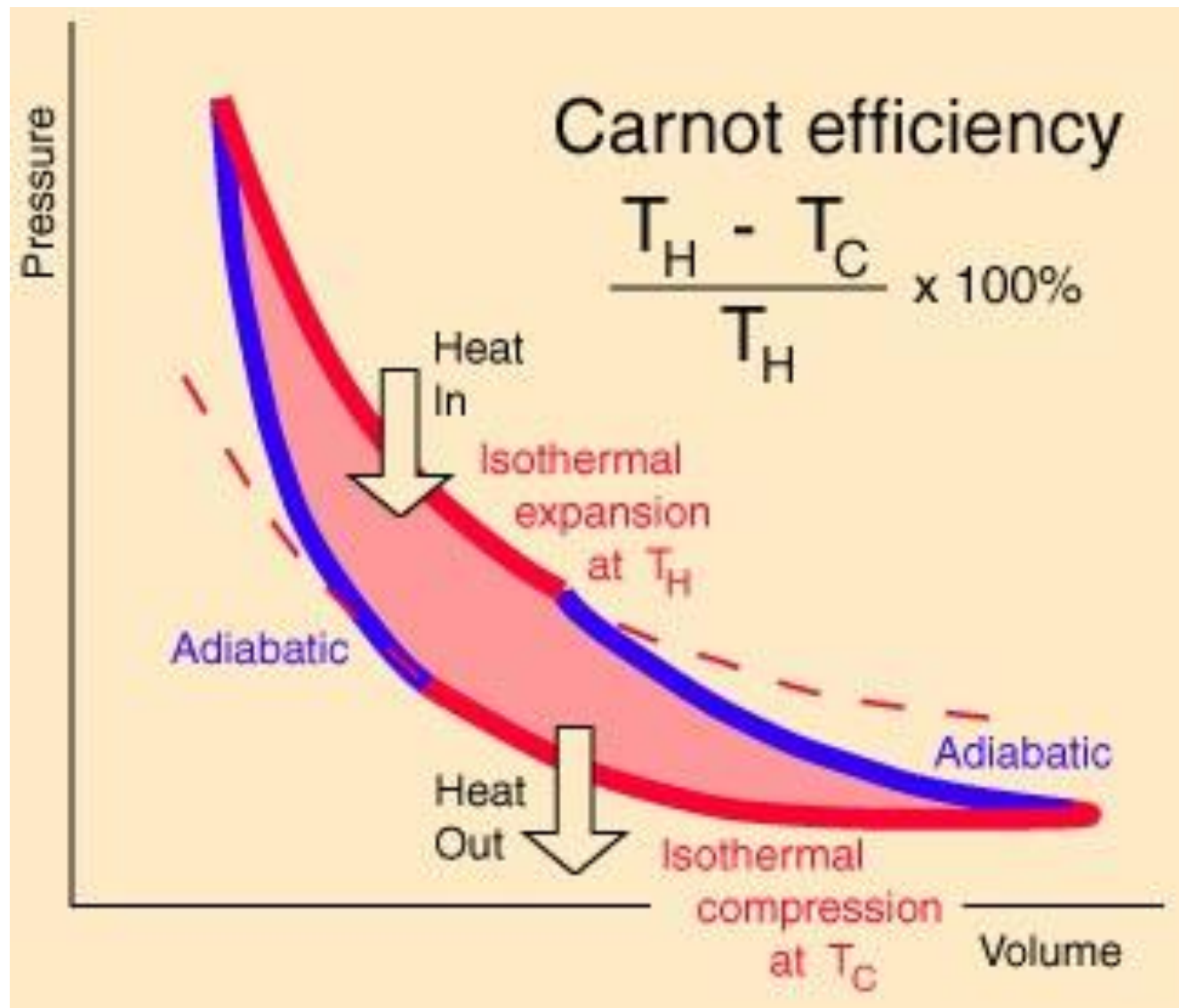
Účinnosť takéhoto tepelného stroja definujeme ako:

$$\eta = \frac{W}{Q_{hot}}$$

Ak stroj pracuje na báze Carnotovho cyklu, pre účinnosť tiež platí:

$$\eta = \frac{T_{hot} - T_{cold}}{T_{hot}}$$

Carnotov cyklus



Prenos tepla

Teplo vždy prechádza z teplého miesta na chladné miesto, z teplejšieho telesa na chladnejšie teleso. V zásade poznáme tri mechanizmy prenosu tepla:

- **Vedením** – uskutočňuje sa obvykle v pevných látkach a pri telesách, ktoré sú v priamom tepelnom kontakte. Jeho mechanizmom je prenos vibrácií molekúl a atómov na susedné molekuly a atómy mriežky. Schopnosť materiálov viesť teplo charakterizuje ich **tepelná vodivosť**. Najlepšími vodičmi tepla sú kovy. Na druhej strane sú materiály, ktoré majú veľmi nízku tepelnú vodivosť. Tieto sú vhodné na tepelnú izoláciu.
- **Sálaním** – o sálaní hovoríme vtedy, ak je prenos tepla sprostredkovaný prúdiacou kvapalinou alebo plynom, ktoré sú v kontakte s ohrievaným telesom, postupne mu odovzdávajú svoje teplo a samy sú pritom ochladzované. Napríklad teplý vzduch v dome ohrieva steny miestností (príklad – rozkúrenie vo vychladnutej miestnosti).

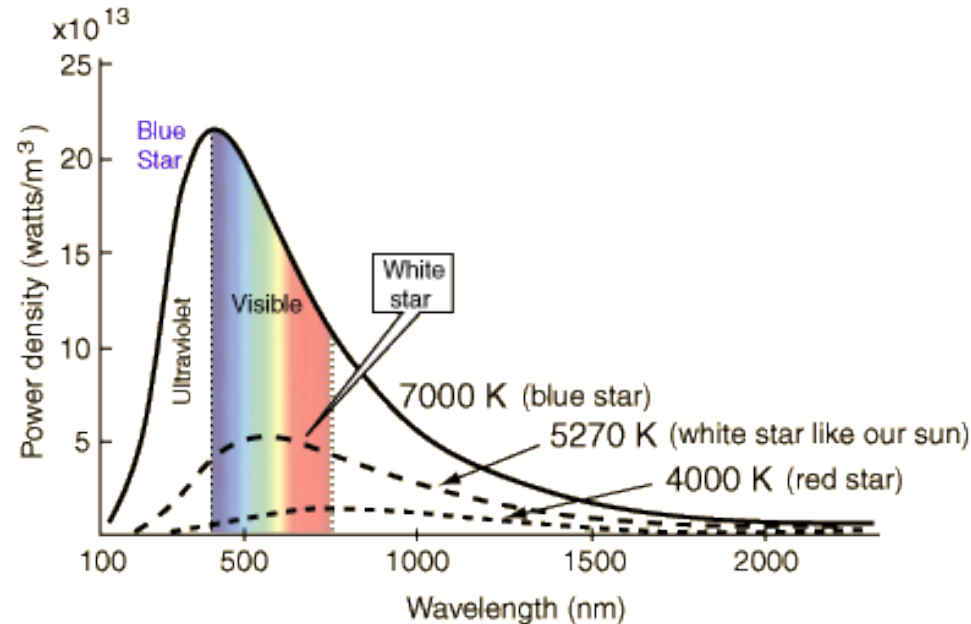
- **Žiarením (vyžarovaním)** – prenos energie je sprostredkovaný elektromagnetickým poľom a nevyžaduje žiadne látkové médium (na rozdiel od vedenia a sálania). Vyžarovanie je jedným zo základných procesov, pretože vždy existuje výmena tepla medzi telesom a jeho okolím, pokiaľ majú rozdielnu teplotu. Žiaden objekt však nevyžaruje viac tepla ako hypotetické čierne teleso. Pomer medzi vyžiareným teplom telesa a teplom, ktoré by to isté teleso vyžiarilo ako čierne teleso, sa nazýva **emitancia**. Emitancia mnohých prírodných materiálov je veľmi vysoká. Napríklad suchá zem alebo piesok majú emitanciu blízku 0,90 a voda a ľad 0,95. Pre vyžarovanie absolútne čierneho telesa platí Stefan-Boltzmannov vyžarovací zákon:

$$W = \sigma AT^4$$

kde W je vyžiarený **výkon [Watt]**, A je plocha telesa, T je absolútna teplota telesa [K] a σ je Stefan-Boltzmanova konštanta (5.67×10^{-8} [W/(m²K⁴)]).

Žiarenie absolútne čierneho telesa (koniec)

Stefan-Boltzmanov zákon udáva výkon, ktorý vyžaruje čierne teleso, ale nehovorí nič o jeho vlnovej dĺžke. Čierne teleso emituje žiarenie s určitým spektrom vlnových dĺžok (význam v kozmológii):



Maximálna hodnota spektra vlnových dĺžok je daná Wienovým

posuvným zákonom: $\lambda_{max} = \frac{2898}{T}$

kde λ_{max} je vlnová dĺžka v mieste maxima [μm] a T je teplota [K].