2. SYRE OCH SYRETÄRANDE ÄMNEN

2.1 Vad är syre och var kommer det ifrån?

Syre är ett grundämne med atomnummer 8 och den kemiska beteckningen O i det periodiska systemet. Jordens atmosfär innehåller ungefär 21% syre vilket förekommer som O₂ molekyler. Så har det dock inte alltid varit. När jorden bildades för ungefär 4,5 miljarder år sedan fanns inte O₂ i atmosfären. Det var först när fotosyntetiska bakterier, s k cyanobakterier, utvecklades som syrgas började produceras och koncentrationen O₂ i atmosfären ökade drastiskt för ungefär 2,1-2,4 miljarder år sedan. Fotosyntesen innebär att solljus, vatten och koldioxid omvandlas till kolhydrater och molekylärt syre.

$$6CO_2 + 6H_2O + \text{solenergi} \rightarrow C_6H_{12}O_6 + 6O_2$$
 (fotosyntes, O_2 produceras)

De kolhydrater som produceras används av de fotosyntetiska organismerna som energikälla och för att producera cellmaterial. Notera att när organismerna dör och deras cellmaterial bryts ner så konsumeras motsvarande mängd syre som producerades under fotosyntesen.

$$C_6H_{12}O_6 + 6O_2 \rightarrow 6CO_2 + 6H_2O$$
 (aerob nedbrytning av glukos)

Varför har vi då så hög koncentration av O₂ i atmosfären idag? Jo, en liten fraktion av det organiska material som produceras av cyanobakterier i haven sjunker till botten och begravs i sedimenten. Eftersom det då inte går åt något O₂ för att bryta ned det organiska materialet så har vi haft en nettoproduktion som har lett till den atmosfär vi har idag.²

2.2 Varför är syre så viktigt för livet på jorden?

Syre är livsnödvändigt för många livsformer på jorden. Man kan klassificera livet på jorden i prokaryoter och eukaryoter. Prokaryoter inkluderar bakterier och arkéer vilka huvudsakligen är encelliga mikroorganismer som är en eller några mikrometer (μ m, 10^{-6} meter) stora. Det har uppskattats att det finns 1 biljon (10^{12}) olika arter av mikroorganismer.³ Många av dessa använder syre för att överleva. Eukaryoter innefattar svampar, växter, djur och människor. Även bland eukaryoter finns det många olika arter på jorden. En studie uppskattade antalet arter till 8,7 miljoner.⁵ Människor, djur och många svampar kräver syre för att överleva.

För att förstå varför syre är så viktigt måste vi förstå lite av de kemiska reaktioner som ligger till grund för allt liv på jorden. Alla organismer använder redoxreaktioner för att generera den energi som krävs för att överleva. En redoxreaktion innebär att elektroner utbyts mellan olika ämnen. Låt oss ta människan som ett exempel. Vi äter mat och andas luft. Maten innehåller organiska ämnen, t.ex. socker. Luften innehåller syre. Genom att de organiska ämnena avger elektroner som tas upp av syre kan cellerna i våra kroppar generera den energi som krävs för att vi ska leva. Inuti cellerna sker reaktionen i flera steg men här fokuserar vi på den totala redoxreaktionen. Den består av två halvreaktioner, en oxidation och en reduktion. Oxidationsreaktionen beskrivs nedan. Glukos oxideras, koldioxid bildas och elektroner frigörs. CO₂ och C₆H₁₂O₆ kallas ett redoxpar.

```
C_6H_{12}O_6 + 6H_2O \rightarrow 6CO_2 + 24H^+ + 24e^- (glukos) (vatten) (koldioxid) (protoner) (elektroner)
```

Reduktionsreaktionen innebär att syre reduceras genom att ta upp elektroner och bilda vatten. Här är redoxparet O₂ och H₂O.

```
6O_2 + 24H^+ + 24e^- \rightarrow 12H_2O
(syre) (protoner) (elektroner) (vatten)
```

Om vi kombinerar de två halvreaktionerna får vi den totala redoxreaktionen:

$$C_6H_{12}O_6 + 6O_2 \rightarrow 6CO_2 + 6H_2O$$

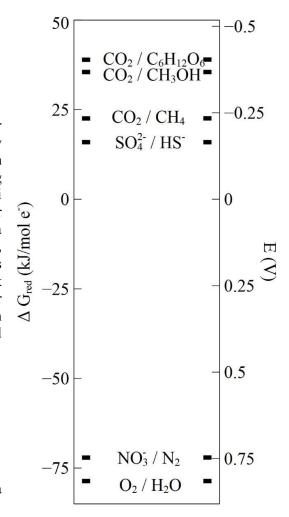
(glukos) (syre) (koldioxid) (vatten)

Glukos fungerar som elektrongivare och syre fungerar som elektrontagare. Man kan tänka på flödet av elektroner från elektrongivare till elektrontagare som ett vattenfall. Elektronerna faller från ett läge med hög potentiell energi till ett läge med låg potentiell energi och cellen kan använda skillnaden. Den här energiskillnaden, som motsvarar den användbara energi som kan utvinnas från en kemisk reaktion, kallas Gibbs fria energi (ΔG). En förändring i Gibbs fria energi är samma sak som en förändring i elektrisk potential. Energi frigörs när elektronerna (som är negativt laddade) rör sig från en låg potential till en hög potential. Relationen mellan energi och potential kan skrivas:

$$AG = -n \cdot F \cdot E$$

där ΔG är Gibbs fria energi (J), n är antalet elektroner som är involverade i reaktionen, F är Faradays konstant (96485,3 J/V.mol e-) och E är den elektriska potentialen (V).

Figur 2-1 visar elektronernas energinivå för olika redoxpar. Den här energinivån är given som ΔG eller E för en reduktionsreaktion. E-värdet kallas därför reduktionspotential. Redoxpar som har ett högt värde på ΔG_{red} och följaktligen ett lågt värde på E,



Figur 2-1. Gibbs fria energi och reduktionspotential vid pH 7 för olika redoxpar.

tenderar att oxideras. Redoxpar som har ett lågt värde på ΔG_{red} och ett högt värde på E, tenderar att reduceras. För att få en hel redoxreaktion måste två redoxpar kombineras. Den energiförändring som sker för den totala redoxreationen är:

$$\Delta G = \Delta G_{red} + \Delta G_{ox}$$
, där $\Delta G_{ox} = -\Delta G_{red}$

I Figur 2-1 kan vi se att syre är en mycket effektiv elektrontagare i redoxreaktioner. Det är detta som gör den så viktig för livet på jorden. Organismer som använder syre som elektrontagare kan utvinna mycket energi från varje mol av de organiska ämnen som de oxiderar och kan därför växa fort och effektivt. En mer detaljerad beskrivning om redoxreaktioner, Gibbs fria energi och reduktionspotentialer finns i Bilaga B.

2.3 Hur mycket syre finns i vattnet?

Även om syre normalt är en gas kan den till viss del också lösa sig i vatten. När mängden syre löst i vatten är i jämvikt med partialtrycket av syre (p_{02}) i atmosfären så kan vi räkna ut koncentration av syre löst i vatten (c_{02}) . Partialtrycket av en gas kan vi beräkna med **Daltons lag**. Den säger att det totala lufttrycket är lika med summan av partialtrycken hos de individuella gaser som luften består av.

Daltons lag:
$$p_{total} = \sum_{i=1}^{n} p_i$$

Jorden atmosfärstryck är 1 atm och luft består av cirka 78,1% kvävgas (N₂), 20,9% syrgas (O₂), 0,9% argon (Ar), 0,04% koldioxid (CO₂), samt mindre andelar av andra gaser. Detta betyder att partialtrycken av dessa gaser i atmosfären är:

```
\begin{split} p_{N2} &= 0,781 \cdot 1 \text{ atm} = 0,781 \text{ atm} \\ p_{O2} &= 0,209 \cdot 1 \text{ atm} = 0,209 \text{ atm} \\ p_{Ar} &= 0,009 \cdot 1 \text{ atm} = 0,009 \text{ atm} \\ p_{CO2} &= 0,0004 \cdot 1 \text{ atm} = 0,0004 \text{ atm} \end{split}
```

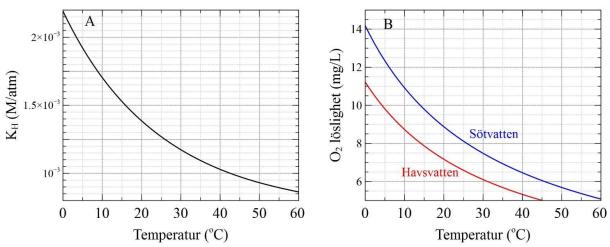
När partialtrycket är syre är känt, kan vi räkna ut koncentration löst i vatten med *Henrys lag*.

Henrys lag:
$$K_H = \frac{c_{02}}{p_{02}}$$

Jämviktskonstanten, K_H , kallas även Henrys lag-konstanten. Värden på K_H finns tabulerade för flera olika gaser, t.ex. i Kaye and Laby Online. För syre är värdet ungefär $1,26\cdot 10^{-3}$ M/atm vid en temperatur på 25° C. Det medför att lösligheten för syre i rent vatten vid 25° C är 8,20 mg/L vid ett lufttryck på 1 atm och luft som är mättad med vattenånga. Lösligheten påverkas dock av vattnets temperatur och salthalt. Vid högre temperatur och högre salthalt minskar syrets löslighet i vatten. Lösligheten vid olika temperaturer och salthalter finns tabulerade i flera olika källor. Den empiriska ekvationen nedan kan också användas för att räkna ut syrets löslighet i vatten för olika temperaturer och salthalter. Syre löst i vatten förkortas ofta DO, vilket står för "dissolved oxygen".

$$DO = \frac{475 - S \cdot (2,83 - 0,011 \cdot T)}{33.5 + T}$$

DO är koncentrationen syre löst i vatten (mg/L). Man antar att DO är i jämvikt med luften som är mättad med vattenånga och har ett tryck på 1 atm. T är temperaturen i ${}^{\circ}$ C och S är salthalten i promille (‰). Figur 2-2 nedan visar hur K_H för och syrets löslighet varierar med temperatur och salthalt.



Figur 2-2. (A) Jämviktskonstanten, K_H, för syre löst i rent vatten.⁸ (B) Syrets löslighet i sötvatten och havsvatten vid ett lufttryck på 1 atm och luft som är mättad med vattenånga.⁷

Trots att koncentrationen syre löst i vatten är ganska låg så är vattenlevande djur beroende av syre för att överleva. Olika arter är olika känsliga för låga syrekoncentrationer. T.ex. visade en studie att fisken fjällröding (*Salvinus alpinus*) påverkades negativt vid en DO-koncentration på 2,18 mg/L. För fisken regnbåge (*Oncorhynchus mykiss*) har DO-koncentrationer under 4,50-9,18 visats ha olika negativa effekter.¹

2.4 Hur mäter man syre löst i vatten?

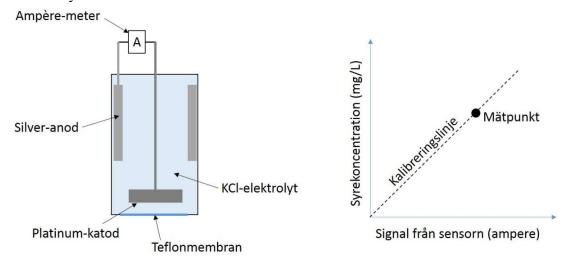
Den vanligaste typen av sensor för syre löst i vatten uppfanns av Leland Clark 1954 och kallas därför ofta för Clark-elektrod.⁶ Sensorn består av en platinum-katod och en silver-anod omslutna av en KCllösning (Figur 2-3). Syre diffunderar in i elektroden genom ett teflonmembran. Vid platinum-katoden reduceras syre enligt reaktionen nedan:

$$O_2 + 2H_2O + 4e^- \rightarrow 4OH^-$$

Samtidigt oxideras silver-anoden till silverklorid:

$$Ag + Cl^{-} \rightarrow AgCl(s) + e^{-}$$

Detta leder till att en elektrisk ström flödar mellan anod och katod. Strömmens storlek beror på hur mycket syre som når katoden, vilket i sin tur beror på koncentration syre som finns i vattnet utanför teflonmembranet. Detta medför att strömmens storlek är proportionell mot syrekoncentrationen. För att kunna bestämma syrekoncentrationen kalibrerar man sensorn. Detta kan man göra genom att mäta signalen i vatten mättat med syre. Om vattnets temperatur och salthalt är kända vet man den mättade syrekoncentrationen. Vatten mättat med syre kan man få genom att t.ex. bubbla luft genom vattnet i några minuter. Det här kallas för en-punktskalibrering och är vanligt för många kommersiella sensorer för syre löst i vatten. För vissa sensorer krävs två-punktskalibrering. Då mäter man även signalen från sensorn i syrefritt vatten.



Figur 2-3. Clark-elektrod för mätning av koncentrationen löst syre i vatten (vänster), samt kalibrering mellan syrekoncentration och signal från sensorn (höger).

2.5 Vad är syretärande ämnen och hur mäter vi dem?

Ämnen som, när de släpps ut i vatten, leder till att löst syre konsumeras kallas syretärande. Organiska ämnen är syretärande. Låt oss ta glukos som ett exempel. Glukos konsumeras snabbt av bakterier. Om syre finns tillgängligt kommer aeroba bakterier att oxidera glukos och reducera syre enligt följande redoxreaktion.

$$C_6H_{12}O_6 + 6O_2 \rightarrow 6CO_2 + 6H_2O$$

(glukos) (syre) (koldioxid) (vatten)

Glukos leder alltså till att syre konsumeras och är därför ett syretärande ämne. I ekvationen ovan kan vi se att 1 mol glukos leder till 6 mol syre konsumeras. Eftersom vi vet att O₂ har en molmassa på 32 g/mol och glukos har 180 g/mol kan vi även räkna ut massan syre som konsumeras per gram glukos.

$$\frac{6.32 \, g}{180 \, g} = 1.067 \, gO_2 \, per \, g \, glukos$$

När vi mäter mängden syretärande ämnen i vatten använder vi ofta termen "oxygen demand". Värdet som vi räknade ut kallas "theoretical oxygen demand" (ThOD) för glukos. På samma sätt kan vi räkna ut ThOD-värden för andra organiska ämnen. ThOD är den mängd syre som teoretiskt kan konsumeras om ett ämne oxideras.

I vatten vet vi oftast inte den kemiska sammansättningen hos de syretärande ämnen som finns. Alltså kan vi inte räkna ut ThOD. Istället finns det olika sätt att mäta syrebehovet (oxygen demand) hos de syretärande ämnen som finns i vattnet. En vanlig parameter kallas COD, vilket står för "chemical oxygen demand". COD är ett mått på mängden syre som krävs för att oxidera de organiska ämnen som finns i vattnet. COD mäts genom att ett starkt oxidationsmedel, vanligtvis kaliumdikromat (K₂Cr₂O₇), tillsätts till provet. Provet hettas upp vilket leder till att organiska ämnen oxideras och dikromat reduceras enligt följande reaktion:

$$1.5 \text{ CH}_2\text{O} + \text{Cr}_2\text{O}_7^{2-} + 8\text{H}^+ \rightarrow 1.5 \text{ CO}_2 + 5.5 \text{ H}_2\text{O} + 2\text{Cr}^{3+}$$
 (organiskt ämne) (dikromat) (protoner) (koldioxid) (vatten) (krom(III)jon)

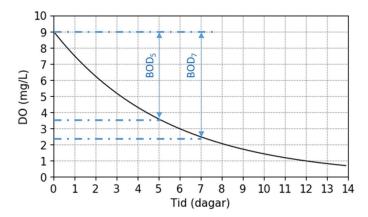
När $Cr_2O_7^{2-}$ reduceras till Cr^{3+} sker en färgförändring. Genom att mäta förändringen i färg med en spektrofotometer kan koncentrationen COD bestämmas. Även om COD-metoden är en kemisk oxidation med dikromat så anges mätvärdena som mg O_2 per liter. För att reducera en mol dikromat till Cr^{3+} krävs 6 mol elektroner. För att reducera en mol O_2 till H_2O krävs 4 mol elektroner (se ekvationerna nedan). Alltså motsvarar konsumtionen av 1 mol dikromat konsumtionen av 1,5 mol O_2 . Från mängden dikromat som konsumerats kan vi alltså beräkna motsvarande mängd syre som hade krävts för att oxidera de organiska ämnena i provet.

$$Cr_2O_7^{2-} + 14H^+ + 6e^- \rightarrow 7H_2O + 2Cr^{3+}$$

(dikromat) (protoner) (elektroner) (vatten) (krom(III)jon)
 $O_2 + 4H^+ + 4e^- \rightarrow 2H_2O$
(syre) (protoner) (elektroner) (vatten)

I mätmetoden för COD kan kloridjoner orsaka felaktiga resultat. För att förhindra att kloridjoner påverkar mätresultaten används ofta kvicksilver, vilket är ett förbjudet ämne i Sverige. På grund av detta pågår ett arbete med att hitta en alternativ metod för att mäta COD.

Ett annat mått på mängden syretärande ämnen i vatten kallas "biochemical oxygen demand" (BOD). BOD är ett mått på den mängd syre som konsumeras när naturligt förekommande mikroorganismer oxiderar de syretärande ämnen som finns i provet. Vattnet som ska analyseras hälls upp i en flaska och den initiala koncentrationen löst syre i provet mäts. Sedan försluts flaskan och placeras i en inkubator som håller en temperatur på 20°C. Efter 7 dagar mäts koncentrationen löst syre i provet igen. Den mängd syre som har konsumerats under de sju dagarna kallas BOD₇. Internationellt är det vanligare att använda ett mätintervall på 5 dagar, dvs BOD₅. Figur 2-4 visar hur koncentration löst syre kan förändras i flaskan över tid.



Figur 2-4. Förändring av koncentrationen löst syre (DO, dissolved oxygen) under ett BOD-test. BOD5 motsvarar syrekonsumtionen under 5 dagar och BOD7 motsvarar syrekonsumtionen under 7 dagar.

Om vi har ett vattenprov med syretärande ämnen och jämför värden på ThOD, COD och BOD₇ så kommer värdena att vara olika. ThOD är ett teoretiskt värde på den totala mängd syre som krävs för att oxidera alla syretärande ämnen i vattnet. COD är ett mått på de ämnen som kan oxideras kemiskt. COD bör ligga ganska nära ThOD-värdet. BOD₇ kommer antagligen vara betydligt lägre än ThOD och COD. BOD₇ mäter bara den andel av de syretärande ämnena som är biologiskt nedbrytbara under en period på 7 dagar. Många organiska ämnen, t.ex. humusämnen, kan vara svåra att bryta ner för mikroorganismer, vilket gör att de inte bidrar till det uppmätta BOD₇-värdet.

2.6 Varifrån kommer syretärande ämnen och vad har de för konsekvenser för miljön?

När vi pratar om syretärande ämnen menar vi oftast organiska ämnen, det vill säga molekyler som är uppbyggda av kolatomer. Dock är även vissa inorganiska ämnen, som ammonium och svavelväte, syretärande. Syretärande ämnen finns överallt och oftast innebär de inte några problem för miljön. Fotosyntetiska bakterier och växter producerar ständigt organiska ämnen och när dessa sedan bryts ner konsumeras syre. Miljöproblem uppstår dock när stora mängder syretärande ämnen släpps ut i vattendrag. Vårt avloppsvatten består bland annat av matrester och avföring vilka innehåller höga koncentrationer av organiska ämnen. Om detta släpps ut orenat i åar, sjöar eller hav kan det leda till att koncentrationen löst syre i vattnet sjunker kraftigt. Konsekvensen av detta blir att vattenlevande djur dör. Vattnet blir även illaluktande på grund av de biokemiska processer som sker i syrefria miljöer, t.ex. produktion av svavelväte. Under 1800-talet och början av 1900-talet växte städerna kraftigt vilket ledde till en ökad mängd avloppsvatten. När avloppssystem konstruerades leddes avloppsvattnet till vattendrag som blev kraftigt förorenade på grund av den stora mängd syretärande ämnen som de utsattes för. I början av 1900-talet utvecklades därför effektiva reningsprocesser för att ta bort syretärande ämnen från avloppsvatten. Idag har reningsverk krav på sig att rena avloppsvatten med avseende på BOD₇. Även inom dricksvattenrening är det viktigt att ta bort organiska ämnen från vattnet. Ofta används klorering för att desinficera dricksvatten. Om det då finns organiska ämnen i vattnet kan dessa leda till att klor konsumeras snabbare och vattnet är då inte lika skyddat mot hälsofarliga mikroorganismer och virus. Dessutom kan trihalometan, ett cancerogent ämne, bildas när klor reagerar med organiska ämnen.

Nyckelbegrepp - Kapitel 2

Daltons lag, Henrys lag, redoxreaktioner, Gibbs fria energi, reduktionspotential, Clark-elektrod, ThOD, COD, BOD₇.

Se även Bilaga B och Övningsuppgifter.

Referenser

- 1. Davies, J. C. (1975). Minimal dissolved oxygen requirements of aquatic life with emphasis on Canadian species: a revie. <u>Journal of the Fisheries Research Board of Canada</u> **32**(12): 2295-2332.
- 2. Kasting, J. F. Siefert, J. L. (2002). Life and the Evolution of Earth's Atmosphere. <u>Science</u> **296**(5570): 1066-1068.
- 3. Locey, K. J. Lennon, J. T. (2016). Scaling laws predict global microbial diversity. <u>PNAS</u> **113**(21): 5970-5975.
- 4. Lyons, T. W., Reinhard, C. T. Planavsky, N. J. (2014). The rise of oxygen in Earth's early ocean and atmosphere. <u>Nature</u> **506**(7488): 307-315.
- 5. Mora, C., Tittensor, D. P., Adl, S., Simpson, A. G. Worm, B. (2011). How many species are there on Earth and in the ocean? <u>PLoS Biol</u> 9(8): e1001127.
- 6. Severinghaus, J. W. Astrup, P. B. (1986). History of blood analysis. V. Oxygen measurement. <u>Journal of Clinical Monitoring</u> **2**(3): 174-189.
- 7. Truesdale, G. A. Gameson, A. L. H. (1957). The solubility of oxygen in saline water. <u>ICES Journal of Marine Science</u> **22**(2): 163-166.
- 8. Wallard, A., Sené, M., Craston, D., Williams, J. Milton, M. (2016). "Kaye and Laby Online 16th Edition." from http://www.kayelaby.npl.co.uk/.

2. ÖVNINGAR

- Ö2-1: En organism lever genom att oxidera acetat ($C_2H_3O_2^-$) till koldioxid (CO_2) och reducera syre till vatten. Hur mycket energi kan organismen teoretiskt utvinna per gram acetat? Beräkna reaktionens förändring i Gibbs fria energi (under standardförhållanden).
- Ö2-2: En bakterie lever genom att oxidera acetat ($C_2H_3O_2$ -) till koldioxid (CO_2) och reducera sulfat (SO_4^{2-}) till vätesulfid (HS^-). Hur mycket energi kan bakterien teoretiskt utvinna per gram acetat? Beräkna reaktionens förändring i Gibbs fria energi (under standardförhållanden).
- Ö2-3: På 2000 meters höjd är lufttrycket ungefär 0,78 atm. Antag att temperaturen är 15°C. Vad har syre för löslighet i rent vatten under dessa förhållanden? Beräkna med hjälp av Henrys lag.
- Ö2-4: På Mount Everests topp är lufttrycket ungefär 0,322 atm. Vad har syre för löslighet i rent vatten upphettat till 30°C vid detta lufttryck? Beräkna med hjälp av Henrys lag.
- Ö2-5: Du har konstruerat en egen Clark-sensor för mätning av löst syre. Du kalibrerar sensorn genom att mäta signalen i rent vatten mättat med syre (DO = 8,9 mg/L). Vid dessa förhållanden genererar sensorn en ström på 214 μ A. Sedan använder du sensorn för att mäta koncentrationen syre i ett annat, okänt prov med vatten. Då genererar sensorn 54 μ A. Vad är syrekoncentrationen i det okända vattenprovet?
- Ö2-6: En Clark-sensor kalibreras med en två-punktskalibrering. Vid 0 mg/L syre i vattnet är sensorsignalen 22 μ A. Med vatten mättat med syre (DO = 8,9 mg/L) är signalen 333 μ A. Vad är syrekoncentrationen i vattnet om sensorn generar 225 μ A?
- Ö2-7: Räkna ut ThOD för metanol (CH₄O). Ange svaret i g O₂ per g metanol.
- Ö2-8: Räkna ut ThOD för etanol (C_2H_6O). Ange svaret i g O_2 per g etanol.
- Ö2-9: Vilka processer bidrar till att syresätta ett vattendrag?
- Ö2-10: Om orenat avloppsvatten släpps ut i ett vattendrag, var tror du att syrekoncentrationen i vattnet kommer att sjunka mest?
- Ö2-11: I en å uppmättes DO-koncentrationer i vattnet på 19,4 mg/L en eftermiddag. Följande morgon var DO-koncentrationen 0,7 mg/L. Vad beror det här på?
- Ö2-12: Vid klorering av dricksvatten vill man att en viss koncentration klor ska finnas kvar i vattnet i distributionsnätet för att förhindra tillväxt av mikroorganismer. Varför kan organiska ämnen i vattnet leda till att klor konsumeras snabbare?
- Ö2-13: Vid ett COD-test konsumeras 16 mmol/L dikromat. Vad var COD-koncentrationen i vattenprovet?
- Ö2-14: Vid ett COD-test konsumeras 10,5 mmol/L dikromat. Vad var COD-koncentrationen i vattenprovet?

FACIT

2. ÖVNINGAR

Ö2-1. Lösningsgång.

Skriv redoxreaktionen (i Bilaga B finns metoden beskriven).

Skriv först halvreaktionerna.

Oxidation: $C_2H_3O_2^- \rightarrow 2CO_2 + 8e^-$

Reduktion: $O_2 + 4e^- \rightarrow H_2O$

Balansera syre:

Oxidation: $C_2H_3O_2^- + 2H_2O \rightarrow 2CO_2 + 8e^-$

Reduktion: $O_2 + 4e^- \rightarrow 2H_2O$

Balansera väte:

Oxidation: $C_2H_3O_2^- + 2H_2O \rightarrow 2CO_2 + 8e^- + 7H^+$

Reduktion: $O_2 + 4e^- + 4H^+ \rightarrow 2H_2O$

Balansera antalet elektroner:

Oxidation: $C_2H_3O_2^- + 2H_2O \rightarrow 2CO_2 + 8e^- + 7H^+$

Reduktion: $2O_2 + 8e^- + 8H^+ \rightarrow 4H_2O$

Sammanfoga halvreaktionerna:

Totala redoxreaktionen: $C_2H_3O_2^- + 2O_2 + H^+ \rightarrow 2CO_2 + 2H_2O$

Beräkna förändringen i Gibbs fria energi för reaktionen (värden på ΔG_f° finns i Bilaga B, tabell B-1):

$$\Delta G^{\circ} = \sum \Delta G_{f,produkter}^{\circ} - \sum \Delta G_{f,reaktanter}^{\circ}$$

 ΔG° =(-2*237,178 - 2*386,02) - (-369,41) = -877 kJ/mol acetat

Att ΔG° är negativt betyder att reaktionen frigör energi (som kan användas av den organism som utför reaktionen).

Beräkna svaret per g acetat. Acetat har molmassan 59 g/mol.

(-877 kJ/mol) / (59 g/mol) = -14,9 kJ/g acetat.

Svar: -14,9 kJ/g acetat.

 $\ddot{\mathbf{O}}\mathbf{2}\mathbf{-2}$. Svar: $\Delta \mathbf{G}^{\circ} = -2.0 \text{ kJ/g acetat.}$

Ö2-3. Lösningsgång.

Henrys lag är: $K_H = \frac{\bar{c}_{O2}}{p_{O2}}$

Vi ska beräkna cO2. Alltså behöver vi värden på K_H och p_{O2}.

Läs av värdet på K_H vid 15°C i Figur 2-2A (Kapitel 2).

 $K_H = 1,53*10^{-3} \text{ M/atm}.$

Vi vet att luft består av 20,9% O2. Vid ett lufttryck på 0,78 atm kan vi alltså räkna ut partialtrycket O2 enligt följande:

pO2 = 0.78 * 0.209 = 0.163 atm.

Vi räknar ut cO2.

 $c_{02} = (1.53*10^{-3} \text{ M/atm})*0.163 \text{ atm} = 2.49 *10^{-4} \text{ M}$

Ofta anges syre löst i vatten i enheten mg/L. För att omvandla från M till mg/L använder vi molmassan för O₂, 32 g/mol.

 $c_{O2} = 2,49 *10^{-4} M * 32 g/mol * 1000 mg/g = 8,0 mg/L$

Svar: 8,0 mg/L (eller 2,5*10⁻⁴ M)

Ö2-4. Svar: 2,5 mg/L.

Ö2-5. Lösningsgång.

Vid 8,9 mg/L O2 genererar sensorn 214 μ A. Vi antar att den generar 0 μ A vid 0 mg/L, och det är ett linjärt samband mellan ström och DO-koncentration.

DO-koncentrationen i vattnet när sensorn genererar 54 µA beräknas då enligt följande:

DO = 54*(8,9/214) = 2.2 mg/L.

Svar: 2,2 mg/L

Ö2-6. Svar: 5,8 mg/L.

Ö2-7. Lösningsgång

Vad är ThOD för CH4O? Först skriver vi redoxreaktionen för oxidation av metanol med syre.

Skriv först halvreaktionerna. Oxidation: $CH_4O \rightarrow CO_2 + 6e^-$ Reduktion: $O_2 + 4e^- \rightarrow H_2O$

Balansera syre:

Oxidation: $CH_4O + H_2O \rightarrow CO_2 + 6e^{-1}$

Reduktion: $O_2 + 4e^- \rightarrow 2H_2O$

Balansera väte:

Oxidation: $CH_4O + H_2O \rightarrow CO_2 + 6e^- + 6H^+$

Reduktion: $O_2 + 4e^- + 4H^+ \rightarrow 2H_2O$

Balansera antalet elektroner:

Oxidation: $CH_4O + H_2O \rightarrow CO_2 + 6e^- + 6H^+$ Reduktion: $1,5O_2 + 6e^- + 6H^+ \rightarrow 3H_2O$

Sammanfoga halvreaktionerna:

Totala redoxreaktionen: $CH_4O + 1,5O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$

För att oxidera 1 mol CH4O krävs 1,5 mol O2. ThOD är alltså 1,5 mol O2/mol CH4O.

För att ange ThOD baserat på massa så använder man molmassan.

Molmassan för CH₄O är 32 g/mol

Molmassan för O₂ är också 32 g/mol.

ThOD är alltså 1,5 mol O2 * 32 g O2/mol O2 / 1 mol CH4O * 32 g CH4O/mol CH4O = 1,5 gO2/gCH4O.

Svar: 1,5 gO₂/gCH₄O.

Ö2-8. Svar: 2,1 gO₂/gC₂H₆O

Ö2-13. Lösningsgång

Vid ett COD test reduceras kromat ($Cr_2O_7^{2-}$) till krom(III) (Cr^{3+}) enligt följande halvreaktion: $Cr_2O_7^{2-} + 14H^+ + 6e^- \rightarrow 7H_2O + 2Cr^{3+}$

Syrereduktion beskrivs med följande halvreaktion:

 $O_2 + 4H^+ + 4e^- \rightarrow 2H_2O$

Vi kan se att kromatreduktion kräver 6 elektroner per Cr₂O₇²⁻ medan syrereduktion kräver 4 elektroner per O2. Alltså motsvarar reduktion av 1,5 mol O2 reduktion av 1 mol Cr₂O₇²⁻.

16 mmol/L dikromat motsvarar alltså 1,5*16 = 24 mmol/L O2. COD-koncentrationen i provet är alltså 24 mmol/L Genom att multiplicera med molmassan för O2 för vi svaret i mg/L. 24*32 = 768 mg/L COD.

Svar: COD-koncentrationen är 768 mg/L.

Ö2-14. Svar: COD= 504 mg/L.