

STRUČNÝ KOMENTÁŘ K NOVÝM DOKUMENTŮM PŘIJATÝM A AUTORIZOVANÝM MEZINÁRODNÍ ASOCIACÍ PRO VLASTNOSTI VODY A VODNÍ PÁRY NA JEDNÁNÍ EC IAPWS V BERLÍNĚ, PŘI PŘÍLEŽITOSTI 15. KONFERENCE ICPWS, ZÁŘÍ 2008.

1. Release on the IAPWS Formulation 2008 for the Thermodynamic Properties of Seawater

Dokument pod termínem seawater-mořská voda popisuje vlastnosti *IAPSO Standard Seawater* [1], roztok mořských solí v obyčejné H₂O. Stavová rovnice použitá k popisu termodynamických vlastností mořské vody je fundamentální rovnice v Gibbsově energii, jako funkce obsahu soli, teploty a tlaku, ve vztahu k Gibbsově energii H₂O. Podrobnosti rovnice jsou uvedeny v článku "A Gibbs function for seawater thermodynamics for -2 °C to 80 °C and salinity up to 120 g/kg" by R. Feistel [2]. Rovnice je konsistentní s formulací IAPWS-95 pro tekutou fázi vody [3, 4], a s dokumentem IAPWS Release 2006 on an equation of state of H₂O ice Ih [5, 6].

Dokument obsahuje: 1 Nomenklaturu; 2 Úvodní poznámky a speciální konstanty; 3 Stavovou rovnici; 4 Vztahy mezi termodynamickými vlastnostmi a měrnou Gibbsovou energií; 5 Koligativní vlastnosti; 6 Obor platnosti a stručnou diskusi; 7 Odhad nepřesnosti; 8 Hodnoty pro ověření výpočtového programu, a 9 Literaturu.

Úvodní poznámky a speciální konstanty: Mořská voda je elektrolytický roztok mořských solí. Chemické složení mořských solí je velmi podobné ve všech oceánech a zanedbatelně se liší s časem. Hmotnostní frakce rozpuštěného materiálu v mořské vodě se nazývá absolutní slanost (absolute salinity). Pro stanovení absolutní salinity neexistují žádné metody. Vzhledem k chemickým reakcím mezi rozpouštědlem a rozpouštěnou látkou není striktně specifickým pojmem a hodnota absolutní salinity není nezbytně nutná vzhledem ke změně teploty a tlaku, nebo k přidání nebo odebrání H₂O. To bylo příčinou toho, že v oceánografii byly postupně zavedeny tři různé stupnice salinity, **stupnice chlorinity** (chlorinity scale of 1937) [7], **praktická stupnice slanosti 1978 (PSS-78)** [8], a **referenční-Composition Salinity Scale of 2008** [9]. Přehled různých stupnic salinity je v článku "The Composition of Standard Seawater and the Definition of the Reference-Composition Salinity Scale" by F.J. Millero et al. [9].

Termín KCl-normalizovaná mořská voda je použit k popisu vzorku mořské vody, který má stejnou měrnou elektrickou vodivost jako roztok chloridu sodného (KCl) v H₂O s hmotovou frakcí KCl 32,4356 g/kg, když oba mají stejnou teplotu $t_{TS-90} = 14,996$ °C a normální tlak, $p = p_0$.

Salinita mořské vody normalizovaná podle KCl, S_n , je stručně označována jako normální salinita a je uvedena v Tabulce 1.

Praktická salinita mořské vody normalizovaná podle KCl se rovná 35. V oboru definice praktická salinita se liší od S o konstantní faktor. V době psaní tohoto dokumentu, komerční přístroje pro měření salinity in-situ (v místě) nebo in-vitro (v laboratorních podmínkách) zpravidla udávají hodnoty praktické salinity (PSS-78).

Chlorinita je definována jako 0,328 5234 násobek hmoty čistého stříbra potřebného k precipitaci všech rozpuštěných chloridů, bromidů a jodidů ve hmotě mořské vody.

Referenční složení mořské soli je definováno z nejpřesnějších určení hlavních chemických složek IAPSO Standardní mořské vody, jejíž vzorek pochází z hladiny Severního Atlantiku [1, 5]. IAPSO je zkratka pro International Association for the Physical Sciences of the Oceans.

Chlorinita KCl-normalizované mořské vody s referenčním složením je (35/1,80655 g/kg). Chlorinita se liší od S o konstantní faktor.

Od molární hmoty M_s mořské soli, uvedené v Tabulce 1 pro referenční složení, molarita m mořské vody, tj. moly rozpouštěné látky na hmotu rozpouštědla je $m = \frac{S}{(1-S)M_s}$.

Molarita KCl-normalizované mořské vody s referenčním složením je 1,160 581 mol/kg.

Předložená stavová rovnice je ve tvaru měrné Gibbsovy energie jako funkce salinity, teploty a tlaku, $g(S, T, p)$. Stavová rovnice mořské vody je dána rov. (3), která sestává z části pro H_2O , $g^w(T, p)$, závislou na teplotě a tlaku, a části salinity, $g^s(S, T, p)$, ve tvaru $g^s(0, T, p) = 0$.

Část pro H_2O se počítá z formulace pro termodynamické vlastnosti obyčejné vody pro obecné a vědecké účely IAPWS-95 [3]. Část salinity, redukována pomocí $g^* = 1$ J/kg, je bezrozměrná polynomiální funkce daná rov. (4). Jsou uvedeny všechny potřebné konstanty a koeficienty, právě tak jako výpočtové vztahy pro termodynamické vlastnosti z rovnice Gibbsovy energie mořské vody, rov. (3), a její T - p derivace.

Vztahy pro termodynamické vlastnosti z měrné Gibbsovy energie lze odvodit z rov. (3) použitím vhodných kombinací měrné Gibbsovy energie a jejími derivacemi. Vztahy mezi termodynamickými vlastnostmi a $g(S, T, p)$ a jejími derivacemi podle T a p jsou shrnuty v Tab. 3. V tabulce 4, derivace části H_2O g^w Gibbsovy funkce g jsou vyjádřeny jako derivace IAPWS-95 Helmholtzovy funkce, $f^w(T, \rho^w)$. Podrobnosti o pravidlech matematické konverse mezi Helmholtzovými a Gibbsovými potenciály je uveden ve [14]. Vztahy termodynamických vlastností rovnice pro mořskou vodu a jejich derivace pro část salinity g^s v rovnici pro g podle S a p jsou uvedeny v Tab. 5. Rovnice pro část salinity $g^s(S, T, p)$ Gibbsovy energie a její derivace jsou v Tab. 6.

Část H_2O rov. (3) plyne z Helmholtzovy funkce $f^w(T, \rho^w)$. Výrazy uvedené v Tab. 3, T - p derivace Gibbsovy funkce pro H_2O , g^w , musí být počítány z ekvivalentních výrazů Helmholtzovy energie, f^w , z formulace IAPWS-95. Potřebné vztahy jsou uvedeny v Tab. 4.

Koligativní vlastnosti: Požadovaná termodynamická podmínka pro výpočet rovnováhy mezi mořskou vodou a různými fázemi H_2O , je rovnost chemických potenciálů H_2O v mořské vodě s měrnou Gibbsovou energií příslušné fáze. V bodu varu mořské vody, salinita solného roztoku S , teplota varu T , a tlak sytých par p se řídí podmínkou rovnováhy mezi mořskou vodou a parou; v bodu tuhnutí mořské vody, salinita solného roztoku S , teplota tuhnutí T a tlak p se řídí rovnovážnými podmínkami mezi mořskou vodou a ledem.

Obor platnosti a diskuse: Stavová rovnice (3), platí pro IAPSO Standard Seawater v níže definovaných oblastech fázového diagramu s následujícími hodnotami salinity, teploty a tlaku:

$$0 \leq S \leq 0,12 \text{ kg/kg}, \quad 261 \text{ K} \leq T \leq 353 \text{ K} \quad \text{a} \quad 0 < p \leq 10^8 \text{ Pa},$$

viz obr. 1 v dokumentu.

Ten zaujímá 'Neptunianovu' oblast platnosti (A) vody v oceánu v oblasti definovanou parametry

$$0 \leq S \leq 0,042 \text{ kg/kg}, \quad T_f \leq T \leq 313 \text{ K} \quad \text{and} \quad 101 \text{ 325 Pa} \leq p \leq 10^8 \text{ Pa}.$$

Teplota tuhnutí $T_f(S, p)$ je definována rov. (32).

Nízkotlaká oblast platnosti (B) je omezena intervaly

$$0 \leq S \leq 0,05 \text{ kg/kg}, \quad T_f \leq T \leq 313 \text{ K} \quad \text{and} \quad p_{vap} \leq p \leq 101 \text{ 325 Pa}.$$

Tlak sytých par $p_{vap}(S, T)$ je definován rov. Eq. (30).

Oblast platnosti (C) je rozšíření na "concentrated" mořskou vodu a na vysoké teploty při atmosferickém tlaku

$$0 \leq S \leq 0,12 \text{ kg/kg}, \quad T_f \leq T \leq 353 \text{ K} \quad \text{and} \quad p = 101 \text{ 325 Pa}.$$

V této dvourozměrné S - T oblasti, mimo průsečík s oblastmi (A), (B) nebo (D), derivace Gibbsových funkcí, g_p , g_{Sp} , g_{Tp} a g_{pp} podle tlaku, viz Tab. 3 a 5 dávají hodnoty extrapolované přes jejich obor platnosti pro hustotu a jejich derivace.

Jak je shrnuto v Tab. 7, část salinity Gibbsovy energie za normálního tlaku, $g^s(S, T, p_0)$, reprezentují experimentální tepelná a colligativní data pro salinitu od čisté vody do 0,12 kg/kg a pro teploty od bodu tuhnutí do 353 K v oblasti (C) (viz obr. 1 v [2]. Tlakově závislá část Gibbsovy funkce $g^s(S, T, p) - g^s(S, T, p_0)$, reprezentuje vysoce přesná experimentální data hustoty a rychlosti zvuku v oblastech (A) a (B), viz obr. 1 [16].

Oblast platnosti (D) je zero-salinity limit zředěné mořské vody v oblasti

$$S = 0, T_f \leq T \leq 353\text{K a } p_{\text{vap}} \leq p \leq 10^8\text{Pa},$$

který leží uvnitř oboru platnosti formulace IAPWS-95 [3]. V této dvou-rozměrné T - p oblasti (D), vně průniku s oblastmi (A), (B) nebo (C), derivace salinity Gibbsovy funkce, g_S a g_{Sp} , viz tab. 5, dávají hodnoty extrapolované přes jejich obor platnosti. Z fyzikálních důvodů, z $(\partial g_S / \partial S)_{T,p}$ viz Tab. 6, relativní chemický potenciál, rov. (25), a chemický potenciál mořské soli, rov. (27), mají logaritmické singularity pro $S \rightarrow 0$.

Oblast (E) je extrapolované rozmezí vlastností kapalné čisté vody mimo oblast platnosti, zasahující do oblasti pevné fáze, mezi teplotou tuhnutí čisté vody a mořské vody a do oblasti plynné fáze, mezi tlak sytých par čisté vody a mořské vody. Pro referenční funkci čisté vody, g^w , rov. (3), tato matematická extrapolace je žádoucí pro hodnoty T nebo p , kde mořská voda je stabilní kapalná fáze, avšak čistá voda je podchlazená nebo přehřátá metastabilní kapalná fáze. S ohledem na salinitu, deprese bodu tuhnutí může být až 8 K, zvýšení bodu varu až 2 K.

V oblasti prizmatického tvaru (F), numerická extrapolace derivací hustoty g_{Sp} , g_{Tp} and g_{pp} [které se objevují v rov. (13) - (17) a (29)] mimo obor jejich platnosti mají za následek hodnoty zřejmě nespolehlivé či přímo neplatné. Pro obor tlaků $p_{\text{vap}} \leq p \leq 10^8\text{Pa}$, tato oblast se nalézá uvnitř trojúhelníku daného $T/\text{K} + 450 S / (\text{kg/kg}) > 362$, $S \leq 0.12\text{kg/kg}$, and $T \leq 353\text{K}$. Především, použití těchto derivací je omezeno na $T < 308\text{K}$ při maximální salinitě, $S = 0.12\text{kg/kg}$, a na $S < 0.02\text{kg/kg}$ při maximální teplotě $T = 353\text{K}$.

Teploty jsou založeny na teplotní stupnici ITS-90, salinity na stupnici Reference-Composition Salinity Scale [9].

Logaritmický člen v rov. (4) plyne z Planckovy teorie ideálních roztoků. Taylorův rozvoj rov. (4) je shodný s Debyeovým-Hückelovým limitním zákonem zředěných electrolytů. V této formulaci, oba teoretické výrazy podporují korektní popis vlastností mořské vody v limitním případě vymizení salinity.

V několika oblastech světových oceánů, zejména v pobřežních vodách nebo ústí řek do moře, složení místní mořské vody se liší od IAPSO Standard Seawater. Související odchylka mezi přímo měřenou hustotou a hustotou počítanou z rov. (3) založené na měření vodivosti je až 0.005% u otevřeného oceánu a až 0.013% v Baltickém moři.

Uvedený obor platnosti neuvažuje rozpustnost složek mořských solí jako např. sádrovec (CaSO_4) nebo vápenec (CaCO_3), které se mohou stát přesycenými nebo sraženými při salinitě dokonce menší než 0.12 kg/kg. Přesycené koncentrace nejsou dostatečně známy a jsou diskutovány v [17].

Formulace termodynamických vlastností mořské vody byla vyvinuta ve spolupráci s IAPSO/SCOR Pracovní skupinou 127 Thermodynamics and Equation of State of Seawater.

Odhad nepřesnosti: Kombinovaná standardní nepřesnost u_c diskutovaná dále, je odhadnuta přímo nebo nepřímo z experimentálních dat při číselném odvození stavové rovnice s využitím její vnitřní konsistence. Zde, je udána kombinovaná standardní nepřesnost u_c [18], z které rozšířená nepřesnost (expanded uncertainties) $U = k u_c$ se získá násobením faktoru pokrytí $k = 2$, odpovídajícím 95% úrovni spolehlivosti. Termín 'nejistota' použitý dále se vztahuje na kombinované standardní nejistoty nebo relativní kombinované standardní nejistoty. Přehled kombinovaných standardních nejistot vybraných veličin v příslušných oblastech S - T - p prostoru, odvozený z odpovídajících experimentů je uveden v Tab. 7. Základní informace o nepřesnosti jednotlivých veličin v S - T - p prostoru je převzata z nepřesností uvedených nebo odhadnutých pro nejpřesnější experimentální data.

Hustota je velmi dobře extrapolovatelná z této formulace až do nejvyšších hodnot salinity při nízkých teplotách [19], obr. 1. V oboru vyšší salinity a vyšších teplot za normálního tlaku, hustota je popsána s nižší přesností a veličiny počítané z extrapolovaných derivací mohou být nesprávné. Pro nedostatek experimentálních dat nelze specifikovat nepřesnost za vyšších tlaků mimo 'Neptunianský' obor S nebo T . Přehled odhadnutých kombinovaných standardních nepřesností vybraných veličin v jednotlivých oblastech prostoru S - T - p je v Tab. Tab. 7.

Nejistota stupnice salinity je 7×10^{-6} kg/kg, odhadnutá z nepřesnosti atomových hmotností, zvláště pak chloru, z určení složek mořských solí, měření vodivosti a z přípravy vzorků IAPSO Standard Seawater [9].

Hodnoty pro ověření výpočtového programu, obsahující měrnou Gibbsovu energii, $g(S, T, p)$, spolu s příslušnými derivacemi a některými termodynamickými vlastnostmi, jsou uvedeny v Tab. 8.

Literatura

- [1] Culkin, F. and P. S. Ridout, J. Atm. Ocean. Technol. **15** (1998) 1072.
- [2] Feistel, R., Deep-Sea Res. I, (2007), submitted.
- [3] IAPWS Release on the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use (September 1996). Available at <http://www.iapws.org>.
- [4] Wagner, W. and A. Pruß, J. Phys. Chem. Ref. Data **31**, 387 (2002).
- [5] IAPWS Release on an Equation of State for H₂O Ice Ih (September 2006). Available at <http://www.iapws.org>
- [6] Feistel, R. and W. Wagner, J. Phys. Chem. Ref. Data **35** (2006) 1021.
- [7] Jacobsen, J.P. and M. Knudsen, *Unormal 1937 or primary standard-water 1937*: Report. Liverpool, 1940, 38 pp. (Publication Scientifique / Association d'océanographie physique. Union géodésique et géophysique internationale, vol. 7).
- [8] Lewis, E.L. and R.G. Perkin, Deep-Sea Res. **28A** (1981) 307.
- [9] Millero, F.J., R. Feistel, D.G. Wright and T.J. McDougall, Deep-Sea Res. I **55** (2008) 50.
- [10] Guildner, L.A., D.P. Johnson, and F.E. Jones, J. Res. Natl. Bur. Stand. **80A** (1976) 505.
- [11] ISO, *ISO Standards Handbook: Quantities and Units* (International Organization for Standardization, Geneva, 1993).
- [12] Preston-Thomas, H., Metrologia **27** (1990) 3.
- [13] CODATA, *2006 CODATA recommended values*. (Committee on Data for Science and Technology, Beijing, 2006). Available from <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html>.
- [14] IAPWS Advisory Note No. 3 on Thermodynamic Derivatives from IAPWS Formulations (August 2007), revised 2008. Available at <http://www.iapws.org>.
- [15] Feistel, R. and E. Hagen, Cold Regions Sci. Technol. **28** (1998) 83.
- [16] Feistel, R., Progr. Oceanogr. **58** (2003) 43.
- [17] Marion, G.M. and J.S. Kargel, *Cold Aqueous Planetary Geochemistry with FREZCHEM: From Modeling to the Search for Life at the Limits* (Springer, Berlin/Heidelberg, 2008).
- [18] ISO, *Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement* (International Organization for Standardization, Geneva, 1993).
- [19] Feistel, R. and G.M. Marion, Progr. Oceanogr. **74** (2007) 515.

2. Release on the IAPWS Formulation 2008 for the Viscosity of Ordinary Water Substance

Dokument nahrazuje "Revised Release on the IAPS Formulation 1985 for the Viscosity of Ordinary Water Substance," vydaný v roce 2003. **Obsahuje korelační rovnici pro vědecké výpočty a má tyto části:** 1 Úvodní poznámky, 2. Korelační rovnici, (Nomenklaturu, Referenční konstanty, Bezrozměrné veličiny, Obor platnosti, Odhad nepřesnosti, Korelační rovnici, Korekci pro kritickou oblast, a Zjednodušení pro mimokritickou oblast), 3 Doporučení pro průmyslové aplikace, 4 Data pro ověření programu a 5 Použitou literaturu.

Úvodní poznámky: Dokument obsahuje korelační rovnice pro smykovou viskozitu obyčejné vody v široké oblasti tlaků a teplot. Podrobná diskuse, vývoj a platnost dokumentu je obsažena v článku Huber, M.L. et al.: Formulation for the Viscosity of H₂O Ref. [1], který bude uveřejněn v Jour. Phys. Chem. Ref. Data.

Referenční konstanty: $T^* = 647.096 \text{ K}$; $p^* = 22.064 \text{ MPa}$ $\rho^* = 322.0 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ jsou konsistentní s hodnotami přijatými pro kritické parametry vody doporučené IAPWS [2], referenční konstanta pro viskozitu $\mu^* = 1.00 \times 10^{-6} \text{ Pa}\cdot\text{s}$, nemá fyzikální význam.

Bezrozměrné veličiny jsou $T = T/T^*$, $\rho = \rho/\rho^*$, $p = p/p^*$ a $\mu = \mu/\mu^*$.

Korelační rovnice viskozity (10) je dána vztahem

$$\bar{\mu} = \bar{\mu}_0(\bar{T}) \cdot \bar{\mu}_1(\bar{T}, \bar{\rho}) \cdot \bar{\mu}_2(\bar{T}, \bar{\rho}),$$

kde první člen reprezentuje viskozitu v limitě zředěného plynu, druhý člen representuje příspěvek vzhledem ke konečné hustotě a poslední člen příspěvek k viskozitě v kritické oblasti. Pro všechny členy jsou tabelovány potřebné součinitelé, konstant a exponenty.

Obor platnosti rovnice je pro všechny termodynamicky stabilní stavy tekuté fáze v následujícím oboru tlaků a teplot:

$0 < p < p_t$	a	$273.16 \text{ K} \leq T \leq 1173.15 \text{ K}$
$p_t \leq p \leq 300 \text{ MPa}$	a	$T_m(p) \leq T \leq 1173.15 \text{ K}$
$300 \text{ MPa} < p \leq 350 \text{ MPa}$	a	$T_m(p) \leq T \leq 873.15 \text{ K}$
$350 \text{ MPa} < p \leq 500 \text{ MPa}$	a	$T_m(p) \leq T \leq 433.15 \text{ K}$
$500 \text{ MPa} < p \leq 1000 \text{ MPa}$	a	$T_m(p) \leq T \leq 373.15 \text{ K}$

(T_m the pressure-dependent melting temperature and p_t the triple-point pressure)

Pro většinu aplikací se doporučuje použít formulaci IAPWS-95 pro výpočet hustoty pokud uvažovaný stav je definován teplotou a tlakem nebo jiné termodynamické veličiny místo hustoty a teploty.

Formulace reprodukuje hodnoty viskozity doporučené ISO při 20 °C (293.15 K) a standardním atmosferickém tlaku s plným počtem číslic uvedených v Technické zprávě *Viscosity of water*, ISO/TR: Technical Report 3666: 1998(E), Geneva; a rovněž souhlasí s hodnotami mezi 288.15 a 313.15 K při atmosferickém tlaku s nepřesností 0.17 % při 293.15 K.

V dokumentu jsou uvedeny následující poznámky k možnosti extrapolace korelační rovnice mimo výše uvedený obor platnosti: Pro parní oblast (vapor states) při teplotách pod trojným bodem (273.16 K) a $p \leq p_{\text{sub}}$ při výpočtu viskozity převládá člen pro zředěný plyn a příznivě se chová až do 250 K. Pro fluidní stavy mimo obor platnosti rovnice, ale v oblasti platnosti IAPWS-95, extrapolace korelační rovnice se chová fyzikálně rozumně. Při vysokých teplotách, extrapolace části pro zředěný plyn korelační rovnice je fyzikálně rozumná minimálně do 2500 K. Pro metastabilní podchlazenou kapalinu při atmosferickém tlaku, rovnice dobře souhlasí (v mezích 5 %) s dostupnými daty až do 250 K.

Odhadnutá nepřesnost rovnice viskozity je znázorněna v obr. 1 originálního dokumentu. V oblasti 273.15 až 1173.15 K a 0 až 100 MPa je mezi 1 až 3 %, a u tlaků do 350 MPa okolo 7 %).

Kritický příspěvek, který je závislý na korelační vzdálenosti ξ , je významný jen pro velmi úzkou oblast hustoty a teploty kolem kritického bodu. Ač viskozita v kritickém bodu má nekonečnou hodnotu, kritický příspěvek dává hodnotou větší než 2 % celkové viskozity jen v níže definované oblasti

$$645.91 \text{ K} < T < 650.77 \text{ K}, 245.8 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3} < \rho < 405.3 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}.$$

Mimo výše uvedenou oblast příspěvek je vždy menší než nepřesnost formulace, což umožňuje zjednodušení výpočtů, jak je uvedeno v sekci 2.8 a 3.

Zjednodušení výpočtu mimo kritickou oblast: Vzhledem k tomu, že kritický příspěvek je významný jen pro velmi úzkou oblast kolem kritického bodu, lze složitost výpočtu zjednodušit

a zredukovat výpočetní čas vynecháním kritického příspěvku při výpočtech mimo oblast 2, a to tak, že $\bar{\mu}_2 = 1$.

Pro aplikaci v průmyslu, kde je vyžadována vyšší výpočtová rychlost se doporučuje položit $\bar{\mu}_2 = 1$ a pro stanovení hustoty použít formulaci IAPS-IF97 [8, 9]. Při použití formulace IAPWS-IF97 pro výpočet hustoty, chyba zavedená touto formulací je menší než nepřesnost ve viskozitě, za předpokladu, že uvažovaný bod leží v oblasti platnosti formulace IAPWS-IF97, s výjimkou bodů blízko nebo v kritické oblasti definované výše.

Pro ověření výpočtového programu uživatele je uvedena tabulka hodnot μ ($\mu\text{Pa}\cdot\text{s}$) pro sadu hodnot T (K) a ρ ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$) s $\bar{\mu}_2 = 1$ i pro kritickou oblast.

Literatura:

- [1] Huber, M. L., R. A. Perkins, A. Laesecke, D. G. Friend, J. V. Sengers, M. J. Assael, I. M. Metaxa, E. Vogel, R. Mareš, and K. Miyagawa, J. Phys. Chem. Ref. Data, (in preparation).
- [2] International Association for the Properties of Water and Steam, Release: Values of Temperature, Pressure and Density of Ordinary and Heavy Water Substances at their Respective Critical Points, available at <http://www.iapws.org> (September 1992).
- [3] International Association for the Properties of Water and Steam, Revised Release on the Pressure along the Melting and Sublimation Curves of Ordinary Water Substance, available at <http://www.iapws.org> (September 2008).
- [4] Wagner, W., R. Feistel, and T. Riethmann, J. Phys. Chem. Ref. Data, in preparation.
- [5] Wagner, W., and A. Průš, J. Phys. Chem. Ref. Data **31** (2002) 387.
- [6] International Association for the Properties of Water and Steam, Release on the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use, available at <http://www.iapws.org> (September 1996).
- [7] International Organization for Standardization (ISO), Viscosity of Water, ISO/TR Technical Report 3666: 1998(E), Geneva.
- [8] Wagner, W., J. R. Cooper, A. Dittmann, J. Kijima, H.-J. Kretschmar, A. Kruse, R. Mareš, K. Oguchi, H. Sato, I. Stöcker, O. Šifner, Y. Takaishi, I. Tanishita, J. Trübenbach, and Th. Willkommen, J. Eng. Gas Turbines & Power **122** (2000) 150.
- [9] International Association for the Properties of Water and Steam, Revised Release on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam, available at <http://www.iapws.org> (August 2007).

3. Revised Release on the IAPS Formulation 1985 for the Thermal Conductivity of Ordinary Water Substance

nahrazuje odpovídající "Revised Release on the IAPS Formulation 1985 for the Thermal Conductivity of Ordinary Water Substance," vydaný v r. 1998. Jeho obsah je identický s obsahem v „Release on the IAPS Formulation 1985 for the Thermal Conductivity of Ordinary Water Substance“, vydaným IAPS v září 1984, kromě drobných uprav k dosažení konsistence s rovnicí vědecké formulace IAPWS-95, s rovnicí viskozity v „Release on the IAPWS Formulation 2008 for the Viscosity of Ordinary Water Substance, a mezinárodní teplotní stupnicí ITS 1990. Materiál v „IAPS Formulation 1985 for the Thermal Conductivity of Ordinary Water Substance“, byl v podstatě identický s obsahem „Release on Thermal Conductivity of Water Substance“, vydaným IAPS v prosinci 1977. Původní experimentální data byla shromážděna v dokumentu "Available Input of the Thermal Conductivity of Water Substance," K. Scheffler, M. Rosner, and M. Reimann (Institut A für Thermodynamik, Technische Universität, München, revidovaném v r, 1977).

Dokument obsahuje:

- Appendix A. obsahuje kriticky vyhodnocená experimentální data.
- Table A.I. Reduced to a uniform grid. Materiál je totožný s daty uvedenými v Release on the IAPS Formulation 1985 for the Thermal Conductivity of Ordinary Water Substance.
- Table A.II. Reduced to the saturation-pressure line. Tlak sytosti byl revidován, aby souhlasil s Release on the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use.

- Appendix B: Doporučená interpolační rovnice pro průmyslové výpočty. Tato část byla upravena aby souhlasila s rovnicí IAPWS-IF97 a teplotní stupnicí ITS-90.
- Appendix C: Doporučená rovnice pro vědecké s obecné účely byla revidována aby souhlasila s vědeckou formulací IAPWS-95, formulací viskozity 2008 a teplotní stupnicí ITS-90.
- Appendix D. Obsahuje vyrovnaní data tepelné vodivosti získaná výpočtem z doporučené rovnice pro průmyslové účely. Table D.I. Vypočtená pro rovnoměrně rozdělené T a p ; Table D.II. Hodnoty vypočtené na mezi sytosti z rovnice podle bodu B.
- Appendix E. Obsahuje vyrovnaní data tepelné vodivosti získaná výpočtem z doporučené interpolační rovnice pro vědecké výpočty. Table E.I. Vypočtená pro rovnoměrně rozdělené T a p ; Table D.II. Hodnoty vypočtené na mezi sytosti z rovnice podle bodu C., počítané pro rovnoměrné rozdělení t a p .
- Table E.II. Vypočtené podle meze sytosti.

U rovnic jsou uvedeny: Nomenklatura, referenční konstanty, bezrozměrné proměnné.

Rovnice tepelné vodivosti pro průmyslové výpočty platí v oboru

$\rho \leq 100$ MPa	pro	$0 \text{ }^\circ\text{C} \leq t \leq 500 \text{ }^\circ\text{C}$
$\rho \leq 70$ MPa	pro	$500 \text{ }^\circ\text{C} \leq t \leq 650 \text{ }^\circ\text{C}$
$\rho \leq 40$ MPa	pro	$650 \text{ }^\circ\text{C} \leq t \leq 800 \text{ }^\circ\text{C}$

4. Revised Release on the Pressure along the Melting and Sublimation Curves of Ordinary Water Substance

Empirické rovnice v dokumentu "Release on the Pressure along the Melting and Sublimation Curves of Ordinary Water Substance", 1993, byly fitovány na relativně stará experimentální data, se značnými nepřesnostmi a rozptylem u několika sekcí křivky tání a sublimační křivky. Tyto rovnice nejsou termodynamicky konsistentní s později vytvořenou stavovou rovnicí IAPWS-1995 [1, 2] a stavovou rovnicí ledu Ih H₂O [3, 4]. To byl důvod k vytvoření nových rovnic pro křivku tání a sublimace. Navíc, křivka tlaku tání ledu III byla mírně modifikována, aby bylo dosaženo konsistence s tlakem tání ledu Ih a trojným bodem led Ih – led III – kapalina ($T = 251.165$ K). Rovnice tlaku tání ledů V, VI, a VII jsou nezměněny. Podrobnosti o nových rovnicích jsou obsaženy v článku W. Wagner *et al.* [5].

Aplikací rovnovážných podmínek u rovnice IAPWS-95 [1, 2]) ledu Ih (IAPWS-95) lze získat mnohem přednější hodnoty T - p , které jsou konsistentní s vlastnostmi vody a ledu Ih. Data u sublimační křivky pokrývají teplotní obor od 130 K do 273.16 K a celou křivku tání Ih ledu (251.165 K až 273.16 K). Pro teplotní obor 30 K až 130 K, sublimační tlak byl vypočten z nedávno vyvinutého fyzikálního modelu [7]. Hodnoty T - p takto určené byly užity pro stanovení rovnice tlaku tání ledu Ih, rov. (1), a sublimačního tlaku rov. (6). V dokumentu jsou uvedeny rovnice tlaku tání rovněž jsou uvedeny trojné body pevných fází s příslušnou kapalnou fází T_i / K p_i / MPa.

Sublimační tlak, popsáný rov (6), platí v oboru 50 K až 273.16 K.: IAPWS, schválila platnost rovnice pro příslušnou mezsytosti. Rovnice (1) až (4) platí pro celý obor rovnovážného stavu sol-liq. Rovnice (5) a (6) jen pro obor rovnováhy solid-liquid nebo solid-vapor equilibrium.

Odhadnuté nepřesnosti tlaku tání a sublimace počítané z rov. (1) až (6) Jsou: rov. (1) led Ih – kapalina 2%, rov. (2) led III – kap. 3%, rov. (3) led V – kap. 3%, rov. (4) led VI – kap. 3%, rov. (5) led VII – kap. 7%, rov. (6) led Ih – plyn, rov (4) led VI – kap. 3%, rov.(5) led. VII – kap. 7%, rov. (6) led Ih – plyn (see Fig.2). Jsou založeny na relativně vysokých nepřesnostech experimentálně stanovených tlaků tání, derivace rovnice (2) až (5) mohou mít chyby ještě větší. Pro potřebu programátora jsou v Tab. 3 uvedeny hodnoty pro ověření programu.

Literatura:

- [1] IAPWS Release on the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use (September 1996). Available at <http://www.iapws.org>.

- [2] Wagner, W. and Pruß, A., The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **31** (2002) 387-535.
- [3] IAPWS Release on an *Equation of State for H₂O Ice Ih* (September 2006). Available at <http://www.iapws.org>.
- [4] Feistel, R. and Wagner, W., A New Equation of State for H₂O Ice Ih. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **35** (2006) 1021-1047.
- [5] Wagner, W., Feistel, R., and Riethmann, T., New Equations for the Melting Pressure and Sublimation Pressure of H₂O Ice Ih. To be submitted to *J. Phys. Chem. Ref. Data*.
- [6] Wagner, W., Saul, A., and Pruß, A., International Equations for the Pressure along the Melting Curve and the Sublimation Curve of Ordinary Water Substance. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **23** (1994) 515-527.
- [7] Feistel, R. and Wagner, W., Sublimation Pressure and Sublimation Enthalpy of H₂O Ice Ih between 0 and 273.16 K. *Geochim. Cosmochim. Acta* **71** (2007) 36-45.

5. Supplementary Release on Properties of Liquid Water at 0.1 MPa

Tento supplementary release poskytuje matematické vztahy pro různé termofyzikální vlastnosti kapalné vody, jako funkci absolutní teploty T za standardního tlaku $p_0 = 0.1$ MPa. Účelem těchto rovnic je poskytnout pohodlnou reprezentaci vlastností za těchto podmínek v mezích přesnosti složitějších IAPWS formulací, popisujících vlastnosti v podstatně širším oboru teplot a tlaků. Diskuse podkladů, vývoje a platnosti těchto korelací je v [1].

Zpracovány jsou vztahy pro termodynamické vlastnosti, viskozitu, tepelnou vodivost, statickou a dielektrickou konstantu. Dále je diskutováno použití těchto korelací u kapalné vody pro tlaky lišící se od 0.1 MPa. Poslední kapitola uvádí číselné hodnoty pro ověření vlastního výpočtového programu.

Korelace termodynamických vlastností v měrné Gibbsově energii g je navržena tak, aby co nejpřesněji aproximovala data počítané z vědecké formulace IAPWS-1995. [2, 3]. Výpočet dalších termodynamických funkcí je prováděn z rigorózních vztahů Tab. 2 a 3 s použitím součinitelů a exponentů uvedených v Tab.1.

Obor platnosti korelačních vztahů pro tlak $p_0 = 0.1$ MPa je v oboru teplot $253.15 \text{ K} \leq T \leq 383.15 \text{ K}$. Při některých teplotách rovnovážný stav látky se nalézá v pevném stavu (pod přibližně 273.15 K) a jako pára (přibližně nad 372.76 K); za těchto podmínek rovnice (1)-(3) popisují kapalnou fázi v metastabilním stavu. Nepřesnost rov. (1)-(3) ve stabilní oblasti je 0.0001 % pro měrný objem (nebo hustotu), 0.005 % pro rychlost zvuku a 0.1 % měrnou isobarickou tepelnou kapacitu. Pro metastabilní oblast není udána nepřesnost, avšak souhlas s dostupnými experimentálními daty pro podchlazenou oblast vody je 0.01 % pro hustotu, 1 % pro rychlost zvuku a 1 % pro isobarickou tepelnou kapacitu.

Matematická struktura rov. (1)-(3) koresponduje s rovnicí IAPWS-1995 která dává dva singulární body při 0.1 MPa, jeden pod bodem tuhnutí a jeden nad bodem varu. Předložená korelace má singulární body v $T = T_a$ a $T = T_b$. Tyto singulární body leží mimo obor platnosti předložené korelace a jejich hodnoty nemají fyzikální význam.

Vztahy pro výpočet termodynamických vlastností kapalné vody pro tlaky lišící se od 0.1 MPa jsou uvedeny v Tab. 4. Nepřesnosti vlastností jsou v podstatě identické s nepřesnostmi formulace IAPWS-1995 [2, 3] v oblasti tlaku od meze sytosti do tlaku 0.3 MPa.

Korelace viskozity vychází z hodnot počítaných z IAPWS Formulation 2008 for the Viscosity of Ordinary Water Substance [4, 5]. Korelační rovnice je dána vztahem

$$\mu / (10^{-6} \text{ Pa.s}) = \sum_{i=1}^4 a_i (T^*)^{b_i}, \text{ kde } T^* = T / (300 \text{ K}), \text{ součinitelé a exponenty jsou uvedeny}$$

v tab. 5.

Rovnice je platná v teplotním oboru $253.15 \text{ K} \leq T \leq 383.15 \text{ K}$. Mimo tento obor se nedoporučuje rovnici používat. Pro korelaci platí totéž, co pro termodynamické vlastnosti s ohledem na metastabilní oblast.

Nepřesnost rovnice je 1 % ve stabilní kapalně oblasti, v metastabilní oblasti podle souhlasu s experimentálními daty v podchlazené oblasti je do 5 %.

Rovnice reprodukuje hodnoty doporučené ISO při 20 °C (293.15 K) a standardním atmo-sferickým tlaku hodnoty uvedené v Ref. [6]; a současně souhlasí se všemi hodnotami pro teploty mezi 288.15 a 313.15 K při atmosferickém tlaku v Ref. [6] v mezích nepřesnosti 0.17 % při 293.15 K.

Korelace tepelné vodivosti je navržena tak, aby dávala hodnoty blízké hodnotám počítaným z doporučené interpolační rovnice pro obecné a vědecké použití, obsažené v Revised Release on the IAPS Formulation 1985 for the Thermal Conductivity of Ordinary Water Substance [7].

Interpolační rovnice tepelné vodivosti λ kapalné vody při tlaku 0.1 MPa je dána rovnicí $\lambda / (1 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}) = \sum_{i=1}^4 c_i (T^*)^{d_i}$, kde $T^* = T/(300 \text{ K})$, součinitelé a exponenty jsou uvedeny v Tabulce 6.

Rovnice je platná v teplotním oboru $273.15 \text{ K} \leq T \leq 383.15 \text{ K}$. Mimo tento obor se nedoporučuje rovnici používat. Pro korelaci platí totéž, co pro termodynamické vlastnosti s ohledem na metastabilní oblast.

Nepřesnost rovnice je totožná s tolerancemi danými v Tab. A 1 dokumentu [7], tj. mezi 1.5 % a 2 %.

Statická dielektrická konstanta: Po přijetí IAPWS formulace [8, 9], byla získána přesnější data pro kapalinu v oblasti nad 273.15 K [10] a pro podchlazenou kapalinu [11]. Zpracování těchto dat je diskutováno v [1].

Korelační rovnice statické dielektrické konstanty ε kapalné vody při tlaku 0.1 MPa je dána vztahem $\varepsilon = \sum_{i=1}^4 (T^*)^{f_i}$, kde $T^* = T/(300 \text{ K})$; součinitelé a exponenty jsou v Tab. 7.

Rovnice je platná v teplotním oboru $253.15 \text{ K} \leq T \leq 383.15 \text{ K}$. Mimo tento obor se nedoporučuje rovnici používat. Pro korelaci platí totéž, co pro termodynamické vlastnosti s ohledem na metastabilní oblast.

Nepřesnost rovnice je 0.01 pro stabilní oblast a přehřátou kapalinu nad 273.15 K, ale pro podchlazenou kapalinu je podstatně vyšší, cca 1 %.

Výpočty pro jiné tlaky: Formulace pro viskozitu, tepelnou vodivost a statickou dielektrickou konstantu (rov. (7)-(9)) mohou být užity pro kapalnou vodu pro kterýkoliv tlak od meze sytosti do 0.3 MPa bez ztráty přesnosti, tj. změna hodnoty vlastnosti vlivem změny tlaku je o jeden řád menší než nepřesnost samotné vlastnosti.

Opatření k podržení požadované přesnosti u některých termodynamických vlastností pro tlaky lišící se od 0.1 MPa je diskutován v sekci 2.4 a 2.5.

Hodnoty pro ověření výpočtového programu uživatele jsou uvedeny v Tab. 8.

Literatura

- [1] Hrubý, J., J. Pátek, J. Klomfar, M. Součková, and A. H. Harvey, J. Phys. Chem. Ref. Data, (in preparation).
- [2] International Association for the Properties of Water and Steam, Release on the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use, available at <http://www.iapws.org> (September 1996).
- [3] Wagner, W., and A. Pruß, J. Phys. Chem. Ref. Data **31** (2002) 387.
- [4] International Association for the Properties of Water and Steam, Release on the IAPWS Formulation 2008 for the Viscosity of Ordinary Water Substance, available at <http://www.iapws.org> (September 2008).
- [5] Huber, M. L., R. A. Perkins, A. Laesecke, D. G. Friend, J. V. Sengers, M. J. Assael, I. M. Metaxa, E. Vogel, R. Mareš, and K. Miyagawa, J. Phys. Chem. Ref. Data, (in press).
- [6] International Organization for Standardization (ISO), Viscosity of Water, ISO/TR Technical Report 3666: 1998(E), Geneva.
- [7] International Association for the Properties of Water and Steam, Revised Release on the IAPS Formulation 1985 for the Thermal Conductivity of Ordinary Water Substance, available at <http://www.iapws.org> (September 2008).
- [8] International Association for the Properties of Water and Steam, Release on the Static Dielectric Constant of Ordinary Water Substance for Temperatures from 238 K to 873 K and Pressures up to 1000 MPa, available at <http://www.iapws.org> (September 1997).

- [9] Fernández, D. P., A. R. H. Goodwin, E. W. Lemmon, J. M. H. Levelt Sengers, and R. C. Williams, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **26** (1997) 1125.
- [10] Hamelin, J., J. B. Mehl, and M. R. Moldover, *Int. J. Thermophys.* **19** (1998) 1359.
- [11] Bertolini, D., M. Cassettari, and G. Salvetti, *J. Chem. Phys.* **76** (1982) 3285.

6. Revised Advisory Note No. 3 Thermodynamic Derivatives from IAPWS Formulations

Popsaná metoda je užitečná pro stanovení derivací prvního a druhého řádu funkcí dvou nezávisle proměnných. Je doporučena pro určení derivací z vědecké formulace IAPWS-1995 [1, 2], z průmyslové formulace IAPWS-IF97 [3, 4]. Revize, resp. doplnění se vztahuje na derivace z "The IAPS Formulation 1984 for the Thermodynamic Properties of Heavy Water Substance" (Revision 2005) [5], "The IAPWS Equation of State for H₂O Ice Ih" (2006) [6, 7], a "The IAPWS Formulation 2008 for the Thermodynamic Properties of Seawater" [8, 9]. Další detaily jsou uvedeny v článku H.-J. Kretzschmar *et al.* [10].

Parciální derivace termodynamických vlastností vody a páry jsou užívány k různým účelům. Potřebné jsou k řešení systému rovnic energetických cyklů, kotlů, nebo výpočtu turbín a zvláště k modelování nestacionárních procesů. U základních rovnic IAPWS-1995 [1, 2] nebo (IAPWS-IF97) [3, 4], všechny parciální derivace prvního a druhého řádu různých vlastností mohou být stanoveny s vysokou přesností. Totéž platí i pro rovnici těžké vody ((Revize 2005) [5], stavovou rovnici ledu Ih (2006) [6, 7] a rovnici mořské vody [8, 9].

V práci jsou uvedeny: Obecný postup pro stanovení parciálních derivací **pro fundamentální rovnice v Helmholtzově volné energii**, IAPWS-95, IAPWS-IF97 oblast 3, pro IAPWS formulaci 1984 D₂O; **parciální derivace ze základní rovnice v Gibbsově volné energii**. **Obecný postup pro rovnice v Gibbsově volné energii, postup stanovení z rovnic Gibbsovy volné energie**, určení parciálních derivací pro průmyslovou formulaci IAPWS-IF97 – oblasti 1, 2, 2meta, a 5, z IAPWS formulace 2006 pro led Ih, a z formulace pro mořskou vodu (2008) V dodatku je určení **parciálních derivací** $(\partial u/\partial p)_v$ rovnice Helmholtzovy volné energie a $(\partial u/\partial p)_v$ rovnice Gibbsovy volné energie.

Literatura

- [1] International Association for the Properties of Water and Steam, Release on the IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use. IAPWS Secretariat, 1995, available from: <http://www.iapws.org>.
- [2] Wagner, W., Pruß, A.: The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **31** (2002) 387-535.
- [3] International Association for the Properties of Water and Steam, *Release on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam*. IAPWS Secretariat, 1997, available from: <http://www.iapws.org>.
- [4] Wagner, W., Cooper, J. R., Dittmann, A., Kijima, J., Kretzschmar, H.-J., Kruse, A., Mareš, R., Oguchi, K., Sato, H., Stöcker, I., Šifner, O., Tanishita, I., Trübenbach, J., Willkommen, Th.: The IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam. *J. Eng. Gas Turbines Power*, **122** (2000) 150-182.
- [5] International Association for the Properties of Water and Steam, *Revised Release on the IAPS Formulation 1984 for the Thermodynamic Properties of Heavy Water (Revision 2005)*. IAPWS Secretariat, 2005, available from: <http://www.iapws.org>.
- [6] International Association for the Properties of Water and Steam, *Release on an Equation of State of H₂O Ice Ih*. IAPWS Secretariat, 2006, available from: <http://www.iapws.org>.
- [7] Feistel, R., Wagner, W.: A New Equation of State of H₂O Ice Ih. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **35** (2006) 1021-1047.
- [8] International Association for the Properties of Water and Steam, *Release on the IAPWS Formulation for the Thermodynamic Properties of Seawater*. IAPWS Secretariat, 2008, (in preparation).
- [9] Feistel, R.: A Gibbs function for the Seawater Thermodynamics for -6 °C to 80 °C and Salinity up to 1 20 g kg⁻¹: *J. Deep-Sea Res. I*, (submitted).
- [10] Kretzschmar, H.-J., Stöcker, I., Wagner, W., Fischer, S., Feistel, R.: A Procedure for Calculating any Thermodynamic Derivative from Equations of State, To be submitted to the *J. Eng. Gas Turbines Power*.

7. Revised Advisory Note No.2 Roles of Various IAPWS Documents Concerning the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance.

Tato advisory note vysvětluje účel a použití jednotlivých dokumentů IAPWS. Je aktualizována podle potřeby, poslední aktualizace byla provedena v září 2008.

Vysvětluje název "ordinary water substance", který označuje kteroukoli fázi vody nebo fáze v rovnováze v normálním přírodním isotopickém složení vodíku a kyslíku.

Specifikuje IAPWS documenty obsahující informace o termodynamických vlastnostech obyčejné vody: IAPWS Formulation 1995 (IAPWS-95), Stavovou rovnici ledu Ih, průmyslovou formu-laci IAPWS-IF97, vlastnosti na sublimační křivce a křivce tání, Advisory Note No.1- nepřesnosti entalpie, význam a použití jednotlivých „backward equations“, doplňkový dokument vlastnosti kapalné vody při tlaku 0.1 MPa, vlastnosti na mezi sytosti, metodu Taylor Series Expansion (TTSE), definice kritického bodu H₂O a D₂O, a směrnici pro používání základních konstant pro vodu.

8. Guideline Fundamental Constants

Tato směrnice (Guideline) je revidována každoročně. Případné změny jsou uvedeny v revizním výtisku z let 2002, 2005 a nyní 2008. Obsah zahrnuje Základní fyzikální konstanty a teplotní stupnice, molekulové vlastnosti (isotopické složení, relativní molekulovou hmotnost H₂O a D₂O, dipólový moment a polarizovatelnost), referenční termofyzikální veličiny (kritické konstanty, trojný bod, max. hustotu a referenční viskozitu vody).

Základní fyzikální konstanty: Poslední stanovení provedené a zveřejněné CODATA¹ je uveřejněno v J. Phys. Chem, Ref. Data **37** (2008)1187-1284.

Teplotní stupnice schválená a přijatá CIPM je International Temperature Scale of 1990 (ITS-90). Rovněž jsou uvedeny vztahy pro konversi z dřívějších teplotních stupnic IPTS-1968 a IPTS-48.

Isotopické složení obyčejné vody je vídeňský standard střední oceánové vody (VSMOW).

Relativní molekulová hmotnost obyčejné vody je 18.015 268, u těžké vody 20,027508.

Dipólový moment H₂O izolované vodní molekuly v základním vibračním stavu je 1,85498 D (Debye), v SI jednotkách 6.1875(3)x 10⁻³⁰ C.m.

Pro **střední elektr. polarizovatelnost** byla přijata hodnota 1.457(3)x10⁻³⁰m³-. Pro střední totální polarizovatelnost (suma elektronických a vibračních efektů) byla adoptována hodnota 1,494(7)x10⁻³⁰ m³.

Referenční **kritické konstanty** jsou;

	H2O	D2O
Tc	647.096 K	643.847 K
pc	22.064 MPa	21.671 MPa
pc	322 kg/m ³	356 kg/m ³
Trojný bod	273.16 K	611.657±0.010 Pa

Maximální hustota vody při atmosferickém tlaku (0.101 325 Pa) je mírně pod 4 °C. Podle Komitétu pro hmotnosti a relativní veličiny (CCM) Mezinárodního komitétu pro váhy a míry

¹ CODATA: Committee on Data for Science and Technology with the mission to strengthen international science for the benefit of society by promoting improved scientific and technical data management and use.

See: www.codata.org. (21st International CODATA Conference: Scientific Information for Society - from Today to the Future. Ukraine, Kiev, 5 - 8 October, 2008).

(CIPM) pro isotropické složení vody VSMOW podle standardní tabulky pro teploty 0 až 40 °C je to $(999.974\ 95 \pm 0.000\ 84)$ kg/m³.

Referenční **viskozita kapalné vody při atmosferickém tlaku** (0,101 325 Pa) a 293,15 K, jako důležitý kalibrační standard, podle ISO je 1,0016 mPa.s s nejistotou 0,17 %.

V práci jsou odvolávky na příslušnou literaturu.

9. Technical Guidance Document: Procedures for the Measurement of Carryover of Boiler Water into Steam

Dokument se zabývá přenosem rozpuštěných a suspendovaných pevných látek v kotelní vodě do páry. Definuje mechanický přenos, daný strháváním kapek do páry, parní přenos, daný těkavostí látek a celkový přenos daný součtem předešlých. Parní přenos začíná být významný asi od tlaku 16 MPa. Pod tímto tlakem jde téměř vždy o mechanický přenos s výjimkou několika látek, jako SiO₂, oxidy a hydroxidy Cu, Al sloučeniny a kyselinu boritou, které vykazují parní přenos i za relativně nízkých tlaků. Pro kotle s tlakem pod 18 MPa, parní přenos je typicky menší než 0,1 %.

Znalost přenosu je významná jednak pro operátory kotelních jednotek s ohledem na vznik koroze, zanášení přehříváků, mezipřehříváků a parních turbín, jednak pro výrobce kotlů s ohledem na výkon kotlů související s účinností komponentů pro separaci voda-pára. Vzhledem k úzké specializaci technické směrnice, nebudeme se jí podrobněji zabývat, uvedeme pouze její rozčlenění do kapitol: Mechanický přenos vs. celkový přenos; Popis metody; Použití sodíku k určení celkového přenosu; Vzorkování; Analytické metody; Testovací postup; Literatura a Tabulky a obrázky.