

Metody przedstawienia składu chemicznego wód podziemnych

Jednostki stosowane w obliczeniach hydrogeochemicznych

Stężenie substancji rozpuszczonych w próbce wody może być przedstawiane w różnych jednostkach, zależnie od celu prezentacji a także przyjętej tradycji. Poniżej wymieniono kilka najczęściej stosowanych jednostek:

mg/dm ³	miligramy na litr próbki,
ppm	części na milion = mg/kg próbki,
ppb	części na miliard = µg/kg próbki,
mmol/dm ³	milimole na litr próbki = milimolarność,
mval/dm ³	miligramorównoważnik na litr próbki,
M	molalność = mole na kg H ₂ O,
mM	milimole na kg H ₂ O,
N	normalność = gramorównoważnik na litr
PEW	przewodność elektrolityczna właściwa w µS/cm; PEW = 100×(aniony lub kationy) w mval/dm ³
pH	- log [H ⁺]

Przy obliczeniach hydrogeochemicznych powszechnie przyjęto wyrażać zawartości jonów **w formie równoważnikowej**, a więc w miligramorównoważnikach (mval/dm³). Substancje chemiczne i jony reagują ze sobą nie w równych proporcjach wagowych, lecz w proporcjach równoważnikowych zależnych od masy atomowej lub jonowej i od wartościowości. Oprócz bilansu w miligramorównoważnikach oblicza się także udział procentowy poszczególnych anionów i kationów (%mval), co umożliwia klasyfikację wód według wybranej **klasyfikacji hydrogeochemicznej** (Macioszczyk, 1987). Przy obliczaniu %mval rozrzuca się również błąd bilansu przyjmując za 100% niezależnie ΣrK oraz ΣrA.

Przeliczenie stężenia jonu Ca⁺² z przykładu 1:

- ◆ Zawartość równoważnikową rCa⁺² w mval/dm³ otrzymuje się dzieląc stężenie analityczne w mg/dm³ przez masę molową jonu i mnożąc przez jego wartościowość:

$$rCa^{+2} = \frac{101.0}{40.078} \cdot 2 = 5.040 \text{ mval/dm}^3$$

Masy molowe można uzyskać z normy PN-89/C-04638/02 lub z dowolnych tablic chemicznych.

◆ Zawartość procentową (%rCa⁺²) obliczamy:

$$\%rCa^{+2} = \frac{rCa^{+2}}{\Sigma rK} 100\% = \frac{5.040}{7.754} 100\% = 64.999 \text{ \%mval}$$

Przeliczenie jednostek na mmol/dm³

Oficjalną jednostką stężenia w układzie SI są mole/m³, liczbowo równe mmolom/dm³ (częściej stosowane w obliczeniach).

$$\text{mmol/dm}^3 = \frac{\text{mg/dm}^3}{\text{masa cząsteczkowa w mg}}$$

$$\text{mmol/dm}^3 = \frac{\text{ppm} \times (\text{gęstość roztworu } \rho \text{ w kg/dm}^3)}{\text{masa cząsteczkowa w mg}}$$

$$\text{mmol/dm}^3 = \frac{\text{mval/dm}^3}{\text{ładunek jonu}}$$

$$\text{mmol/dm}^3 = \frac{\text{mM} \times \rho \times (\text{waga roztworu} - \text{waga substancji rozpuszczonej})}{\text{waga roztworu}}$$

$$\text{dla wód słodkich } \frac{\rho \times (\text{waga roztworu} - \text{waga substancji rozpuszczonej})}{\text{waga roztworu}} \text{ praktycznie } \approx 1$$

$$\text{czyli } \text{mmol/dm}^3 \approx \text{mM}$$
