

5. Kemijski sastav vode u prirodi i prikazivanje sastava

Sadržaj:

- 5.1. Prikazivanje sastava vode
- 5.2. Kemijski sastav vode u prirodi
- 5.3. Podjela vode prema količini tvari otopljene
- 5.4. Klasifikacija po Palmeru
- 5.5. Kiselost - aktivitet vodikovoga iona (pH)
- 5.6. Redoks potencijal – Eh
- 5.7. Otopljeni plinovi
- 5.8. Alkalnost
- 5.9. Glavni kationi i anioni
- 5.10. Sporedni sastojci i sastojci u tragovima
- 5.11. Provjera točnosti kemijske analize

5.1. Prikazivanje sastava vode

- Kemijski sastav vode može se iskazati:
 - brojčano (u tablicama)
 - grafički, (u dijagramima)
 - sastav se najčešće iskazuje koncentracijama ili masenim omjerima
 - Jedinice za iskazivanje sastava jesu:
 - mg/L ili mmol ekv/L
 - u udjelima ekvivalenata (mmol ekv %)

- Izražavanje rezultata analize u **mmol ekv** omogućuje uvid u točnost analize
- **zbroj ekvivalenata kationa mora biti jednak zbroju ekvivalenata aniona**
- za sastojke u tragovima - ppm (pars per milion) - (dio na milijun dijelova).
- To je jedinica za maseni omjer ali u **vrlo razrijeđenim otopinama** kakve su vode kojima se hidrogeolozi uglavnom bave, može se bez velike pogreške poistovjetiti jedinica **ppm s mg/L**, iako su to dvije različite jedinice.
- Jedinica (ppm) jest omjer, a jedinica (mg/L) masena koncentracija.

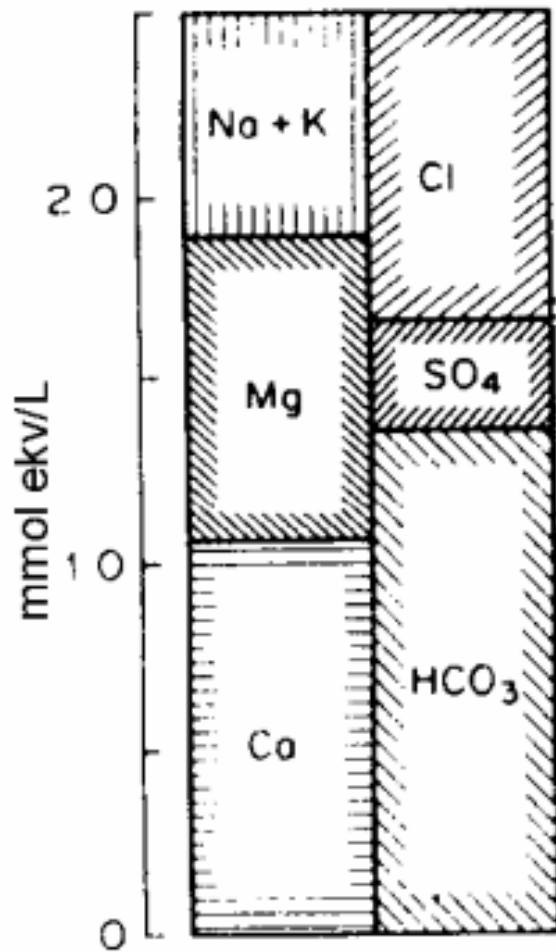
- jedinica **ppb** (dio na milijardu dijelova - maseni omjer) u većini se slučajeva može aproksimirati koncentracijskom jedinicom mg/m^3 .
- rezultati kemijske analize prikazuju se količinom (ili masom) analiziranih iona (npr. Na^+ , Ca^{2+} , Cl^-)
- Za **kompleksne ione** analizirani sadržaj često se izražava kao sadržaj elementa centralnog atoma

- Npr.
- u analizi nitrata sadržaj se izražava kao mg/L NO_3^- kao N,
- što znači da je sadržaj nitrata izražen kao sadržaj dušika,
- koncentracija od 10 mg NO_3^- -N/ L (izražena kao N) ekvivalentna je 44 mg NO_3^- (izražena kao NO_3^-). ,
koncentracija od 10 mg NO_3^- -N/ L (izražena kao N) ekvivalentna je 44 mg NO_3^- (izražena kao NO_3^-)
- faktor od 4,4 jest odnos relativne molekulske mase nitratnog iona (=64) i relativne molekulske mase elementa dušika (=14).
- PO_4^{3-} , koji se često izražava u obliku P (PO_4^{3-} - P), a također i za SiO_2 koji se može izraziti kao Si

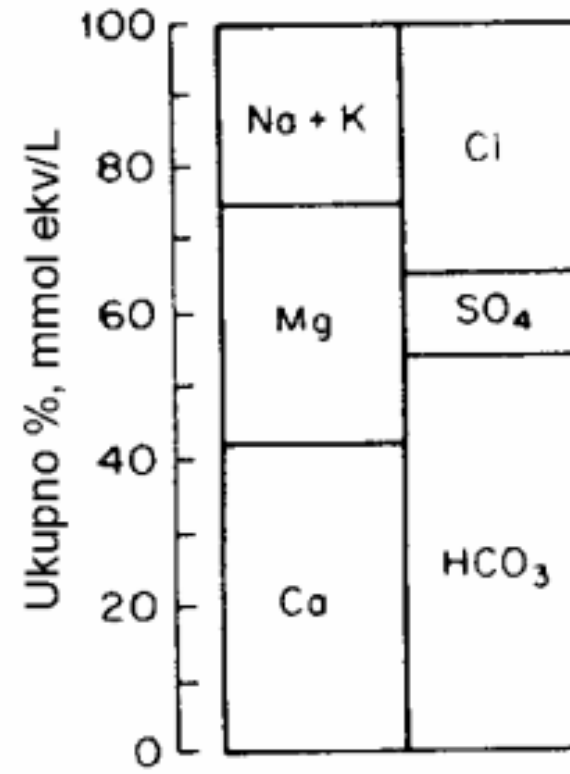
Tablično prikazivanje sastava vode
 -(samo kationi) (Levačić, 1997)

sastojci	γ / (mg/L)	C / (mmolekv/L)	ekv.%
Na ⁺	900,1	39,15	79,3
K ⁺	30,5	0,78	1,6
Li ⁺	0,3	0,04	0,1
Mg ²⁺	44,1	3,63	7,42
Ca ²⁺	113,1	5,64	11,4
Sr ²⁺	0,1	-	-
Fe ²⁺	0,1	-	-
Mn ²⁺	0,4	-	-
Al ³⁺	0,5	0,1	-

Grafičko prikazivanje sastava stupičastim dijagramom (Freeze)

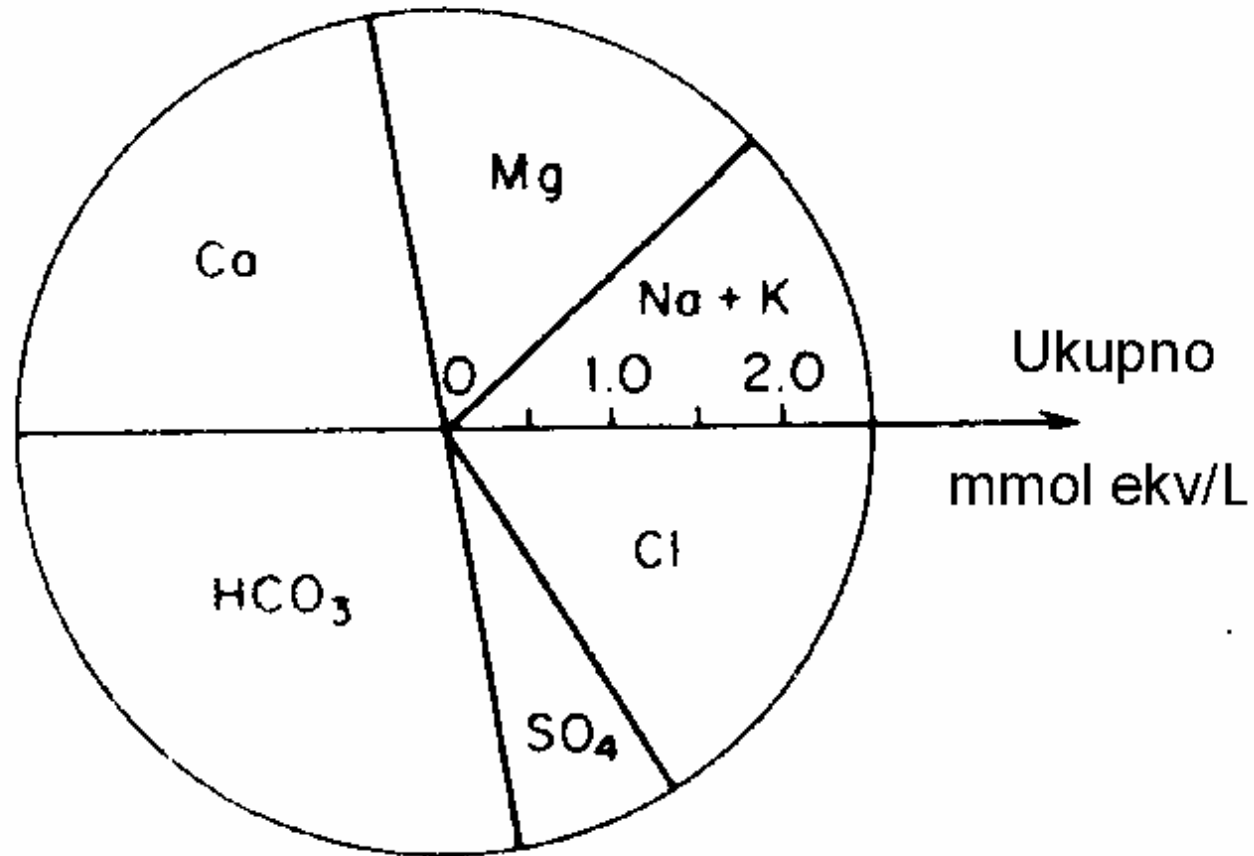


(a)



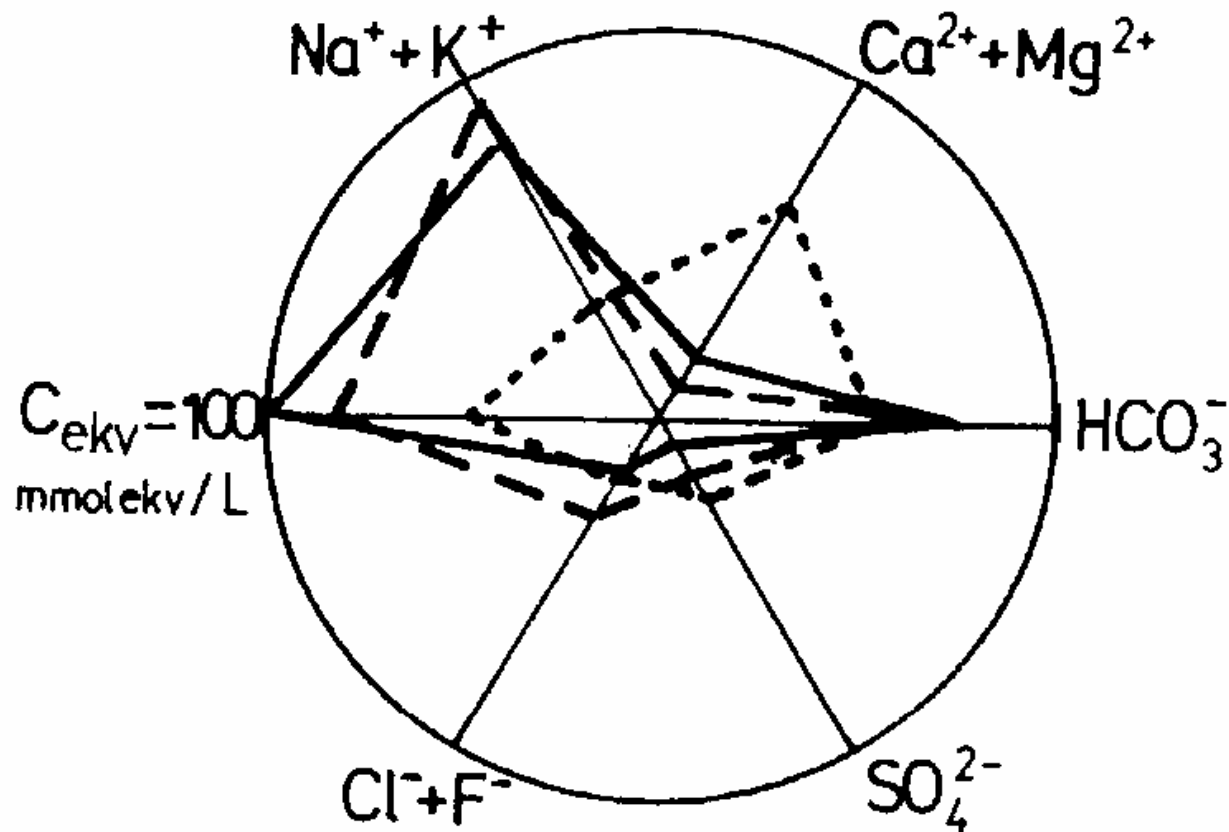
(b)

Slika kružnoga dijagrama (Freeze)



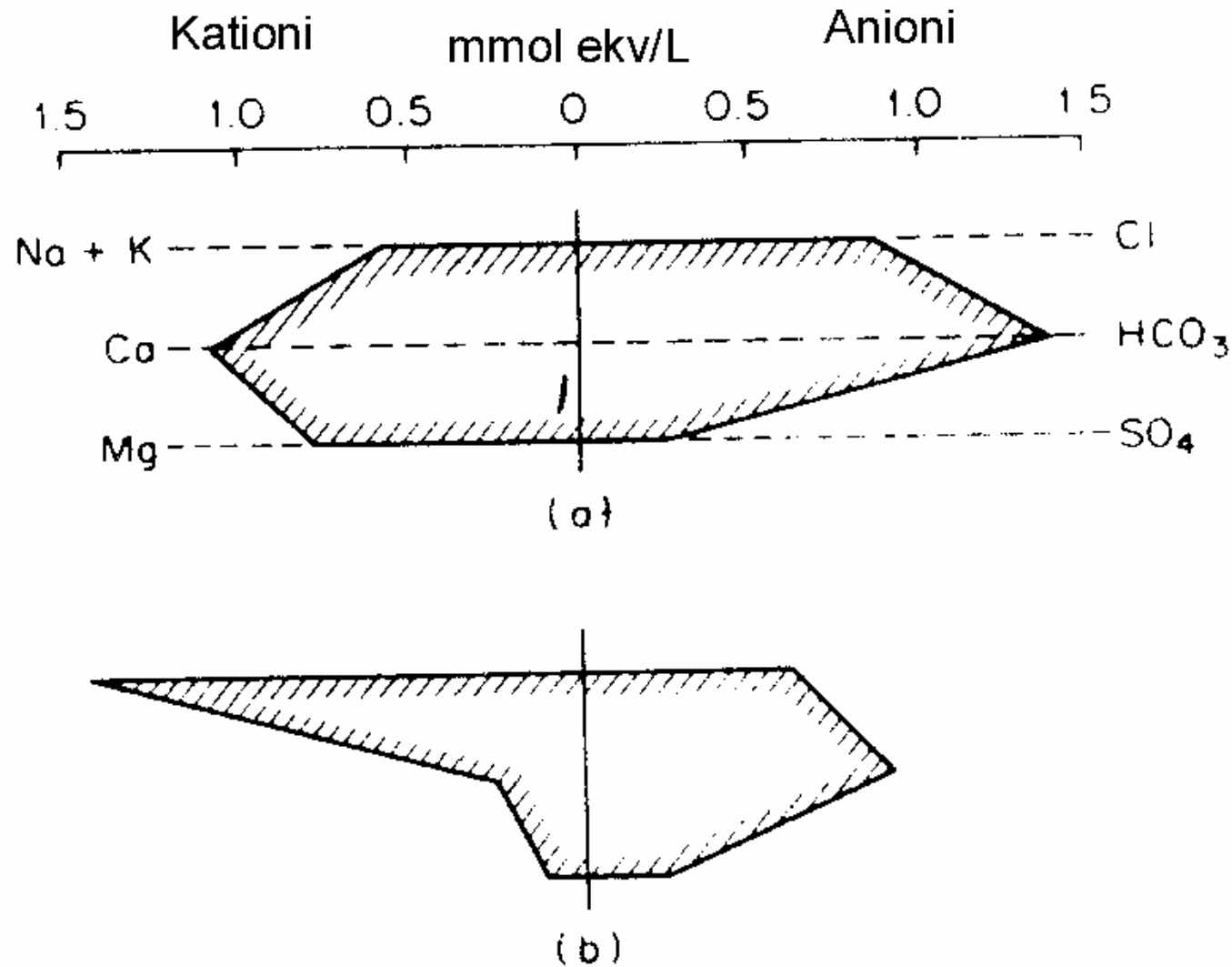
- Sastav vode izražava se nanošenjem rezultata analize na okrugli graf, (engl. - pie diagram)
- na radijusu se označava ukupna količina otopljenih ekvivalenata
- isječci polukruga označavaju postotni udio ekvivalenata nekog iona

Vektorski dijagram sastava vode; — Jamnica; --- Lipik; Varaždinske Toplice (Levačić, 1997)



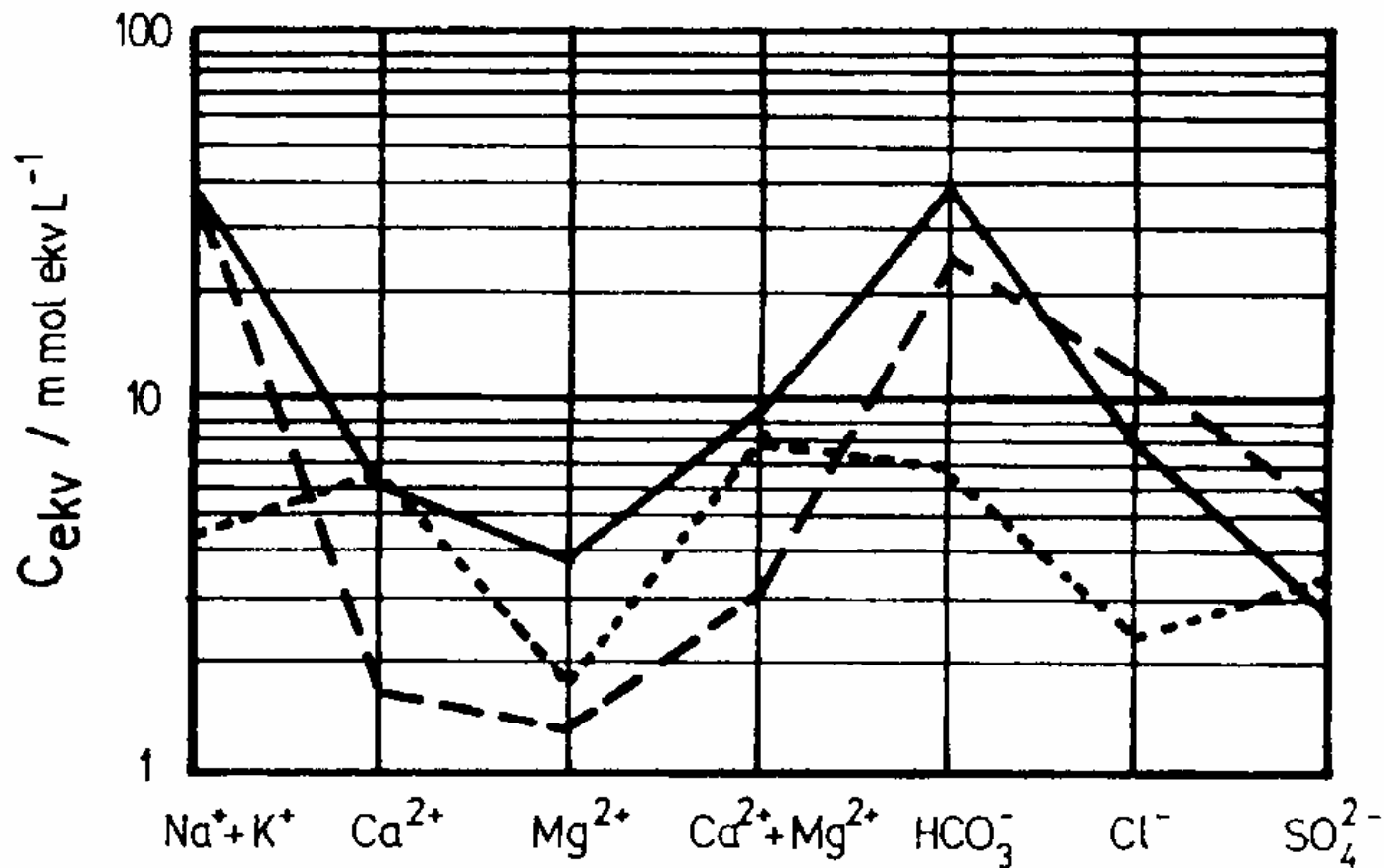
- kružnica predstavlja 100 postotni udio svih iona
- broj vektora ovisi o broju iona ili grupa iona
- dužina radijus vektora razmjerna je postotnom udjelu pojedinih ionskih vrsta ili ionskih grupa
- spajanjem vrhova vektora nastaje geometrijski oblik (nepravilan mnogokutnik) karakterističan za određeni sastav vode
- taj način olakšava vizualno uspoređivanje kemijskog sastava različitih uzoraka vode

Stiffovi dijagrami (Freeze)



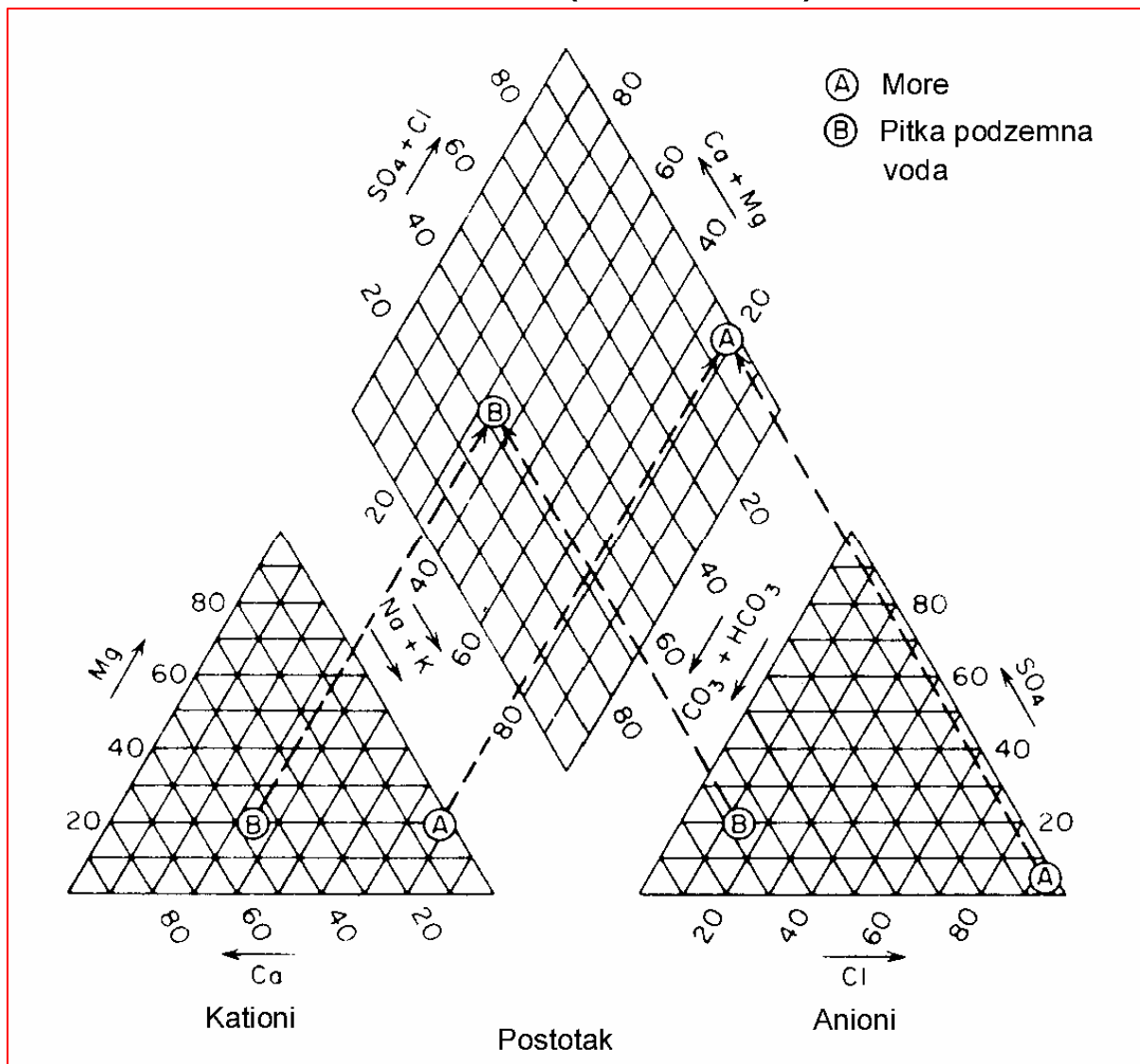
- Iz Stiffovih dijagrama zaključuje se (prema obliku dijagrama) o kemijskom sastavu i tipu vode
- Dijagram se sastoji od tri paralelna vodoravna pravca
- Na **lijevu** stranu pravaca nanosi se broj mmol ekv/L **kationa**, i to na gornji pravac zbroj K^+ i Na^+ , na srednji pravac Ca^{2+} , a na donji Mg^{2+} .
- Na **desnu** stranu pravaca nanose se mmol ekv/L **aniona**, i to na gornji pravac kloridi, na srednji pravac hidrogenkarbonati a na donji pravac sulfati

Schoellerov dijagram; — Jamnica; ---Lipik;
.... Varaždinske Toplice (Levačić, 1997)



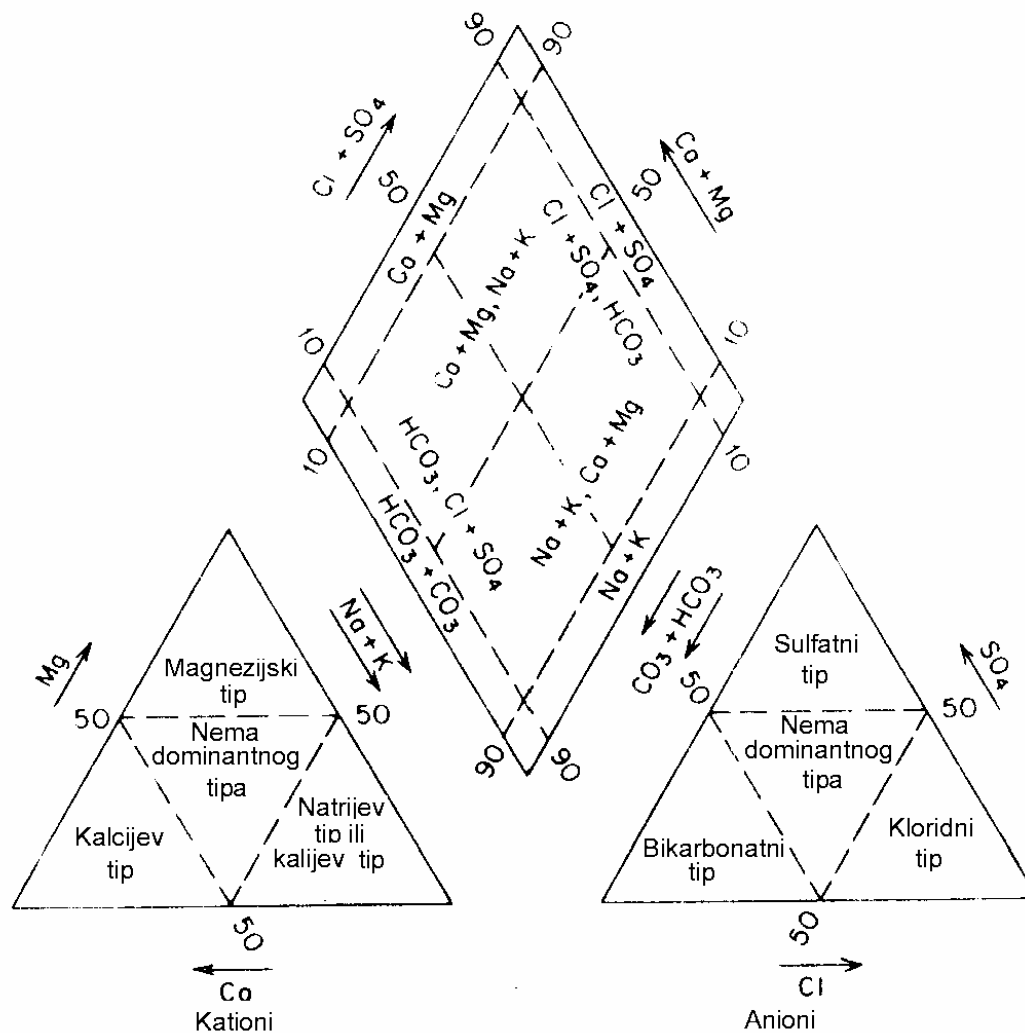
- Schoellerov polulogaritamski dijagram.
- Na apscisu se nanose kemijske komponente prisutne u vodi
- na ordinatu se u logaritamskom mjerilu nanose rezultati kemijske analize u mmol ekv/L.
- Schoellerov dijagram prikazuje prethodna slika

Piperov dijagram i smještaj točaka koje prikazuju postotni udio aniona i kationa te njihov položaj u rombu (Freeze)

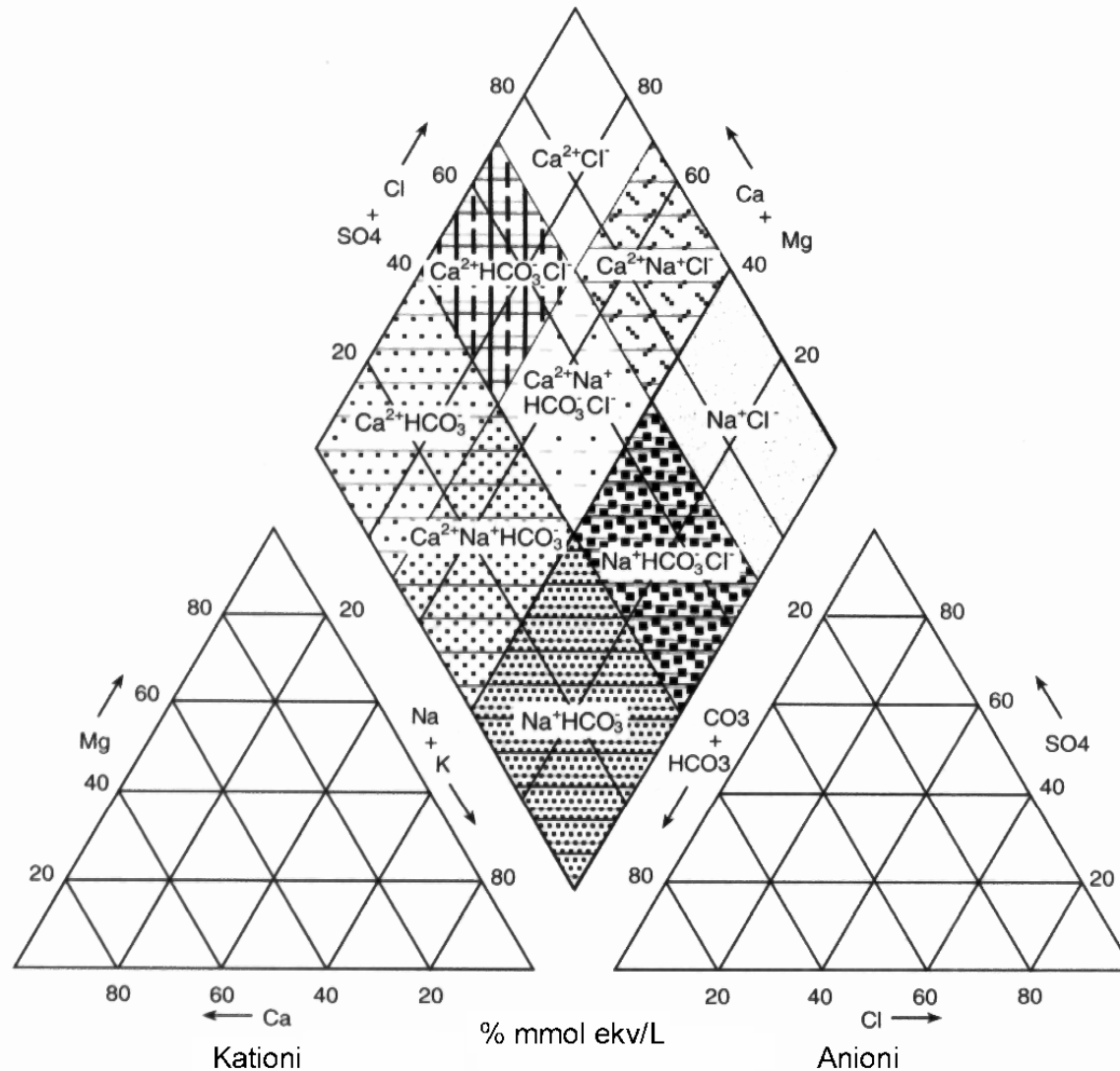


- U hidrogeologiji se za prikazivanje sastava vode najviše koristi Piperov trojni dijagram
- U lijevi trokut nanose se postotni udjeli ekvivalenata najvažnijih kationa (Ca^{2+} , Mg^{2+} i $\text{Na}^+ + \text{K}^+$),
- u desni postotni udjeli ekvivalenata najvažnijih aniona (Cl^- , SO_4^{2-} i $\text{HCO}_3^- + \text{CO}_3^{2-}$).
- Između njih smješten je romb, na čijim su suprotnim stranicama nanesene sume postotnih udjela ekvivalenata grupe kationa i aniona.
- Sastav nekog uzorka vode određuju dvije točke. Jedna u trokutu kationa i druga u trokutu aniona. Te točke određuju kationski i anionski facies vode.
- Sjecište dvaju pravaca u rombu označuje ukupan sastav vode.

Prikaz vodnih faciesa u Piperovu dijagramu (Freeze)

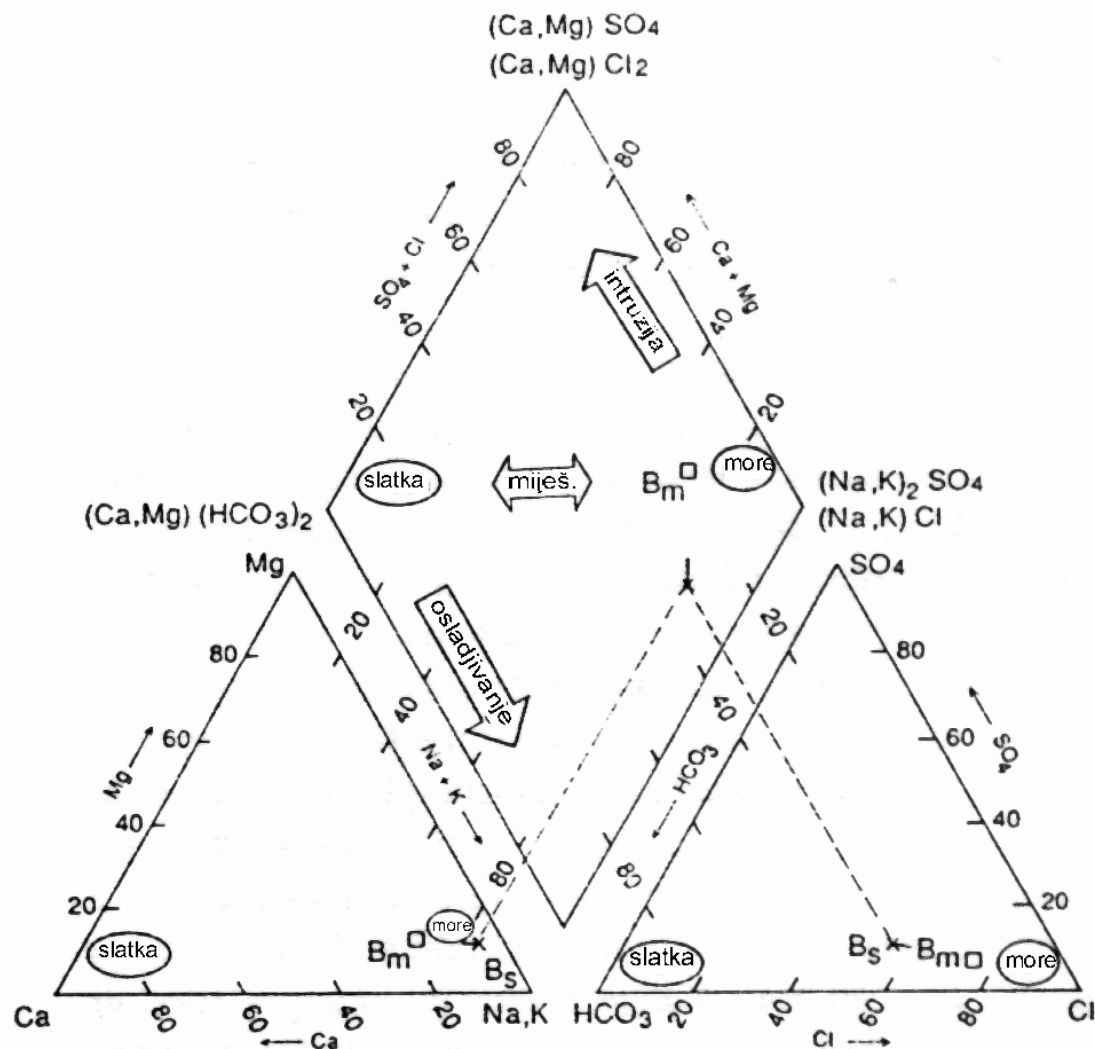


Prikaz vodnih faciesa u rombu Piperova diagrama (Deutsch. 1997)



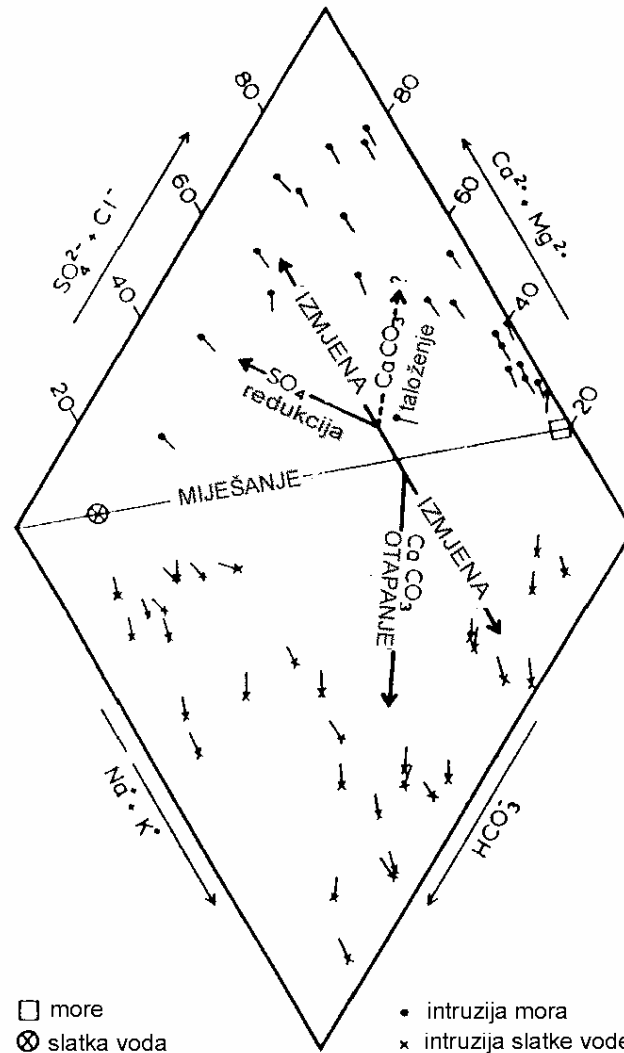
- Prethodna slika prikazuje razmještaj vodnih faciesa u rombu Piperova dijagrama.
- Položaj točaka u trokutima ili položaj zajedničke točke u rombu određuje vodni facies kojemu pripada analizirana voda.
- Osim brzog određivanja vodnoga faciesa velika je prednost Piperovih dijagrama to što nam omogućuju brz i jasan uvid u procese koji su se zbivali u vodonosniku.

Miješanje morske i slatke vode te efekt ionske izmjene prikazan na Piperovu dijagramu (Appelo i Postma, 1994)



- na Piperovu su dijagramu nanese točke s prosječnim sastavom morske vode i prosječnim sastavom slatke vode
- nanese je i točka koja odgovara sastavu mješavine morske i slatke vode nastalom običnim miješanjem - ta točka (Bm) u rombu pada na spojnicu točaka koja spaja sastave slatke i morske vode.
- točka Bs predstavlja također sastav mješavine morske i slatke vode, ali je pri tom miješanju došlo i do ionske izmjene. Ta točka više ne leži na spojnici točaka sastava slatke i morske vode. Stoga se i sastav te vode "pomaknuo" sa spojnice. Zapravo točka Bs predstavlja sastav NaHCO_3 tipa vode
- zbog miješanja slane vode sa slatkom ona ima više hidrogenkarbonata i manje klorida
- zbog ionske izmjene Na^+ s Ca^{2+} , Ca^{2+} se veže uz ionski izmjenjivač, a Na^+ ulazi u otopinu, pa ga u toj miješanoj vodi ima više nego što bi odgovaralo običnom miješanju. To upućuje na dodatne reakcije koje su se zbivale prilikom miješanja

Razni kemijski procesi koji se zbivaju u vodi vide se na Piperovu dijagramu (Appelo i Postma, 1994)



5.2. Kemijski sastav vode u prirodi

- Voda je otopina u kojoj se nalaze otopljeni plinovi, krute tvari i tekućine
- Otopljene tvari možemo podijeliti na pet skupina:
 1. Otopljeni plinovi
 2. Otopljeni glavni ioni
 - a) kationi
 - b) anioni
 3. Otopljene biogene tvari
 4. Otopljeni mikroelementi
 5. Otopljene organske tvari

Otopljeni plinovi

- otopljeni plinovi jesu O_2 , N_2 , CO_2 , SO_2 , NO_x , ali u posebnim uvjetima javljaju se i H_2 , CH_4 , H_2S , He, Ar,
- Plinovi se mogu otapati u kišnim kapima u atmosferi u površinskim vodama i u podzemnoj vodi.
- Pri stvaranju kiše otapaju se u kišnim kapima atmosferski plinovi (N_2 , O_2 , CO_2 , He, Ar)
- i plinovi koji se u atmosferi nalaze kao produkti raznih tehnogenih procesa i prirodnih procesa (CO_2 , SO_2 , CH_4 , H_2S , NO_x , NH_3 i dr.)
- U tlu raspadom organske materije nastaju plinovi CO_2 , H_2 , CH_4 , H_2S , NH_3 , a denitrifikacijom nastaje N_2 .
- Koncentracija otopljenih plinova u vodi se mijenja.

- Sastav i koncentracija otopljenih krutih tvari ovisi o petrografskom sastavu vodonosnika i svojstvima vode koja je u taj vodonosnik ušla (kemijski sastav, pa s tim u vezi Eh i pH). Ti će parametri odrediti vrstu i doseg reakcija između vode i vodonosnika
- prikazuje najvažnije kemijske procese u otapanju i kemijske procese koji ograničuju koncentraciju otopljenih tvari u podzemnoj vodi

Otopljeni neki **mikroelementi** u
vodi i maksimalno dopuštene koncentracije tih elemenata u
pitkoj vodi (Levačić, 1997)

Element	Rijeke / (mg/kg)	Oceani / (mg/kg)	MDK / (mg/L)
F	100	1300	1,0
B	20	4450	1,0
Al	50	1	0,2
Cr(VI)	1	0,2	0,05
Mn	8	0,2	0,05
Fe	40	2	0,3
Ni	2	0,5	0,05
Cu	7	0,5	0,1
Zn	30	2	5,0

- **Mikroelementi** su otopljene krute tvari kojih ima u vrlo malim količinama. Tu se u prvom redu misli na otopljene katione teških metala, ali toj grupi pripadaju i druge tvari prisutne u vrlo malim količinama.
- **Biogene tvari** nastaju zbog metaboličkih aktivnosti organizama. Kao produkti razgradnje nastaju CO_2 , H_2O , zatim dušični spojevi od amonijaka do nitrata (ovisno o Eh vode) te fosforni i sumporni spojevi, tj. spojevi svih elemenata koji izgrađuju biljni i životinjski svijet.
- **Organske tvari** u vodi potječu od produkata raspada metabolizma živih organizama, produkata naftnih onečišćenja te tehnogenih i komunalnih onečišćenja

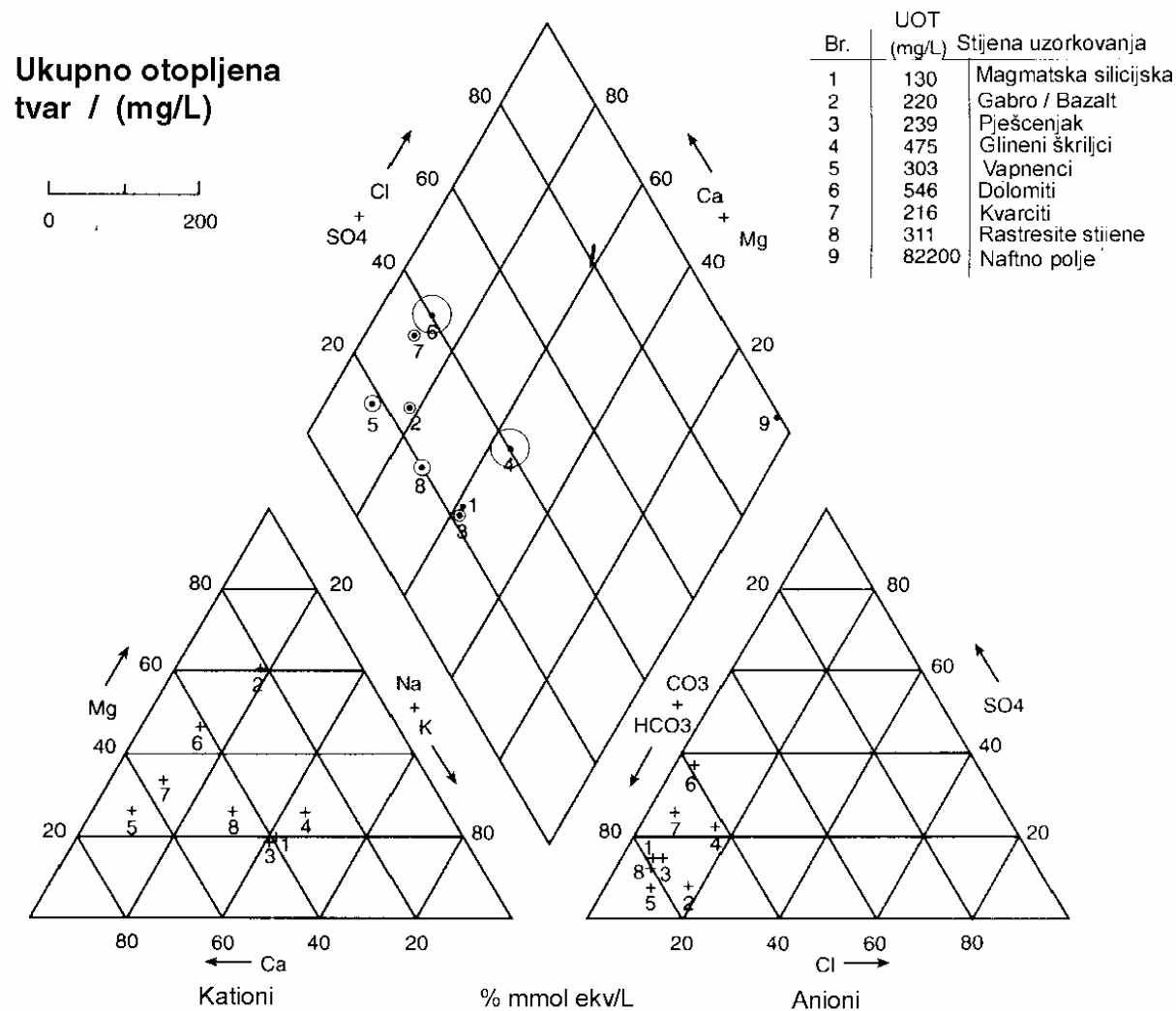
- Čimbenici koji određuju kemijski karakter podzemne vode su :
- petrografski sastav tla i vodonosnika,
- njihova propusnost i
- topografija hidrološkoga sustava.
- Treba uzeti u obzir i
- granulaciju krute faze,
- mogućnost ionske izmjene,
- selektivnosti izmjene (kromatografski efekt),
- brzinu strujanja vode,
- poroznost i propusnost,
- mogućnost miješanja s vodama drugačijega faciesa itd.

Pri tome voda mijenja sastav, pa se prema kemijskom sastavu i količini otopljene tvari može razvrstati u određene grupe, ovisno o kriteriju razvrstavanja.

U hidrogeologiji se najviše rabi podjela na hidrogeokemijske faciese.

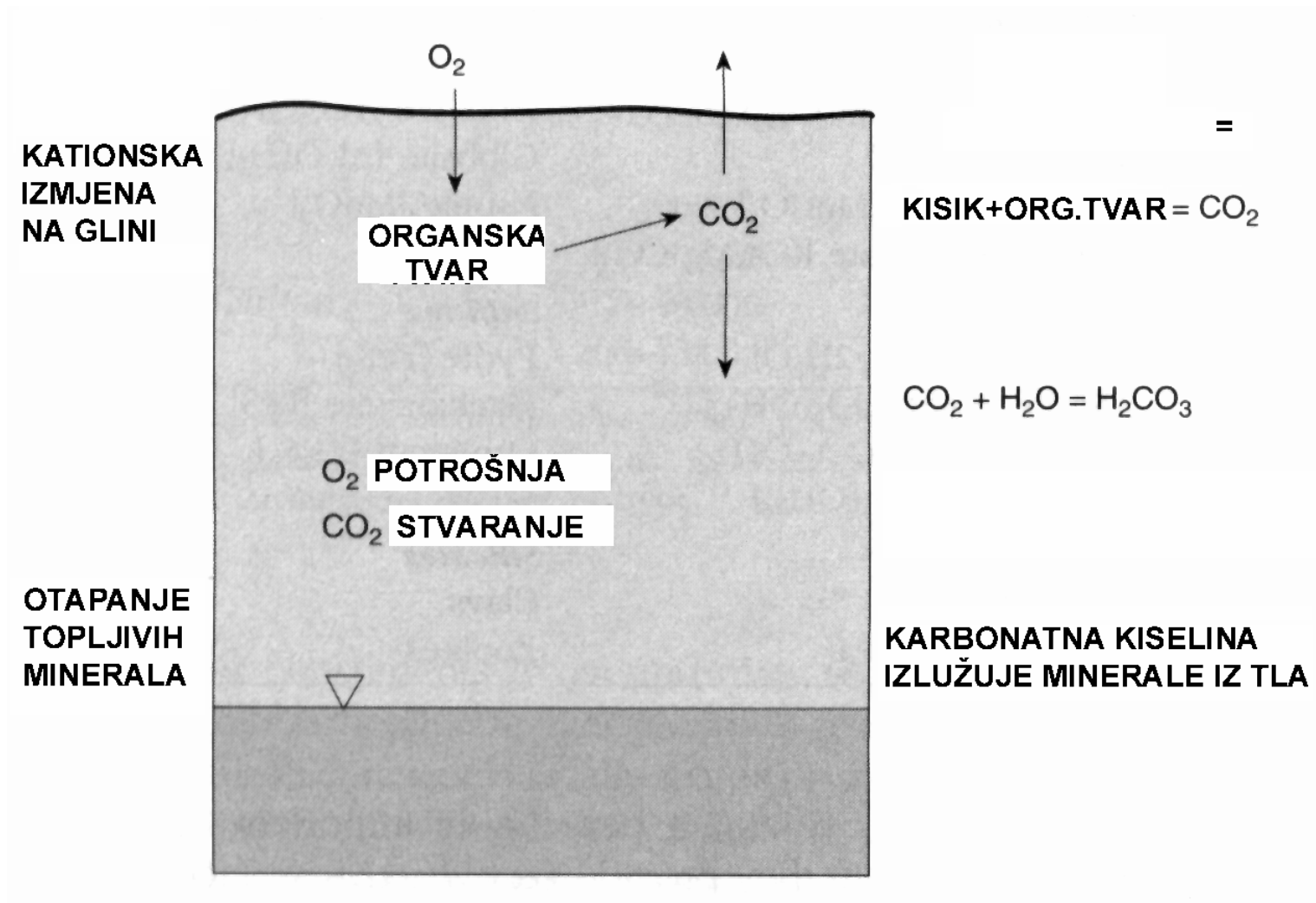
- **Kišnica** se može smatrati najrazrjeđenijom morskom vodom s omjerom koncentracija Cl^-/Na^+ istovjetnim omjeru u morskoj vodi.
- Ulaskom u tlo voda se obogaćuje otopljenim tvarima u prvom redu raste količina otopljenoga Ca^{2+} i HCO_3^- , pa opada omjer koncentracija $\text{Na}^+ / (\text{Na}^+ + \text{Ca}^{2+})$ i omjer koncentracija $\text{Cl}^- / (\text{Cl}^- + \text{HCO}_3^-)$, a raste količina otopljene tvari u vodi.
- Ako dođe do evaporacije ili evapotranspiracije, povećava se koncentracija otopljene tvari, može čak doći do zasićenja, pa će se taložiti spojevi koji su se prije toga otopili u vodi.
- Načelno će se taložiti kalcijevi i karbonatni spojevi, pa se pri tome zbiva obrnut proces od onoga koji se zbivao tijekom otapanja, odnosno povećavaju se omjeri koncentracija $\text{Na}^+ / (\text{Na}^+ + \text{Ca}^{2+})$ i $\text{Cl}^- / (\text{Cl}^- + \text{HCO}_3^-)$.

Prikaz prosječnoga sastava vode iz petrološki različitih vodonosnika (White, 1963)



- Na kemijski sastav vode utječe i organska tvar u tlu kroz koju voda prolazi.
- Organska tvar u tlu potječe od raspadnutih biljnih i životinjskih organizama.
- Ona se raspada do huminskih tvari, koje se dijele na huminske i fulvične kiseline.
- Prosječni sastav huminskih kiselina prikazuje formula $C_{187}H_{186}O_{89}N_9S$,
- prosječni sastav fulvičnih kiselina formula $C_{135}H_{182}O_{95}N_5S_2$

Shematski prikaz najvažnijih kemijskih reakcija u zoni tla (Deutsch, 1997)



- **Ugljik** iz organske tvari oksidacijom prelazi u **CO₂**, koji onda utječe na karbonatnu ravnotežu u vodi, te na njezinu agresivnost i sposobnost otapanja i trošenja stijena.
- Zona tla posebno je važno područje za sastav podzemne vode, čak i ako je sloj tla vrlo tanak.
- U tom sloju nalaze se reaktivni minerali, voda bogata organskom materijom i agresivnim CO₂, bogata kisikom, što omogućuje brojne kemijske reakcije i otapanje brojnih tvari.

Prosječan kemijski sastav otopljenih tvari u Jadranskom moru (Levačić, 1977)

Ioni	Konc. / (mg/L)	Udio %
Cl ⁻	21250	55,49
Na ⁺	11810	30,84
SO ₄ ⁻	2970	7,75
Mg ²⁺	1420	3,71
Ca ²⁺	457	1,19
K ⁺	390	1,02

5.3. Podjela vode prema količini tvari otopljene

Tip vode	Ukupno otopljena tvar /(g/kg)
Slatke	< 1
Slankaste (bočate, brakične)	1 – 10
Slane	10 – 100
Slanci (slanjače, rasoli)	>100

Podjela vode prema vodnim faciesima

- U hidrogeokemiji voda se dijeli prema vodnim faciesima a njih određuju otopljeni kationi i anioni.
- Prema **kationima** dijeli se na:
 - kalcijske
 - magnezijske
 - natrijske
- prema **anionima** na:
 - hidrogenkarbonatne
 - kloridne
 - sulfatne

5.4. Klasifikacija po Palmeru

- Vode se dijele na kisele, alkalne i neutralne na slijedeći način.
- **KATIONI**
- Kationi vrlo jakih baza - kationi alkalnih elemenata (Na^+ , K^+ , Li^+ , ...)
- Kationi slabijih baza - kationi zemnoalkalnih elemenata (Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} ,
- Kationi vrlo slabih baza (Al^{3+} , Fe^{2+} , Fe^{3+} , Mn^{2+} ,
- Hidronium ion (vodikov kation)

ANIONI

- Anioni jakih kiselina
(Cl^- , SO_4^{2-} , NO_3^-)
- Anioni slabih kiselina
(CO_3^{2-} , HCO_3^- , S^{2-} , HS^- )

Palmer dijeli katione na 4 grupe a anione na 2 grupe.

- Zbroj ekvivalenata kationa jakih baza pridružuje se zbroju ekvivalenata aniona jakih kiselina, to se naziva "**primarna slanost**" i označava se sa S_1
- Ako je preteklo aniona jakih kiselina oni se pridružuju kationima slabijih baza i taj dio se naziva "**sekundarna slanost**" – S_2
- Ako i nakon toga još ostane nepridruženih aniona jakih kiselina, oni se pridružuju vodikovim ionima i taj se dio naziva "**tercijarna slanost**" – S_3 ili kiselost

- Ako ima više ekvivalentata kationa jakih baza, ostatak se pridružuje ekvivalentima aniona slabih kiselina i taj se dio naziva "primarna alkalnost" i označava se A_1 .
- Ostatak kationa slabih baza pridružuje se anionima slabih kiselina i taj dio se zove "sekundarna alkalnost" i označava se A_2 .
- Na kraju se kationi teških kovina pridružuju preostalim anionima slabih kiselina i taj dio se naziva "tercijarna alkalnost" – A_3 .

- Ioni koji tvore grupu **primarne slanosti** reagirat će u vodi **neutralno**
- ioni **sekundarne slanosti** (hidroliza) **slabo kiselo**
- ioni **tercijarne slanosti** reagirat će **jako kiselo**
- Ioni grupe **primarne alkalnosti** reagirat će **jako bazično,**
- **sekundarne alkalnosti** nešto **manje bazično,**
- ioni **tercijarne alkalnosti** djelovat će **neutralno** do **slabo bazično.**

Podijela voda na 5 razreda:

razred	slanost	slanost	slanost	alkal- nost	alkal- nost	alkal- nost
	S ₁	S ₂	S ₃	A ₁	A ₂	A ₃
I	+	-	-	+	+	+
II	+	-	-	-	+	+
III	+	+	-	-	+	+
IV	+	+	-	-	-	+
V	+	+	+	-	-	+

S_1 - primarna slanost

S_2 - sekundarna slanost

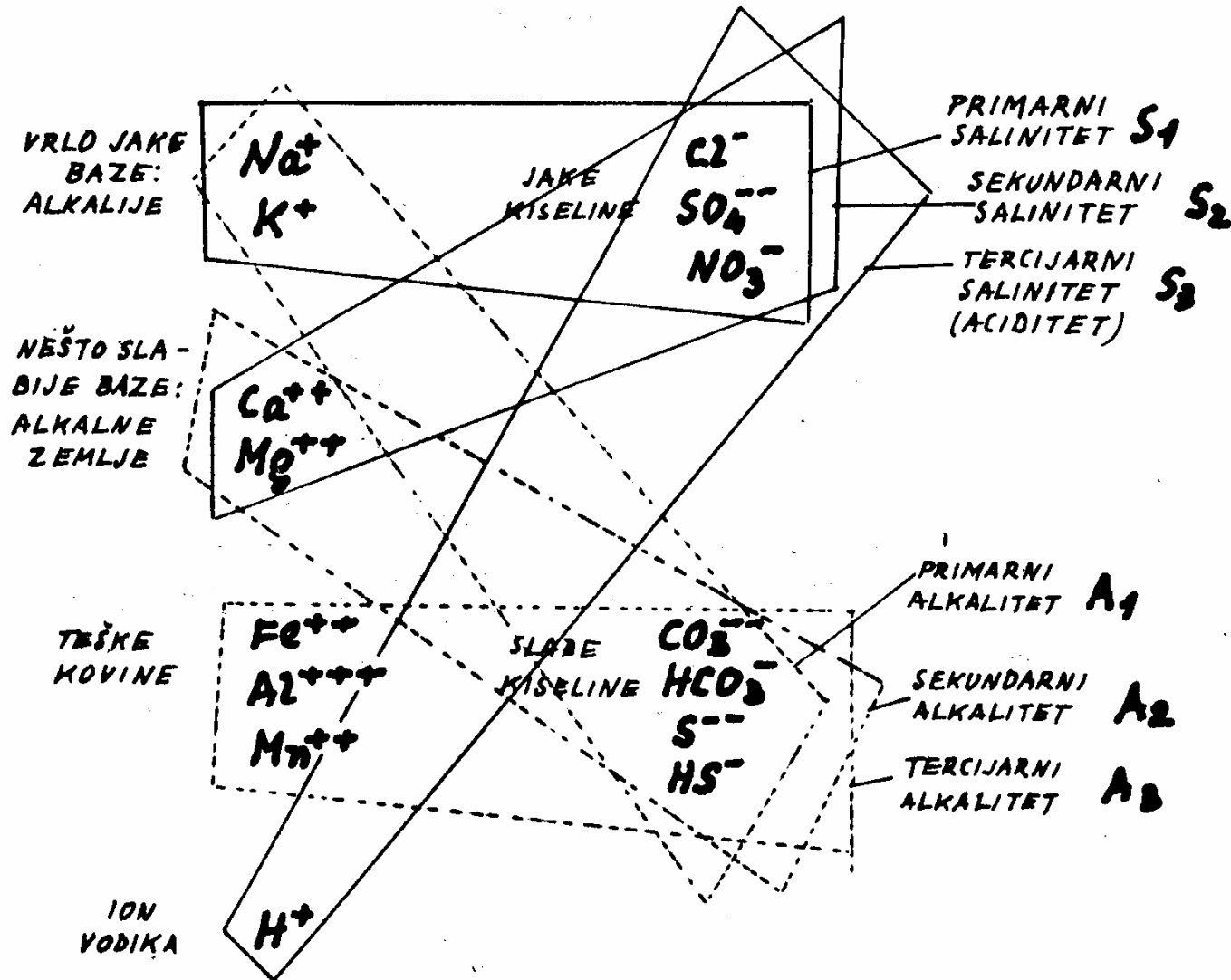
S_3 - tercijarna slanost

A_1 - primarna alkalnost

A_2 - sekundarna alkalnost

A_3 - tercijarna alkalnost

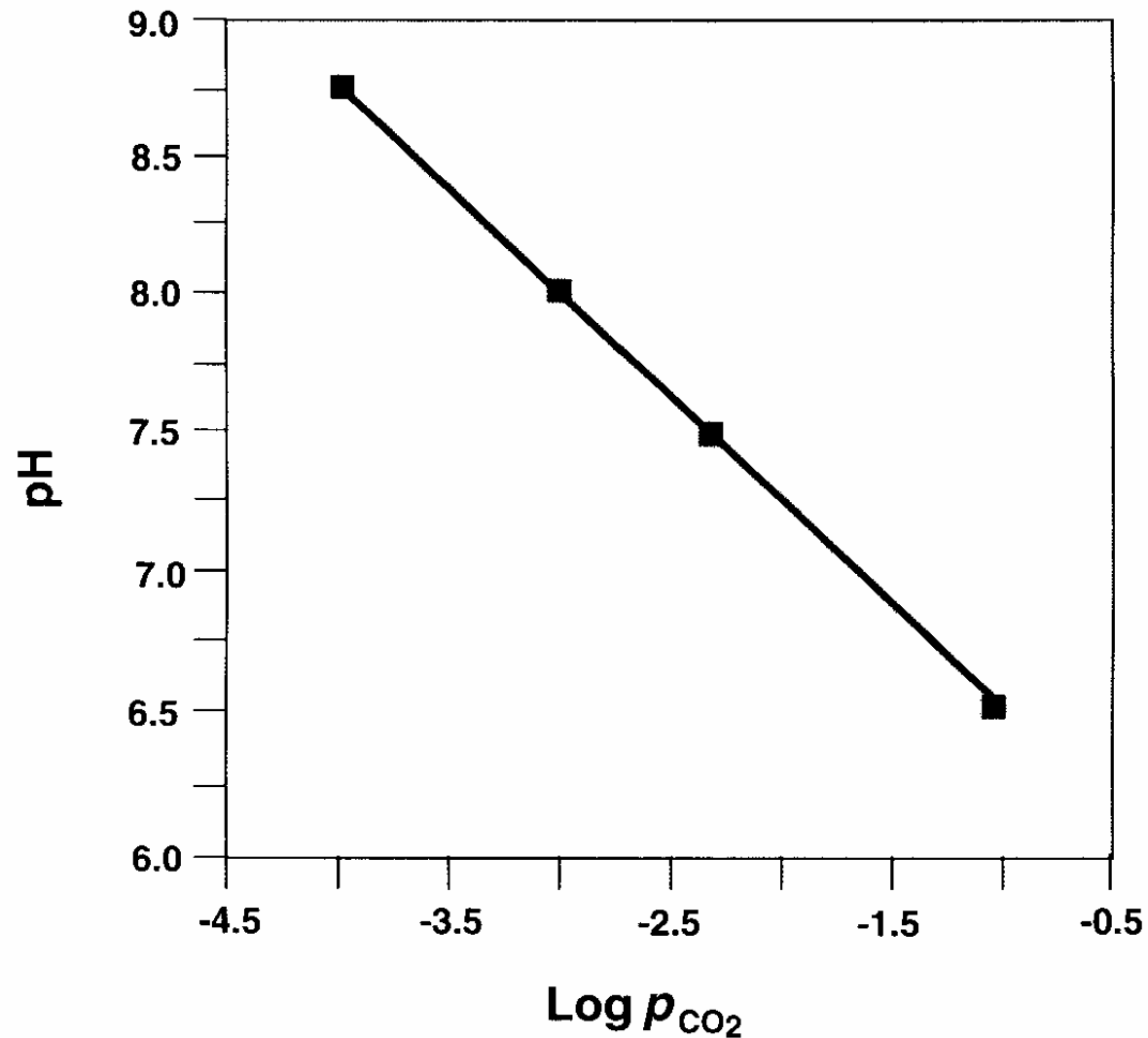
Grafički prikaz Palmerove klasifikacije (Sabioncello, 1967)



5.5. Kiselost - aktivitet vodikovoga iona (pH)

- pH otopine uglavnom određuju **karbonati**; ipak se pH može osjetno promijeniti izlaganjem vode površinskim uvjetima i uravnoteženjem s atmosferskim tlakom CO_2
- mjerenje pH podzemne vode važno je, jer mnogi procesi u otopini - **kompleksiranje, interakcija između vode i stijene, topljivost minerala i svojstva adsorpcije, topljivost plinova i biokemijske reakcije** - ovise o pH.

Utjecaj parcijalnoga tlaka CO₂ na pH podzemne vode (Deutsch, 1997)



- Kada su **visoki parcijalni tlakovi**, ravnotežni pH relativno je nizak (6,5 do 7,0) - zbog visoke koncentracije ugljične kiseline koja nastaje zbog velikih količina otopljenog CO_2 u vodi.
- Uz niže parcijalne tlakove CO_2 ima manje ugljične kiseline pa je ravnotežni pH s kalcitom viši.
- Zbog oksidacije organske tvari u tlu podzemna voda je u ravnoteži s visokim parcijanim tlakom CO_2 .

5.6.Redoks potencijal - *Eh*

- sastojci podzemne vode osjetljivi su na redoks uvjete (npr. O, Fe, Mn, As, Se, Cr, N, organski spojevi).
- sastojci međusobno reagiraju i o tome ovisi njihova pokretljivost u vodonosnicima
- Kada se na terenu mjeri elektrodni potencijal treba obratiti pažnju na ravnotežu koja se zbiva između različitih **otopljenih redoks parova i platinske elektrode.**

Greška pri mjerenju Eh može biti usljed taloga na Pt- elektrodi.

- Manje su greške u kiseloj otopini,
- U lužnatom mediju na elektrodi se mogu taložiti hidroksidi (često hidroksidi željeza)

Ako se redoks potencijal vodonosnika smanjuje zbog redukcije oksidiranih vrsta organskom tvari, može doći do **smanjenja koncentracije otopljenog kisika**

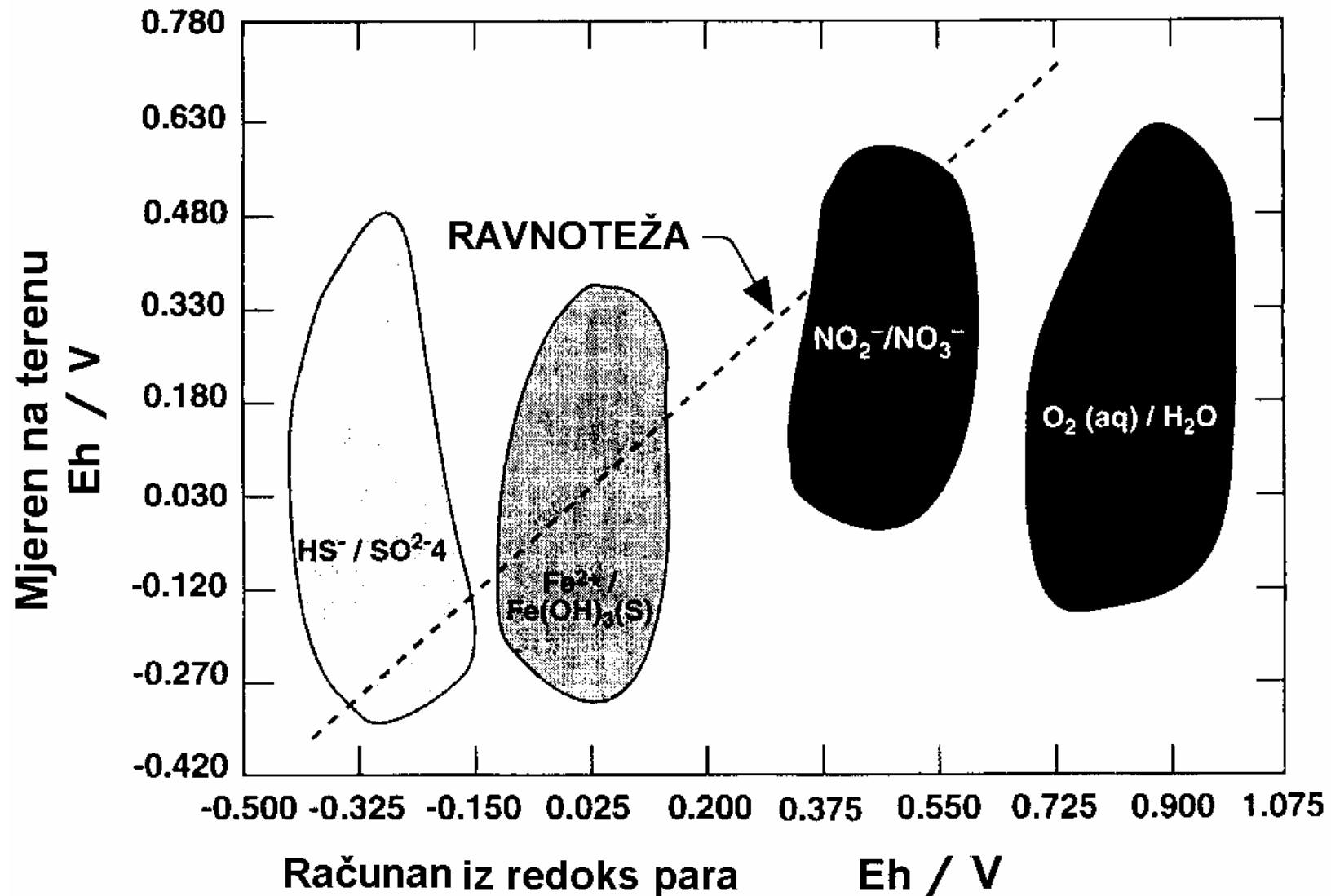
- zbog redukcije oksidiranih vrsta organskom tvari, može doći do smanjenja koncentracije otopljenog kisika kao posljedica toga može doći do otapanja:
 - Mn(IV) minerala,
 - Fe(III) minerala,
 - redukcija NO_3^- u NO_2^- i N_2

- **Redoks potencijal** omogućuje procjenu koja je redoks vrsta najstabilnija u okolišu i smjer u kojem će se odvijati redoks reakcije
- Podzemna je voda općenito manje oksidativna od površinske, jer nema izvora molekularnoga kisika, a ima krutina koje u vodonosniku djeluju reducirajuće (organska tvar i sulfidni minerali).

Zato će uzorak podzemne vode otapati na zraku kisik i pri tom će mu porasti redoks potencijal.

- Ondje gdje se predviđa relativno reduktivan vodonosnik ($Eh < +100$ mV), treba prije određivanja Eh zaštititi uzorak vode od doticaja s atmosferom.

- Odnos između izmjerena Eh i izračunana Nernstovom jednačinom (Deutsch, 1997)



- *Eh* uzorka vode može se držati ujednačenim ali mogućnost držanja ujednačenoga *Eh* nije toliko velika kao što je to mogućnost pH puferiranja
- zbog niske koncentracija redoks reaktivnih elemenata (Fe, Mn, As, Se), odnosno male brzine redoks reakcija teško je održati ujednačeni *Eh*
- Zbog niskih koncentracija redoks reaktivnih elemenata mjerenje *Eh* može biti nepouzdana

5.7. Otopljeni plinovi

- Otopljeni **kisik** jedini je plin koji se rutinski mjeri u uzorcima vode.
- Sadržaj kisika u vodi važan je zbog njegova utjecaja na redoks reakcije, upotrebe kao kvalitativnog indikatora Eh i općenite potrebe za dodavanjem kisika u zonu organskog onečišćenja, da bi se stvorili aerobni uvjeti i olakšala biorazgradljivost.
- U temperaturnom području između 0 i 35 °C voda u dodiru sa zrakom ima masenu koncentraciju otopljenoga kisika između 14,7 i 7 mg/L.

5.8. Alkalnost

- Alkalnost je mjera za kapacitet neutralizacije neke otopine.
- U pojam alkalnosti ulaze sve kemijske vrste koje mogu neutralizirati kiselinu,
- ali u podzemnoj vodi alkalnost uglavnom potječe od otopljenih karbonata. U tom slučaju smatra se da ostalih alkalnih kemijskih vrsta nema ili ima u zanemarivim količinama.
- Budući da je u površinskim vodama (a u velikoj većini slučajeva i u podzemnim vodama) hidrogenkarbonatni ion (HCO_3^-) općenito dominantan anion, točno određivanje alkalnosti temelj je ispravna određivanja kemijskoga sustava takve vode.

- Dio otopljenih karbonata u uzorku vode gubi zbog otplinjavanja CO_2 i taloženja minerala ili se količina ukupnih karbonata povećava pri otapanju čestica karbonatnih minerala nefiltriranog uzorka
- Ako su u otopini prisutni i drugi anioni koji se titriraju s kiselinom (kao što su HS^- , HPO_4^{2-} , organske tvari), prije računanja ukupnih karbonata mora se njihova koncentracija odrediti neovisno i odbiti od vrijednosti alkalnosti.

- Ako se CO_2 otplini iz uzorka vode, pri čemu se u boci u kojoj se nalazi uzorak taloži kalcit, promijenit će se i alkalnost.
- Karbonat istaložen kao kalcit predstavlja dio izvorne alkalnosti uzorka vode i titracija otopine dat će nižu vrijednost alkalnosti od njegove stvarne vrijednosti u vodi.

5.9. Glavni kationi i anioni

- Glavni kationima i anionima smatraju se najzastupljeniji ioni u podzemnoj vodi, a to su:
- Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+ , HCO_3^- , CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , Cl^- i NO_3^-
- U tu skupinu ubraja se i nedisocirana silicijeva kiselina, H_4SiO_4 , iako –jasno- ona nije ion.
- Za razumijevanje kemijskoga sastava podzemne vode treba u njoj odrediti koncentracije glavnih kationa i aniona
- Glavni ioni mogu jedan s drugim, a i s elementima u tragovima, stvoriti jake komplekse u otopini i time utjecati na njihovu pokretljivost i reaktivnost.
- poznavanje koncentracije glavnih iona potrebno je za računanje indeksa zasićenja i identifikaciju reaktivnih minerala u vodonosniku.
- Važno je pri tome pripomenuti da otopljene ione i suspendirane čestice treba zasebno analizirati.

- Prije konzerviranja vode uzorke treba profiltrirati.
- Filtrirati se treba pod tlakom kroz filter veličine pora od 45 μm .
- U nekim slučajevima fino disperzirani Al i Fe hidroksidi mogu proći kroz taj filter, pa se onda mora upotrijebiti filter veličine pora od 0,1 μm . Ne smije se filtrirati vakuumom, jer se tada mogu iz uzorka vode otpliniti otopljeni plinovi, a to utječe na neke već raspravljene parametre.
- Pri računanju cjelokupnoga transporta tvari u otopini treba imati na umu da koloidno kretanje može povećati transport ukupnoga materijala (disperziranog i otopljenog) zbog posebnih svojstava koloida (npr. adsorpcije).

- Otopljeni Na^+ i K^+ u vodi relativno su stabilni.
- Tijekom otplinjavanja CO_2 iz uzorka vode mogu se taložiti Ca^{2+} a možda i Mg^{2+} ioni kao karbonatni minerali.
- Stoga se uzorak vode u posebnoj boci iz koje će se uzimati voda za određivanje kationa zakiseli do $\text{pH} = 2$, pri kojoj su kiselosti minerali topljivi i neće se taložiti.
- Tipični glavni nekarbonatni anioni Cl^- i NO_3^- nisu posebno reaktivni ali se ipak boca s uzorkom vode koja je namijenjena određivanju aniona nakon filtracije hladi. Ohlađivanje uzorka inhibira biološke procese, koji mogu prouzročiti denitrifikaciju.
- Naime, ako je prisutno dosta organske tvari koja može oksidirati sav raspoloživi kisik, preostala će organska tvar nakon nestanka kisika trošiti nitrate kao elektron akceptor.
- Hidrogenkarbonanti i karbonatni ioni nisu stabilni i trebali bi se odrediti na licu mjesta alkalnom titracijom.

5.10. Sporedni sastojci i sastojci u tragovima

- Sporednim sastojcima i sastojcima u tragovima smatraju se Fe, Mn, Al, Cd, Cr, Pb, Zn, As, Se, P, F, Br, I, B, Co, Cu, Pb, Hg, NH_4^+ .
- Oni se određuju iz istoga zakiseljenog uzorka kao i glavni kationi, jer bi se eventualnim taloženjem nekoga kationa mogli adsorbirati na taloge.
- Organske komponente mogu se očuvati od biodegradacije dodavanjem biocida kakav je HgCl_2 .

5.11. Provjera točnosti kemijske analize

- **Provjera točnosti kemijske analize provodi se:**
- kontrolom ekvivalencije kationa i aniona
- omjerom izračunane i određene otopljene krute tvari
- omjerom izračunane i određene provodnosti
- omjerom određene provodnosti i zbroja iona
- omjerom izračunane ukupno otopljene krute tvari i provodnosti
- omjerom određene ukupno otopljene krute tvari i provodnosti

- Najtočnija je provjera ekvivalencije kationa i aniona. Ako nema podataka ukupne analize, provjeravaju se ostali dostupni podaci
- 1. Kontrola ekvivalencije kationa i aniona
- Ako se koncentracija kationa i aniona izrazi u mmol ekv/L, tada u točnoj analizi zbroj mmol ekvivalenata kationa i aniona mora biti jednak.
- Dopušta se slijedeća pogreška:
$$\% \text{ razlike} = 100 \frac{\sum kationa - \sum aniona}{\sum kationa + \sum aniona}$$
- Tipični kriterij za prihvaćanje analize je slijedeći:

Tipični kriterij za prihvaćanje analize je slijedeći:

Zbroj aniona / (mmol ekv/L)	Prihvatljiva greška
0 - 3,0	$\pm 0,2$ mmol ekv/L
3,0 - 10,0	± 2 %
10,0 - 800	± 5 %

Literatura:

- 1. Levačić, E., (1977): Osnove geokemije vode, Geotehnički fakultet u Varaždinu, Varaždin.
- 2. Freeze R.A., Cherry, J.A., (1979): Groundwater, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs.
- 3. Deutsch W.J., (1997) Groundwater Geochemistry, Fundamentals and applications to Contamination, Lewis Publishers, Boca Raton
- 4. Appelo, C.A.J., (1985) CA, computer aided chemistry, or the evaluation of groundwater quality with a geochemical computer model H₂O.
- 5. White, D.E., Hem, J.D., and Waring, G.A., (1963): Chemical composition of subsurface water, in Data of Geochemistry, 6th ed., U.S. Geological Survey.
- 6. Sabioncelo P., (1967) Kemija i tehnologija vode, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb.