

IONENBALANS

1 TOEPASSINGSGEBIED

De norm is van toepassing op alle soorten water, waarin van de meest voorkomende ionen de concentratie gekend zijn.

2 PRINCIPE

De ionenbalans is een eenvoudige, maar zeer doeltreffende controle om de kwaliteit van de analyseresultaten te bepalen. In water moet de som van de positieve ladingen gelijk zijn aan de som van de negatieve ladingen. Daarom moet de som van de kationenconcentraties altijd gelijk zijn aan die van de anionenconcentraties, de anionen zijn dus in evenwicht met de kationen.

De ionenbalans is de algebraïsche som van de ladingen van de kationen en de anionen.

Als de concentratie van alle ionen bekend zijn, moet

$$\sum c_i \cdot z_i = 0$$

formule 1

waarin

c_i is de concentratie van het ion i

z_i is het ladingsgetal van het ion i

Een te grote afwijking van de nulwaarde wijst op een fout in één of meer van de analyses en/of op de aanwezigheid van één of meer ionen die niet in de berekening werden opgenomen.

3 OPSTELLING VAN DE IONENBALANS

3.1 Algemeen

Bereken de ionenbalans uit de concentraties en de ladingsgetallen van de meest voorkomende ionen. Voor de meeste watersoorten is de opgave van de concentratie in mmol/l aan te bevelen. De ionen van calcium, magnesium, natrium, kalium, waterstofcarbonaat, chloride, sulfaat en nitraat leveren bijna altijd de belangrijkste bijdragen voor de balans. Kleine bijdragen kunnen afkomstig zijn van de ionen ammonium, ijzer(II), mangaan, carbonaat, fluoride, nitriet,.... Stoffen die in ongeladen toestand voorkomen zoals koolstofdioxide, kiezelzuur (voornamelijk H_4SiO_4) en ijzer(III)hydroxide leveren geen bijdrage. De bijdrage van de ionen van zwakke zuren en basen zoals fosforzuur en aluminiumion is afhankelijk van de pH en is te berekenen als de pH en de protolyseconstanten gekend zijn. Vorming van complexen of ionenparen van geanalyseerd bestanddelen heeft, mits geen hydronium- en hydroxide-ionen daarin voorkomen, geen invloed op de ionenbalans daar de vermindering van het aantal positieve ladingen gelijk is aan de vermindering van het aantal negatieve ladingen. Wel moeten de totale concentraties van de componenten die het complex of ionenpaar vormen in de balans worden opgenomen. De aanwezigheid van organische verbindingen zoals humusstoffen en ander polyelektrolyten maken een nauwkeurige meting onmogelijk, daar de evenwichtsconstanten niet bekend zijn.

3.2 Procedures

- 3.2.1 Ammonium
CMA/2/I/B.4.1 en CMA/2/I/B.4.2
- 3.2.2 Calcium
CMA/2/I/B.1
- 3.2.3 Chloride
CMA/2/I/C.3
- 3.2.4 Fluoride
CMA/2/I/C.1.1 en CMA/2/I/C.1.2
- 3.2.5 IJzer(II)
CMA/7/A
- 3.2.6 Kalium
CMA/2/I/B.1
- 3.2.7 Magnesium
CMA/2/I/B.1
- 3.2.8 Mangaan
CMA/7/A
- 3.2.9 Natrium
CMA/2/I/B.1
- 3.2.10 Nitraat
CMA/2/I/C.3 en CMA/2/I/C.6
- 3.2.11 Nitriet
CMA/2/I/C.3 en CMA/2/I/C.6
- 3.2.12 Sulfaat
CMA/2/I/C.3
- 3.2.13 Waterstofcarbonaat/carbonaat

- De gehalten aan koolstofdioxide/waterstofcarbonaat/carbonaat kunnen berekend worden uit het DIC gehalte, de geleidbaarheid en de pH.
- De gehalten aan koolstofdioxide/waterstofcarbonaat/carbonaat kunnen berekend worden uit de alkaliniteit, de geleidbaarheid en de pH.

3.3 Foutenanalyse van de ionenbalans

Als een laboratorium grote aantallen analyses met dezelfde methoden aan eenzelfde watersoort heeft verricht komen twee soorten fouten tot uiting, namelijk systematische en toevallige fouten.

Opmerking: Worden vele soorten water herhaaldelijk geanalyseerd met dezelfde methoden, dan kunnen de navolgende beschouwingen globaal ook worden toegepast op een groep van verwante watersoorten. Worden de analysemethoden gewijzigd, dan moet een en ander voor de nieuwe situatie opnieuw worden beschouwd.

Beschouw hiertoe eerst alle uitkomsten van ionenbalansen x_i , verkregen uit de individuele berekeningen van $\sum c_i \cdot z_i = x_i$ en bereken het gemiddelde \bar{x} , de standaardafwijking s en de grenzen van het betrouwbaarheidsinterval $(\bar{x} - ts)/\sqrt{n}$ en $(\bar{x} + ts)/\sqrt{n}$, waarin n het aantal uitkomsten x_i is en t de factor van Student bij de gekozen betrouwbaarheid en $n-1$ vrijheidsgraden (zie hiervoor verder NEN 3114 en eventueel NEN 1047).

Opmerking: meestal wordt voor een betrouwbaarheid van 95 % gekozen.

Opmerking: de standaardafwijking s geeft een schatting van de wortel uit de som der kwadraten van de standaardafwijkingen der afzonderlijke analyses.

3.3.1 De eerste fout

De eerste soort fout treedt op als de verwachtingswaarde van het gemiddelde, namelijk nul, niet binnen het betrouwbaarheidsinterval ligt. Men zegt dan dat het gemiddelde significant van nul verschilt. De systematische fout kan worden veroorzaakt door:

- het ontbreken van de analyses van één of meer ionen
- systematische fouten in de analyses van één of meer ionen
- een onbekende bijdrage van humuszuren of andere polyelektrolyten

Opmerking: Als het gemiddelde niet significant van nul verschilt, geeft dit geen garantie dat de bovengenoemde oorzaken niet aanwezig zijn, daar interne compensatie van de systematische fouten kan zijn opgetreden.

3.3.2 De tweede fout

De tweede soort fout kan worden gevonden in waarden van afzonderlijke ionenbalansen, die buiten het berekende betrouwbaarheidsinterval liggen, de zogenaamde uitschieters. Deze wijzen op een toevallige fout in de analyses of een toevallige afwijking van het monster.

Opmerking: Het niet voorkomen van uitschieters geeft eveneens geen garantie, dat er geen toevallige afwijkingen zijn opgetreden.

4 REFERENTIES

- NEN 6530:1986 Water – de ionenbalans.