

The Fundamentals of Water Chemistry

اساسات کی می ای اب

by: David Banks, Hydrogeologist and thermogeologist

Translated by: Prof.Eqrar



A Millimole

Original materials developed 2001-2014 by
© David Banks. Distribution by
NORPLAN in Afghanistan permitted
under the auspices of the project
“Capacity Building and Institutional
Cooperation in the field of Hydrogeology
for Faryab Province , Afghanistan”

NORAD supported project in MRRD:
Capacity Building and Institutional Cooperation in the field of Hydrogeology for Faryab
Province , Afghanistan

یک سوال A question

یک نمونه آب دارای A water sample contains

دارای 40 گرم در لیتر ایون کلسیم Ca^{++} 40 g/L calcium ions

دارای 23 گرم در لیتر ایون سدیم Na^{+} 23 g/L sodium ions

دارای 1 گرم در لیتر ایون هایدروجن H^{+} 1 g/L of hydrogen ions

Which type of ion is most abundant?

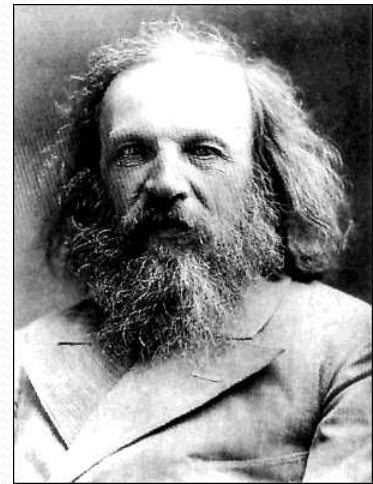
کدام نوع ایون ان بیشترین زیاده است

اتومی

هر اتم و مولکول دارای کتله است
It is measured in atomic mass units
به یونیت کتله اتمی اندازه گیری می شود

- 1 amu is approximately the mass of one hydrogen atom
- یک یونیت کتله اتمی تقریباً حجم یک اتم هایدروجن است
- Carbon has a mass of 12 amu
- اکاربن دارای 12 یونیت حجم اتمی است
- Oxygen has a mass of 16 amu
- اکسیجن دارای 16 یونیت حجم اتمی است
- Sodium has a mass of 23 amu
- سدیم دارای 23 یونیت حجم اتمی است
- Calcium has a mass of 40 amu
- کلسیم دارای 40 یونیت حجم اتمی است

The Siberian scientist Dmitry Mendeleev (1834-1907) systematised this information
• اب دارای 18 یونیت حجم اتمی است
ساینس دان سایبری ای دی متری مان دالیف (1834-1907) این معلومات را بصورت سیستماتیک درآورد



جدول دوره‌ی عناصر The periodic table of the elements

This particularly clear version is from
Los Alamos National Laboratory

<http://periodic.lanl.gov/index.shtml>

این جدول ورژن فلتر شده از لابراتوار لاس
الماس می‌باشد

Atomic number
نمبر اتمی

Atomic mass
کتل اتمی

2
He
4.003

Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period																		
1	1 <u>H</u> 1.008																	2 <u>He</u> 4.003
2	3 <u>Li</u> 6.94	4 <u>Be</u> 9.012											5 <u>B</u> 10.81	6 <u>C</u> 12.01	7 <u>N</u> 14.01	8 <u>O</u> 16.00	9 <u>F</u> 19.00	10 <u>Ne</u> 20.18
3	11 <u>Na</u> 22.99	12 <u>Mg</u> 24.31											13 <u>Al</u> 26.98	14 <u>Si</u> 28.09	15 <u>P</u> 30.97	16 <u>S</u> 32.06	17 <u>Cl</u> 35.45	18 <u>Ar</u> 39.95
4	19 <u>K</u> 39.10	20 <u>Ca</u> 40.08	21 <u>Sc</u> 44.96	22 <u>Ti</u> 47.88	23 <u>V</u> 50.94	24 <u>Cr</u> 52.00	25 <u>Mn</u> 54.94	26 <u>Fe</u> 55.85	27 <u>Co</u> 58.93	28 <u>Ni</u> 58.69	29 <u>Cu</u> 63.55	30 <u>Zn</u> 65.39	31 <u>Ga</u> 69.72	32 <u>Ge</u> 72.64	33 <u>As</u> 74.92	34 <u>Se</u> 78.96	35 <u>Br</u> 79.90	36 <u>Kr</u> 83.79
5	37 <u>Rb</u> 85.47	38 <u>Sr</u> 87.62	39 <u>Y</u> 88.92	40 <u>Zr</u> 91.22	41 <u>Nb</u> 92.91	42 <u>Mo</u> 95.96	43 <u>Tc</u> (98)	44 <u>Ru</u> 101.1	45 <u>Rh</u> 102.9	46 <u>Pd</u> 106.4	47 <u>Ag</u> 107.9	48 <u>Cd</u> 112.4	49 <u>In</u> 114.8	50 <u>Sn</u> 118.7	51 <u>Sb</u> 121.8	52 <u>Te</u> 127.6	53 <u>I</u> 126.9	54 <u>Xe</u> 131.3
6	55 <u>Cs</u> 132.9	56 <u>Ba</u> 137.3	*	72 <u>Hf</u> 178.5	73 <u>Ta</u> 180.9	74 <u>W</u> 183.9	75 <u>Re</u> 186.2	76 <u>Os</u> 190.2	77 <u>Ir</u> 192.2	78 <u>Pt</u> 195.1	79 <u>Au</u> 197.0	80 <u>Hg</u> 200.5	81 <u>Tl</u> 204.38	82 <u>Pb</u> 207.2	83 <u>Bi</u> 209.0	84 <u>Po</u> (209)	85 <u>At</u> (210)	86 <u>Rn</u> (222)
7	87 <u>Fr</u> (223)	88 <u>Ra</u> (226)	**	104 <u>Rf</u> (265)	105 <u>Db</u> (268)	106 <u>Sg</u> (271)	107 <u>Bh</u> (270)	108 <u>Hs</u> (277)	109 <u>Mt</u> (276)	110 <u>Ds</u> (281)	111 <u>Rg</u> (280)	112 <u>Cn</u> (285)	113 <u>Uut</u> (284)	114 <u>Fl</u> (289)	115 <u>Uup</u> (288)	116 <u>Lv</u> (293)	117 <u>Uus</u> (294)	118 <u>Uuo</u> (294)

The answer to our question

جواب سوال های ما

Calcium is 40 times heavier than hydrogen, so مرتبه نسبت به هایدروژن سنگین تر است

40 g/L calcium is exactly the same number of ions as 40 گرام در یک لیتر عین نمبر یک ایون

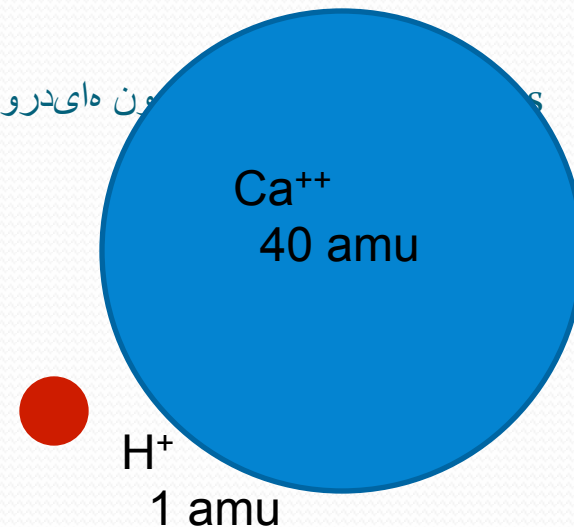
23 g/L sodium ions Na^+ 23 گرام در یک لیتر ایون سدیم

1 g/L of hydrogen ions H^+ یک گرام ایون هایدروژن

In fact 40 g of calcium ions is 6×10^{23} ions در حقیقت 40 گرام ایون کلسیم برابر است به

23 g of sodium ions is 6×10^{23} ions 23 گرام ایون سدیم برابر است به

1 g of hydrogen ions is 6×10^{23} ions 1 گرام هایدروژن برابر است به 6



مول و ملی Moles and Millimoles

مول



مول A Mole



ملی مول A Mill mole

یک فکتور A Scaling Factor

مقیاس

A **mole** is simply a fixed (macroscopic) number of particles, namely 6×10^{23} particles per mole.

اجزای یک مول است 6×10^{23} یک مول بصورت
(حقیقی) می‌گردد (تعداد اجزای ی‌عن

This is the number of particles in 1 g hydrogen atoms.

اینست تعداد اجزای ان در یک گرام اتوم های درون

- Thus, 1 mole Na = 23 g
- 1 mole H₂O = 18 g

Conc. in mmol/l = conc. in mg/l / molar mass

غلظت ملی مول در یک لیتر = غلظت ملی مول در یک لیتر بر حجم مولار
[mmol/l] = [mg/l] / [molar mass g/mol]

سوال دی گرا Another question

Sodium nitrate is a salt with the formula



س

If Na = 23 atomic mass units, N = 14 amu and O = 16 amu

What is its molecular mass ?

حجم مولی کولر ان چه می باشد؟

What is the mass of 1 mole of NaNO_3 ?

چند است؟ NaNO_3 حجم یک مول

If you dissolve 85 mg of sodium nitrate in 1 L of water

هرگاه 85 ملی گرام سودیم نایتریٹ در یک لیٹر آب منحل شود



What concentration of sodium ions and what concentration of nitrate ions do you get?

چه مقدار از غلظت ایون سودیم و چه مقدار از غلظت ایون نایتریٹ را بدست آورده می توانید؟

معاذلت Equivalents

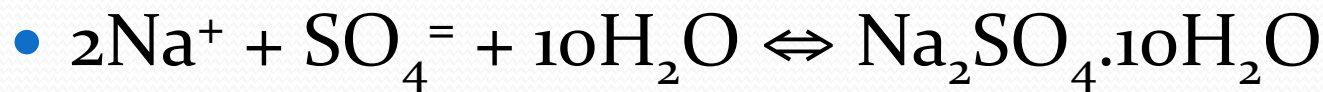
One mole of calcium ions reacts with one mole of sulphate to precipitate gypsum:

یک مول از ایون کلریم همراه با یک مول از ایون سلفات تفاعل نموده باعث ترسب گچ میشود



but, **two** moles of sodium react with one of sulphate to precipitate mirabilite

اما، دو مول از ایون سودیم همراه با یک مول از ایون سلفات تفاعل نموده باعث ترسب میرابلایت میشود



Thus, one mole of calcium is *equivalent in terms of charge* to two moles of sodium

بدین گونه، یک مول از کلریم معادل است در موجودیت چارج به دو مول سودیم

معادل‌ت Equivalents

1 equivalent = 1 mole of charge

یک معادل = به یک مول چارج

Conc. in meq/l = conc. in mmol/l x charge

$[\text{meq/l}] = [\text{mmol/l}] \cdot z = [\text{mg/l}] \cdot z / [\text{molar mass g/mol}]$

Thus 10.02 mg/l Ca^{++} ($\text{Ca} = 40.08 \text{ g/mol}$)

= 0.25 mmol/l

= 0.5 meq/l

11.5 mg/l Na^+ ($\text{Na} = 23 \text{ g/mol}$)

= 0.5 mmol/l

= 0.5 meq/l

القلی Alkalinity

این یک راهکار رهنمودی و اساسی است.
This is a *constructed* concept.

القلی عبارت از Alkalinity is

- the capacity of a solution to neutralise acids
- ظ
- the total (in meq/l) of basic species in a solution
- در مجموع (به ملی ایگویی و الینت بر لیتر) اساس نوع آن ندر محلول است

$$\text{Alkalinity} = \Sigma [\text{OH}^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{HCO}_3^-]$$

where [] = concentration in mmol/l

کج = غلظت به ملی مول به لیتر

Alkalinity القلیت

Alkalinity is measured by a titration.

القلیت توسط تتریشن اندازه شده است

- A known volume of sample is taken and stirred with a magnetic stirrer. A pH electrode is inserted

یک حجم معلوم از نمونه گرفته شده توسط مخلوط کننده مقناطیسی.
یک الکترود پی ای چ را داخل نماید

- A strong acid (hydrochloric or sulphuric) is added drop by drop until the pH has dropped to a given value, often pH 4.3

•
ی
گردیده تا زمانی که پی ای چ به قیمت 3.4 برسد

- The amount of acid (meq) required to neutralise one litre of water is calculated.

مقدار اسید (ملی اکویوالینت) برای یک لیتر آب محاسبه شده
ضرورت است تا آنرا خنثی سازد

چرا پی اچ 3.4؟ Why pH 4.3



pH
8.2

pH
4.3

At pH 4.3, almost all HCO_3^- has been converted to carbonic acid.

در پی اچ 3.4 تقریباً تمام کاربونات به تی‌زاب کاربونیکی تبدیل می‌شود

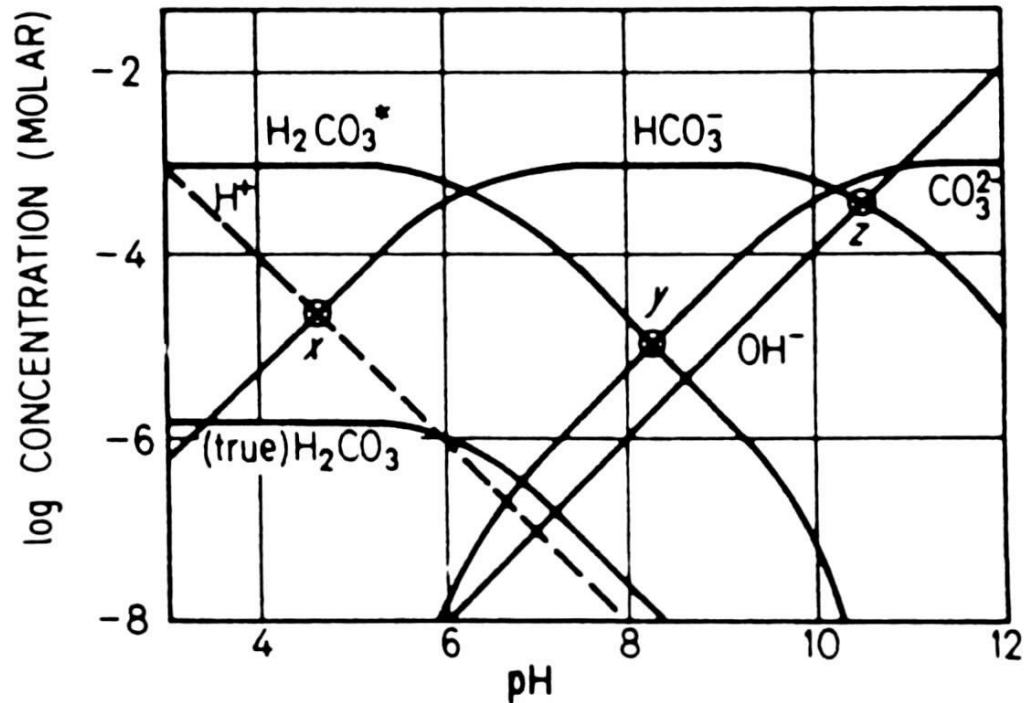
Alkalinity is cited in meq/L

القلیت به ملی می‌تر معادل در لیتر نشان داده می‌شود

Old unit is mg/L CaCO_3

1 meq/L = c. 50 mg/L CaCO_3

1 meq/L = c. 61 mg/L HCO_3^-



After Stumm &
Morgan 1996

پی اچ pH

pH is a measure of the activity of hydronium (hydrogen) ions (**protons**) in solution

پی اچ اندازه فعالیت ایون های دروجن (پروتون) را در یک محلول نشان می دهد

$$\text{pH} = -\log_{10}(\text{H}^+)$$

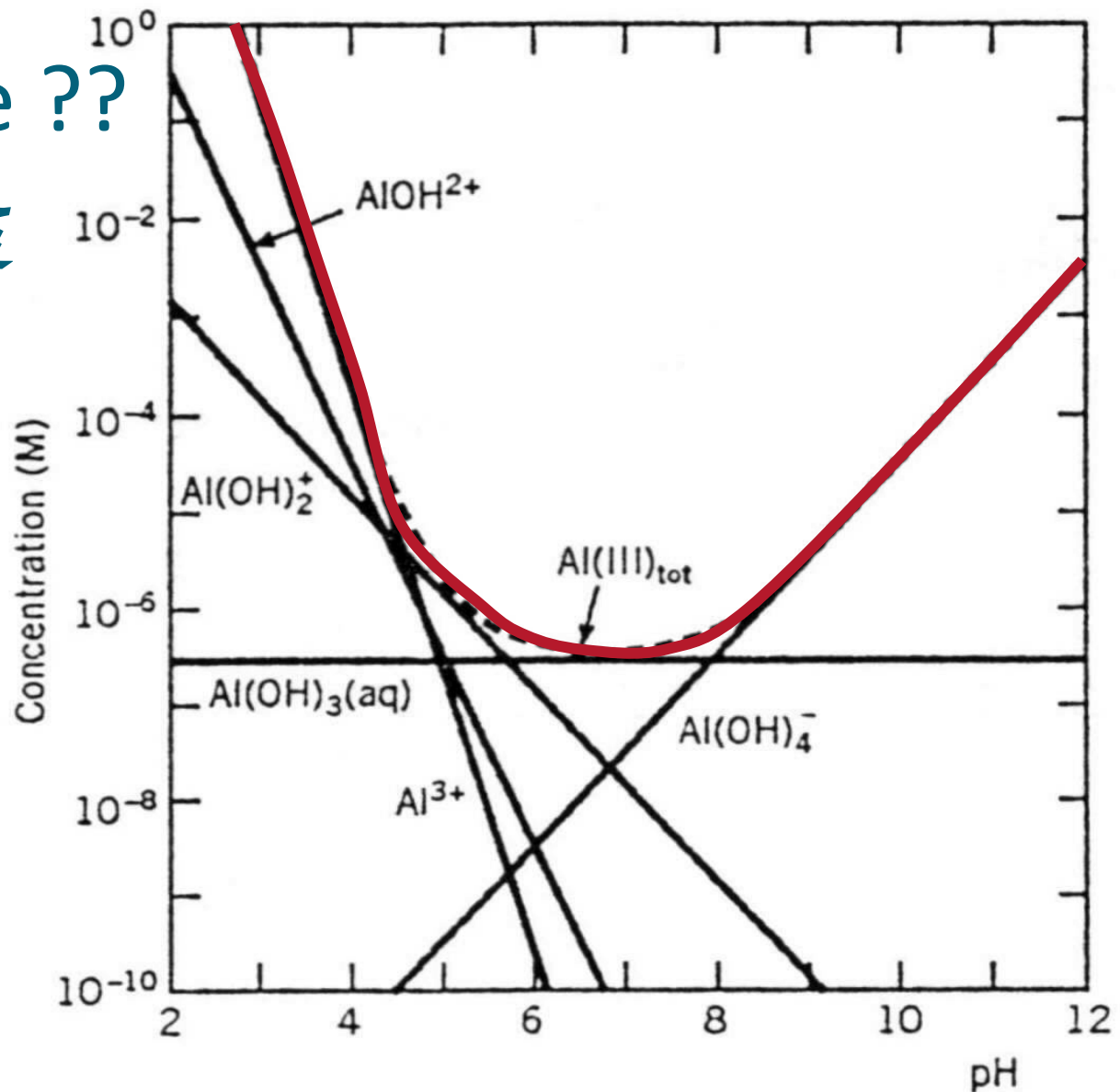
Thus, in water of pH=7, there are 10^{-7} mole/l hydrogen ions or 0.0001 mg/l.

In water of pH = 3, there are 10^{-3} mole/l hydrogen ions or 1 mg/l.

Why is pH a Master Variable ??

چرا پی اچ کلیدی
تغییر است

After Stumm &
Morgan 1996



- It controls the solubility of elements, such as metals and Zn

فلزات آلوده، آهن و چسب

هدایت جریان برقی (EC) Electrical conductivity

مجموع مواد جامد منحل (TDS) Total dissolved solids

The more dissolved ions there are in water, the better it is at conducting electricity.

ایون های زیاد منحل در آب وجود دارد که بهترین طریقه آن دریافت توسط هدایت جریان برقی می باشد

EC varies with temperature. We normally cite it at a standard temperature of either 20 or 25°C

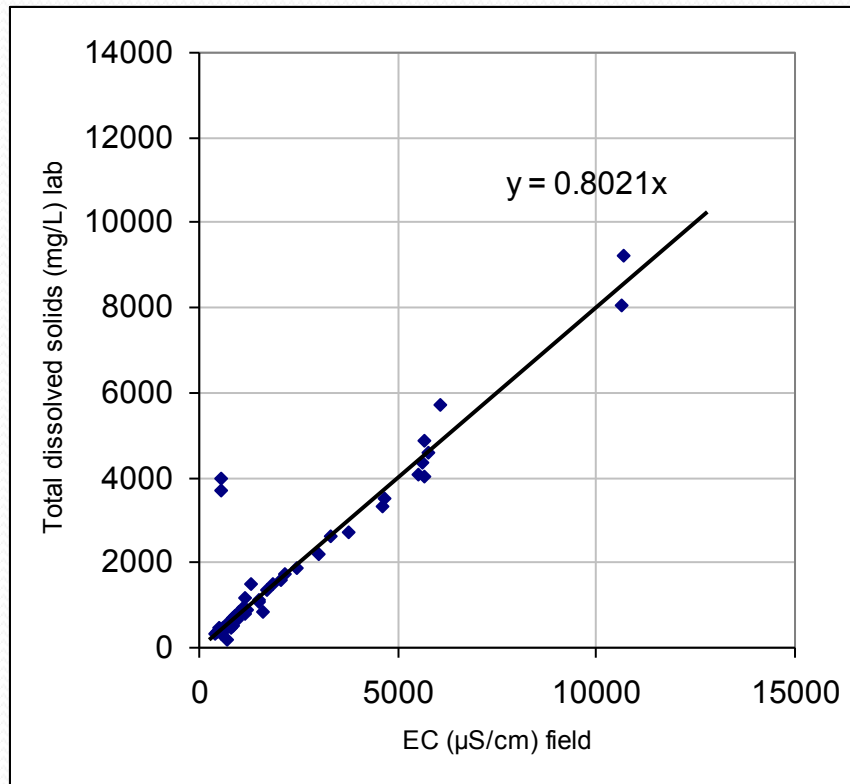
هدایت جریان برقی نظر به درجه حرارت متغییر بوده. ما معمولاً درجه 20-25 را معیار قرار می دهیم

**Rule 1: 1 meq/L of cations (or 1 meq/L of anions)
results in 100 $\mu\text{S}/\text{cm}$ of EC up to around 2000 $\mu\text{S}/\text{cm}$**

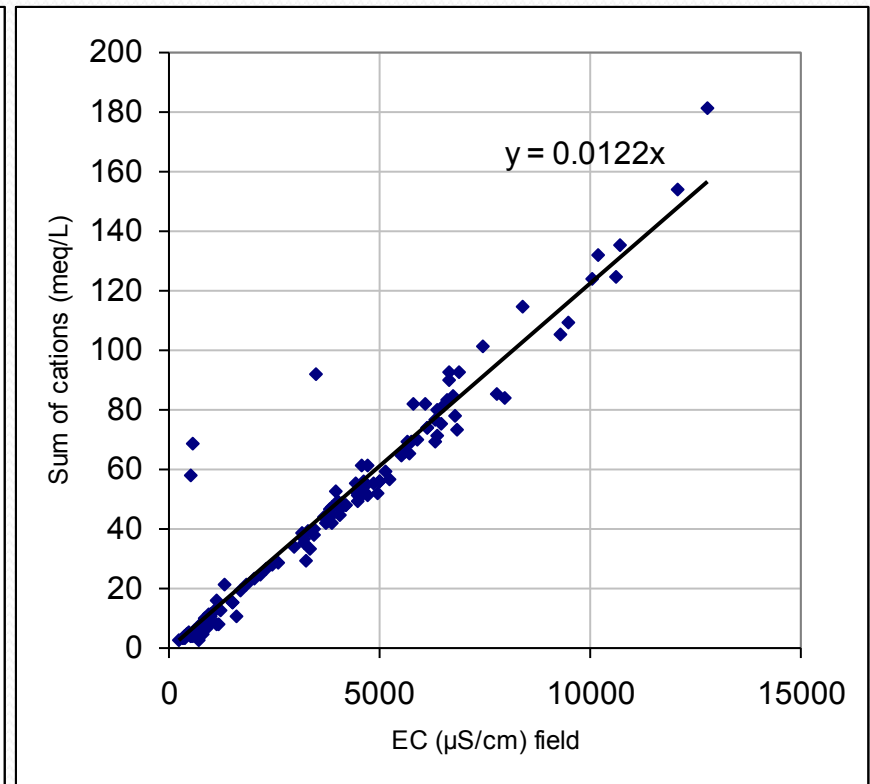
Rule 2: $\text{TDS (mg/L)} = \text{EC (}\mu\text{S/cm)} \times f$

- where $f = 0.55$ for a water dominated by sodium chloride
- $f = 0.75$ for a water dominated by calcium bicarbonate

در حقیقت در Faryab فارابی



$$\text{TDS} = \text{EC} \times 0.8$$



$$1 \text{ meq cations} = 82 \mu\text{S/cm of EC}$$

When you receive the results of an analysis from a laboratory, you should do some basic checks
زمانی که شما نتایج آزمایشگاه را دریافت می کنید باید شما آنرا چک اساسی نمایید

- Are the laboratory's methods documented ?
آیا روش های آزمایشگاه مستند شده است
- Have the analyses been calibrated or verified against known standards?
آیا نتایج تحلیلی با استانداردهای شناخته شده کالیبره شده یا تایید شده است
- What are the accuracy / precision of the laboratory's methods?
دقت و صحت روش های آزمایشگاه چیست
- Is there a large ion balance error?
آیا تراز یونیون بزرگ است
- Are the results realistic?
آیا نتایج حقیقی است
- Are the units of measurement clearly documented
آیا واحدهای اندازه گیری به وضوح مستند شده است

اب حالات خنثی را بصورت جریان برقی دارا می باشد
Water is electrically neutral, thus:

$$\Sigma \text{ cations (meq/l)} = \Sigma \text{ anions (meq/l)}$$

$$\Sigma \text{ cations} = \frac{2 \cdot [\text{Ca}^{++}]}{40.08} + \frac{[\text{Na}^+]}{22.99} + \frac{2 \cdot [\text{Mg}^{++}]}{24.31} + \frac{[\text{K}^+]}{39.1} \quad \text{where } [] = \text{conc. in mg/l}$$

$$\Sigma \text{ anions} = \frac{2 \cdot [\text{SO}_4^{=}] }{96.06} + [\text{alkalinity}] + \frac{[\text{Cl}^-]}{35.45} + \frac{[\text{NO}_3^-]}{62.0}$$

$$\text{IBE} = \frac{(\Sigma \text{ cations} - \Sigma \text{ anions})}{(\Sigma \text{ cations} + \Sigma \text{ anions})} \times 100\%$$

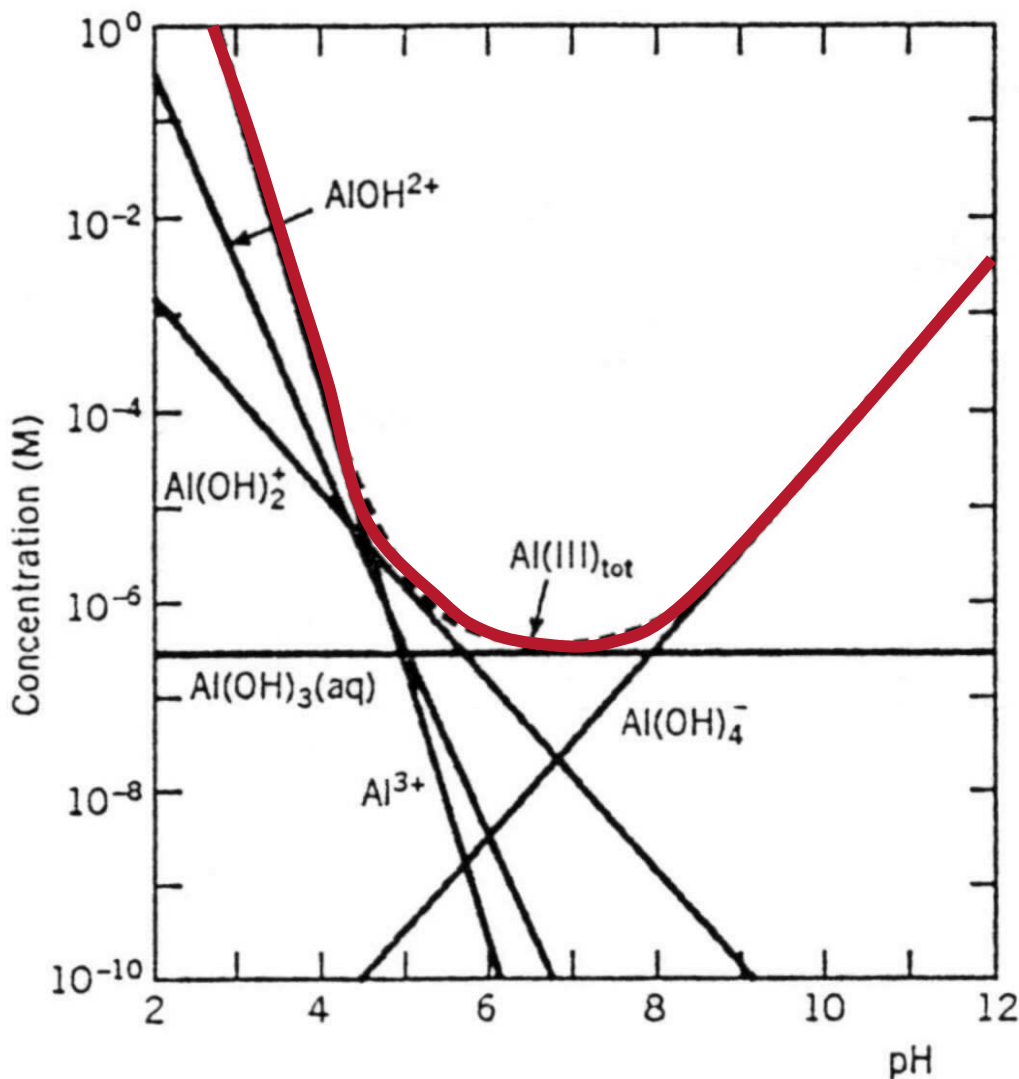
ان حل الی ت... این یک حقیقت است Solubility...is it realistic?

In most circum-neutral groundwaters, the concentration of dissolved aluminium should be very low.

در اکثر محیط ها-اب که دارای پی اچ 7 باشد، مقدار غلظت الیمن منحل باید بسیار پایینی باشد

If not...particulate contamination??

در صورت نه.....ملوثیت عمده موجود است



انحلالیت ... این یک Solubility...is it realistic?

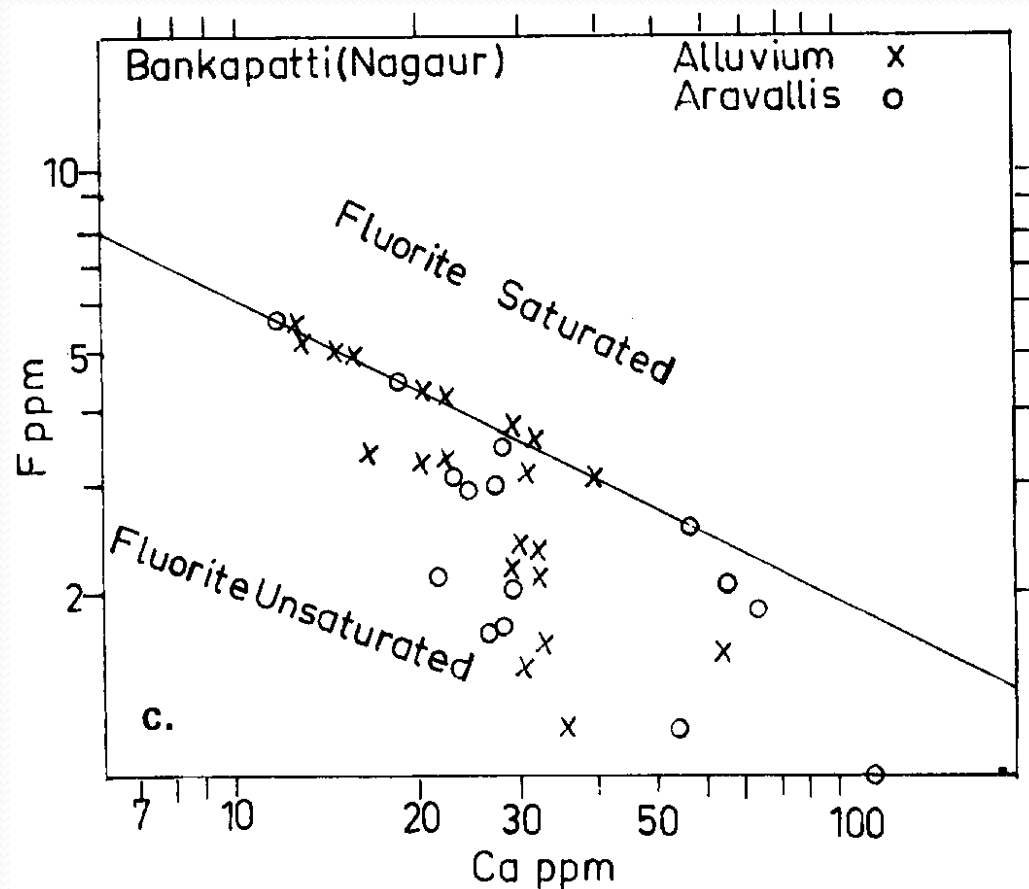
حقیقت است

The solubility of fluorite (CaF_2) often limits the solubility of fluoride.

انحلالیت فلورایت بـعضاً
انحلالیت فلوراید را
محدود می‌سازد

Thus, high fluoride is
usually found in low
Ca waters

پس، فلوراید زیاد معمولاً در
آب‌های که مقدار کلسیم
ان کم باشد یافت
می‌گردد



From Handa 1975. Geochemistry and genesis of fluoride-containing groundwaters in India

بعضی اشتباهات Some common mistakes!

عام

Don't confuse mg/L with $\mu\text{g/L}$

لطفأ واحداث را باهم اشتبا نكنید

1000 micrograms = 1 milligram!

Some labs cite nitrate as NO_3^-

بعضی لابراتوار ها نایتریٹ را مانند NO_3^-

Other labs cite it as nitrate-nitrogen

لابراتوار های دیگری نایتریٹ را مانند $(\text{NO}_3^- - \text{N})$

Remember that

به یاد بایڈ داشت که 50 mg/L NO_3^- is c. $11 \text{ mg/L } (\text{NO}_3^- - \text{N})$

Be careful how laboratories cite alkalinity or bicarbonate

Is it really bicarbonate

دقت بایڈ نمود که لابراتوار ها القلیت وی ا بیکاربونات را ذکر مینمایند ایاغ حقیقتاً بیکاربونات می باشد یعنی (HCO_3^-)

Or is it total alkalinity in

ویاهم مجموع القلیت به واحداث معادل meq/L or mg/L CaCO_3 equivalent