

# Zuren en basen

Berekening van de gevolgen van onvoorziene lozingen op oppervlaktewater of de rwzi

## Achtergrond

Wanneer een stof een zuur of base is, zal door een lozing van die stof de pH van het ontvangende water worden verstoord, met eventueel toxische gevolgen. Dit geldt voor zowel het oppervlaktewater als de RWZI. Dit pH effect kan worden vertaald naar een toxiciteitswaarde in mg/l. De berekende toxiciteitswaarde kan gebruikt worden in het Proteus model. Aangenomen is daarbij dat beneden pH6 en boven pH9 een LC50 waarde wordt bereikt (50% sterfte van aquatische organismen).

## Buffercapaciteit ontvangend water

Het ontvangende water heeft een bufferende werking, waardoor pH effecten van de lozing van een zuur of base worden gedempt. Proteus hanteert een defaultwaarde voor deze buffercapaciteit. Deze is bepaald op basis van meetresultaten uit een meetcampagne in 2018 in Nederlandse oppervlaktewateren en een RWZI (worst case waarden). De eindpunten van deze bepaling zijn pH6 voor zuren en pH9 voor basen.

Defaultwaarden voor de buffercapaciteit het ontvangende water:

Zuur of base	pH effect	Buffercapaciteit defaultwaarde in meq/l	
		oppervlaktewater	RWZI
Zuur	Verlagen tot pH 6	1,19	3,15
base	Verhogen tot pH 9	1,11	2,7

De gebruiker kan deze defaultwaarden wijzigen, maar moet dit wel onderbouwen aan de hand van chemisch-analytisch onderzoek.

## Toxiciteitswaarden voor pH effecten

Uitgaande van de buffercapaciteit kan men de toxiciteitswaarden berekenen, volgens de formules:

Voor lozing op oppervlaktewater:  $\text{pH EC50} = \text{buffercapaciteit} / N * \text{mmv} * 100 / A.$

Voor lozing op de RWZI:  $\text{pH IC50bact} = \text{buffercapaciteit} / N * \text{mmv} * 100 / A.$

Waarin:

pH EC50: toxiciteit in mg/l door zuur of base voor oppervlaktewater

pH IC50bact: toxiciteit in mg/l voor zuur of base voor de RWZI

buffercapaciteit: benodigde hoeveelheid zuur of base in meq/l om de pH tot pH 6 te verlagen of tot pH 9 verhogen

N: aantal protonen of hydroxylionen dat per molecuul beschikbaar is

mmv: massa mol verhouding in g/mol, bijv. voor HCl: 36,5 g/mol

A: percentage zuur of base, bijv. 33 % HCl of 40% NaOH

## Invullen in Proteus

- *pH EC50*

De berekende pH EC50 kan worden ingevuld in Proteus bij de stoffeigenschappen: LC50vis, EC50daphnia of IC50alg.

Let wel dat dit alleen zin heeft als pH EC50 lager is dan de laagst bekende toxiciteitswaarde.

- *pH IC50bact*

De berekende pH IC50bact kan worden ingevuld bij IC50bact. Ook hier heeft dit alleen zin als de pH IC50bact lager is dan de laagst bekende waarde voor IC50bact.

## Mengsels van zuren en basen

Het kan voorkomen dat een mengsel zuren en basen bevat. Hieronder wordt voorgesteld hoe de pH LC50 en pH IC50 in zo'n geval berekend kunnen worden.

Bij het vaststellen van de pH LC50 en de pH IC50 moet eerst gekeken worden of het mengsel zuur, base of neutraal is.

### mengselberekening

- *bepalen of het mengsel zuur, basisch of neutraal is*

Begin met het berekenen hoeveel protonen en hydroxylionen er per gram mengsel zijn en bepaal het verschil van die twee. Als het verschil positief is, is het mengsel zuur, als het verschil negatief is, is het mengsel basisch en als het verschil nul is, is het een neutrale stof.

Het aantal protonen equivalenten volgt uit:

$$P_{eq} = \sum \{ \text{fractie zuur}(i) * \text{aantal protonen zuur}(i) / \text{mmv zuur}(i) * \text{percentage zuur}(i) / 100 \}$$

Waarbij:  $P_{eq}$  = Aantal protonen equivalenten (mol/gr mengsel)  
Fractie zuur = Percentage van het zuur in het mengsel /100  
Aantal protonen = aantal protonen per molecuul zuur  
mmv = massa mol verhouding zuur (gr/mol)  
Percentage zuur: concentratie zuur (%)

Het aantal hydroxylionen volgt uit:

$$H_{eq} = \sum \{ \text{fractie base}(i) * \text{aantal hydroxylionen base}(i) / \text{mmv base}(i) * \text{percentage base}(i) / 100 \}$$

Waarbij:  $H_{eq}$  = Aantal hydroxylionen equivalenten (mol/gr mengsel)  
Fractie base = Percentage van de base in het mengsel /100  
Aantal hydroxylionen = aantal hydroxylionen per molecuul base  
mmv = massa mol verhouding base (gr/mol)  
Percentage base: concentratie base (%)

Berekening verschil:

$$\text{Neutralisatie} = (P_{eq} - H_{eq})$$

Waarbij:  $P_{eq}$  = Aantal protonen equivalenten zuur(en) (mol/gr mengsel)  
 $H_{eq}$  = Aantal hydroxylionen equivalenten base(n) (mol/gr mengsel)

Indien:            Neutralisatie < 0; Mengsel is een base  
                      Neutralisatie = 0; Mengsel is "zuur noch base"  
                      Neutralisatie > 0: Mengsel is een zuur

- *Berekening pH LC50 en pH IC50 van het mengsel*

De pH EC50 (voor lozing op oppervlaktewater) volgt nu uit:

$$\text{pH EC50} = \text{buffercapaciteit} / \text{Neutralisatie}$$

De pH IC50bact (voor lozing op de RWZI volgt) nu uit:

$$\text{pH IC50bact} = \text{buffercapaciteit} / \text{Neutralisatie}$$