



Gerhard Hobiger

Kohlendioxid in Wasser mit Alkalinität

Berechnung und grafische Darstellung
der chemischen Gleichgewichte



Springer Spektrum

Kohlendioxid in Wasser mit Alkalinität

Gerhard Hobiger

Kohlendioxid in Wasser mit Alkalinität

Berechnung und grafische Darstellung
der chemischen Gleichgewichte



Springer Spektrum

Gerhard Hobiger
Fachabteilung Geochemie
Geologische Bundesanstalt
Wien
Österreich

ISBN 978-3-662-45465-7
DOI 10.1007/978-3-662-45466-4

ISBN 978-3-662-45466-4 (eBook)

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Springer Spektrum

© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2015

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung, die nicht ausdrücklich vom Urheberrechtsgesetz zugelassen ist, bedarf der vorherigen Zustimmung des Verlags. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Bearbeitungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Planung: Rainer Münz

Gedruckt auf säurefreiem und chlorfrei gebleichtem Papier

Springer Spektrum ist eine Marke von Springer DE. Springer DE ist Teil der Fachverlagsgruppe Springer Science+Business Media
www.springer-spektrum.de

Für meinen Vater

Vorwort

Kohlendioxid, oder kurz CO_2 , ist eine gasförmige Verbindung, die man im täglichen Leben oft antrifft. Das reicht vom erfrischenden Sodawasser oder CO_2 -Bädern im Wellnessbereich über die – leider oft – in den Medien zu lesenden Gärgasunfällen bis zum Verursacher für die derzeit stattfindende Klimaerwärmung. Überall spielt das Kohlendioxid eine Hauptrolle. Zum Verständnis, warum Kohlendioxid bei all diesen Vorgängen als einer der Hauptakteure in Aktion tritt, müssen die chemischen Gleichgewichte des Kohlendioxids betrachtet werden. In diesem Buch wird die Wechselwirkung des CO_2 mit Wasser berechnet und zur Veranschaulichung grafisch dargestellt. Insgesamt sind es nur wenige Gleichgewichte, die berücksichtigt werden müssen, sie sind jedoch voneinander abhängig. Zum besseren Verständnis wird allerdings immer nur eine chemische Reaktion betrachtet und diskutiert.

Daher ist das Ziel dieses Buches, ein besseres Verständnis der Kohlensäuregleichgewichte zu vermitteln. Es richtet sich an alle, die mit hydrochemischen Problemstellungen, bei denen das Kohlendioxid von Wichtigkeit ist, zu tun haben; es soll aber auch an fortgeschrittenen Lehrgängen der Hydrochemie Verwendung finden sowie eine Hilfestellung für Studierende in höheren Semestern sein, die sich für die mathematische Behandlung von chemischen Gleichgewichten interessieren.

Es werden die theoretischen Grundlagen für die chemischen Gleichgewichte ausführlich erläutert, und die abgeleiteten mathematischen Gleichungen können direkt für eigene Berechnungen herangezogen werden. Sämtliche Berechnungen wurden in MS-EXCEL® als Makro programmiert und als 3D- bzw. 2D-Grafiken dargestellt. Der Autor hat alles exakt abgeleitet und auch mehrmals durch Parallelrechnungen bzw. durch unterschiedliche Programmierungen verifiziert. Sollte sich jedoch trotz aller Sorgfältigkeit ein Fehler eingeschlichen haben, so ist der Verfasser für jede Kritik und Verbesserungsvorschläge dankbar.

An dieser Stelle möchte ich mich beim Springer-Verlag bedanken, der mir während der Erstellung des Buches jederzeit und stets hilfreich zur Seite stand. Insbesondere richtet sich dieser Dank an den Betreuer Herrn Dr. Rainer Münz und an Frau Imme Techentin, die mir sehr viele Tipps und Ratschläge beim Verfassen des Manuskriptes gab und die mühevollen Aufgabe der Vorbereitungen für den Satz übernahm.

Des Weiteren möchte ich mich auch bei meiner Frau und meinen Kindern bedanken, die mich in der Zeit des Verfassens dieses Buches stets verständnisvoll unterstützten.

Im Oktober 2014

Gerhard Hobiger

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
	Literatur	4
2	Grundlegende Definitionen	5
2.1	pX-Wert	5
2.1.1	pH-Wert	5
2.1.2	pK-Wert	6
2.2	Ionenprodukt des Wassers	7
2.3	Alkalinität	8
2.3.1	Verhalten der Alkalinität für verschwindenden Partialdruck des Kohlendioxids	10
2.4	Das offene System	12
	Literatur	12
3	Das offene System von Kohlendioxid in Wasser mit Alkalinität	15
3.1	Definition des Systems	15
3.2	Chemie des Systems	15
3.3	Mathematische Behandlung des offenen Systems mit Alkalinität ...	16
3.3.1	Temperaturabhängigkeit der Gleichgewichtskonstanten ...	19
3.3.2	Allgemeine mathematische Berechnung des Gleichungssystems (3.6– 3.9)	21
3.4	Die einzelnen Systeme im offenen System Kohlendioxid in Wasser mit Alkalinität	28
3.4.1	System 1 : $f(p_{CO_2}, [H^+], [HCO_3^-])$ -Beziehungen zwischen dem Partialdruck des Kohlendioxids, der Wasserstoffionenkonzentration und der Hydrogencarbonatkonzentration	29
3.4.2	System 2 : $f(p_{CO_2}, [H^+], [CO_3^{2-}])$ -Beziehungen zwischen dem Partialdruck des Kohlendioxids, der Wasserstoffionenkonzentration und der Carbonatkonzentration	34
3.4.3	System 3 : $f(p_{CO_2}, [H^+], [Alk])$ -Beziehungen zwischen dem Partialdruck des Kohlendioxids, der Wasserstoffionenkonzentration und der Alkalinität	39

3.4.4	System 4 : $f(p_{CO_2}, [HCO_3^-], [CO_3^{2-}]$)-Beziehungen zwischen dem Partialdruck des Kohlendioxids, der Hydrogencarbonatkonzentration und der Carbonatkonzentration	42
3.4.5	System 5 : $f(p_{CO_2}, [HCO_3^-], [Alk])$ -Beziehungen zwischen dem Partialdruck des Kohlendioxids, der Hydrogencarbonatkonzentration und der Alkalinität	44
3.4.6	System 6 : $f(p_{CO_2}, [CO_3^{2-}], [Alk])$ -Beziehungen zwischen dem Partialdruck des Kohlendioxids, der Carbonatkonzentration und der Alkalinität	48
3.4.7	System 7 : $f([H_2CO_3], [H^+], [HCO_3^-])$ -Beziehungen zwischen der Kohlensäurekonzentration, der Wasserstoffionenkonzentration und der Hydrogencarbonatkonzentration	54
3.4.8	System 8 : $f([H_2CO_3], [H^+], [CO_3^{2-}]$)-Beziehungen zwischen der Kohlensäurekonzentration, der Wasserstoffionenkonzentration und der Carbonatkonzentration	57
3.4.9	System 9 : $f([H_2CO_3], [H^+], [Alk])$ -Beziehungen zwischen der Konzentration an Kohlensäure, der Wasserstoffionenkonzentration und der Alkalinität	60
3.4.10	System 10 : $f([H_2CO_3], [HCO_3^-], [CO_3^{2-}]$)-Beziehungen zwischen der Kohlensäurekonzentration, der Hydrogencarbonatkonzentration und der Carbonatkonzentration	63
3.4.11	System 11: $f([H_2CO_3], [HCO_3^-], [Alk])$ -Beziehungen zwischen der Konzentration der Kohlensäure, der Hydrogencarbonatkonzentration und der Alkalinität	65
3.4.12	System 12 : $f([H_2CO_3], [CO_3^{2-}], [Alk])$ -Beziehungen zwischen der Konzentration der Kohlensäure der Carbonatkonzentration und der Alkalinität	67
3.4.13	System 13 : $f([H^+], [HCO_3^-], [CO_3^{2-}]$)-Beziehungen zwischen der Wasserstoffionenkonzentration, der Hydrogencarbonatkonzentration und der Carbonatkonzentration	70
3.4.14	System 14 : $f([H^+], [HCO_3^-], [Alk])$ -Beziehungen zwischen der Wasserstoffionenkonzentration, der Hydrogencarbonatkonzentration und der Alkalinität	73
3.4.15	System 15 : $f([H^+], [CO_3^{2-}], [Alk])$ -Beziehungen zwischen der Wasserstoffionenkonzentration, der Carbonatkonzentration und der Alkalinität	76
3.4.16	System 16 : $f([HCO_3^-], [CO_3^{2-}], [Alk])$ -Beziehungen zwischen der Hydrogencarbonatkonzentration, der Carbonatkonzentration und der Alkalinität	80
3.5	Allgemeine Bemerkungen zur Vollständigkeit des mathematischen Formelsystems	83
	Literatur	85

4 Das offene System von Kohlendioxid in reinem Wasser als Spezialfall des allgemeinen Falles mit Alkalinität	87
4.1 Das System Kohlensäure und reines Wasser	87
4.2 Die einzelnen Systeme und die Ableitung der zugehörigen expliziten Gleichungen	92
4.2.1 System 0*: $f(p_{CO_2}, [H_2CO_3])$ -Beziehungen zwischen dem Partialdruck des Kohlendioxids und der Kohlensäurekonzentration	92
4.2.2 System 3*: $f(p_{CO_2}, [H^+])$ -Beziehungen zwischen dem Partialdruck des Kohlendioxids und der Wasserstoffionenkonzentration	94
4.2.3 System 5*: $f(p_{CO_2}, [HCO_3^-])$ -Beziehungen zwischen dem Partialdruck des Kohlendioxids und der Hydrogencarbonatkonzentration	96
4.2.4 System 6*: $f(p_{CO_2}, [CO_3^{2-}])$ -Beziehungen zwischen dem Partialdruck des Kohlendioxids und der Carbonatkonzentration	98
4.2.5 System 9*: $f([H_2CO_3], [H^+])$ -Beziehungen zwischen der Kohlensäurekonzentration und der Wasserstoffionenkonzentration	101
4.2.6 System 11*: $f([H_2CO_3], [HCO_3^-])$ -Beziehungen zwischen der Kohlensäurekonzentration und der Hydrogencarbonatkonzentration	103
4.2.7 System 12*: $f([H_2CO_3], [CO_3^{2-}])$ -Beziehungen zwischen der Kohlensäurekonzentration und der Carbonatkonzentration	104
4.2.8 System 14*: $f([H^+], [HCO_3^-])$ -Beziehungen zwischen der Wasserstoffionenkonzentration und der Hydrogencarbonatkonzentration	106
4.2.9 System 15*: $f([H^+], [CO_3^{2-}])$ -Beziehungen zwischen der Wasserstoffionenkonzentration und der Carbonatkonzentration	108
4.2.10 System 16*: $f([HCO_3^-], [CO_3^{2-}])$ -Beziehungen zwischen der Hydrogencarbonatkonzentration und der Carbonatkonzentration	110
Literatur	112
Anhang	113
Sachverzeichnis	141

Kohlendioxid kommt in der Atmosphäre zu 0,03 Vol.-% (Holleman-Wiberg 2007) bzw. mit einem Partialdruck von $3,7 \times 10^{-4}$ atm (Sigg und Stumm 2011) frei vor. Aufgrund der Wechselwirkung zwischen der Atmosphäre mit der Hydrosphäre findet man Kohlendioxid in Form von Kohlensäure und deren Salze auch im Wasser. Nahezu den gesamten Kohlenstoff der Erde findet man in gebundener Form als Kalk (Calciumcarbonat), Dolomit (Calcium-Magnesium-Carbonat), Magnesit (Magnesiumcarbonat) und anderen Carbonaten in den großen carbonathaltigen Gebirgen der Erdkruste (z. B.: Dolomiten, Kalkalpen, etc.). Diese sind in früheren geologischen Zeiten aus Schalen- und Krustentieren entstanden. Das erklärt auch die große Bedeutung der Carbonate in der Geologie der Erde (Schuster et al. 2013). Die hauptsächlich vorkommenden Erdalkalicarbonate besitzen die spezielle chemische Eigenschaft, dass sie sich durch den Kohlendioxidanteil der Atmosphäre und Wasser reversibel in Hydrogencarbonate verwandeln und somit in eine lösliche Form überführt werden können (Dreybrodt et al. 1996). Einer der Ersten, der sich mit dem Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht quantitativ beschäftigt hat, war Tillmanns. Von ihm stammt auch die bekannte Tillmanns-Kurve, aus der man ablesen kann, ob ein Wasser kalklösend, also aggressiv, oder kalkabscheidend ist (Tillmanns und Heubleins 1912). Die damit verbundene Verkarstung von diesen Gebirgen ist die Grundlage für die Entstehung von ausgedehnten Höhlensystemen und den darin befindlichen Stalaktiten und Stalagmiten. Solche Karstgebirge sind als natürliche Wasserreservoirs für Trinkwassernutzungen von unschätzbarem Wert (Hilberg 2011; Reimann und Birke 2010; Zhang 1995). Daraus lässt sich allgemein erkennen, dass Carbonatgesteine als gute Aquifere anzusprechen sind, woraus das große Interesse in der Hydrogeologie resultiert (Golubic et al. 1979; Hölting 1984). Gelangen Wässer in größere Tiefen, so tritt aufgrund der geothermischen Tiefenstufe eine Erwärmung ein. Somit können durch die Wechselwirkung mit dem Gestein Mineralstoffe gelöst werden, wodurch sich diese Wässer mit besonderen Inhaltsstoffen anreichern. Diese Wässer werden oft in der Balneologie und im Wellnessbereich genutzt (Fresenius und Fuchs 1930; Gübeli-Litscher 1948; Hobiger et al. 2005; Zötl und Goldbrunner 1993).

Aufgrund dieser Eigenschaften der Erdalkalicarbonate wird die gesamte Hydrochemie des in Carbonatgesteinen vorkommenden Wassers durch das Zusammenspiel von Lösung und Ausfällung wesentlich beherrscht. Eine entscheidende Rolle spielen dabei die chemischen Gleichgewichte der Kohlensäure und deren Salze in Wasser mit dem Kohlendioxid der Atmosphäre (Dreybrodt et al 1996). Ebenso sind die Gleichgewichte zwischen Kohlendioxid und Wasser in allen Oberflächengewässern der Erde von großer Bedeutung. Durch das theoretische Verständnis dieser chemischen Gleichgewichte können daher die Zusammenhänge zwischen CO_2 -Gehalt der Luft, Niederschlag, Verkarstung, Lösungsinhaltsstoffen im gespeicherten Wasser (Trinkwasserressourcen), Carbonathärte der Wässer sowie die Aufnahmefähigkeit des Kohlendioxids in den großen Ozeanen der Erde interpretiert bzw. abgeschätzt werden (Caleira und Wickert 2003).

Neben den anorganischen Vorkommen spielt der Kohlenstoff die wichtigste Rolle in der organischen Materie. Ohne Kohlenstoff ist ein Leben im herkömmlichen Sinn unmöglich. In sämtlichen biochemischen Reaktionen sind Kohlenstoffverbindungen mitbeteiligt. Wird daher organische Materie oxidativ abgebaut, so entsteht neben anderen Endprodukten auch Kohlendioxid, das wieder über die Photosynthese zum Aufbau von organischen Molekülen in der Natur verwendet wird. Insgesamt existiert daher ein natürlicher biogener Kohlenstoffkreislauf, der organische Moleküle auf- bzw. abbaut (Golubic 1979). Dabei spielt das Kohlendioxid eine zentrale Rolle. Bei diesen chemischen Reaktionen wird neben dem Stoffumsatz immer auch Energie umgesetzt, was sowohl in der gesamten Biosphäre als auch in der Technik ausgenutzt wird. In der Technik nutzt man die dabei frei werdende Energie, die bei der Verbrennung von organischen Verbindungen entsteht. Derzeit werden aber größtenteils nicht erneuerbare fossile Brennstoffe zur Energieerzeugung verwendet, was zu einem zusätzlichen Eintrag an Kohlendioxid in die Atmosphäre führt. Aufgrund des nun im Kreislauf befindlichen größeren Anteils an Kohlendioxid kann in kurzer Zeit der Überschuss nicht mehr in den biogenen Stoffwechsel zurückgeführt werden, sodass sich Kohlendioxid in der Atmosphäre anreichert. Da Kohlendioxid ein Treibhausgas ist, wird diese Erhöhung des Kohlendioxidanteils der Luft als ein Mitverursacher für die globale Klimaerwärmung angesehen. Bedingt durch die chemische Wechselwirkung zwischen Hydrosphäre und Atmosphäre erfolgt dadurch auch eine Anreicherung von Kohlendioxid und somit auch Kohlensäure und deren Salze in der gesamten Hydrosphäre. Daher ist es auch von diesem Gesichtspunkt aus wichtig, die theoretischen Zusammenhänge zwischen der Konzentration des Kohlendioxids in der Atmosphäre und den Verbindungen der Kohlensäure in der Hydrosphäre zu kennen, um bessere Prognosen für die Auswirkungen der Klimaerwärmung und eventuelle Rückkopplungsmechanismen geben zu können. Diese allgemeinen Zusammenhänge haben große Bedeutung in der Umweltchemie (Bliefert 2002) und Umweltgeologie.

In diesem Buch werden die theoretischen Grundlagen für das chemische Gleichgewicht zwischen Kohlendioxid und Wasser mit einer bestimmten Alkalinität allgemein dargestellt. Löst sich Kohlendioxid in Wasser mit Alkalinität, bildet es die zweibasige Kohlensäure, die in 2 Stufen dissoziiert. Vom chemischen Gesichtspunkt aus gesehen sind nur wenige einfache chemische Gleichgewichte zu berücksichtigen und

sie können mit einfachen mathematischen Modellen beschrieben werden. Es wird gezeigt, welche mathematischen Beziehungen zwischen den einzelnen Parametern existieren, und im Anschluss werden alle explizit berechnet und grafisch dargestellt. Um die Anzahl der möglichen mathematischen Gleichungen zu berechnen, werden kombinatorische Methoden eingesetzt. Daraus ergibt sich, dass das allgemeine System zwei Freiheitsgrade besitzt. In weiterer Folge ergeben sich zunächst 16 Systeme mit jeweils 3 voneinander unabhängigen Variablen, wobei jeweils 2 bekannt sein müssen (2 Freiheitsgrade), um die dritte zu berechnen. Aus diesen 16 Systemen folgen 48 mathematische Beziehungen, mit denen das gesamte chemische System beschrieben werden kann. Es ist daher möglich, mit nur zwei bekannten Variablen das gesamte Gleichgewichtssystem zwischen Kohlendioxid und Wasser mit Alkalinität exakt zu berechnen. „Exakt“ bedeutet, dass von allen beteiligten chemischen Gleichgewichten sämtliche Bestimmungsgleichungen ohne Näherungen mitberücksichtigt werden. Nicht berücksichtigt wurden Komplexbildungen und der Ionenstärkeinfluss (Eberle et al. 1982; Eberle und Donnert 1991). Es wurden daher die Aktivitätskoeffizienten gleich eins gesetzt, wodurch das System als ideal angenommen wurde. Der Einfluss von nichtidealen Bedingungen kann allerdings jederzeit mit entsprechenden Näherungsformeln (z. B. Debye-Hückel (Kortüm 1966)) bei numerischer Berechnung mit entsprechenden Programmen leicht mitberücksichtigt werden (Eberle und Donnert 1991). Wie oben erwähnt, genügen im Prinzip nur zwei Variablen, um alle anderen zu bestimmen. Dies ist zwar mathematisch richtig, aber in der chemischen Praxis können in sinnvoller Weise nur bestimmte Parameter vorgegeben werden. Dies folgt unmittelbar aus der Chemie der Kohlensäure und aus den beteiligten chemischen Gleichgewichten.

Aus dem allgemeinen Fall wird durch Gleichsetzen der Alkalinität mit null das Gleichgewicht von Kohlendioxid mit reinem Wasser abgeleitet. Dieser Spezialfall besitzt nur noch 1 Freiheitsgrad, und es existieren 20 Gleichungen, die zur Beschreibung dieses Systems notwendig sind. Dies wird ebenfalls mit kombinatorischen Methoden gezeigt, und im Anschluss werden alle aus den bereits bekannten Gleichungen des allgemeinen Falles hergeleitet, berechnet und wieder grafisch dargestellt.

Dieser Spezialfall kann, nach Berücksichtigung der entsprechenden Gleichgewichtskonstanten, auf alle Gase, die in Wasser eine 2-basige Säure bilden, angewandt werden.

Des Weiteren ist eine Erweiterung auf Gase, die in Wasser eine einbasige Säure bilden, leicht aus dem angegebenen Formalismus möglich. Bildet das Gas eine mehrbasige Säure in Wasser, so müssten noch zusätzlich die weiteren Gleichungen für die Dissoziationsstufen in die Berechnungen einbezogen werden. Um daraus die expliziten Gleichungen darzustellen, ist allerdings ein sehr hoher mathematischer Aufwand nötig. Leicht hingegen ist die Ableitung der möglichen existierenden Beziehungen bei mehr als zweibasigen Säuren über die hier vorgestellte kombinatorische Methode.

Literatur

- Bliefert C (2002) Umweltchemie, 3. Aufl. Wiley-VCH, Weinheim
- Caleira K, Wickert M E (2003) Anthropogenic carbon and ocean pH. *Nature* 425:25
- Dreybrodt W, Lauckner J, Zaihua L, Svensson U, Buhmann D (1996) The kinetics of the reaction $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}^+ + \text{HCO}_3^-$ as one rate limiting steps for the dissolution of calcite in the System $\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2-\text{CaCO}_3$. *Geochim Cosmochim Acta* 60:3375–3381
- Eberle SH, Donnert D (1991) Die Berechnung des pH-Wertes der Calcitsättigung eines Trinkwassers unter Berücksichtigung der Komplexbildung. *Z Wasser Abwasser Forsch* 24:258–268
- Eberle SH, Hennes Ch, Dehnad F (1982) Berechnung und experimentelle Prüfung eines komplexchemischen Modells der Hauptkonstituenten des Rheinwassers. *Z Wasser Abwasser Forsch* 15:217–229
- Fresenius L, Fuchs O (1930) Zur Berechnung der Mineralwasseranalysen. *Z Anal Ch* 82:226–234
- Golubic S, Krumbein W, Schneider J (1979) The carbon cycle. In: Trudinger PA, Swaine DJ (Hrsg) *Studies in environmental science 3. Biochemical cycling of mineral-forming elements*. Elsevier, Amsterdam, S 29–45
- Gübeli-Litscher O (1948) *Chemische Untersuchung von Mineralwässern*. Universitätsverlag Wagner, Innsbruck
- Hilberg S (2011) Anwendung hydrochemischer Modellrechnungen zur Bestimmung von Infiltrationsgebieten – Fallbeispiel Reißbeck (Oberkärnten, Österreich). *Grundwasser Z Fachsekt Hydrogeol* 16:25–36
- Hobiger G, Kollmann W, Shadlau S (2005) Thermal- und Mineralwässer. In: BMLFUW (Hrsg) *Hydrologischer Atlas Österreichs (HAÖ)*, 2. Lieferung, Kartentafel 6.6, Wien
- Holleman-Wiberg (2007) *Lehrbuch der Anorganischen Chemie*, 102. Aufl. de Gruyter, Berlin
- Höltling B (1984) *Hydrogeologie – Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie*, 2. Aufl. Ferdinand Enke, Stuttgart
- Kortüm G (1966) *Lehrbuch der Elektrochemie*. Verlag Chemie, Weinheim
- Reimann C, Birke M (Hrsg) (2010) *Geochemistry of European bottled water*. Boorntreager Science Publishers, Stuttgart
- Schuster R, Daurer A, Krenmayr HG, Linner M, Mandl GW, Pestal G, Reitner JM (2013) *Rocky Austria, Geologie von Österreich – kurz und bunt*. Geologische Bundesanstalt, Wien
- Sigg L, Stumm W (2011) *Eine Einführung in die Chemie wässriger Lösungen und natürlicher Gewässer*, 5. Aufl. vdf, Hochschulverlag an der ETH, Zürich
- Tillmanns J, Heubleins O (1912) Über die kohlen-sauren Kalk angreifende Kohlensäure der natürlichen Wässer. *Gesundheits-Ingenieur* 35:669–667
- Zhang D (1995) *Karst Geomorphology and Hydrogeology*. In: Mt. Kräuterin of the Northeastern Alps, Austria. Dissertation, Univ. Wien
- Zötl J, Goldbrunner JE (1993) *Die Mineral- und Heilwässer Österreichs – Geologische Grundlagen und Spuren*. Springer, Heidelberg

In diesem Kapitel werden die wichtigsten und grundlegenden Definitionen, welche für das Verständnis der Kohlensäuregleichgewichte notwendig sind, definiert und erläutert (Appelo und Postma 2005; Höll 1986; Sigg und Stumm 2011; Stumm und Morgan 1996). Dabei ist zu beachten, dass sämtliche Konzentrationen in mol/l angegeben werden.

2.1 pX-Wert

Allgemein wird ein pX-Wert in der Chemie wie folgt definiert:

$$pX = -\lg X \quad (2.1)$$

Die Umkehrung davon lautet:

$$X = 10^{-pX} \quad (2.2)$$

X ... reelle positive Größe ($X > 0$)

Sinnvolle Anwendungen ergeben sich dann, wenn die Größe X über mehrere 10er-Potenzen variieren kann und somit im logarithmischen Maßstab besser dargestellt werden kann. Ein wichtiges Beispiel ist der pH-Wert.

2.1.1 pH-Wert

In der Chemie der wässrigen Lösungen spielt die Aktivität bzw. die Konzentration der Wasserstoffionen eine entscheidende Rolle (Bliefert 1978; Eberle et al. 1982; Eberle und Donnert 1991; Galster 1990; Kahlert und Scholz 2014; Lahav et al.