

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
		IX

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