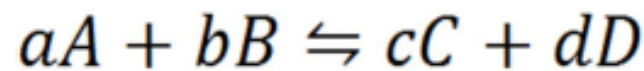


Massenwirkungsgesetz

Reaktionsgleichung



A,B: Reaktand, Edukt

C,D: Produkt

a,b,c,d: stöchiometrische Koeffizienten

Ionenprodukt

$$Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Q: Ionenprodukt

[]: Ionenaktivitäten

Quelle: Wismeier, 2011

Q ist das Ionen-
Aktivitätsprodukt
(oft IAP abgekürzt)

Eckige Klammern
bedeuten, dass hier
Aktivitäten eingesetzt
werden

Massenwirkungsgesetz

Im thermodynamischen Gleichgewicht gilt:

$$Q = K$$

K: Gleichgewichtskonstante

und damit:

$$K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Im Ungleichgewicht gilt:

- $Q < K$: Reaktion verläuft in Richtung der Produkte (nach rechts)
- $Q > K$: Reaktion verläuft in Richtung der Edukte (nach links)

Quelle: Wismeier, 2011

Es wird vorausgesetzt,
dass das IAP oder Q
dem Gleichgewichtswert entspricht

Die Geschwindigkeit,
mit der K erreicht wird,
ist nicht definiert: Sie
reicht von Minuten bis
zu Jahrtausenden (sogar
Millionen Jahren)

Massenwirkungsgesetz

Im thermodynamischen Gleichgewicht gilt:

$$Q = K$$

K: Gleichgewichtskonstante

und damit:

$$K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

Im Ungleichgewicht gilt:

- $Q < K$: Reaktion verläuft in Richtung der Produkte (nach rechts)
- $Q > K$: Reaktion verläuft in Richtung der Edukte (nach links)

Quelle: Wismeier, 2011

Es wird vorausgesetzt,
dass das IAP oder Q
dem Gleichgewichtswert entspricht

Die Geschwindigkeit,
mit der K erreicht wird,
ist nicht definiert: Sie
reicht von Minuten bis
zu Jahrtausenden (sogar
Millionen Jahren)

Aktivität von Ionen im Wasser: Definition

- Davies Gleichung (PHREEQC default)

$$\log(\gamma_i) = -Az_i^2 \left(\frac{\sqrt{\mu}}{1 + \sqrt{\mu}} - 0.3\mu \right)$$

- Erweiterte WATEQ und erweiterte Debye-Hückel Gleichungen

$$\log(\gamma_i) = -\frac{Az_i^2\sqrt{\mu}}{1 + Ba_i^0\sqrt{\mu}} - b_i\mu$$

A, B : temperaturabhängige Konstanten

a_i^0, b_i : ionenspezifische Parameter

Quelle: Wismeier, 2011

Die vereinfachte Berechnung kann mit der Davies-Gleichung erfolgen, die Debye-Hückel Gleichung berücksichtigt auch den Ionenradius

Aktivität von Ionen im Wasser: Definition

- Die Ionenstärke einer Lösung ist ein Maß für die elektrische Feldstärke aufgrund gelöster Ionen.

(Wikipedia)

$$\mu = \frac{1}{2} \sum_i^{N_{aq}} z_i^2 \frac{n_i}{W_{aq}}$$

z_i :	Valenz der Spezies i
N_{aq} :	Anzahl von Spezies in der Lösung
n_i :	Mol der Spezies i [mol]
W_{aq} :	Masse Wasser [kg]

Quelle: Wismeier, 2011

Die Ionenstärke berücksichtigt die Molalität (n) und die elektrische Ladung der gelösten Substanzen.

Aktivität von Ionen im Wasser: Definition

- Die Ladungsbilanz natürlich vorkommender Wässer ist praktisch immer ausgeglichen!
- Fehler in der Ladungsbilanz von Grundwasseranalysen rühren daher von Ungenauigkeiten bei der Messung und/oder nicht analysierten Inhaltsstoffen.
- Fehler in der Ladungsbilanz von bis zu 2% sind in den meisten Labor unvermeidbar. Bisweilen müssen auch größere Fehler in Kauf genommen werden. Bei Proben mit Fehlern grösser als 5% sollten jedoch die Analyseverfahren in Augenschein genommen werden

(nach Appelo and Postma (2005): Geochemistry, groundwater and pollution)

Quelle: Wismeier, 2011