



Calcitlösekapazität Ein Survey zur Berechnung

Pilotstudie unter Einbindung
der Unabhängigen Stellen Deutschlands
nach Trinkwasserverordnung 2001

Band 1 der Schriftenreihe

Systeme, Prozesse, Konformität

Calcitlösekapazität

Ein Survey zur Berechnung

Pilotstudie unter Einbindung der Unabhängigen Stellen nach Trinkwasserverordnung 2001

Systeme, Prozesse, Konformität

Band 1 der Schriftenreihe

Die Schriftenreihe greift aus Gesundheitsverwaltung und gesundheitlichem Verbraucherschutz Themen zu Systemen und Prozessen auf. Dies umfasst unter anderem Qualitätsmanagementsysteme und Prozesse wie Risikoanalysen, sowie die Bewertung und Überprüfung von Produktions- und Dienstleistungsprozessen, z. B. durch Qualitätsaudits, sowie Akkreditierungs- oder Notifizierungsverfahren.

Grundlage dieser Publikation ist die Auswertung eines Laborsurvey zur Berechnung der Calcitlösekapazität, einem Parameter der Trinkwasserverordnung.

Der Survey wurde von der Unabhängigen Stelle nach Trinkwasserverordnung am Bayerischen Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit (LGL) unter Einbezug aller Unabhängigen Stellen Deutschlands durchgeführt.

An der Vorbereitung der Pilotstudie war maßgeblich Herr Dr. Lessig (LGL) beteiligt; dafür und für seine fachliche Beratung gilt ihm der Dank der Autoren. Wir danken den Unabhängigen Stellen für die Unterstützung des Projekts und besonders den Trinkwasseruntersuchungsstellen für ihre Bereitschaft zur Teilnahme am Survey. Nicht zuletzt sei Frau Dr. Graser (Chemisches Labor Dr. Graser, Schonungen), Frau Ruhnke (Institut für Lebensmittelchemie am Landesuntersuchungsamt Rheinland-Pfalz) und Herrn Dr. Lacombe (Landesinstitut für den Öffentlichen Gesundheitsdienst NRW) für die fachliche Beratung gedankt.

Herausgeber:

Bayerisches Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit
Eggenreuther Weg 43
91058 Erlangen

Telefon: 09131/764-0
Telefax: 09131/764-102

E-Mail: poststelle@lgl.bayern.de
Internet: www.lgl.bayern.de

Autorinnen und Autoren der Fachpublikation:

Claudia Schäfer, Dr. Bertram Reindl, Dr. Roswitha Müller, Dr. Peter Franke

Bei fachlichen Fragen wenden Sie sich bitte an:

Dr. Bertram Reindl
E-Mail: bertram.reindl@lgl.bayern.de

Stand:

September 2006

ISSN 1863-5008	(Print Ausgabe)
ISBN 3-939652-13-X	(Print Ausgabe bis 31.12.2006)
ISBN 978-3-939652-13-7	(Print Ausgabe ab 01.01.2007)
ISBN 3-939652-14-8	(Online Ausgabe bis 31.12.2006)
ISBN 978-3-939652-14-4	(Online Ausgabe ab 01.01.2007)

Diese Druckschrift wird kostenlos im Rahmen der Öffentlichkeitsarbeit der Bayerischen Staatsregierung herausgegeben. Sie darf weder von den Parteien noch von Wahlwerbern oder Wahlhelfern im Zeitraum von fünf Monaten vor einer Wahl zum Zweck der Wahlwerbung verwendet werden. Dies gilt für Landtags-, Bundestags-, Kommunal- und Europawahlen. Missbräuchlich ist während dieser Zeit insbesondere die Verteilung auf Wahlveranstaltungen, an Informationsständen der Parteien sowie das Einlegen, Aufdrucken und Aufkleben parteipolitischer Informationen oder Werbemittel. Untersagt ist gleichfalls die Weitergabe an Dritte zum Zweck der Wahlwerbung. Auch ohne zeitlichen Bezug zu einer bevorstehenden Wahl darf die Druckschrift nicht in einer Weise verwendet werden, die als Parteinahme der Staatsregierung zugunsten einzelner politischer Gruppen verstanden werden könnte. Den Parteien ist es gestattet, die Druckschrift zur Unterrichtung ihrer eigenen Mitglieder zu verwenden. Bei publizistischer Verwertung – auch von Teilen – werden Angabe der Quelle und Übersendung eines Belegexemplars erbeten. Das Werk ist urheberrechtlich geschützt. Alle Rechte sind vorbehalten. Die Broschüre wird kostenlos abgegeben, jede entgeltliche Weitergabe ist untersagt. Diese Broschüre wurde mit großer Sorgfalt zusammengestellt. Eine Gewähr für die Richtigkeit und Vollständigkeit kann dennoch nicht übernommen werden

Inhaltsverzeichnis

1	EINLEITUNG	3
2	PROBLEMSTELLUNG	4
3	GLEICHGEWICHTSSYSTEM DER KOHLENSÄURE	5
3.1	Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht	5
3.2	pH - Wert, die Basekapazität und die Säurekapazität	5
3.3	Calcitsättigung und Entsäuerung eines Wassers	8
4	RECHENVERFAHREN NACH DIN 38404-10: 1995-4.....	9
4.1	Rechenverfahren 1	9
4.2	Rechenverfahren 2	10
4.3	Rechenverfahren 3	12
5	RICHTIGKEIT DER WASSERANALYSE	14
6	CALCITSURVEY	17
6.1	Durchführung.....	17
6.2	Auswertung.....	24
6.2.1	Rechenverfahren und Rechenprogramme	24
6.2.2	Darstellung der Berechnungsergebnisse.....	27
6.2.2.1	Datensatz 1.....	28
6.2.2.2	Datensatz 2.....	30
6.2.2.3	Datensatz 3.....	32
6.2.2.4	Datensatz 4.....	34
6.2.2.5	Datensatz 5.....	36
6.2.2.6	Datensatz 6.....	38
6.2.2.7	Datensatz 7.....	40
6.2.2.8	Datensatz 8.....	42
6.2.3	Zusammenfassung der Kommentare	44
6.3	Diskussion	51
7	AUSBLICK	53
8	LITERATURVERZEICHNIS.....	54

Zusammenfassung

Die Anforderungen an den pH - Wert eines Trinkwassers sind in der Trinkwasserverordnung (TrinkwV) festgelegt. Die Verordnung fordert in Umsetzung der EG-Richtlinie 98/83/EG die Nichtkorrosivität des Trinkwassers. Dazu sind der Indikatorparameter Wasserstoffionenkonzentration und die Calcitlösekapazität mit Grenzwerten versehen. Während die Bestimmung eines pH - Wertes relativ unproblematisch und durch Ringversuche bereits vielfach überprüft worden ist, ist der Calcitlösekapazitätswert aufgrund der Kombination aus Analytik mehrerer Parameter und aufwendiger Berechnung schwieriger zu ermitteln.

Die Unabhängigen Stellen Deutschlands nach TrinkwV haben einen Survey zur Berechnung der Calcitlösekapazität initiiert. Dazu wurden von der Unabhängigen Stelle am Bayerischen Landesamt für Gesundheit und Lebensmittelsicherheit (LGL) Datensätze mit den Analysewerten eines Wassers vorgegeben, die mit den laboreigenen Programmen und Methoden durch die Labore bearbeitet werden sollten. An der Umfrage nahmen 107 Labore aus 8 Bundesländern teil.

85 % der Labore verwendeten das Rechenverfahren 3 nach DIN 38404-10 zur Berechnung der Calcitlösekapazität. 21 verschiedene kommerziell verfügbare Programme und eigene Rechenroutinen wurden eingesetzt. Die Ergebnisse zu den einzelnen Datensätzen führten trotz vorgabetechnischem Ausschluss jeglicher Messunsicherheit der verwendeten Analyten nicht nur zu keinen einheitlichen Resultaten zwischen den Laboren, sondern zeigten auch erhebliche Schwankungen bei einzelnen Programmen auf. Einfluss auf die Spannweite der Ergebnisse hatte die Wahl der nach DIN möglichen Eingangsgrößenpaare, hier besonders pH - Wert, Säurekapazität ($K_{S4,3}$) und Basekapazität ($K_{B8,2}$). Obwohl die Rechenprogramme auf den Kontrolldaten der DIN 38404-10 basieren, ist das offensichtlich kein Garant für eine zufrieden stellende Übereinstimmung der Berechnungsergebnisse. Nur wenige Anwender überprüften die Richtigkeit des Ergebnisses. Zur Prüfung der Plausibilität der Analysewerte kann die Ionenbilanz, sowie die Übereinstimmung des berechneten mit dem gemessenen pH - Wert herangezogen werden. Es wird offensichtlich von den meisten Rechenprogrammen keine Überprüfung der Plausibilität der eingegebenen Analysenwerte durchgeführt.

1 Einleitung

Die Anforderungen an den pH - Wert eines Trinkwassers wurden in der novellierten Trinkwasserverordnung [1] neu festgelegt. Die Trinkwasserverordnung setzt die Vorgaben der EG-Richtlinie [2] über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch von 1998 in nationales Recht um. Sie trat am 01.01.2003 in Kraft. Die EU-Richtlinie legt für den Indikatorparameter Wasserstoffionenkonzentration den Grenzbereich $6,5 \leq \text{pH} \leq 9,5$ fest. Zudem wird gefordert, dass das Wasser nicht korrosiv wirken sollte [2]. Die Umsetzung dieser Forderung wurde in Deutschland an das Gleichgewichtssystem der Kohlensäure gebunden. Die Trinkwasserverordnung begrenzt das Calcitlösevermögen auf 5 mg/l CaCO_3 für Einzelwässer und auf 10 mg/l CaCO_3 für Mischwässer. Bei einem pH - Wert $\geq 7,7$ gilt diese Forderung für Einzelwässer als erfüllt. Der Korrosionsangriff auf metallische Rohrleitungen ist ab einem pH - Wert von 7,7 vernachlässigbar [3]. Die Asbest- und Schwermetallbelastung eines Wassers kann dann gering gehalten werden, wenn der pH - Wert eines Wassers hoch und die Calcitlösekapazität gering ist [4]. Eine Bestimmung der Calcitlösekapazität ist entsprechend erforderlich, wenn der pH - Wert des Wassers am Ausgang des Wasserwerks $< 7,7$ ist (s. Abb. 1). Werden dann die Grenzwerte für das Calcitlösevermögen überschritten, ist eine Entsäuerung des Wassers erforderlich [1].

Trinkwasserverordnung 2001, Anlage 3, Nr.18 Wasserstoffionenkonzentration (pH - Wert):
„Das Wasser sollte nicht korrosiv wirken. **Die berechnete Calcitlösekapazität am Ausgang des Wasserwerks darf 5 mg/l CaCO_3 nicht überschreiten. Diese Forderung gilt als erfüllt, wenn der pH - Wert am Wasserwerksausgang $\geq 7,7$ ist. Bei der Mischung von Wasser von zwei oder mehreren Wasserwerken darf die Calcitlösekapazität im Verteilungsnetz den Wert von 10 mg/l nicht überschreiten.** Für in Flaschen oder Behältnisse abgefülltes Wasser kann der Mindestwert auf 4,5 pH-Einheiten herabgesetzt werden. Für in Flaschen oder Behältnisse abgefülltes Wasser, das von Natur aus kohlenensäurehaltig ist oder mit Kohlensäure versetzt wurde, kann der Mindestwert niedriger sein. **Der Grenzwert für den pH - Wert muss zwischen $\geq 6,5$ und $\leq 9,5$ pH-Einheiten liegen.**“

Abb. 1: TrinkwV 2001

2 Problemstellung

Die Trinkwasserverordnung von 1990 [5] begrenzte den so genannten „Delta-pH-Wert“ und forderte bei einer Überschreitung des Grenzwertes eine Entsäuerung des Wassers. Der Delta-pH-Wert ist definiert als die Differenz des gemessenen pH - Wertes zu dem bei der vorhandenen Härte und dem Hydrogencarbonatgehalt im Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht zu erwartenden pH - Wert [6]. Der Parameter Delta-pH-Wert beschreibt den Sättigungszustand eines Wassers an Calcit.

Auch die in der Trinkwasserverordnung geforderte Ermittlung der Calcitlösekapazität beschreibt den Calcitsättigungszustand eines Wassers. Sie erfolgt mittels Berechnung eines konkreten Zahlenwertes in Milligramm pro Liter (mg/l) oder Millimol pro Liter (mmol/l) Calciumcarbonat. Die Berechnung ist mathematisch aufwendig, was die Anwendung von Rechenprogrammen sinnvoll macht. Da eine Grenzwertüberschreitung der Calcitlösekapazität eine Entsäuerung des Trinkwassers erfordert, ist die Zuverlässigkeit der Analyse- und der Berechnungsergebnisse elementar. Beispiele aus der Praxis zeigen, dass Berechnungsergebnisse zur Calcitlösekapazität für ein konkretes Wasser durch verschiedene Labore zu stark abweichenden Ergebnissen führen können.

Um einen Überblick bezüglich der angewendeten Verfahren, Rechenprogramme und der Güte der Berechnungsergebnisse zur Calcitlösekapazität bei nach Trinkwasserverordnung gelisteten Laboratorien zu erhalten, wurde von der Unabhängigen Stelle Bayerns eine Berechnungsumfrage vorbereitet und in Absprache mit den Unabhängigen Stellen Deutschlands nach TrinkwV 2001 durchgeführt.

Nachfolgend sind kurz die theoretischen Hintergründe der Thematik zusammengefasst. Danach wird auf die Berechnungsumfrage eingegangen, sowie die Ergebnisse dargestellt und abschließend diskutiert.

3 Gleichgewichtssystem der Kohlensäure

3.1 Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht

Bei der Auflösung von Calciumcarbonat (Calcit, CaCO_3) in Wasser unter Einwirkung von Kohlenstoffdioxid stellt sich das Gleichgewichtssystem der Kohlensäure ein. Findet weder eine Auflösung noch eine Abscheidung von Calciumcarbonat in einem kohlensäurehaltigen Wasser statt, befindet sich dieses im so genannten „Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht“. Es ist calcitgesättigt [6].



Liegt ein Überschuss an freiem Kohlenstoffdioxid vor, bewirkt dieses, dass Calciumcarbonat gelöst wird. Der für die Calcitauflösung verantwortliche Anteil der überschüssigen freien Kohlensäure wird als kalklösende Kohlensäure bezeichnet [6].

Umgekehrt bewirkt ein Defizit an freier Kohlensäure oder ein Überschuss an Ca^{2+} -Ionen (hartes Wasser), dass bis zum Erreichen des Gleichgewichts Calcit abgeschieden wird [6].

Die Menge Calcit, die ein Wasser pro Liter lösen kann, wird als Calcitlösekapazität und die Menge Calcit, die ein Wasser pro Liter abscheiden kann, als Calcitabscheidekapazität bezeichnet [6].

Das Gleichgewichtssystem der Kohlensäure (Kohlenstoffdioxid, Hydrogencarbonat und Carbonat) wird durch den pH - Wert (vgl. Abb. 2) und die Temperatur beeinflusst. Das Gleichgewicht kann auch als Funktion der Basenkapazität oder der Säurekapazität beschrieben werden.

3.2 pH - Wert, die Basekapazität und die Säurekapazität

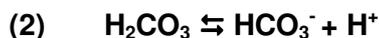
Der pH - Wert des Wassers wird vom Gehalt an freiem Kohlenstoffdioxid (CO_2) bestimmt. Er ist eine Funktion des Calcit-Kohlensäure-Systems [6]. Ein Wasser mit einem hohen Anteil freier Kohlensäure liegt im sauren pH-Bereich ($\text{pH} < 7$). Ein solches Wasser befindet sich nicht im Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht, es ist stark calcitlösend [6]. Wasser mit einem pH - Wert von über 7,8 ist dagegen nur gering calcitlösend [7]. Bei einem pH - Wert von 8,2 ist

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

praktisch keine freie aggressive Kohlensäure mehr vorhanden. [8]. Das Wasser ist calcitabscheidend.

Das Gleichgewichtssystem der Kohlensäure ist ein kompliziertes, aufwendig zu analysierendes System. Bei der Reaktion von CO_2 und Wasser kommt es nicht zu einer vollständigen Umsetzung des CO_2 . Der Hauptanteil des CO_2 bleibt als Gas gelöst [6].

Wird einem CO_2 -haltigen Wasser Natronlauge zugefügt, bewirkt dieser einen Domino-Effekt. Es breiten sich mehrere Reaktionen über alle Komponenten des anorganischen Kohlenstoffes¹ aus: Wasserstoffionen werden neutralisiert (1), neue Wasserstoffionen werden nachgeliefert, indem Kohlensäure (H_2CO_3) dissoziiert (2) und neue Kohlensäure (H_2CO_3) wird nachgeliefert, indem ein Teil des Kohlenstoffdioxids (CO_2) mit Wasser reagiert (3). Die Folge dieser Prozesse besteht im wesentlichen darin, dass nachher weniger CO_2 vorhanden ist als vorher. Die einzige Eigenschaft, die sich zur Analyse des Kalk-Kohlensäure-Gleichgewichts eignet, ist ihr Verhalten gegenüber Säuren und Laugen. Eine Reaktion mit Säuren oder Laugen verändert das Gleichgewichtssystem. Die Endpunkte solcher Prozesse im System sind durch bestimmte pH - Werte charakterisiert (s. Abb.2). Jeder pH - Wert eines Wassers bedingt ein bestimmtes Konzentrationsverhältnis des anorganischen Kohlenstoffs im Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht [6].



¹ Komponenten des anorganischen Kohlenstoffes: Kohlenstoffdioxid (CO_2), Hydrogencarbonat (HCO_3^-) und Carbonat (CO_3^{2-})

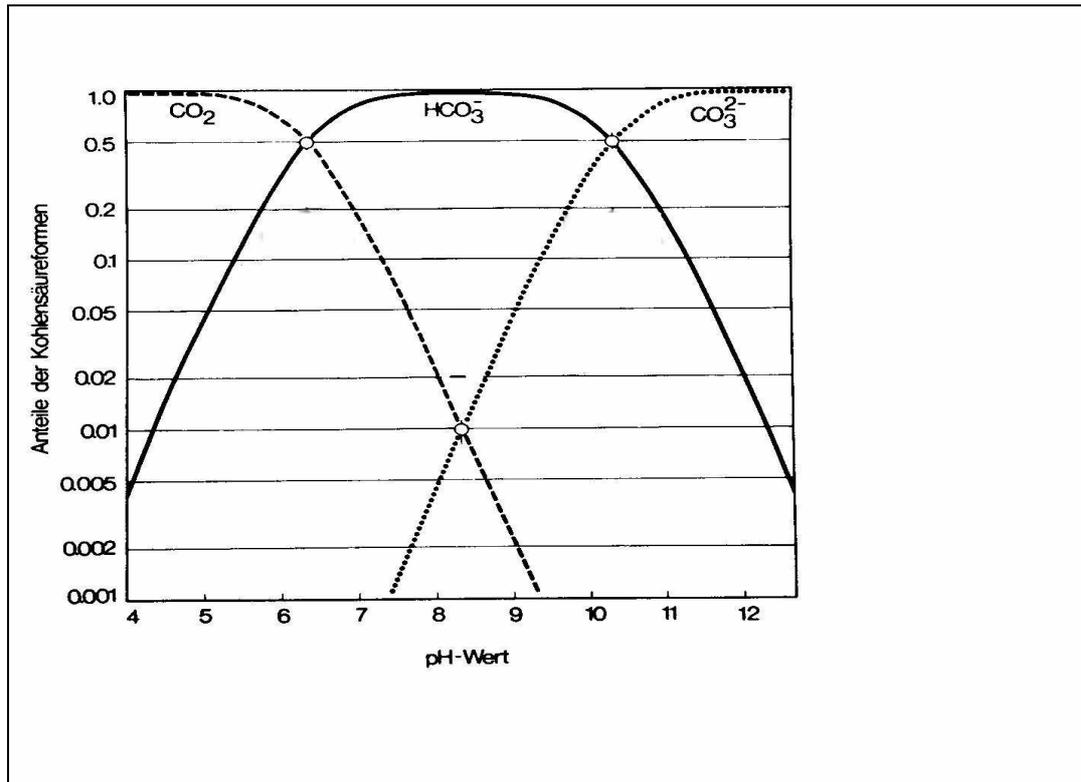


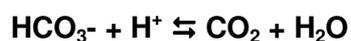
Abb. 2: „Kohlensäureformen“ in Abhängigkeit vom pH - Wert, modifiziert nach [8]

Zur Bestimmung der Basekapazität bis pH 8,2 wird dem Wasser Natronlauge solange zugegeben, bis fast das gesamte CO₂ aufgebraucht ist. Nun besteht der anorganische Kohlenstoff nahezu ausschließlich aus Hydrogencarbonat. Der pH - Wert liegt bei 8,2. Wird die Konzentration der Natronlauge vorgegeben und das Volumen der zugegebenen Natronlauge gemessen, ist bei Erreichen des pH - Wertes 8,2 eine Titration durchgeführt und die Basekapazität bis pH 8,2 ermittelt. Hierbei laufen die Reaktionen 1, 2 und 3 (s. 4.3) ab. Nach Addition der drei Gleichungen ergibt sich:



Die Basekapazität bis pH 8,2 ist daher ein Maß dafür, wie viel CO₂ (mmol/l) die Probe enthalten hat [6].

Die Säurekapazität bis pH 4,3 wird ermittelt, indem einem Wasser, welches Hydrogencarbonat enthält, Salzsäure zugefügt wird. Dann laufen die Reaktionen, die durch Natronlauge ausgelöst wurden, in umgekehrter Richtung ab.



Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Es wird Salzsäure zugesetzt, bis nahezu das gesamte Hydrogencarbonat aufgebraucht ist. Der anorganische Kohlenstoff besteht nun fast ausschließlich aus CO_2 , der pH Wert liegt bei 4,3. Sind die Konzentration und das Volumen der zugesetzten Salzsäure bekannt, ist bei Erreichen des pH - Wertes 4,3 die Säurekapazität bis pH 4,3 ermittelt. Entsprechend der o.g. Reaktionsgleichung ist die Säurekapazität bis pH 4,3 ein Maß dafür, wie viel Hydrogencarbonat (in mmol/l) die Probe enthalten hat [6].

Wird davon ausgegangen, dass Kohlenstoffdioxid, Hydrogencarbonat und Carbonat die allein bestimmenden Säuren im Wasser sind, bestimmen diese sich gegenseitig. Entsprechend kann einer dieser Parameter als Kontrollgröße für den anderen verwendet werden [9].

3.3 Calcitsättigung und Entsäuerung eines Wassers

Ein Wasser, welches überschüssiges CO_2 enthält, ist in der Lage Calcit aufzulösen. Es besitzt eine Calcitlösekapazität. Um ein Wasser hinsichtlich seiner Abweichung vom Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht beurteilen zu können, eignet sich sowohl das überschüssige CO_2 als auch die Calcitlösekapazität. Hierbei liegt aber keine lineare Korrelation vor, denn mit zunehmendem Reaktionsfortschritt steigt die Hydrogencarbonatkonzentration und somit auch der Bedarf an zugehörigem CO_2 . Dieser Anteil CO_2 geht auf diese Weise der Calcitlösung verloren [6].

Die Beurteilung eines Wassers im Hinblick auf die Calcitlösekapazität geschieht dadurch, dass die Probe rechnerisch oder experimentell in den Zustand der Calcitsättigung gebracht wird.

Hierzu eignet sich zum einen die Entfernung oder Einleitung von CO_2 . Das Austreiben von CO_2 mit Luft wird auch als „physikalische Entsäuerung“ bezeichnet. Der dadurch erreichte Sättigungszustand wird nach DIN 38404-10:1995-04 durch den „Sättigungs-pH - Wert nach Austausch von Kohlenstoffdioxid“ charakterisiert“.

Der andere Weg ist die Entsäuerung durch Calcit. Dabei wird ein Sättigungszustand durch die Zugabe von Calciumcarbonat (Calcit) erreicht, der nach DIN 38404-10:1995-04 unterschiedlich charakterisiert wird:

- Der „Sättigungs-pH - Wert nach Einstellung der Calcitsättigung durch Calcit“
- Die pro Liter bei der Gleichgewichtsherstellung in die Lösung gehende Calcitmasse, dies beschreibt die Calcitlösekapazität bzw. Calcitabscheidekapazität [6].

4 Rechenverfahren nach DIN 38404-10: 1995-4

4.1 Rechenverfahren 1

Das Rechenverfahren 1 bestimmt die Calcitsättigung eines Wassers durch Berechnung des Sättigungs-pH - Wertes nach Austausch von Kohlenstoffdioxid (pHA).

Anwendungsbereich [DIN 38404-10: 1995-04]:

- Temperaturbereich: 0-40 °C, für Wasser im Bereich der Zahlenwerte oder Größen der Tabelle 1 (o. g. DIN)
- Bestimmung des Sättigungs-pH - Wertes pHA entsprechend der Säurekapazität $K_{S4,3}$ und der Calciumkonzentration aus den Werten nach Tabelle 1 (o. g. DIN)
- Stoffe, die Einfluss auf die Bestimmung von $K_{S4,3}$ oder die Komplexbildung haben, dürfen eine Gesamtkonzentration von 0,1 mmol/l nicht überschreiten
- Voraussetzung für Gültigkeit des Verfahrens: $\alpha(\text{SO}_4)/(\alpha(\text{Ca}) + \alpha(\text{Mg})) \leq 0,5$

Die genannte Tabelle 1 der DIN ist nicht für salzreiche Wasser anwendbar, deshalb darf die elektrische Leitfähigkeit κ_{25} eines Wassers nicht größer sein als der entsprechende Maximalwert κ_{25-max} für die Stoffmengenkonzentration bzw. die Massenkonzentration von Calcium.

Sind diese Bedingungen nicht gegeben, ist das Rechenverfahren 3 anzuwenden.

Erforderliche Analysewerte [DIN 38404-10: 1995-04]:

- pH_t pH - Wert des zu untersuchenden Wassers bei Messtemperatur t
(nach DIN 38404-5)
- t Messtemperatur des Wassers, in °C
- t_b Bewertungstemperatur des Wassers auf die die Aussage des Verfahrens bezogen wird, in °C
- κ_{25} elektrische Leitfähigkeit, bei 25 °C, in mS/ m
(nach DIN EN 27888)
- $K_{S4,3}$ Säurekapazität bis pH 4,3, in mmol/ l
(nach DIN 38409-7)

Weiterhin ist die Stoffmengenkonzentration oder Massenkonzentration folgender Stoffe erforderlich: Calcium, Magnesium und Sulfat.

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Bestimmung der Calcitsättigung [DIN 38404-10: 1995-04]:

Es wird der gegebenenfalls auf die Bewertungstemperatur umgerechnete pH_{tb} mit dem auf die Bewertungstemperatur t_b bezogenen Sättigungs-pH - Wert pH_{Atb} verglichen und folgende Aussagen getroffen:

$pH_{tb} < pH_{Atb} - a_1$: Das Wasser ist calcitlösend.

$pH_{tb} = pH_{Atb} \pm a_1$: Das Wasser ist im Zustand der Calcitsättigung.

$pH_{tb} > pH_{Atb} + a_1$: Das Wasser ist calcitabscheidend.

a_1 : Grenzabweichung zur Bestimmung der Calcitsättigung nach Rechenverfahren 1, $a_1=0,05$

Der Bedingungsrahmen des Rechenverfahrens 1 ist sehr eng. Falls dieses Verfahren deshalb nicht anwendbar ist, fordert die Norm die Anwendung des Rechenverfahrens 3. Zudem ist es mit diesem Verfahren nicht möglich, die Calcitsättigung eines Wassers als Calcitlösekapazität ($CaCO_3$ in mg/l) zu beschreiben. Entsprechend erfüllt es nicht die Anforderungen der Trinkwasserverordnung.

4.2 Rechenverfahren 2

Das Rechenverfahren 2 bestimmt die Calcitsättigung eines Wassers durch Berechnung des Sättigungs-pH - Wertes nach Strohecker und Langelier (pHL).

Anwendungsbereich [DIN 38404-10: 1995-04]:

Das Verfahren ist unter folgenden Einschränkungen geeignet, die Calcitsättigung eines Wassers zu ermitteln:

Für die Berechnung von pH_L muss gelten:

- Elektrische Leitfähigkeit bei 25 °C in mS/m $5 \leq K_{25} \leq 200$
- Säurekapazität bis pH 4,3 in mmol/l $0,25 \leq K_{S4,3} \leq 10$
- Stoffmengenkonzentration an Calcium in mmol/l $0,25 \leq c(Ca) \leq 10$

Das Verfahren berücksichtigt nicht die Komplexbildung. Stoffe, die auf die Bestimmung von $K_{S4,3}$ oder auf die Komplexbildung einen Einfluss haben, dürfen eine Gesamtkonzentration von 0,1 mmol/l nicht überschreiten.

Weiterhin muss folgende Bedingung gelten:

$$c(SO_4)/(c(Ca) + c(Mg)) \leq 0,5$$

Werden diese Bedingungen nicht eingehalten, ist das Rechenverfahren 3 anzuwenden.

Erforderliche Analysewerte [DIN 38404-10: 1995-04]:

- pH_t pH - Wert des zu untersuchenden Wassers bei Messtemperatur t
(Bestimmung nach DIN 38404-5)
- t Messtemperatur des Wassers, in °C
- t_b Bewertungstemperatur des Wassers auf die die Aussage des Verfahrens bezogen wird, in °C
- K_{25} elektrische Leitfähigkeit, bei 25 °C, in mS/m (nach DIN EN 27888)
- $K_{S4,3}$ Säurekapazität bis pH 4,3, in mmol/l (nach DIN 38409-7)

Weiterhin sind die Stoffmengenkonzentrationen oder Massenkonzentrationen von Calcium, Magnesium und Sulfat erforderlich.

Bestimmung der Calcitsättigung [DIN 38404-10: 1995-04]:

Es wird der gegebenenfalls auf die Bewertungstemperatur umgerechnete pH - Wert pH_{t_b} mit dem bestimmten auf die Bewertungstemperatur bezogenen Sättigungs-pH - Wert $\text{pH}_{L_{t_b}}$ verglichen und folgende Aussagen getroffen:

$\text{pH}_{t_b} < \text{pH}_{L_{t_b}} - a_2$: Das Wasser ist calcitlösend

$\text{pH}_{t_b} = \text{pH}_{L_{t_b}} \pm a_2$: Das Wasser ist im Zustand der Calcitsättigung

$\text{pH}_{t_b} > \text{pH}_{L_{t_b}} + a_2$: Das Wasser ist calcitabscheidend

a_2 : Grenzabweichung zur Bestimmung der Calcitsättigung nach Rechenverfahren 2, $a_2=0,05$

Die Angaben der DIN verweisen nicht auf die Möglichkeit einer Berechnung der Calcitlösekapazität (CaCO_3 in mg/l) mit dem Rechenverfahren 2. Auf dem Markt befindet sich jedoch das Rechenprogramm *Wassersoft*. Dieses ermittelt die Calcitlösekapazität nach dem Verfahren 2. Wasserproben erfüllen jedoch oft nicht die Bedingungen bezüglich der Einschränkungen des Verfahrens.

4.3 Rechenverfahren 3

Das Rechenverfahren 3 bestimmt die Calcitsättigung eines Wassers durch iterative Berechnung mit Rechenprogrammen.

Dieses Verfahren bezeichnet die Berechnung der Calcitsättigung eines Wassers unter Berücksichtigung von Komplexen des Calciums und Magnesiums mit Hydrogencarbonat, Carbonat und Sulfat sowie der Ionenaktivitätskoeffizienten und der Temperaturabhängigkeit [DIN 38404-10: 1995-04].

Das Verfahren gibt die zur Berechnung zu verwendenden Stoffkonstanten und deren Abhängigkeit von der Temperatur und der Ionenstärke des Wassers vor.

Eine solche Berechnung ist mit Rechenprogrammen ausführbar [a.a.O.].

Anwendungsbereich [DIN 38404-10: 1995-04]:

- Elektrische Leitfähigkeit bei 25 °C in mS/ m $3 \leq K_{25} \leq 250$
- Stoffmengenkonzentration an Orthophosphat in mmol/l $c(\text{PO}_4) < 0,1$ (< 3 mg/l P)
- Stoffmengenkonzentration an Ammonium in mmol/l $c(\text{NH}_4) < 0,1$ (< 1,8 mg/l)
- Säurekapazität bis pH = 4,3 in mmol/l $K_{\text{S}4,3} \geq 0,2$
- Stoffmengenkonzentration an Calcium in mmol/l $c(\text{Ca}) \geq 0,1$ (≥ 4 mg/l)

Das Verfahren ist nicht für salzfreies Wasser anwendbar. Die Richtigkeit des Rechengebnisses ist vom relativen Fehler der Analysewerte abhängig. Dies ist besonders bei salzarmen Wässern zu beachten.

Erforderliche Analysewerte [DIN 38404-10: 1995-04]:

- pH_t pH - Wert des zu untersuchenden Wassers bei Messtemperatur t (nach DIN 38404-5)
- t Messtemperatur des Wassers, in °C
- t_b Bewertungstemperatur des Wassers auf die die Aussage des Verfahrens bezogen wird, in °C
- K_{25} elektrische Leitfähigkeit, bei 25 °C, in mS/m (nach DIN EN 27888)
- $K_{\text{S}4,3}$ Säurekapazität bis pH 4,3, in mmol/l (Bestimmung nach DIN 38409-7)

Weiterhin ist die Stoffmengenkonzentration oder Massenkonzentration von Calcium, Magnesium, Sulfat, Nitrat, Chlorid, Natrium, Kalium, Orthophosphat und Ammonium erforderlich.

Fakultativ können zur Berechnung verwendet werden:

$K_{B8,2}$	Basekapazität bis $pH = 8,2$, in $mmol/l$ (Bestimmung nach DIN 38409-7)
C (DIC)	Stoffmengenkonzentration an gelöstem anorganischem Kohlenstoff in $mmol/l$ (Bestimmung z.B. nach DEV G 1 als Q_C)

Es müssen von den Messgrößen pH - Wert, $K_{S4,3}$, $K_{B8,2}$ und DIC mindestens 2 vorhanden sein [a.a.O.].

Bestimmung der Calcitsättigung [DIN 38404-10: 1995-04]:

Es wird der gegebenenfalls der auf die Bewertungstemperatur umgerechnete pH - Wert pH_{tb} mit dem bestimmten auf die Bewertungstemperatur bezogenen Sättigungs- pH - Wert pH_{Ctb} verglichen und folgende Aussagen getroffen:

$pH_{tb} < pH_{Ctb} - a_3$:	Das Wasser ist calcitlösend.
$pH_{tb} = pH_{Ctb} \pm a_3$:	Das Wasser ist im Zustand der Calcitsättigung.
$pH_{tb} > pH_{Ctb} + a_3$:	Das Wasser ist calcitabscheidend.

a_3 : Grenzabweichung zur Bestimmung der Calcitsättigung nach Rechenverfahren 3, $a_3=0,03$

Bestimmung der Calcitlösekapazität [DIN 38404-10: 1995-04]:

„Die Calcitlösekapazität bei der Bewertungstemperatur D_{tb} ist die Differenz zwischen der Calciumkonzentration nach Berechnung von pH_{Ctb} und der tatsächlichen Calciumkonzentration des Wassers. Sie wird in $mmol/l$ $CaCO_3$ oder in mg/l $CaCO_3$ angegeben. Ist $D_{tb} < 0$, so ist der Betrag von D_{tb} als Calcitabscheidekapazität anzugeben.“ Die Calcitlöse- bzw. Calcitabscheidekapazität ist eine geeignete Größe, die Calcitsättigung eines Wassers zu beschreiben [a.a.O].

Mögliche Berechnungsgrundlagen:

Entsprechend der o. g. Aussagen ergeben sich insgesamt 6 Berechnungsgrundlagen (Wertepaare) bezüglich der Ermittlung der Calcitlösekapazität eines Wassers: $K_{S4,3} / pH$; $K_{S4,3} / K_{B8,2}$; $K_{B8,2} / pH$; $DIC / K_{S4,3}$; $DIC / K_{B8,2}$; DIC / pH .

Der DIC^2 war im Rahmen der Berechnungsumfrage nie gegeben, deshalb wird er nicht in die weiteren Betrachtungen einbezogen.

² DIC: Gelöster Anorganischer Kohlenstoff, bestehend aus: Kohlendioxid (CO_2), Hydrogencarbonat (HCO_3^-) und Carbonat (CO_3^{2-})

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

In Bezug auf die Berechnungsgrundlagen verweist bzw. empfiehlt die DIN 38404-10: 1995-04 folgendes:

- **normativer Verweis** der DIN 38404-10: 1995-04; Tab.6:

Das Ergebnis ist zu ungenau, wenn bei $\text{pH} > 7,3$ Berechnung mit $K_{B8,2}$ erfolgt.

- **Anmerkung** der DIN 38404-10; 6.3 (nicht normativ):

Das Ergebnis der Berechnung kann genauer sein, wenn bei

$$\begin{array}{ll} \text{pH} < 7,3 & \rightarrow K_{S4,3} / K_{B8,2} \\ \text{pH} < 5,5 & \rightarrow K_{B8,2} / \text{pH} \end{array} \quad \text{eingesetzt wird.}$$

Das Rechenverfahren 3 ermöglicht die Berechnung der Calcitlöse- bzw. -abscheidekapazität entsprechend den Anforderungen der Trinkwasserverordnung. Das Verfahren ermöglicht die Beschreibung der Calcitsättigung eines Wassers als Calcitlösekapazität. Der Bedingungsrahmen des Verfahrens lässt die Berechnung der Calcitlösekapazität für die meisten Wässer zu.

5 Richtigkeit der Wasseranalyse

Die Bestimmung der Calcitsättigung eines Wassers als Calcitlösekapazität bedarf neben der Analyse zahlreicher Parameter einer umfangreichen Berechnung. Deshalb sollte die Richtigkeit bzw. die Plausibilität der Ergebnisse überprüft werden. Die Plausibilitätsprüfung soll ermitteln, „mit welcher Güte die analytischen Labor- und Vor-Ort-Untersuchungen durchgeführt wurden. Es werden (stets) alle Parameter berechnet, die dem Kalk-Kohlensäuregleichgewicht zugrunde liegen. Sie werden zur Beurteilung von Art und Umfang einer Aufbereitung, des Korrosionsverhaltens und weiteren wasserchemischen Fragestellungen benötigt [10].“

Die Ionenbilanz gilt als wichtigste Kontrolle der Plausibilität einer wasserchemischen Analyse. Dabei werden die Ionenäquivalente der positiv geladenen (Kationen: Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ und K^+) und negativ geladenen (Anionen: HCO_3^- , Cl^- , SO_4^{2-} und NO_3^-) Hauptinhaltsstoffe miteinander verglichen. Bei sehr weichen und vor allem bei sauren Wässern sind Nebenbestandteile wie Aluminium, Fluorid und die Wasserstoffionenkonzentration einzubeziehen [10].

Die Größe des Analysefehlers wird aus dem Verhältnis der Abweichung zwischen Kationen- und Anionensumme zum Mittelwert aus beiden Summenwerten ermittelt [10].

$$\text{Fehler} = \frac{(\sum \text{Kationen} - \sum \text{Anionen}) * 100}{(\sum \text{Kationen} + \sum \text{Anionen}) * 0,5} \%$$

Maximal zulässiger Fehler:

Kationen- bzw. Anionensumme größer 1mmol/l: 5%

Kationen- bzw. Anionensumme kleiner 1mmol/l: $\leq 0,1$ mmol/l

Nach der Berechnung des Kalk-Kohlensäuregleichgewichts empfiehlt das LfW-Merkblatt Nr. 1.5/1 [10] eine Plausibilitätsprüfung der Werte an Hand des berechneten pH - Wertes, der aus den Analyseergebnissen ermittelt wird. Der berechnete pH - Wert wird mit dem vor Ort ermittelten pH - Wert verglichen. Im Merkblatt heißt es:

„Aus den Analysewerten kann der pH - Wert eines Wassers berechnet werden, der vorliegen müsste, wenn die zugrunde gelegten Messwerte richtig ermittelt wurden. Bei ausreichend gepufferten Wässern ($PI > 0,2$ mmol/l)³ betragen bei guten Analysen die Abweichungen weniger als 0,1 pH-Einheiten. Bei Wässern mit geringer Pufferungsintensität und bei pH - Werten < 6 bzw. > 8 können größere Differenzen bis zu 0,3 pH-Einheiten toleriert werden“ [10].

Der DVGW verweist in seinem Arbeitsblatt 214-1 [9] darauf, dass Wasseranalysen vor der Anwendung von Entsäuerungsmaßnahmen neben einer Ionenbilanz auf ihre Konsistenz bezüglich des pH - Wertes, der Säurekapazität und der Basekapazität überprüft werden müssen. Die Möglichkeit der Überprüfung der Konsistenz von pH - Wert, Säurekapazität und Basekapazität ist gegeben, „... wenn Kohlenstoffdioxid, Hydrogencarbonat und Carbonat die allein bestimmenden Säuren und Basen im Wasser sind [9].“ Entsprechend bestimmen sich der pH - Wert, die Säure- und die Basekapazität gegenseitig (s. auch Kap.3.2). Der berechnete und gemessene pH - Wert sollte demnach bei der Berechnung aus Pufferkapazitäten bei harten Wässern nicht mehr als 0,05 und bei weichen Wässern nicht mehr als 0,1 pH-Einheiten voneinander abweichen [9]. Das DVGW- Arbeitsblatt enthält ein Rechenschema mit dem die Konsistenzprüfung des pH - Wertes sowie analog die Überprüfung der Säure- und Basekapazität durchgeführt werden kann.

³ PI: Pufferungsintensität

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Gleichzeitig verweist es darauf, dass Rechenprogramme nach DIN 38404-10 eine Konsistenzprüfung durchführen. Die Benennung der Rechenprogramme erfolgt nicht.

Das Bayerische Landesamt für Umwelt gibt dazu folgende Hinweise:

- a. Bei harten Wässern sollte keine Abweichung vorliegen, da es bei diesen Wässern bei der Probenahme zu einer schnellen Entsäuerung (CO_2 – Freisetzung) kommt.
- b. Bei weichen Wässern sollte die Abweichung, wegen der geringen Pufferung weicher Wässer, nicht mehr als 0,1 - 0,2 pH-Einheiten betragen [11].

6 Calcitsurvey

6.1 Durchführung

Im Rahmen des 6. Erfahrungsaustausches der Unabhängigen Stellen Deutschlands nach TrinkwV im November 2005 wurde vereinbart, einen Survey zur Calcitlösekapazität bei den nach Trinkwasserverordnung gelisteten Laboratorien bzw. Laboratorien der Landesämter durchzuführen. Die Umfrage fand unter Federführung der Unabhängigen Stelle Bayerns statt. Die Datensätze wurden Anfang Januar 2006 von den jeweils zuständigen Unabhängigen Stellen der Länder an die Laboratorien mit der Bitte um Bearbeitung verschickt. Die Rücklauffrist endete im Mai 2006. Die Ergebnisse wurden z.T. über die Unabhängigen Stellen der einzelnen Länder vorgelegt.

Es gingen Ergebnisse von insgesamt 107 Laboratorien aus 8 Bundesländern ein. Es nahmen 23 Labore aus Bayern, 11 Labore aus Schleswig-Holstein, 10 Labore aus Rheinland-Pfalz, 10 Labore aus Brandenburg, 10 Labore aus Thüringen, 8 Labore aus Sachsen-Anhalt, 2 Labore aus Berlin und 33 Labore aus Nordrhein-Westfalen am Survey teil (s. Abb. 3).

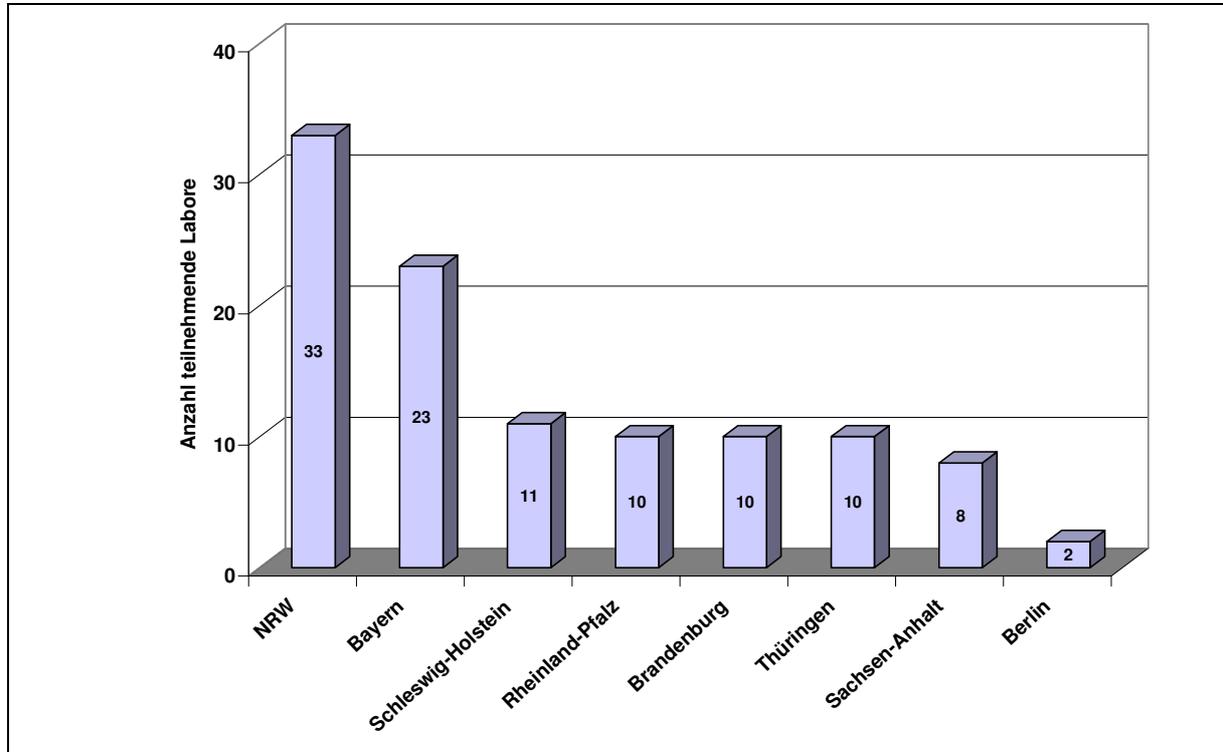


Abb. 3 Teilnehmende Labore aus den Bundesländern

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Ausgangslage

Es wurden 8 Datensätze mit den Analysewerten eines Wassers vorgegeben, mit denen eine Berechnung der Calcitlösekapazität durchgeführt werden sollte. Die in Tabelle 1 dargestellten Werte wurden mit dem Rechenprogramm *WinWASI 3.0* berechnet. Das Ergebnis aus der Säurekapazität ($K_{S4,3}$) und dem pH - Wert wurde aus Vereinfachungsgründen als Zielwert für die Datensätze 1 - 5, 7 und 8 festgelegt.

Tabelle 1: Ergebnisse zur Calcitlösekapazität auf Basis von *WinWasi 3.0* (CaCO_3 in mg/l)

Datensatz								
Basis	1	2	3	4	5	6	7	8
$K_{S4,3}$ / pH	165,7	6,9	-5,6	-7,7	9,6	-	145,2	11,7
$K_{S4,3}$ / $K_{B8,2}$	101,5	13,2	-8,8	-0,4	10,3	-	114,4	10,8
$K_{B8,2}$ / pH	102,7	8,4	-2,3	-24,1	9,3	*	122,8	12,1

* siehe Tabelle 10

Die Plausibilitätsprüfung wurde entsprechend den Kriterien des Merkblatts Nr. 1.5/1 (April 2003) des Bayerischen Landesamtes für Wasserwirtschaft (nun: Bayerisches Landesamt für Umwelt) durchgeführt. Das Merkblatt legt als Kriterium für die Überprüfung der Übereinstimmung des berechneten mit dem vor Ort ermittelten pH - Wert die Pufferintensität fest. Diese Basis zur Festlegung eines Grenzbereiches ist präziser als der Versuch der Definition eines harten und weichen Wassers, wie es das Arbeitsblatt 214-1 (2005) des DVGW festlegt. Zudem basiert der Plausibilitätstest des DVGW auf sehr engen Differenzen zwischen dem gemessenen und dem berechneten pH - Wert.

Die nachfolgenden Tabellen zeigen die Plausibilitätsprüfungen für alle vorgegebenen Datensätze nach dem Merkblatt 1.5/1 des LfW:

Tabelle 2: Plausibilitätsprüfung für Datensatz 1

Check	Ergebnis	Kriterium	Erfüllung
<i>Ionenbilanz</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Absoluter Fehler: 0,02 mmol/l ▪ Fehler in %: 3,4 ▪ Kationen- bzw. Anionensumme < 1 mmol/l 	Kationen- bzw. Anionensumme < 1 mmol: ≤ 0,1 mmol/l	<i>erfüllt</i>
<i>Übereinstimmung pH - Werte</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Abweichung: 0,25 pH-Einheiten ▪ PI > 0,2 mmol/l 	PI > 0,2 mmol: < 0,1 pH-Einheit	<i>nicht erfüllt</i>

Tabelle 3: Plausibilitätsprüfung für Datensatz 2

Check	Ergebnis	Kriterium	Erfüllung
<i>Ionenbilanz</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Absoluter Fehler: 0,02 mmol/l ▪ Fehler in %: 1,2 ▪ Kationen- bzw. Anionensumme > 1 mmol/l 	Kationen- bzw. Anionensumme > 1 mmol: max. 5%	<i>erfüllt</i>
<i>Übereinstimmung pH - Werte</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Abweichung: 0,32 pH-Einheiten ▪ PI > 0,2 mmol/l 	PI > 0,2 mmol: < 0,1 pH-Einheit	<i>nicht erfüllt</i>

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Tabelle 4: Plausibilitätsprüfung Datensatz 3

Check	Ergebnis	Kriterium	Erfüllung
<i>Ionenbilanz</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Absoluter Fehler: 0,00 mmol/l ▪ Fehler in %: 0,04 ▪ Kationen- bzw. Anionensumme > 1mmol/l 	Kationen- bzw. Anionensumme > 1 mmol: max. 5%	<i>erfüllt</i>
<i>Übereinstimmung pH - Werte</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Abweichung: 0,02 pH-Einheiten ▪ PI > 0,2mmol/l 	PI > 0,2 mmol: < 0,1 pH-Einheit	<i>erfüllt</i>

Tabelle 5: Plausibilitätsprüfung Datensatz 4

Check	Ergebnis	Kriterium	Erfüllung
<i>Ionenbilanz</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Absoluter Fehler: 0,02 mmol/l ▪ Fehler in %: 0,5 ▪ Kationen- bzw. Anionensumme > 1mmol/l 	Kationen- bzw. Anionensumme > 1 mmol: max. 5%	<i>erfüllt</i>
<i>Übereinstimmung pH - Werte</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Abweichung: 0,29 pH-Einheiten ▪ PI > 0,2mmol/l 	PI > 0,2 mmol: < 0,1 pH-Einheit	<i>nicht erfüllt</i>

Tabelle 6: Plausibilitätsprüfung Datensatz 5

Check	Ergebnis	Kriterium	Erfüllung
<i>Ionenbilanz</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Absoluter Fehler: 0,02 mmol/l ▪ Fehler in %: 0,1 ▪ Kationen- bzw. Anionensumme > 1mmol/l 	Kationen- bzw. Anionensumme > 1 mmol: max. 5%	<i>erfüllt</i>
<i>Übereinstimmung pH - Werte</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Abweichung: 0,05 pH-Einheiten ▪ PI > 0,2mmol/l 	PI > 0,2 mmol: < 0,1 pH-Einheit	<i>erfüllt</i>

Tabelle 7: Plausibilitätsprüfung Datensatz 6

Check	Ergebnis	Kriterium	Erfüllung
<i>Ionenbilanz</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ mit Datensatz nicht durchführbar 		<i>nicht erfüllt</i>
<i>Übereinstimmung pH - Werte</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ mit Datensatz nicht durchführbar 		<i>nicht erfüllt</i>

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Tabelle 8: Plausibilitätsprüfung Datensatz 7

Check	Ergebnis	Kriterium	Erfüllung
<i>Ionenbilanz</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Absoluter Fehler: 0,01 mmol/l ▪ Fehler in %: 0,06 ▪ Kationen- bzw. Anionensumme > 1mmol/l 	Kationen- bzw. Anionensumme > 1 mmol: max. 5%	<i>erfüllt</i>
<i>Übereinstimmung pH - Werte</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Abweichung: 0,12 pH-Einheiten ▪ PI > 0,2mmol/l 	PI > 0,2 mmol: < 0,1 pH-Einheit	<i>nicht erfüllt</i>

Tabelle 9: Plausibilitätsprüfung Datensatz 8

Check	Ergebnis	Kriterium	Erfüllung
<i>Ionenbilanz</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Absoluter Fehler: 0,04 mmol/l ▪ Fehler in %: 0,8 ▪ Kationen- bzw. Anionensumme > 1mmol/l 	Kationen- bzw. Anionensumme > 1 mmol: max. 5%	<i>erfüllt</i>
<i>Übereinstimmung pH - Werte</i>	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Abweichung: 0,01 pH-Einheiten ▪ PI > 0,2mmol/l 	PI > 0,2 mmol: < 0,1 pH-Einheit	<i>erfüllt</i>

Die Ergebnisse der Plausibilitätsprüfungen für die Datensätze 1, 2, 4, 6 und 7 legen eine erneute Untersuchung des Wassers nahe. Dies schließt eine weitere Probenahme mit anschließender Analyse und Berechnung der Calcitlösekapazität ein.

Besonderheiten

Einige Datensätze (2, 6, 8) wurden hinsichtlich einzelner Parameter, wie Titrations- bzw. Bewertungstemperatur oder Säurekapazität verändert, um den Einfluss der Datenqualität auf die Ergebnisse herauszuarbeiten (s. Tab. 10 -12).

Für den Datensatz 6 ist eine Berechnung aus der Basekapazität bis pH 8,2 und dem pH - Wert grundsätzlich möglich. Da dieser Datensatz ohne Angabe der Säurekapazität und vor allem der Titrationstemperatur vorgegeben wurde, ist die Ermittlung eines Zielwertes jedoch nicht zweckmäßig.

Hinsichtlich der Bestimmung der Basekapazität weisen erfahrene Praktiker darauf hin, dass die Titration der Basekapazität wegen der Gefahr des Gasaustausches mit der Umgebung stark fehlerbehaftet ist.

Tabelle 10: Auswirkung der Veränderung bei Datensatz 2

Datensatz 2: Veränderung der Bewertungstemperatur (<i>tb</i>) von 10,7 °C auf 15,0 °C		<i>tb</i> = 10,7 °C	<i>tb</i> = 15,0 °C
	$K_{S4,3} / \text{pH}$	7,0	6,9
	$K_{S4,3} / K_{B8,2}$	13,4	13,2
	$K_{B8,2} / \text{pH}$	8,8	8,4

Tabelle 11: Auswirkung der Veränderung bei Datensatz 6

Datensatz 6: Keine Angabe der Titrationstemperatur (<i>tt</i>) Keine Angabe der Säurekapazität ($K_{S4,3}$)	angenommene <i>tt</i> = 10,7 °C	angenommene <i>tt</i> = 20 °C	Keine Eingabe der <i>tt</i> in Rechenpro- gramm
	$K_{B8,2} / \text{pH}$	-17,9 $K_{B8,2} / \text{pH}$	-12,8 $K_{B8,2} / \text{pH}$

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Tabelle 12: Auswirkung der Veränderung bei Datensatz 8

Datensatz 8: Veränderung der Titrationstemperatur (tt) von 20 °C auf 15,5°C		tt = 20 °C	tt = 15,5 °C
	$K_{S4,3} / \text{pH}$	11,7	11,7
	$K_{S4,3} / K_{B8,2}$	9,7	10,8
	$K_{B8,2} / \text{pH}$	12,5	12,0

6.2 Auswertung

6.2.1 Rechenverfahren und Rechenprogramme

Das Rechenverfahren 1 wurde von zwei Laboren als ausschließliches Verfahren angewandt. Die Calcitsättigung des Wassers wurde nicht als Calcitlösekapazität beschrieben. Zwei weitere Labore wendeten teilweise Rechenverfahren 1 und teilweise Rechenverfahren 2 an. Hierbei wurde ebenfalls nicht die Calcitlösekapazität ermittelt. Dies gilt auch bei der Verwendung aller drei Rechenverfahren durch ein weiteres Labor.

Das Rechenverfahren 2 wendeten neun Labore an. Davon beschrieben drei Labore die Calcitsättigung des Wassers als Calcitlösekapazität. Zwei Labore verwendeten das Programm *Wassersoft*. Dieses Programm ermittelt die Calcitlösekapazität. Allerdings erfüllen einige Datensätze (z.B. Datensatz 1) nicht die Bedingungen des Rechenverfahrens 2. Ein Labor verwies auf die Internetseite www.calcit.info/index.php. Hier wird ein Rechenprogramm auf Grundlage des Verfahrens 2 vorgegeben. Das Labor lieferte für alle Datensätze Berechnungsergebnisse. Das Ergebnis ist zweifelhaft, da bei Eingabe, beispielsweise des Datensatzes 1, auch dieses Programm wegen des eingeschränkten Bedingungsrahmens kein Ergebnis ermittelt.

Die Mehrheit der Labore (91 von 107, d.h. 85 %) berechnet die Calcitlösekapazität mit dem Rechenverfahren 3. Mit diesem Verfahren ist es möglich, aussagefähige Berechnungen durchzuführen, die den Anforderungen der TrinkwV entsprechen. Deshalb gehen in die folgenden Betrachtungen nur diese Berechnungsergebnisse ein. Ein Labor gab die Berechnungswerte als Sättigungsindex an; diese Werte konnten in den nachfolgenden Betrachtungen nicht berücksichtigt werden (s. Abb. 4).

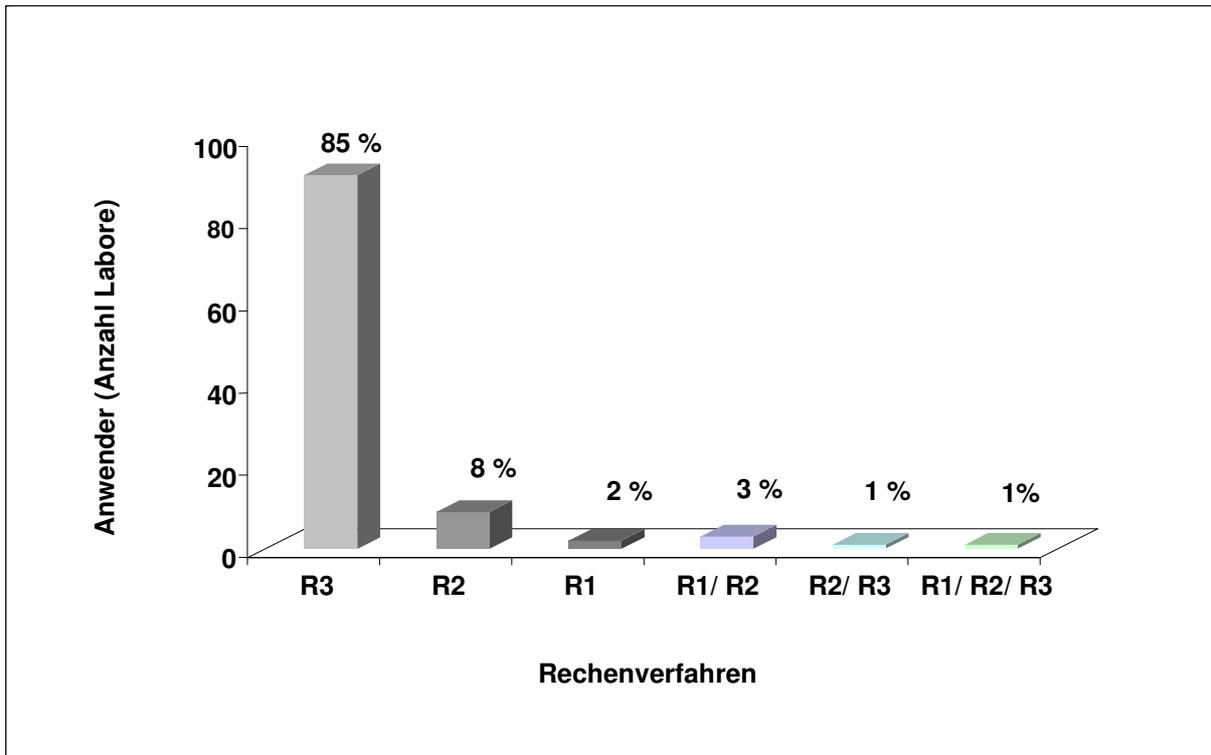


Abb. 4: Anwendung von Rechenverfahren im Survey

Bezüglich der Anwendung der Rechenprogramme können folgende Aussagen getroffen werden: Die im Rahmen der Umfrage am häufigsten angewendeten Rechenprogramme sind das Programm *WinWASI*, gefolgt von *BWASA* und *Blomesystem* (Calcit-Modul im LIMS) (s. Abb.5). Ein Labor verwendete kein Rechnerprogramm. Ein weiteres machte diesbezüglich keine Angabe. Das Programm *CAS 3.2/Demoversion* wurde von einem Labor angewendet. Es entspricht nicht der DIN 38404-10:1995. Zwei Labore lieferten Ergebnisse aus zwei verschiedenen Rechenprogrammen. Diese Berechnungen sind in die Auswertung eingegangen. Ein weiterer Teilnehmer gab Ergebnisse aus drei Berechnungen an. Zwei dieser Berechnungen wurden wegen der fehlenden Angabe zum Rechenverfahren nicht in die Auswertung einbezogen.

Wegen der sichtbaren Übereinstimmung der Berechnungsergebnisse werden die Programme nicht gesondert nach ihren Softwareversionen aufgegliedert. Lediglich in der folgenden Abbildung (Abb. 5) wird das Programm *WASSER* wegen der stark abweichenden Versionsbezeichnung getrennt aufgeführt. Gleiches gilt für das Programm *WASI für Windows 1.0*. Die Ergebnisse dieser Programme stimmen in Bezug auf das Rechenprogramm *WASSER*, bzw. auf das Rechenprogramm *WinWASI* gut überein. Die Darstellung der Berechnungsergebnisse erfolgt deshalb komprimiert.

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

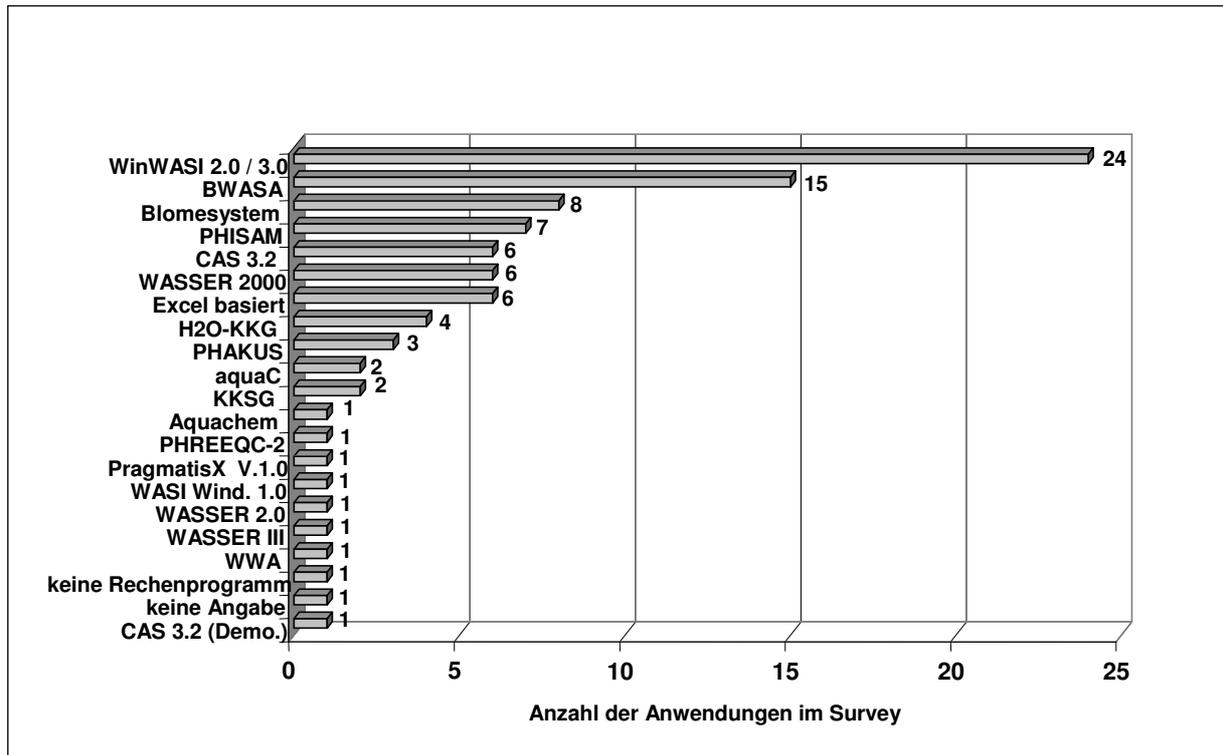


Abb. 5: Anwendung von Rechenprogrammen für Rechenverfahren 3 im Survey

Die nachfolgenden Aussagen zu den Rechenprogrammen beziehen sich ausschließlich auf die Berechnungsergebnisse zur Calcitlösekapazität. Andere Anwendungseigenschaften wie die Benutzerfreundlichkeit und sonstige Funktionalitäten der Programme wurden in diesem Survey nicht abgefragt.

6.2.2 Darstellung der Berechnungsergebnisse

In Tabelle 13 werden die Berechnungsergebnisse, die mit dem Rechenverfahren 2 erzielt und als Calcitlösekapazität in mg/l CaCO₃ angegeben wurden, sowie alle als Sättigungsindex angegebenen Berechnungswerte, zusammengefasst.

Tabelle 13: Zusammenfassung der Ergebnisse aus Rechenverfahren RV (in mg/l CaCO₃) und Werte als Sättigungsindex

Lab.	D 1	D 2	D 3	D 4	D 5	D 6	D 7	D 8	RV	Rechenprogramm
Calcitlösekapazität (CaCO₃ in mg/l)										
NRW31	206,73	5,46	-32,31	-14,34	11,05	23,47	-171	16,41	R2	www.calcit.info/index.php
Th7	*	-6	2	*	**	*	*	-4	R2	Wassersoft 1.2
BB4	*	6	- 2	- 6	*	*	*	4	R2	Wassersoft 1.2
Sättigungsindex										
SHL1	3,59	0,66	-0,09	-0,23	*	*	*	0,14	R2	Excel basiert
BB1	*	-0,541	0,154	0,305	*	*	*	-0,091	R2	kein Programm
SHL5	-3,63	-0,665	0,041	0,241	-0,219	0,132	-1,34	-0,176	R3	WinWASI 3.0

* Bedingungen bzw. Anwendungsbereich des Rechenverfahrens 2 nicht erfüllt

** Ionenbilanzfehler

Die Ergebnisse aller Berechnungen, die mit dem Rechenverfahren 3 durchgeführt und mit der Wertangabe in mg/l bzw. in mmol/l angegeben wurden, werden in den Abbildungen 6 bis 13 dargestellt. Auch stark abweichende Werte sind in der Auswertung enthalten. Die X-Achse ist stets mit der Bezeichnung Calcitlösekapazität beschriftet. Bei negativen Werten handelt es sich um die Calcitabscheidekapazität. Die teilnehmenden Labore sind verschlüsselt auf der Y-Achse abgetragen. Zudem wurden die dazu gehörigen Datenpunkte mit den verwendeten Programmen beschriftet. Die Ergebnisse von 92 Berechnungen aus 90 Laboren gehen in die Darstellung ein.

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

6.2.2.1 Datensatz 1

Die Abbildung 6 zeigt grob zwei Wertenniveaus. Ein Niveau ist im Bereich um 100 mg/l CaCO_3 , das zweite Niveau ist im Wertebereich zwischen 160 und 180 mg/l CaCO_3 zu erkennen. Der Unterschied zwischen den Niveaus ist beträchtlich. Die meisten Labore (36) berechneten Werte um 165 mg/l CaCO_3 . Den unterschiedlichen Ergebnissen liegen mit hoher Wahrscheinlichkeit unterschiedliche Eingangsgrößen zu Grunde. Es ist nachvollziehbar, dass der Wert aus Säurekapazität und Basekapazität deutlich unter dem Wert aus Säurekapazität und pH - Wert liegt (s. auch Tab.1).

Werden die Rechenprogramme miteinander verglichen, zeigt sich bei Datensatz 1 eine gute Übereinstimmung bezogen auf die jeweiligen Wertenniveaus. Die Tendenz zu leicht höheren Werten hat das Programm *WASSER*, sowie teilweise die Programme *PHAKUS* und *PHISAM*. Die Excel basierten Berechnungen fügen sich gut in das Gesamtbild ein. Der Teilnehmer, welcher keine Angabe zum Rechenprogramm machte, ermittelte einen stark abweichenden Wert.

Innerhalb einzelner Rechenprogramme ist beim überwiegenden Teil der Berechnung eine gute, zum Teil sehr gute Übereinstimmung der Berechnungswerte innerhalb des jeweiligen Niveaus zu erkennen. Der Wert des Programms *BWASA*, welcher zwischen den beiden Wertenniveaus liegt, wurde aus dem Mittelwert der Eingangsgrößen ($K_{S4,3} / pH$ und $K_{S4,3} / K_{B8,2}$) gebildet.

Von 92 Berechnungen konnten 88 numerische Werte in die Auswertung einbezogen werden (s. Abb. 6). Die vier übrigen Berechnungen wurden jeweils mit dem Calcit-Modul der Fa. Bloemesystem durchgeführt. In einem Fall ist dem Anhang der Unterlagen zu entnehmen, dass die Bedingungen bezüglich des Eingabewertes Leitfähigkeit nicht erfüllt seien. Es ist jedoch auch ersichtlich, dass die Einheit nicht angepasst wurde. Es erfolgte keine Umrechnung der Leitfähigkeit von Millisiemens pro Meter (mS/m) in Mikrosiemens pro Zentimeter ($\mu\text{S}/\text{cm}$), wie es das Programm fordert. Allerdings ist dem Anhang eines weiteren Labors zu entnehmen, dass trotz korrekter Eingabe der Leitfähigkeit keine Berechnung durch das Programm erfolgte.

Der pH - Wert im vorgegebenen Datensatz liegt bei 5,8. Die Trinkwasserverordnung fordert hier die Bestimmung der Calcitlösekapazität (s. Kap. 1, Kap. 3.1).

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

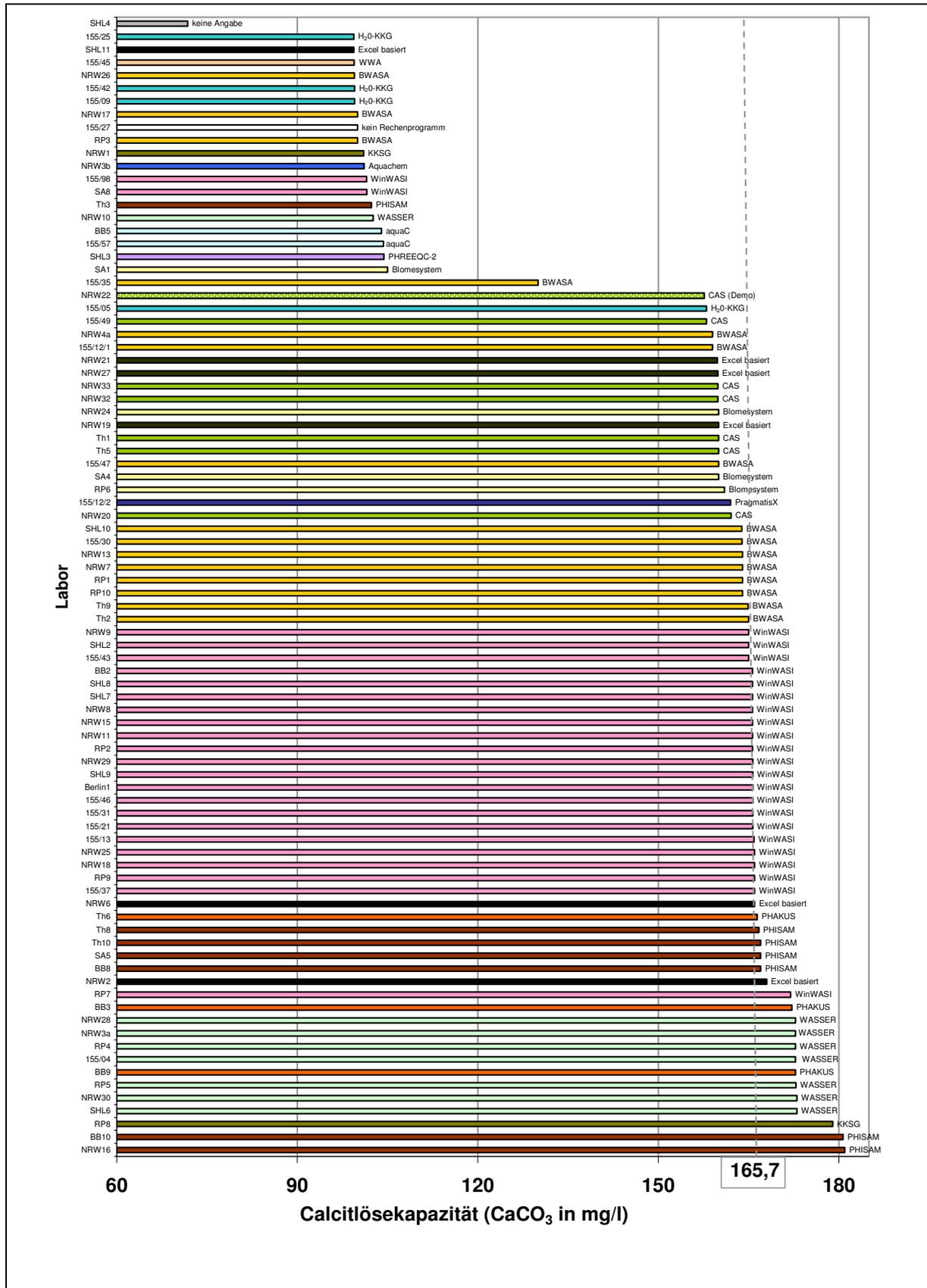


Abb. 6: Zusammenstellung der Ergebnisse aus den einzelnen Laboren mit RV 3 und Datensatz 1

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

6.2.2.2 Datensatz 2

Die Mehrzahl der Ergebnisse aus dem Datensatz 2 liegt nah beieinander. 65 Berechnungen stimmen mit dem Zielwert (6,9 mg/l CaCO_3) überein. Es kann davon ausgegangen werden, dass diesen Berechnungen die Eingangsgrößen Säurekapazität und pH - Wert zu Grunde liegen. Drei Ergebnisse aus Excel basierten Berechnungen überschreiten nur knapp den Grenzwert von 5 mg/l CaCO_3 . Eine Berechnung (ohne Angabe des Rechenprogramms) liegt darunter. In einem höheren Niveau (zwischen 8 und 14 mg/l CaCO_3) liegen 14 Berechnungen. Ein Ergebnis weicht sehr stark von allen anderen Ergebnissen ab.

Der Vergleich der Rechenprogramme zeigt bei Datensatz 2 eine gute, überwiegend sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse. Allerdings differieren die Ergebnisse im höheren Wertebereich recht deutlich. Die zwei Werte des Programms *aquaC* liegen im höheren Wertebereich. 3 von 4 Werten des Programms *H₂O-KKG* liegen ebenfalls in diesem höheren Wertebereich. In diesen Bereich fügen sich auch die Einzelergebnisse der Programme *PHREEGC-2*, *AQUACHEM*, und *WWA* sowie ein Wert aus dem Programm *KKSG*, einer Excel basierten Berechnung, sowie der Wert, welcher ohne Rechenprogramm ermittelt wurde ein.

Innerhalb einzelner Rechenprogramme ist beim überwiegenden Teil der Berechnungen eine gute, zum Teil sehr gute Übereinstimmung der Berechnungswerte innerhalb des jeweiligen Niveaus zu erkennen. Die Ergebnisunterschiede bezüglich des Programms *WinWASI* lassen sich mit der unterschiedlichen Wahl der Eingangsgrößen begründen.

Eine der 92 Berechnungen führte zu keinem Ergebnis. Sie wurde mit dem Calcit-Modul der Fa. Blomesystem durchgeführt. Hierbei handelt es sich möglicherweise um einen Umrechnungsfehler bezüglich der Eingabeeinheit der Leitfähigkeit.

Der pH - Wert im vorgegebenen Datensatz liegt knapp über 7,7. Eine Bestimmung der Calcitlösekapazität ist laut Trinkwasserverordnung bei diesem pH - Wert nicht erforderlich (vgl. Kap. 1). Die Ergebnisse liegen zum Teil knapp, überwiegend aber deutlich über dem Grenzwert 5 mg/l CaCO_3 für Einzelwässer. 13 Berechnungen führten zu Werten am und zum Teil deutlich über dem Grenzwertbereich für Mischwässer von 10mg/l CaCO_3 .

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

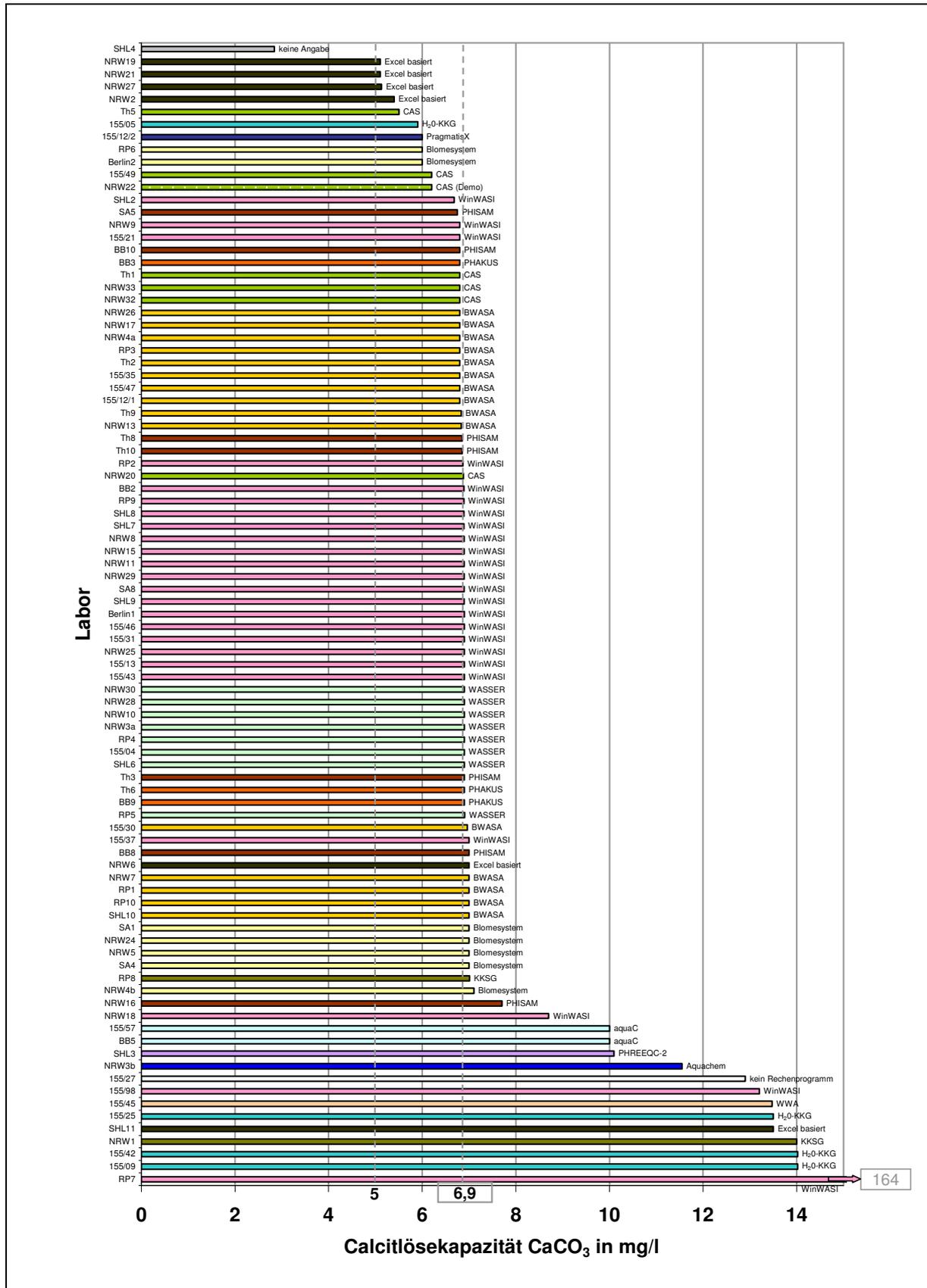


Abb. 7: Zusammenstellung der Ergebnisse aus den einzelnen Laboren mit RV 3 und Datensatz 2

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

6.2.2.3 Datensatz 3

Der größte Teil der Berechnungen (72) erzielte Werte im negativen Niveau zwischen -4 und -7 mg/l CaCO_3 . 16 Berechnungen führten zu einem Ergebnis unterhalb diesen Niveaus, im Wertebereich zwischen -8 bis -12 mg/l CaCO_3 . Elf Ergebnisse liegen darüber, sie befinden sich in einem Wertebereich zwischen -3 und 7 mg/l CaCO_3 . Eine mögliche Ursache ist hier die Anwendung unterschiedlicher Eingangsgrößen. Eine Berechnung weicht sehr stark in den negativen Wertebereich ab. Ein Ergebnis, welches ohne Rechenprogramm ermittelt wurde, liegt bei 0 mg/l CaCO_3 .

Die Ergebnisse der Berechnungen mit den unterschiedlichen Rechenprogrammen zeigen eine relativ weite Streuung. Interessant ist das Verhalten der einzelnen Rechenprogramme. Die Werte des Calcit-Moduls der Fa. Blomesystem sind im negativen Ergebnisbereich zwischen -7 und -12 mg/l CaCO_3 („Ausreißer“ -31 mg/l CaCO_3) zu finden. Die Berechnungen mit dem Programm *BWASA* ergaben sehr unterschiedliche Werte, zum Teil im calcitabscheidenden und zum Teil im calcitlösenden Bereich (-6,6 bis 6,9 mg/l CaCO_3). Die Berechnungswerte der Programme *CAS* und *PHISAM* lassen zwei Wertenniveaus, möglicherweise abhängig von unterschiedlichen Eingangsgrößen erkennen. Die Berechnungen mit dem Programm *H₂O-KKG* orientieren in den schwach positiven Bereich. Ein einheitliches Bild zeigen die Programme *aquaC*, *WASSER*, und *PHAKUS* und die Excel basierten Anwendungen. Alle befinden sich im negativen Wertebereich um -5,6 mg/l CaCO_3 . Bezüglich des Programms *WinWASI* können die Ergebnisse den Eingangsgrößen Säurekapazität und pH - Wert (-5,6 mg/l CaCO_3) sowie Säurekapazität und Basekapazität (-8,8 mg/l CaCO_3) zugeordnet werden.

Der vorgegebene pH - Wert liegt bei 7,18. Dieser Wert macht eine Bestimmung der Calcitlösekapazität erforderlich (vgl. Kap. 1). Die Ergebnisse der dargestellten Berechnungen liegen überwiegend im negativen (calcitabscheidenden) Wertebereich. Zwei Berechnungen mit dem Programm *BWASA* überschreiten den Grenzbereich 5 mg/l CaCO_3 für Einzelwässer. Der Datensatz erfüllt die Plausibilitätskriterien.

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

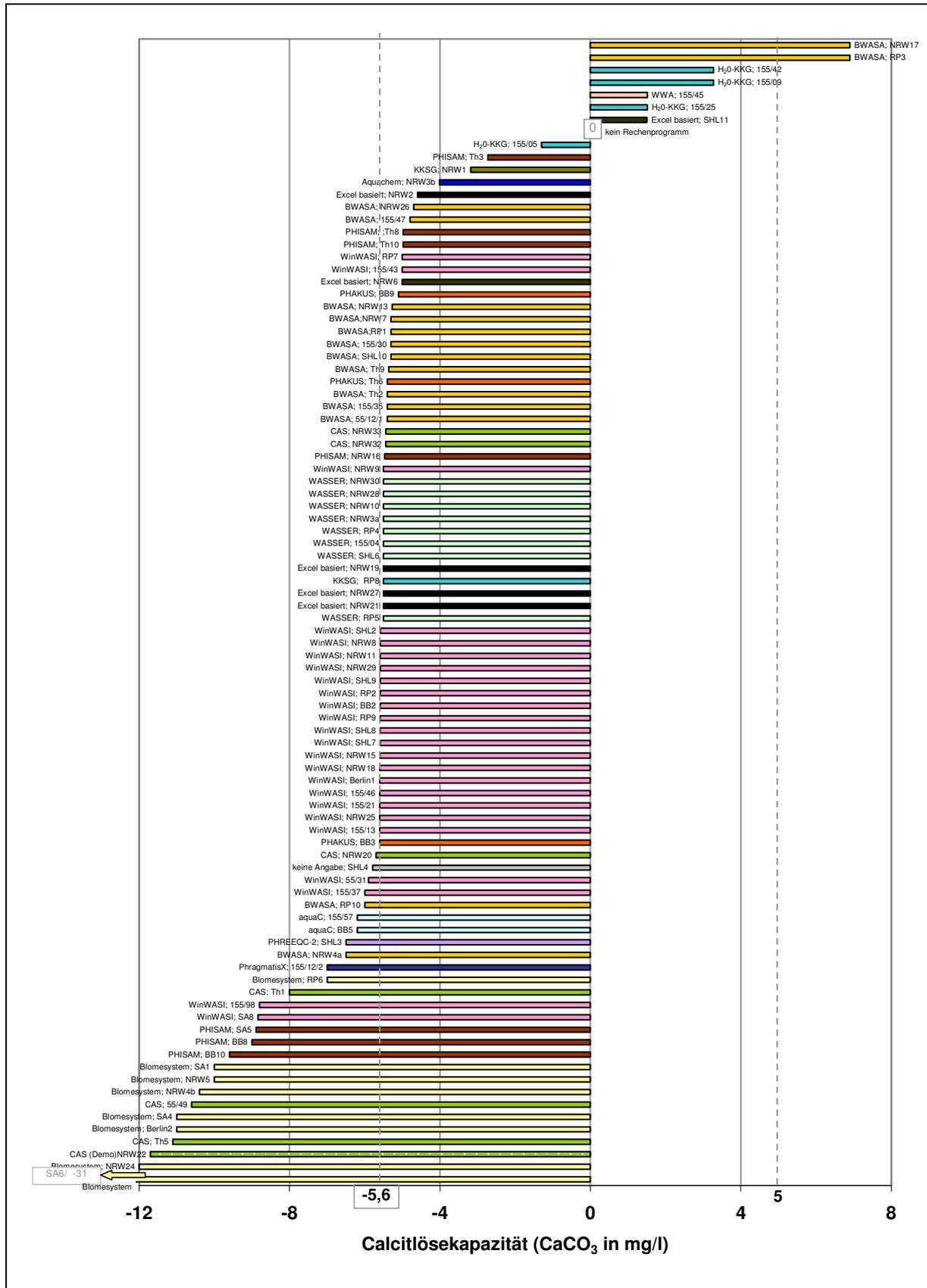


Abb. 8: Zusammenstellung der Ergebnisse aus den einzelnen Laboren mit RV 3 und Datensatz 3

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

6.2.2.4 Datensatz 4

Der überwiegende Teil der Berechnungen (82) liegt im calcitabscheidenden Bereich. Davon stellen sich 65 Berechnungsergebnisse im negativen Wertebereich zwischen -6,5 und -8 mg/l CaCO₃ ein. Drei Werte liegen darüber und 14 Werte liegen darunter. Ein negativer Zahlenwert weicht stark von den anderen ab. Neun Berechnungsergebnisse sind im calcitlösenden Bereich zu finden. Davon liegen drei Ergebnisse knapp über 4 mg/l CaCO₃. Ein Wert, welcher ohne Rechenprogramm ermittelt wurde, liegt bei 0 mg/l CaCO₃.

Die meisten der Rechenprogramme lieferten annähernd gleiche Ergebnisse. Eine Berechnung mit dem Calcit-Modul der Fa. Blomesystem weicht etwas in den negativen Bereich ab. Ein Berechnungswert des Programms *WASSER* weicht deutlich in den negativen Bereich ab. Im calcitlösenden Bereich liegen 3 von 4 Ergebnissen des Programms *H₂O-KKG*, die zwei Berechnungen aus dem Programm *aquaC*, eine Excel basierte Anwendung sowie die Einzelergebnisse aus den Programmen *WWA*, *PHREEGC-2*, und *AQUACHEM*.

Bezüglich des Verhaltens der einzelnen Rechenprogramme sind lediglich beim Calcit-Modul von Blomesystem und den Programmen *CAS* und *H₂O-KKG* größere Abweichungen festzustellen. Bezüglich des Programms *H₂O-KKG* ist ein Wert im negativen Bereich zu finden, die drei anderen im positiven calcitlösenden Bereich. Geringe Abweichungen sind beim Programm *PHISAM* zu erkennen. Ein Ergebnis der Programms *WinWASI* weicht stark von den anderen ab.

Möglicherweise liegen den Werten im calcitlösenden Bereich die Eingangsgrößen Säurekapazität und Basekapazität zu Grunde.

Der pH - Wert im Datensatz 4 liegt bei 7,83. Die Trinkwasserverordnung fordert hier keine Bestimmung der Calcitlösekapazität. Dennoch nähern sich drei Berechnungen dem Grenzwert von 5 mg/l CaCO₃ für Einzelwässer.

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

6.2.2.5 Datensatz 5

Bei Datensatz 5 liegen die meisten Berechnungsergebnisse (67) zwischen 8 und 10 mg /l CaCO_3 . Sieben Berechnungen liegen leicht, zwei weitere Berechnungen deutlich darunter. 14 Labore berechneten Werte zwischen 12 und 15 mg/l CaCO_3 .

Im höheren Wertebereich liegen zum großen Teil die Berechnungen mit dem Calcit-Modul der Fa. Blomesystem und dem Programm *H₂O-KKG*. Die zwei Anwendungen von *aquaC* sowie die Einzelanwendungen *PHREEG2-C*, *WWA* und einer Excel basierten Anwendung liegen ebenfalls in diesem Bereich.

Die Ergebnisse der Anwendungen des Calcit-Moduls der Fa. Blomesystem haben eine hohe Spannweite (3 – 15 mg/l CaCO_3). Ergebnisschwankungen sind in einer geringeren Breite bei den Programmen *CAS* und *H₂O-KKG* zu erkennen. Die Ergebnisse der Programme *BWASA*, *PHISAM*, *WASSER*, *PHAKUS*, *KKSG* und *WinWASI* liegen sehr gut beieinander. Die Ergebnisse aus den verschiedenen Eingangsgrößen stimmen sehr gut überein (s. Tab.1).

Der pH - Wert im Datensatz 5 liegt unter 7,7. Eine Bestimmung der Calcitlösekapazität ist nach Trinkwasserverordnung erforderlich. Eine Berechnung mit dem Calcit-Modul von Blomesystem und ein Ergebnis des Labors, welches keine Angabe zum verwendeten Programm machte, liegen unter dem Grenzwert 5 mg/l CaCO_3 für Einzelwässer. Die meisten Ergebnisse liegen deutlich über diesem Grenzwert. Alle Berechnungen im höheren Wertebereich liegen auch über dem Grenzwert 10 mg/l CaCO_3 für Mischwässer.

Der Datensatz erfüllt die Plausibilitätskriterien.

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

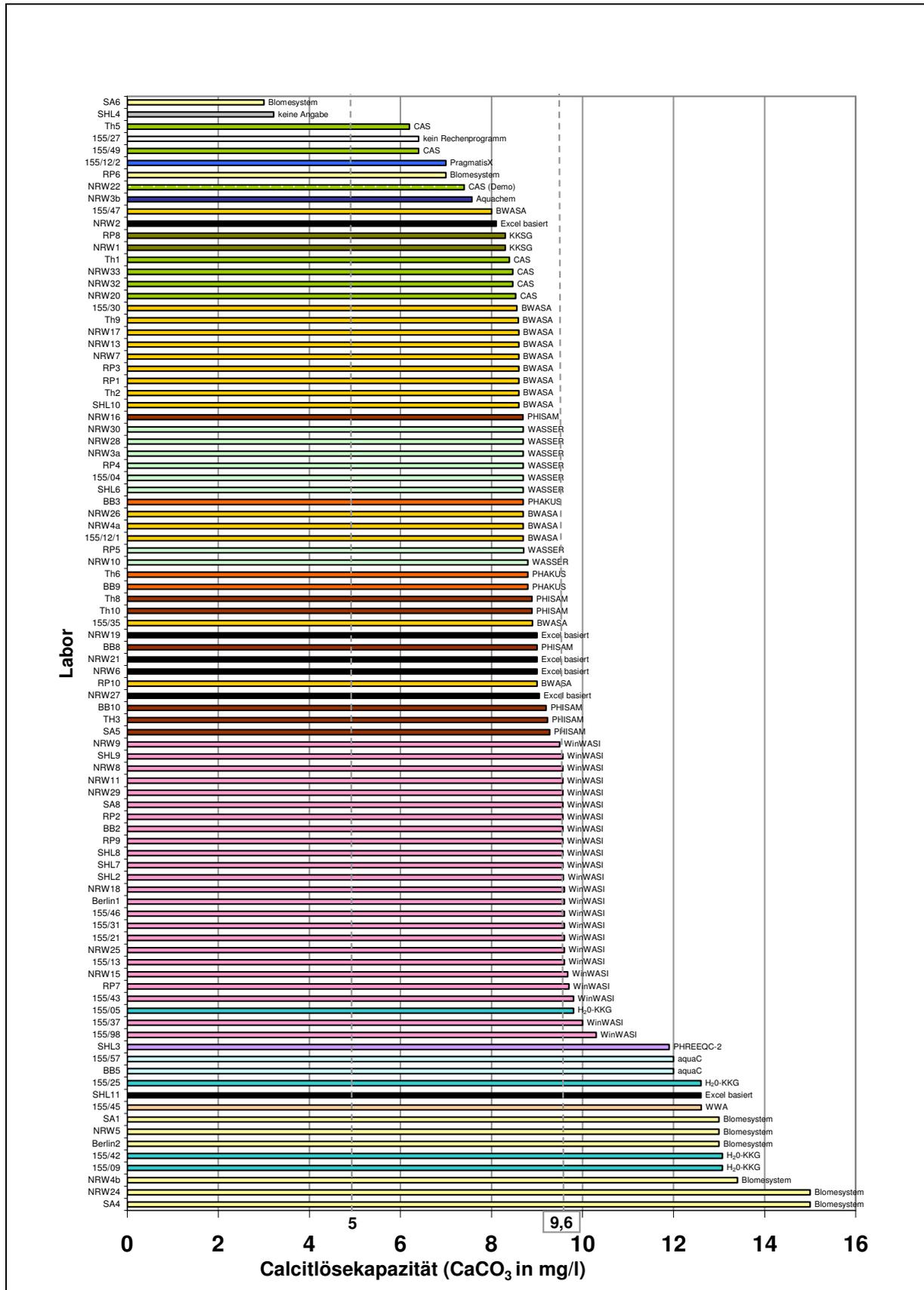


Abb. 10: Zusammenstellung der Ergebnisse aus den einzelnen Laboren mit RV 3 und Datensatz 5

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

6.2.2.6 Datensatz 6

67 der 92 in diese Betrachtung eingehenden Labore gaben Ergebnisse zu Datensatz 6 an. 25 Labore distanzieren sich von ihrem Ergebnis oder gaben kein Ergebnis an (s. 6.3, Tab.17 Kommentare).

Die drei mittleren Wertenniveaus resultieren mit großer Wahrscheinlichkeit aus dem unterschiedlichen Eingangswert für die Titrationstemperatur (s. 6.1, Tab. 11). Die Spannweite der Berechnungsergebnisse ist beträchtlich. Die meisten Werte liegen im calcitabscheidenden Bereich. Mit dem Programm *PHISAM* wurden tendenziell niedrigere Werte als mit den anderen Rechenprogrammen ermittelt. Zwei Ergebnisse liegen im stark calcitabscheidenden Bereich (*aquaC und WinWASI*.) Es wurden sechs Berechnungswerte im calcitlösenden Bereich ermittelt. Es liegen fünf Werte über dem Grenzwert 5 mg/l CaCO₃. 3 Werte, berechnet mit dem Calcit-Modul von Blomesystem liegen deutlich darüber.

Der pH - Wert im Datensatz 6 beträgt 7. Eine Bestimmung der Calcitlösekapazität wird in der Trinkwasserverordnung gefordert. Der calcitabscheidende Charakter dieses Wassers ist mit dem hohen Gehalt an Calciumionen zu begründen.

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

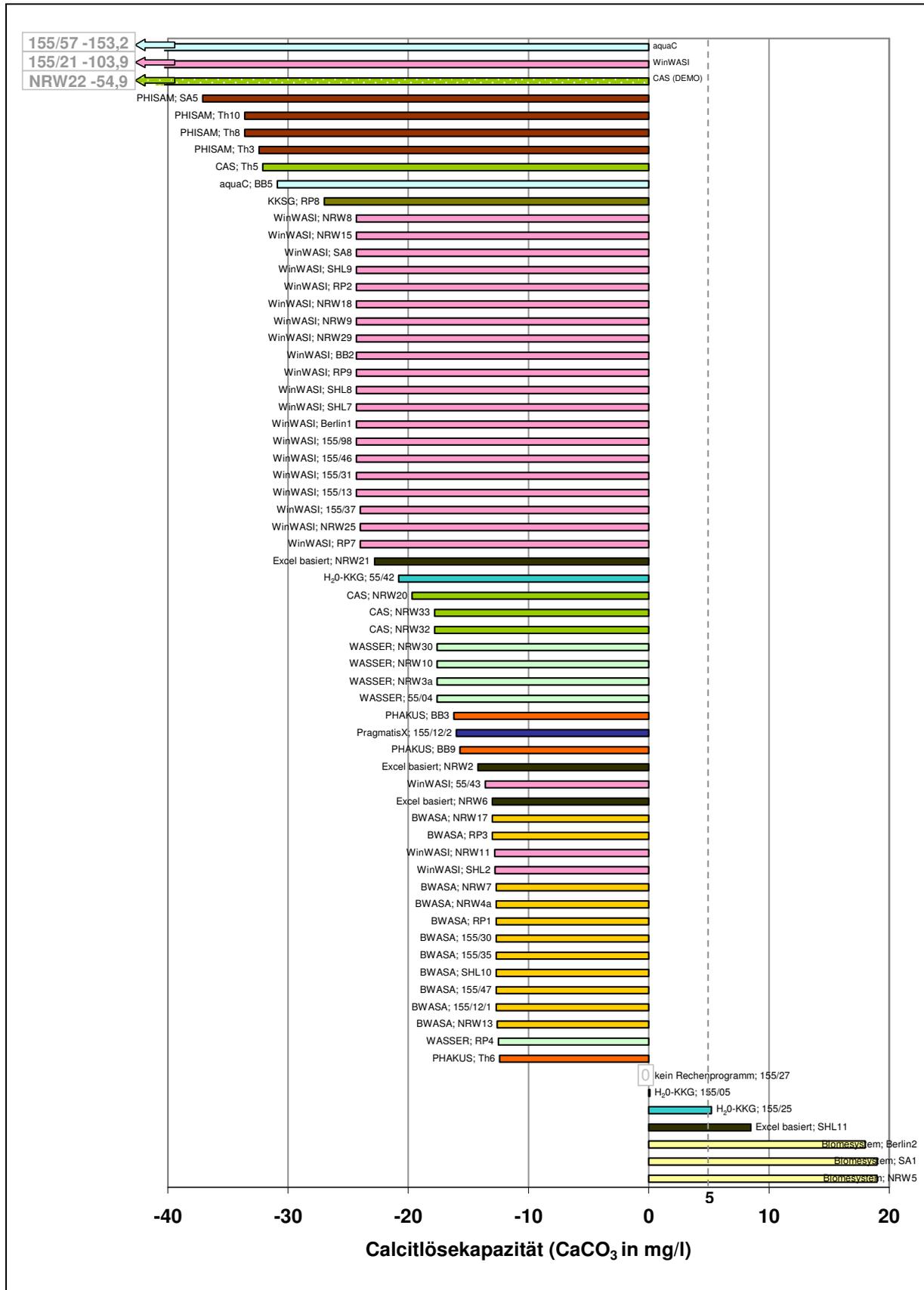


Abb. 11: Zusammenstellung der Ergebnisse aus den einzelnen Laboren mit RV 3 und Datensatz 6

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

6.2.2.7 Datensatz 7

Die Berechnungsergebnisse bezüglich des Datensatzes 7 zeigen eine relativ gute Übereinstimmung bezogen auf die jeweiligen Wertenniveaus. Auch die Ergebnisse der einzelnen Rechenprogramme stimmen gut überein. Die mit dem Calcit-Modul von Blomesystem berechneten Werte liegen in fünf Anwendungsfällen höher als die Werte der anderen Programme.

Nur bei starker Vergrößerung sind drei Wertenniveaus zu erkennen. Die meisten Ergebnisse liegen um ein Niveau von 145 mg/l CaCO₃. Das ist der Bereich des Zielwertes aus den Eingangsgrößen Säurekapazität und pH - Wert. In diesem Bereich sind die Ergebnisse des Programms *PHAKUS*, und zum großen Teil die Ergebnisse der Programme *BWASA*, *WinWASI*, *aquaC*, *PHISAM*, *CAS* und auch Excel basierte Anwendungen zu finden. Das Programm *H₂O-KKG* liegt mit einem Ergebnis in diesem Bereich. Das Niveau um 110 mg/l CaCO₃ bildet ca. 20% der Berechnungsergebnisse ab. Diesem Bereich liegen mit hoher Wahrscheinlichkeit die Eingangsgrößen Säurekapazität und Basekapazität zu Grunde. Der überwiegende Anteil der Berechnungen (3) mit dem Programm *H₂O-KKG* fügt sich hier ein, des weiteren einige Berechnungen mit den Programmen *WINWASI* und *BWASA*, eine Berechnung mit dem Programm *CAS* und die zwei in der Betrachtung enthaltenen Ergebnisse aus dem Programm *aquaC*. Die nur einmal in der Betrachtung vorhandenen Werte der Programme *AQUACHEM*, *PHREEQC-2*, *WWA* und 1 von 2 Ergebnissen aus dem Programm *KKSG* befinden sich ebenso in diesem Bereich, wie die Berechnung ohne Anwendung eines Rechenprogramms. Fünf Ergebnisse aus dem Calcit-Modul der Fa. Blomesystem liegen um 160 mg/l CaCO₃. Zwei Berechnungswerte weichen deutlich von allen anderen ab.

Der pH - Wert im vorgegebenen Datensatz liegt bei 6,34. Die Trinkwasserverordnung fordert hier die Bestimmung der Calcitlösekapazität (s. Kap. 1, Kap. 3.1).

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

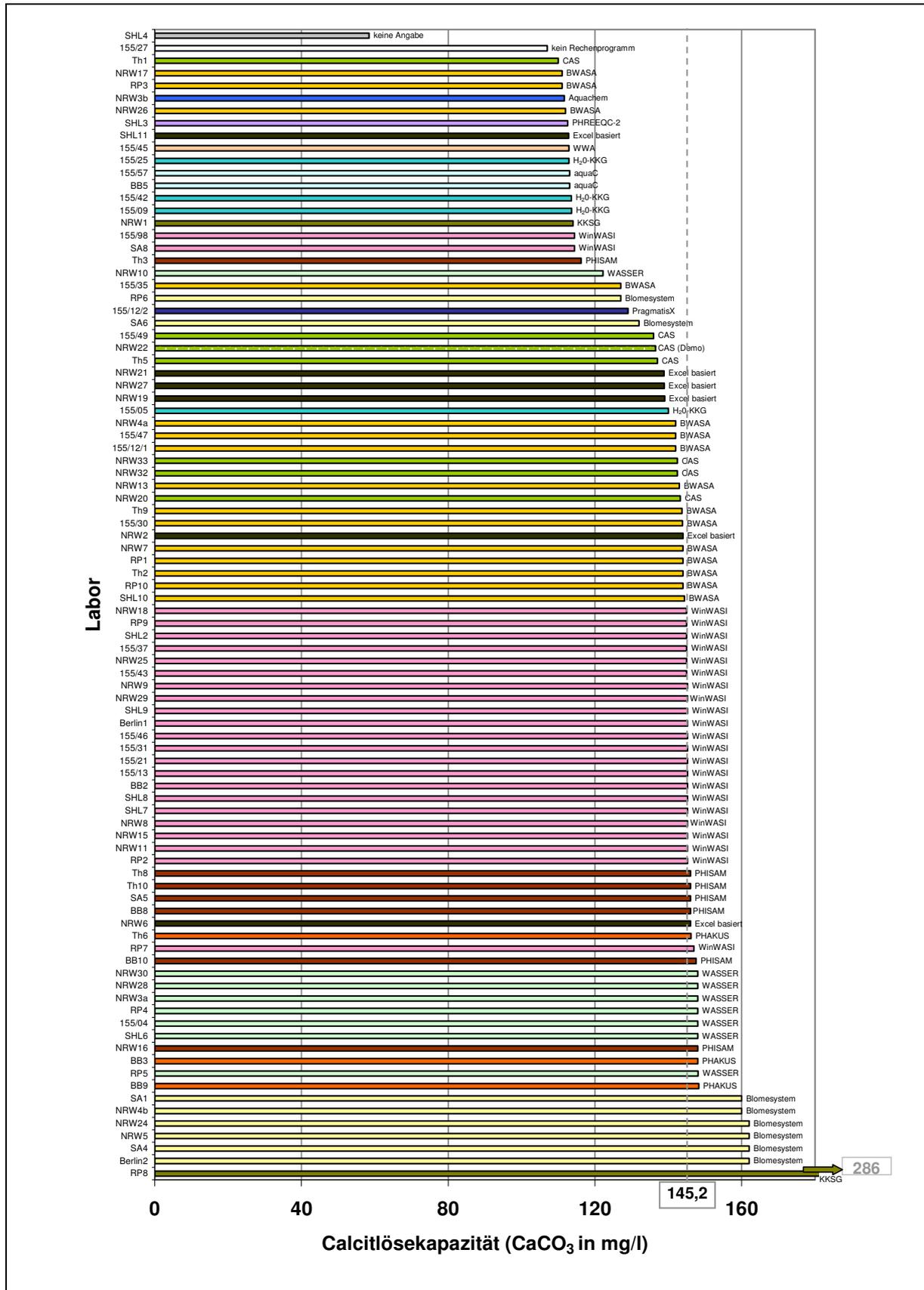


Abb.12: Zusammenstellung der Ergebnisse aus den einzelnen Laboren mit RV 3 und Datensatz 7

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

6.2.2.8 Datensatz 8

Die Berechnungsergebnisse des Datensatzes 8 stimmen gut überein. Die meisten der Ergebnisse weichen nur gering voneinander ab. Die Ergebnisse aus den Eingangsgrößen Säurekapazität und pH - Wert sowie Säurekapazität und Basekapazität stimmen hier bezogen auf den ermittelten Zielwert gut überein. Auch das Gesamtbild zu Datensatz 8 weist auf diesen Sachverhalt hin (s. Abb.13).

Bezüglich der verschiedenen Rechenprogramme zeigt sich bei Datensatz 8, in der Tendenz die folgende Abstufung. Die höchsten Berechnungswerte ermittelte das Programm *H₂O-KKG*, gefolgt von *AQUACHEM* (1 Anwendung), *KKSG* (2 Anwendungen), *WWA* (1 Anwendung), *WASSER* und *WinWASI*. Die Programme *PHISAM*, *BWASA*, *CAS*, *PragmatisX* (1 Anwendung) und besonders das Calcit-Modul von Blomesystem und die Programme *aquaC* (2 Anwendungen) und *PHREEQC-2* (1 Anwendung) ermittelten Ergebnisse auf einem geringeren Wertelevel.

Der pH - Wert des Datensatzes liegt bei 7,24. Die Trinkwasserverordnung fordert die Bestimmung der Calcitlösekapazität. Eine Berechnung mit dem Calcit-Modul der Fa. Blomesystem und die Berechnung ohne Angabe zum Rechenprogramm liegt unter dem Grenzwert für Einzelwässer. Alle anderen Berechnungen liegen über diesem Grenzwert. 70 Berechnungen liegen auch über dem Grenzwert 10 mg/l CaCO₃ für Mischwässer.

Der Datensatz erfüllt die Plausibilitätskriterien.

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

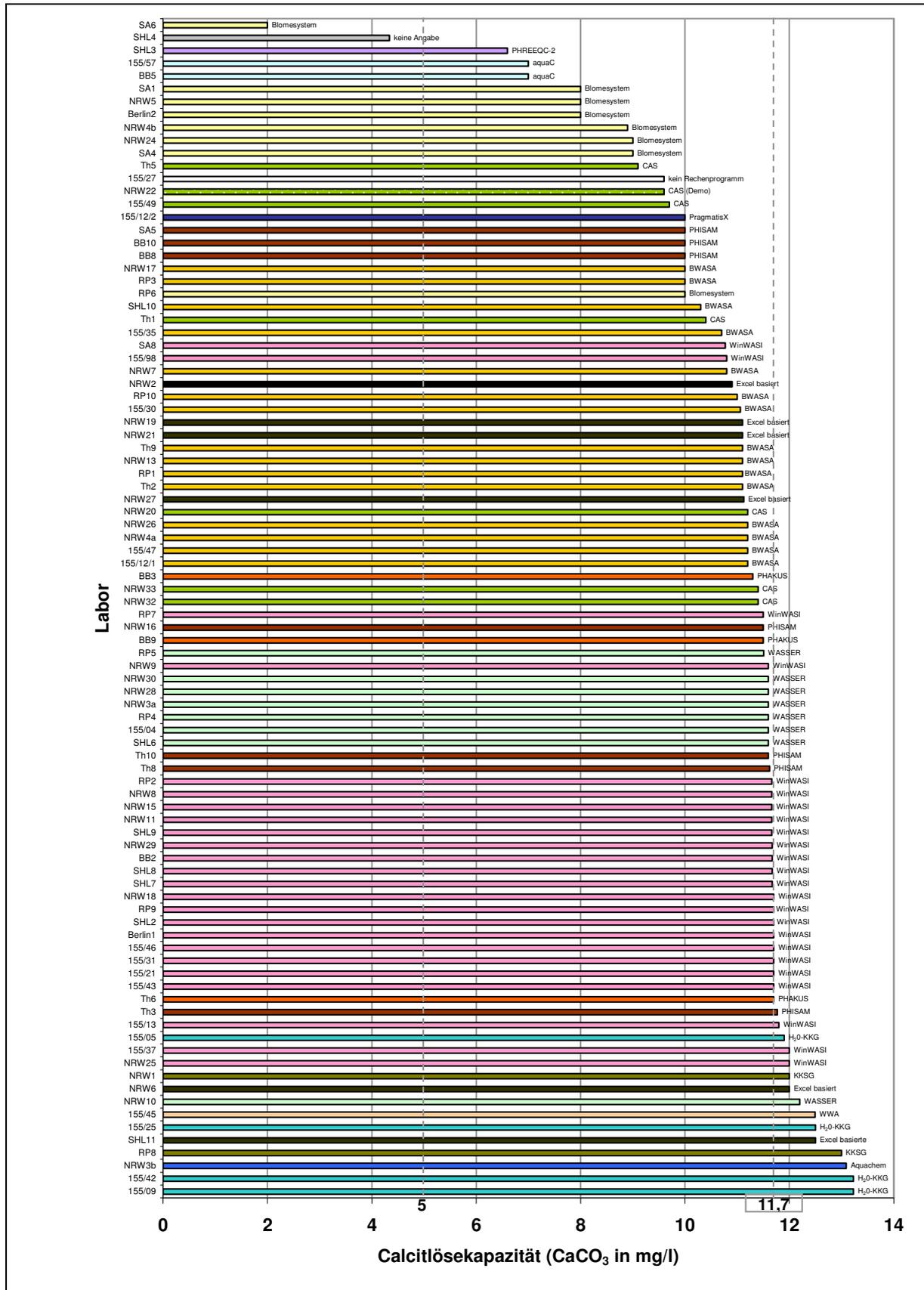


Abb.13: Zusammenstellung der Ergebnisse aus den einzelnen Laboren mit RV 3 und Datensatz 8

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

6.2.3 Zusammenfassung der Kommentare

Die in die Auswertung einbezogenen 92 Berechnungen stammen von 90 Laboratorien. Von einzelnen Laboren wurden zu den Berechnungen Kommentare abgegeben. Diese werden in den nachfolgenden Tabellen (Tab. 12-20) zusammengefasst.

Tabelle 12: Kommentare einzelner Labore zum Datensatz 1 (R3)

Bedingungen	<ul style="list-style-type: none">▪ Leitfähigkeit erfüllt nicht Bedingung der DIN
Plausibilität	<ul style="list-style-type: none">▪ pH - Wert Plausibilität nach LFW-Merkblatt 1.5/1 nicht gegeben▪ pH - Wert –Konsistenz nach DVGW Arbeitsblatt W 214-1 nicht gegeben
Berechnungs- grundlage	<ul style="list-style-type: none">▪ Ergebnis aus Mittelwert von $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ und $K_{S4,3} / \text{pH}$, unsichere, quantitative Aussage!▪ $\text{pH} < 7,3$; Entscheidung für $K_{S4,3} / \text{pH}$, da $K_{B8,2}$ zu ungenau▪ $\text{pH} < 7,7$, $L_f < 300 \mu\text{S}/\text{cm}$, Entscheidung für $K_{S4,3} / \text{pH}$▪ $\text{pH} < 7,3$; Entscheidung für $K_{S4,3} / K_{B8,2}$▪ Ergebnis aus $K_{B8,2} / \text{pH}$

Tabelle 13: Kommentare einzelner Labore zum Datensatz 2 (R3)

Bedingungen	<ul style="list-style-type: none"> ▪ keine Rechnung möglich ▪ Ladungsbilanzfehler > 5 %
Plausibilität	<ul style="list-style-type: none"> ▪ errechnete Abweichung der pH - Werte 0,28 pH-Einheiten, da Pufferintensität nahe 0,2 mmol Kriterium erfüllt ▪ pH - Wert - Konsistenz nach DVGW Arbeitsblatt W 214-1 nicht gegeben
Berechnungs- grundlage	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Wert über $K_{S_{4,3}}/pH$, da bei niedriger PI der Titrationsfehler bei $K_{B_{8,2}}$, bei Stoffaustausch mit der Atmosphäre relativ groß ist ▪ $pH < 7,7$, $L_f < 300 \mu S/cm$, Entscheidung für $K_{S_{4,3}}/pH$

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Tabelle 14: Kommentare einzelner Labore zum Datensatz 3 (R3)

Bedingungen	
Plausibilität	<ul style="list-style-type: none">▪ pH - Wert Plausibilität nach LFW-Merkblatt 1.5/1 gegeben▪ pH - Wert –Konsistenz nach DVGW Arbeitsblatt W 214-1 nicht gegeben
Berechnungs- grundlage	<ul style="list-style-type: none">▪ Ergebnis aus Mittelwert von $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ und $K_{S4,3} / \text{pH}$, hier geringe Abweichung der Ergebnisse▪ $\text{pH} < 7,3$; Entscheidung für $K_{S4,3} / \text{pH}$, da $K_{B8,2}$ zu ungenau▪ Programm (<i>BWASA</i>) wählte Wert aus $K_{S4,3} / K_{B8,2}$, wegen der Gefahr des Gasaustausches bei der Titration und der gegen 0 strebenden Ladungsbilanz ist dieser Wert fehlerbehaftet, deshalb Ergebnis aus pH - Wert und Gesamtkonzentration der Hauptionen gewählt▪ Wert aus $K_{S4,3} / K_{B8,2}$▪ $\text{pH} < 7,3$; Entscheidung für $K_{S4,3} / K_{B8,2}$

Tabelle 15: Kommentare einzelner Labore zum Datensatz 4 (R3)

Bedingungen	
Plausibilität	<ul style="list-style-type: none"> ▪ pH - Wert Plausibilität nach LFW-Merkblatt 1.5/1 nicht gegeben ▪ pH - Wert - Konsistenz nach DVGW Arbeitsblatt W 214-1 nicht gegeben
Berechnungsgrundlage	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Wert über $K_{S4,3} / \text{pH}$, da wegen der niedrigen Basekapazität der Titrationsfehler bei $K_{B8,2}$ bei Stoffaustausch mit der Atmosphäre relativ groß ist ▪ Wert aus $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ ▪ Ergebnis aus $K_{B8,2} / \text{pH}$

Tabelle 16: Kommentare einzelner Labore zum Datensatz 5 (R3)

Bedingungen	
Plausibilität	<ul style="list-style-type: none"> ▪ pH - Wert Plausibilität nach LFW-Merkblatt 1.5/1 gegeben ▪ pH - Wert - Konsistenz nach DVGW Arbeitsblatt W 214-1 gegeben
Berechnungsgrundlage	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ergebnis aus Mittelwert von $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ und $K_{S4,3} / \text{pH}$, sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse, hervorragende Qualität des Datensatzes ▪ Wert aus $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ ▪ Ergebnis aus $K_{B8,2} / \text{pH}$

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Tabelle 17: Kommentare einzelner Labore zum Datensatz 6 (R3)
(Anzahl der Kommentare von 90 einbezogenen Laboren)

Bedingungen	<p>13 Labore:</p> <ul style="list-style-type: none">▪ Datensatz ist nicht berechenbar <p>2 Labore:</p> <ul style="list-style-type: none">▪ Distanzierung vom Ergebnis, nicht sinnvolle Berechnung <p>5 Labore:</p> <ul style="list-style-type: none">▪ Programm berechnet auf Grundlage des Datensatzes kein Ergebnis <p>1 Labor:</p> <ul style="list-style-type: none">▪ DIN- Verfahren nicht anwendbar, da Säurekapazität nicht gegeben ist, ermittelter Wert aus berechneter Säurekapazität unter Vorbehalt
Plausibilität	<p>1 Labor:</p> <ul style="list-style-type: none">▪ Ionenbilanz und Übereinstimmung berechneter und gemessener pH - Wert nicht durchführbar <p>1 Labor:</p> <ul style="list-style-type: none">▪ Fehler der Ionenbilanz
Berechnungsgrundlage	<p>4 Labore:</p> <ul style="list-style-type: none">▪ Säurekapazität wurde berechnet <p>3 Labore:</p> <ul style="list-style-type: none">▪ Angabe, dass mit Titrationstemperatur, $t_t = 20\text{ °C}$ gerechnet wurde <p>1 Labor:</p> <ul style="list-style-type: none">▪ Angabe, dass mit Titrationstemperatur $10,7\text{ °C}$ gerechnet wurde

Tabelle 18: Kommentare einzelner Labore zum Datensatz 7 (R3)

Bedingungen	
Plausibilität	<ul style="list-style-type: none"> ▪ pH - Wert Plausibilität nach LFW-Merkblatt 1.5/1 nicht gegeben ▪ pH - Wert - Konsistenz nach DVGW Arbeitsblatt W 214-1 nicht gegeben
Berechnungsgrundlage	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ergebnis aus Mittelwert von $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ und $K_{S4,3} / \text{pH}$ ▪ $\text{pH} < 7,3$; Entscheidung für $K_{S4,3} / \text{pH}$, da $K_{B8,2}$ zu ungenau ▪ Wert aus $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ ▪ $\text{pH} < 7,3$; Entscheidung für $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ ▪ Ergebnis aus $K_{B8,2} / \text{pH}$

Tabelle 19: Kommentare einzelner Labore zum Datensatz 8 (R3)

Bedingungen	
Plausibilität	<ul style="list-style-type: none"> ▪ pH - Wert Plausibilität nach LFW-Merkblatt 1.5/1 gegeben ▪ pH - Wert - Konsistenz nach DVGW Arbeitsblatt W 214-1 gegeben
Berechnungsgrundlage	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Ergebnis aus Mittelwert von $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ und $K_{S4,3} / \text{pH}$, sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse, hervorragende Qualität des Datensatzes ▪ $\text{pH} < 7,3$; Entscheidung für $K_{S4,3} / \text{pH}$, da $K_{B8,2}$ zu ungenau ▪ Wert aus $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ ▪ $\text{pH} < 7,3$; Entscheidung für $K_{S4,3} / K_{B8,2}$ ▪ Ergebnis aus $K_{B8,2} / \text{pH}$

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Tabelle 20: Pauschale Kommentare der Labore (R3)
(Anzahl der Kommentare von 90 teilnehmenden Laboren)

Bedingungen	
Plausibilität	<p>1 Labor:</p> <p>a) <i>WASSER 2000</i> rechnet mit vorgegebenen Werten. Als Kontrollwert wird die Basekapazität berechnet. Zum Teil traten Unterschiede zum vorgegebenen Wert auf.</p> <p>b) <i>Aquachem</i> führt Berechnungen mit berechnetem pH - Wert durch. Es treten Abweichungen bis zu 0,3 pH-Einheiten auf</p>
Berechnungsgrundlage	<p>2 Labore: Entscheidung für $K_{S4,3}$ / pH, da erfahrungsgemäß die Bestimmung von $K_{B8,2}$ mit größeren Schwankungen behaftet ist (Datensatz 6 aus $K_{B8,2}$ / pH)</p> <p>1 Labor: Auswahl der Wertekombination gemäß DIN 38404-C10-R3 Abschnitt 6.3 Anmerkung 2 und Tabelle 6</p> <p>11 Labore: Angabe der Entscheidung für $K_{S4,3}$ / pH (außer Datensatz 6)</p>

6.3 Diskussion

Das Rechenverfahren 3 nach DIN 38404 ist geeignet, die Calcitsättigung eines Wassers als Calcitlösekapazität entsprechend den Anforderungen der Trinkwasserverordnung zu beschreiben. Der Bedingungsrahmen des Verfahrens lässt die Berechnung der Calcitlösekapazität für die meisten Wässer zu. Das Rechenverfahren 2 ermöglicht, beispielsweise mit dem Rechenprogramm *Wassersoft*, die Bestimmung der Calcitlösekapazität eines Wassers, ist aber wegen des eingeschränkten Bedingungsrahmens weniger geeignet. Es schränkt beispielsweise die Stoffmengenkonzentration an Calcium ($0,25 \leq c(\text{Ca}) \leq 10 \text{ mmol/l}$) und das Sulfat zu Calcium und Magnesiumverhältnis ($c(\text{SO}_4)/(c(\text{Ca}) + c(\text{Mg})) \leq 0,5$) ein (s. auch Kap.4.2). Das Rechenverfahren 1 ermöglicht nicht die Beschreibung des Calcitsättigungszustandes des Wassers als Calcitlösekapazität (s. auch Kap. 4.1).

Die Berechnung der Calcitlösekapazität nach dem Rechenverfahren R3 ist auf der Grundlage von 6 verschiedenen Eingangsgrößenpaaren vorgegeben (s. Kap. 4.3). Mit den versandten Datensätzen sind folgende Berechnungskombinationen möglich:

- Säurekapazität und pH - Wert ($K_{S4,3} / pH$),
- Säurekapazität und Basekapazität ($K_{S4,3} / K_{B8,2}$) und
- Basekapazität und pH - Wert ($K_{B8,2} / pH$).

In einigen Programmen scheinen neben diesen und den Kombinationen mit DIC weitere Berechnungsvarianten (z.B. pH und starke Elektrolyte) möglich zu sein. Ob diese Verfahren den in der Norm relevanten Verfahren gleichwertig sind, muss das Labor prüfen und dokumentieren.

Die im Rahmen des Survey von den Laboren ermittelten Ergebnisse, meist berechnet aus Säurekapazität und pH - Wert ($K_{S4,3} / pH$) oder aus Säurekapazität und Basekapazität ($K_{S4,3} / K_{B8,2}$), weichen oft stark voneinander ab.

Die Auswertung der Berechnungen z.B. des Datensatzes 3 zeigen, dass dies auch der Fall sein kann, wenn der zu Grunde liegende Datensatz die Plausibilitätskriterien des LfW [10] erfüllt. Eine konkrete Betrachtung dieser Abweichungen, in Bezug auf die einzelnen Rechenprogramme im Survey, ist wegen der meist fehlenden Angabe der Eingangsgrößen nicht möglich.

Die Ergebnisse der verschiedenen Rechenprogramme differieren zum Teil erheblich. Dies ist besonders bei Berechnungsergebnissen im Grenzwertbereich problematisch.

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Es konnte nicht festgestellt werden, dass ein Programm über alle Datensätze hinweg eher zu niedrigeren oder zu höheren Berechnungsergebnissen neigt. Es zeigt sich diesbezüglich eine Variabilität zwischen den Datensätzen, d.h. es kann festgestellt werden, dass ein beliebiges Rechenprogramm bei einem Datensatz ein hohes Niveau und bei einem anderen Datensatz ein niedriges Niveau im Vergleich zu den anderen Anwendungen erreicht.

Es ist des Weiteren eine Variabilität innerhalb einzelner Rechenprogramme festzustellen. Auch hier hängt das Vorhandensein der Abweichungen vom Datensatz ab. Die Spannweite der Ergebnisse ist bei einigen Programmen erheblich (z.B. Calcit-Modul von Blomesystem).

Die Rechenprogramme müssen entsprechend den Vorgaben der DIN 38404-10: 1995-04 [12] umgesetzt sein. Die in der Norm vorgegebenen Kontrolldaten müssen verwendet und die Referenzergebnisse erreicht werden. Da die Calcitlösekapazität ein Berechnungsparameter ist, wird sie als solcher nicht akkreditiert. Es gehen aber Analysenwerte aus akkreditierten Methoden in die Berechnung ein. Üblicherweise wird davon ausgegangen, dass kommerzielle Rechenprogramme einer Validierung durch den Anbieter unterzogen wurden. Das Labor seinerseits muss die Validität der eingesetzten Software sicherstellen und im Rahmen von Akkreditierungen bzw. Überprüfungen durch die Unabhängigen Stellen nachweisen. Unter der Annahme der Anwendung der in der Norm vorhandenen Kontrolldaten scheint nach den Ergebnissen dieses Survey die Validität der Ergebnisse einiger Rechenprogramme nicht ausreichend sichergestellt. Eine erweiterte Prüfung der Rechenprogramme über die bisherigen Normdatensätze hinaus könnte zu mehr Transparenz und damit Berechnungs- bzw. Ergebnissicherheit führen.

Um unter den gegebenen Rahmenbedingungen den Parameter Calcitlösekapazität mit relativer Genauigkeit zu bestimmen, empfiehlt es sich, eine Überprüfung der Plausibilität der Analysewerte durchzuführen. Es sollte sowohl die Ionenbilanz als auch eine Überprüfung des gemessenen und berechneten pH - Wertes bzw. eine Überprüfung der Konsistenz von Säurekapazität, Basekapazität und pH - Wert durchgeführt werden. Die Bestimmung der Calcitlösekapazität birgt bezüglich der vor Ort zu bestimmenden Analyten und wegen der relativ komplexen, iterativen Berechnungsmethode ein hohes Fehlerpotential.

Die Calcitlösekapazität ist als Grundlage eines Grenzwertparameters der Trinkwasserverordnung in einer nationalen Gesetzgebung geregelt. Die Richtlinie 98/83/EG fordert lediglich die Nichtkorrosivität des Trinkwassers; sie fordert nicht, diesen Parameter an das Gleichgewichtssystem der Kohlensäure zu binden. Die Calcitlösekapazität ist derzeit jedoch offen-

sichtlich die beste Möglichkeit, das Korrosionsverhalten des Wassers zu ermitteln. Der Survey zeigt, dass die Berechnung der Calcitlösekapazität eines Wassers vielen Einflussfaktoren unterliegt und unter den derzeitigen Rahmenbedingungen nicht zu gleichwertigen Ergebnissen zwischen den Laboren führt.

7 Ausblick

Eine Überschreitung der Grenzwerte der Calcitlösekapazität kann zu weit reichenden Konsequenzen für den Unternehmer zentraler Wasserversorgungsanlagen oder den Betreiber einer Kleinanlage führen. Es sind daher weitere Anstrengungen zur Qualitätssteigerung bei der Bestimmung der Calcitlösekapazität erforderlich. Unter anderem sind bei einer anstehenden Routineüberarbeitung der DIN 38404-10: 1995-04 (DIN-Normen werden i. d. R. alle 5 Jahre überprüft) zur Sicherstellung exakter gleichartiger Ergebnisse für alle Wässer, neben einer Optimierung der Kontrollparameter zur Überprüfung der Validität der Rechenprogramme, auch eindeutige Vorgaben zur Berechnungsweise im Rechenverfahren 3 mit Hilfe von Softwareanwendungen festzulegen. Die Durchführung eines praktischen Ringversuchs ist ein weiterer Schritt, um die derzeitige Situation bezüglich der Berechnungssicherheit des Parameters Calcitlösekapazität zu überprüfen und um daraus weitere Schlüsse abzuleiten.

8 Literaturverzeichnis

- [1] Verordnung zur Novellierung der Trinkwasserverordnung (TrinkwV 2001) vom 21. Mai 2001, BGB Jahrgang 2001, Teil 1 Nr. 24, Bonn, S. 959-980
- [2] Richtlinie 98/83/EG des Rates vom 3. November 1992 über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch
<http://www.dvgw.de/pdf/eg9883.pdf> (gelesen: 6.März 2006)
- [3] Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft (2005): Merkblatt Nr. 1.5/3, Roh- und Trinkwasseruntersuchungen nach TrinkwV und EÜV, 2, S.3
<http://www.bayern.de/IfW/service/produkte/veroeffentlichungen/merkblaetter/teil1/nr153.pdf>
(gelesen: 8.März 2006)
- [4] Nissing, W.; Johannsen K. (2003): pH - Wert und Calcitsättigung in: Grohmann, H. (Hg.): Die Trinkwasserverordnung, S. 473 f., 4. Auflage, Erich Schmidt Verlag Berlin
- [5] Verordnung über Trinkwasser und über Wasser für Lebensmittelbetriebe (TrinkwV 1990) Fassung vom 5. Dezember 1990
<http://www.umwelt-online.de/recht/wasser/tvo/tvoges.htm> (gelesen: 6.März 2006)
- [6] Kölle, W.(2001): Wasseranalysen – richtig beurteilt, S. 231-256, 1. Auflage, WILEY-VCH Verlag GmbH, Weinheim
- [7] DVGW (1988): pH - Wert und Calciumcarbonatsättigung eines Trinkwassers, Eschborn
- [8] Zühlke, K.(o.J.) : Kohlensäure/ Kalk- Kohlensäure-Gleichgewicht
<http://www.trinkwasserspezie.de/KKSGgw.htm> (gelesen: 3.April 2006)
- [9] DVGW (2005): Technische Regel Arbeitsblatt W 214-1, Entsäuerung von Wasser-Teil 1. Grundsätze und Verfahren, S. 10-17, DVGW Bonn
- [10] Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft (2003): Merkblatt Nr. 1.5/1, Umfang einer „Chemisch-technischen Wasseranalyse“ für die Bearbeitung grund- und trinkwasser-technischer Belange, S. 6-8
<http://www.bayern.de/IfW/service/produkte/veroeffentlichungen/merkblaetter/teil1/nr151.pdf>
(gelesen: 20.März 2006)
- [11] Mitteilung aus dem Bayerischen Landesamt für Umwelt (6.März.2006)
- [12] DIN 38404-10 (C10) Physikalische und physikalisch-chemische Stoffkenngrößen (Gruppe C) Teil 10: Calcitsättigung eines Wassers (C10), 1995

Calcitlösekapazität: Ein Survey zur Berechnung

Anhang: Vorgabewerte Datensätze 1-8 (D1 – D8)

	D1	D2	D3	D4	D5	D6	D7	D8
Bewertungstemperatur (°C)	9,3	15,0	11,2	8,2	13,0	10,7	10,1	13,9
Temperatur pH-Messung(°C)	9,3	10,7	11,2	8,2	13,0	10,7	10,1	13,9
Titrationstemperatur (°C)	20,0	20,0	20,0	20,0	20,0	-	20,0	15,5
Leitfähigkeit bei 25 °C (mS/m)	5,75	16,73	94,1	42,3	141,0	156,3	86,0	38,6
pH - Wert	5,8	7,71	7,18	7,83	7,35	7,01	6,38	7,24
Säurekapazität pH 4,3 (mmol/l)	0,49	1,48	6,28	3,97	3,09	-	2,26	3,89
CO ₂ -Ausblasung Ja / nein	ja	nein	nein	ja	ja	ja	ja	ja
Basekapazität pH 8,2 (mmol/l)	1,1	0,140	1,02	0,26	0,34	1,54	1,78	0,52
Calcium (mg/l)	5,0	17,9	113,0	53,1	89,6	280,6	85,7	67,2
Magnesium (mg/l)	1,7	9,1	57,2	18,5	27,3	67,1	29,2	8,7
Natrium (mg/l)	0,9	1,0	6,4	4,3	147,9	41,6	33,9	2,0
Kalium (mg/l)	3,8	2,8	1,8	7,6	18,8	3,8	13,0	6,6
Ammonium (mg/l)	0,06	0,05	0,022	0,056	0,05	0,022	0,05	0,05
Eisen (mg/l)	0,045	0,12	0,005	0,311	0,328	0,8	0,16	0,027
Mangan (mg/l)	0,008	0,17	0,0	0,209	0,12	0,022	0,305	0,022
Chlorid (mg/l)	1,0	2,0	37,0	4,6	245,8	19,0	67,9	5,0
Nitrat (mg/l)	0,0	0,0	96,0	2,1	0,0	0,0	34,4	6,2
Nitrit (mg/l)	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,134	0,0
Sulfat (mg/l)	2,0	9,0	86,0	21,7	174,1	701,0	0,134	7,0
Orthophosphat (mg/l)	0,032	0,087	0,04	0,077	0,008	0,001	180,7	0,14
Fluorid (mg/l)	0,32	0,12	0,2	0,11	0,56	0,2	0,04	0,12

Notizen



91058 **Erlangen**
Eggenreuther Weg 43
Telefon: 09131/764-0



85764 **Oberschleißheim**
Veterinärstraße 2
Telefon: 089/3 1560-0



97082 **Würzburg**
Luitpoldstraße 1
Telefon: 0931/41993-0



80538 **München**
Pfarrstraße 3
Telefon: 089/2184-0

www.lgl.bayern.de

**Bayerisches Landesamt für
Gesundheit und Lebensmittelsicherheit**
Eggenreuther Weg 43, 91058 Erlangen

Telefon: 09131/764-0
Telefax: 09131/764-102

Internet: www.lgl.bayern.de
E-Mail: poststelle@lgl.bayern.de

Druck: Print Com, Erlangen

ISSN 1863-5008

ISBN 3-939652-13-X

ISBN 978-3-939652-13-7

ISBN 3-939652-14-8

ISBN 978-3-939652-14-4

(Print Ausgabe)

(Print Ausgabe bis 31.12.2006)

(Print Ausgabe ab 01.01.2007)

(Online Ausgabe bis 31.12.2006)

(Online Ausgabe ab 01.01.2007)