

Práctica 5- Distribución de especies en equilibrio en solución acuosa y estados de saturación con respecto a minerales utilizando programas de especiación/saturación.

Modelización hidrogeoquímica

Javier Pont Castillo
Natàlia Esteve Domingo
Nuria Boluda Botella

a) Calcular con PHREEQC la distribución de especies en equilibrio para el agua de mar.

Datos de concentración de agua de mar (extraído del libro de Appelo and Postma, "Geochemistry, Groundwater and Pollution" 1ª edición (1993), pag. 57):

```

SOLUTION 1
temp 25
pH 8.22
pe 4
redox pe
units mg/l
density 1.013
Na 10768
K 399.1
Mg 1291.8
Ca 412.3
N(-3) 0.03
Cl 19353
Alkalinity 156.53
S(6) 2712
N(5) 0.29
Fe(2) 0.002
Al 0.002
F 1.39
Si 4.28
P 0.06
-water 1 # kg
    
```

b) Reproducir el gráfico de barras indicando las simplificaciones que se consideran convenientes

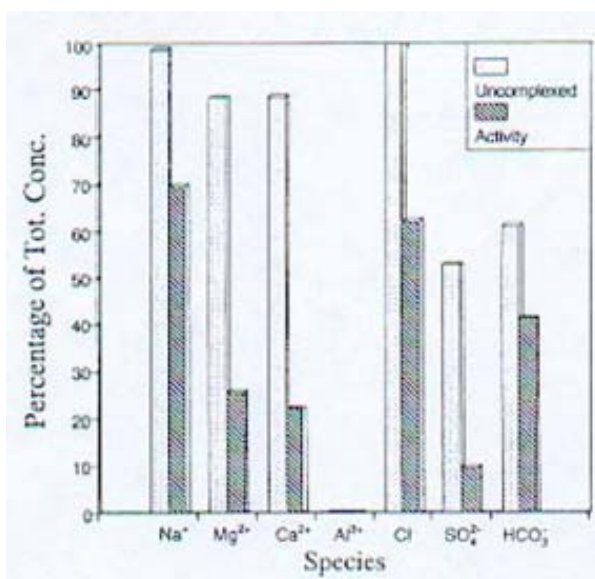


Gráfico extraído del libro de Appelo and Postma, "Geochemistry, Groundwater and Pollution" 2ª edición (2005), pag. 129: Figura 4.3. La importancia de la complejación y correcciones de actividad como porcentaje de la concentración total para agua de mar 35‰ con un pH de 8.22.

a) Calcular con PHREEQC la distribución de especies en equilibrio para el agua de mar.

En este apartado se calculará la distribución de especies en equilibrio para el agua de mar, cuya concentración se proporciona en el enunciado.

```
SOLUTION 1
  temp      25
  pH        8.22
  pe        4
  redox     pe
  units     mg/l
  density   1.013
  Na        10768
  K         399.1
  Mg       1291.8
  Ca        412.3
  N(-3)     0.03
  Cl       19353
  Alkalinity 156.53
  S(6)      2712
  N(5)      0.29
  Fe(2)     0.002
  Al        0.002
  F         1.39
  Si        4.28
  P         0.06
  -water    1 # kg
```

Composición de la disolución en moles y en molaridad.

Elements	Molality	Moles
Al	7.580e-008	7.580e-008
Alkalinity	3.198e-003	3.198e-003
Ca	1.052e-002	1.052e-002
Cl	5.582e-001	5.582e-001
F	7.482e-005	7.482e-005
Fe(2)	3.662e-008	3.662e-008
K	1.044e-002	1.044e-002
Mg	5.433e-002	5.433e-002
N(-3)	2.190e-006	2.190e-006
N(5)	2.117e-005	2.117e-005
Na	4.790e-001	4.790e-001
P	1.981e-006	1.981e-006
S(6)	2.887e-002	2.887e-002
Si	7.284e-005	7.284e-005

Descripción de la disolución.

```
pH = 8.220
pe = 4.000
Activity of water = 0.981
Ionic strength = 6.661e-001
Mass of water (kg) = 1.000e+000
Total carbon (mol/kg) = 2.902e-003
Total CO2 (mol/kg) = 2.902e-003
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -1.334e-004
```

Percent error, $100 * (Cat - |An|) / (Cat + |An|) = -0.01$
Iterations = 11
Total H = 1.110153e+00
Total O = 5.563076e+001

Como puede observarse en la descripción de la disolución, la actividad del agua tiene un valor de 0,981 (menor que 1, la correspondiente a un agua dulce), debido a la alta concentración de iones disueltos en la misma. La fuerza iónica es 0,666 (es necesario considerar actividades) y el porcentaje de error en el balance eléctrico es muy pequeño, 0,01%.

PHREEQC considera el par redox.

Redox couple	pe	Eh (volts)
N(-3)/N(5)	4.7420	0.2805

La siguiente distribución de especies en la disolución.

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma	
	OH-	2.670e-006	1.629e-00	-5.573	-5.788	-0.215
	H+	7.977e-009	6.026e-009	-8.098	-8.220	-0.122
	H2O	5.551e+001	9.808e-001	1.744	-0.008	0.000
Al		7.580e-008				
	Al(OH)	7.563e-008	5.644e-008	-7.121	-7.248	-0.127
	Al(OH)3	1.578e-010	1.840e-010	-9.802	-9.735	0.067
	Al(OH)2+	1.028e-011	7.671e-012	-10.988	-11.115	-0.127
	AlOH+2	1.939e-014	6.013e-01	-13.713	-14.221	-0.508
	AlF2+	1.527e-014	1.139e-014	-13.816	-13.943	-0.127
	AlF3	3.042e-015	3.547e-015	-14.517	-14.450	0.067
	AlF+2	2.964e-015	9.195e-016	-14.528	-15.036	-0.508
	AlF4-	4.678e-017	3.491e-017	-16.330	-16.457	-0.127
	Al+3	4.645e-017	3.719e-018	-16.333	-17.430	-1.097
	AlSO4+	4.181e-017	3.120e-017	-16.379	-16.506	-0.127
	Al(SO4)2	3.508e-018	2.618e-018	-17.455	-17.582	-0.127
	AlF5-2	4.410e-020	1.368e-020	-19.356	-19.864	-0.508
	AlF6-3	4.711e-024	3.382e-025	-23.327	-24.471	-1.144
	AlHSO4+2	5.375e-026	1.667e-026	-25.270	-25.778	-0.508
C(4)		2.902e-003				
	HCO3-	2.022e-003	1.368e-003	-2.694	-2.864	-0.170
	MgHCO3+	2.894e-004	2.160e-004	-3.538	-3.666	-0.127
	NaHCO3	2.204e-004	2.570e-004	-3.657	-3.590	0.067
	MgCO3	1.176e-004	1.371e-004	-3.930	-3.863	0.067
	NaCO3-	8.874e-005	6.623e-005	-4.052	-4.179	-0.127
	CaHCO3+	6.054e-005	4.094e-005	-4.218	-4.388	-0.170
	CO3-2	5.089e-005	1.064e-005	-4.293	-4.973	-0.679
	CaCO3	3.599e-005	4.196e-005	-4.444	-4.377	0.067
	CO2	1.620e-005	1.889e-005	-4.790	-4.724	0.067
	FeCO3	1.368e-009	1.595e-009	-8.864	-8.797	0.067
	FeHCO3+	1.145e-009	8.543e-010	-8.941	-9.068	-0.127
Ca		1.052e-002				
	Ca+2	9.356e-003	2.346e-003	-2.029	-2.630	-0.601
	CaSO4	1.065e-003	1.242e-003	-2.972	-2.906	0.067
	CaHCO3+	6.054e-005	4.094e-005	-4.218	-4.388	-0.170
	CaCO3	3.599e-005	4.196e-005	-4.444	-4.377	0.067
	CaF+	6.771e-007	5.053e-007	-6.169	-6.296	-0.127

	CaHPO4	9.475e-008	1.105e-007	-7.023	-6.957	0.067
	CaOH+	8.493e-008	6.338e-008	-7.071	-7.198	-0.127
	CaPO4-	5.811e-008	4.337e-008	-7.236	-7.363	-0.127
	CaH2PO4+	6.703e-010	5.002e-010	-9.174	-9.301	-0.127
	CaHSO4+	5.875e-011	4.385e-011	-10.231	-10.358	-0.127
Cl		5.582e-001				
	Cl-	5.582e-001	3.486e-001	-0.253	-0.458	-0.205
	FeCl+	4.028e-009	3.006e-009	-8.395	-8.522	-0.127
F		7.482e-005				
	F-	4.052e-005	2.472e-005	-4.392	-4.607	-0.215
	MgF+	2.955e-005	2.205e-005	-4.530	-4.657	-0.127
	NaF	4.078e-006	4.754e-006	-5.390	-5.323	0.067
	CaF+	6.771e-007	5.053e-007	-6.169	-6.296	-0.127
	HF	1.917e-010	2.234e-010	-9.717	-9.651	0.067
	FeF+	2.070e-012	1.544e-012	-11.684	-11.811	-0.127
	HF2-	2.840e-014	2.120e-014	-13.547	-13.674	-0.127
	AlF2+	1.527e-014	1.139e-014	-13.816	-13.943	-0.127
	AlF3	3.042e-015	3.547e-015	-14.517	-14.450	0.067
	AlF+2	2.964e-015	9.195e-016	-14.528	-15.036	-0.508
	AlF4-	4.678e-017	3.491e-017	-16.330	-16.457	-0.127
	AlF5-2	4.410e-020	1.368e-020	-19.356	-19.864	-0.508
	AlF6-3	4.711e-024	3.382e-025	-23.327	-24.471	-1.144
	SiF6-2	1.299e-034	4.029e-035	-33.886	-34.395	-0.508
Fe(2)		3.662e-008				
	Fe+2	2.712e-008	6.247e-009	-7.567	-8.204	-0.638
	FeCl+	4.028e-009	3.006e-009	-8.395	-8.522	-0.127
	FeSO4	2.528e-009	2.947e-009	-8.597	-8.531	0.067
	FeCO3	1.368e-009	1.595e-009	-8.864	-8.797	0.067
	FeHCO3+	1.145e-009	8.543e-010	-8.941	-9.068	-0.127
	FeOH+	4.309e-010	3.215e-010	-9.366	-9.493	-0.127
	FeF+	2.070e-012	1.544e-012	-11.684	-11.811	-0.127
	FeHPO4	1.832e-012	2.135e-012	-11.737	-11.671	0.067
	FeH2PO4+	3.496e-014	2.609e-014	-13.456	-13.584	-0.127
	FeHSO4+	1.564e-016	1.167e-016	-15.806	-15.933	-0.127
H(0)		4.410e-028				
	H2	2.205e-028	2.570e-028	-27.657	-27.590	0.067
K		1.044e-002				
	K+	1.028e-002	6.417e-003	-1.988	-2.193	-0.205
	KSO4-	1.603e-004	1.196e-004	-3.795	-3.922	-0.127
	KOH	3.107e-009	3.622e-009	-8.508	-8.441	0.067
	KHPO4-	1.440e-009	1.074e-009	-8.842	-8.969	-0.127
Mg		5.433e-002				
	Mg+2	4.669e-002	1.350e-002	-1.331	-1.870	-0.539
	MgSO4	7.201e-003	8.395e-003	-2.143	-2.076	0.067
	MgHCO3+	2.894e-004	2.160e-004	-3.538	-3.666	-0.127
	MgCO3	1.176e-004	1.371e-004	-3.930	-3.863	0.067
	MgF+	2.955e-005	2.205e-005	-4.530	-4.657	-0.127
	MgOH+	1.069e-005	7.977e-006	-4.971	-5.098	-0.127
	MgHPO4	7.369e-007	8.591e-007	-6.133	-6.066	0.067
	MgPO4-	4.510e-007	3.365e-007	-6.346	-6.473	-0.127
	MgH2PO4+	4.911e-009	3.665e-009	-8.309	-8.436	-0.127
N(-3)		2.190e-006				
	NH4+	2.044e-006	1.152e-006	-5.690	-5.938	-0.249
	NH3	9.348e-008	1.090e-007	-7.029	-6.963	0.067
	NH4SO4-	5.277e-008	3.938e-008	-7.278	-7.405	-0.127
N(5)		2.117e-005				
	NO3-	2.117e-005	1.245e-005	-4.674	-4.905	-0.230
Na		4.790e-001				
	Na+	4.727e-001	3.341e-001	-0.325	-0.476	-0.151
	NaSO4-	5.953e-003	4.443e-003	-2.225	-2.352	-0.127
	NaHCO3	2.204e-004	2.570e-004	-3.657	-3.590	0.067

	NaCO ₃ -	8.874e-005	6.623e-005	-4.052	-4.179	-0.127
	NaF	4.078e-006	4.754e-006	-5.390	-5.323	0.067
	NaOH	3.082e-007	3.593e-007	-6.511	-6.445	0.067
	NaHPO ₄ -	7.495e-008	5.594e-008	-7.125	-7.252	-0.127
O(0)		1.041e-037				
	O ₂	5.207e-038	6.070e-038	-37.283	-37.217	0.067
P		1.981e-006				
	MgHPO ₄	7.369e-007	8.591e-007	-6.133	-6.066	0.067
	HPO ₄ -2	5.449e-007	8.586e-008	-6.264	-7.066	-0.803
	MgPO ₄ -	4.510e-007	3.365e-007	-6.346	-6.473	-0.127
	CaHPO ₄	9.475e-008	1.105e-007	-7.023	-6.957	0.067
	NaHPO ₄ -	7.495e-008	5.594e-008	-7.125	-7.252	-0.127
	CaPO ₄ -	5.811e-008	4.337e-008	-7.236	-7.363	-0.127
	H ₂ PO ₄ -	1.286e-008	8.333e-009	-7.891	-8.079	-0.188
	MgH ₂ PO ₄ +	4.911e-009	3.665e-009	-8.309	-8.436	-0.127
	KHPO ₄ -	1.440e-009	1.074e-009	-8.842	-8.969	-0.127
	CaH ₂ PO ₄ +	6.703e-010	5.002e-010	-9.174	-9.301	-0.127
	PO ₄ -3	4.106e-010	6.424e-012	-9.387	-11.192	-1.806
	FeHPO ₄	1.832e-012	2.135e-012	-11.737	-11.671	0.067
	FeH ₂ PO ₄ +	3.496e-014	2.609e-014	-13.456	-13.584	-0.127
S(6)		2.887e-002				
	SO ₄ -2	1.449e-002	2.653e-003	-1.839	-2.576	-0.737
	MgSO ₄	7.201e-003	8.395e-003	-2.143	-2.076	0.067
	NaSO ₄ -	5.953e-003	4.443e-003	-2.225	-2.352	-0.127
	CaSO ₄	1.065e-003	1.242e-003	-2.972	-2.906	0.067
	KSO ₄ -	1.603e-004	1.196e-004	-3.795	-3.922	-0.127
	NH ₄ SO ₄ -	5.277e-008	3.938e-008	-7.278	-7.405	-0.127
	FeSO ₄	2.528e-009	2.947e-009	-8.597	-8.531	0.067
	HSO ₄ -	2.083e-009	1.554e-009	-8.681	-8.808	-0.127
	CaHSO ₄ +	5.875e-011	4.385e-011	-10.231	-10.358	-0.127
	FeHSO ₄ +	1.564e-016	1.167e-01	-15.806	-15.933	-0.127
	AlSO ₄ +	4.181e-017	3.120e-017	-16.379	-16.506	-0.127
	Al(SO ₄) ₂ -	3.508e-018	2.618e-018	-17.455	-17.582	-0.127
	AlHSO ₄ +2	5.375e-026	1.667e-026	-25.270	-25.778	-0.508
Si		7.284e-005				
	H ₄ SiO ₄	7.016e-005	8.179e-005	-4.154	-4.087	0.067
	H ₃ SiO ₄ -	2.682e-006	2.001e-006	-5.572	-5.699	-0.127
	H ₂ SiO ₄ -2	7.285e-011	2.259e-011	-10.138	-10.646	-0.508
	SiF ₆ -2	1.299e-034	4.029e-035	-33.886	-34.395	-0.508

Hay una gran cantidad de especies en disolución, relacionadas con los iones que se consideran en “*solution I*” y que aparecen en la base de datos de PHREEQC. Estas especies en disolución, llamados “pares iónicos o complejos” están formados por iones de diferente signo, y su concentración es importante cuando hay elevadas concentraciones de iones. Incluyen tanto especies cargadas, como sin carga. Estas últimas suelen identificarse con supracero “⁰” para distinguirlas de fases sólidas, aunque en PHREEQC no se indica, porque aparece en el apartado “Distribution of species” y ya se entiende que son especies en disolución. Algunas de ellas son: CaCO₃, FeCO₃, CaSO₄, CaHPO₄, NaF, HF, AlF₃, FeSO₄, FeHPO₄, KOH, MgSO₄, MgCO₃, MgHPO₄, NH₃, NaOH...

La formación de complejos también influye en la concentración de los elementos en disolución (cantidad total, suma de especies libres y pares iónicos). La formación de complejos produce un aumento en la concentración de una especie en solución, con respecto a la cantidad que cabría esperar considerando la solubilidad de una especie libre, para una determinada fase mineral.

Llama la atención que el ion cloruro apenas forma pares iónicos en disolución (únicamente con el hierro, pero a muy baja concentración). La mayor parte del ion cloruro se encuentra en forma libre, en cambio el sulfato, el potasio el hierro, el aluminio, el calcio,... forman una gran cantidad de complejos acuosos. La formación de estas especies y la elevada fuerza iónica de la disolución (y por tanto la consideración de actividades) influyen en la solubilidad de minerales. Es imprescindible para el agua de mar tener en cuenta ambas correcciones, para poder calcular el estado de saturación con respecto a fases minerales sólidas.

Con estas consideraciones, el software calcula los valores de Índices de saturación o saturation index (SI) de fases minerales que aparecen en su base de datos:

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-3.59	7.21	10.80	Al(OH)3
Albite	-1.92	2.75	4.66	NaAlSi3O8
Alunite	-8.96	-10.36	-1.40	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-0.85	-5.21	-4.36	CaSO4
Anorthite	-5.52	20.10	25.62	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.73	-7.60	-8.34	CaCO3
Ca-Montmorillonit	-3.63	4.15	7.78	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	0.88	-7.60	-8.48	CaCO3
Chalcedony	-0.52	-4.07	-3.55	SiO2
Chlorite(14A)	6.62	75.00	68.38	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	3.33	35.53	32.20	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-3.26	-21.40	-18.15	CO2
Dolomite	2.64	-14.45	-17.09	CaMg(CO3)2
Fluorite	-1.24	-11.84	-10.60	CaF2
Gibbsite	-0.90	7.21	8.11	Al(OH)3
Gypsum	-0.64	-5.22	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-24.44	-24.44	0.00	H2
H2O(g)	-1.52	-0.01	1.51	H2O
Halite	-2.52	-0.93	1.58	NaCl
Hydroxyapatite	1.95	-38.51	-40.46	Ca5(PO4)3OH
Illite	-2.26	9.60	11.86	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
K-feldspar	-1.06	1.03	2.09	KAlSi3O8
K-mica	2.75	15.46	12.70	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	-1.16	6.28	7.43	Al2Si2O5(OH)4
Melanterite	-8.63	-10.84	-2.21	FeSO4:7H2O
NH3(g)	-8.73	2.28	11.01	NH3
O2(g)	-34.26	48.86	83.12	O2
Quartz	-0.09	-4.07	-3.98	SiO2
Sepiolite	1.12	16.88	15.76	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-1.78	16.88	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	-2.29	-13.18	-10.89	FeCO3
SiO2(a)	-1.36	-4.07	-2.71	SiO2
Talc	6.00	27.40	21.40	Mg3Si4O10(OH)2
Vivianite	-11.06	-47.06	-36.00	Fe3(PO4)2:8H2O

En cuanto a los índices de saturación se puede interpretar que:

En general, valores positivos de los índices de saturación indicarían que las especies minerales pueden precipitar, y valores negativos que el agua en contacto con estas fases minerales podría disolverlas.

Los valores en torno a 0 indicarían que esas fases sólidas pueden estar presentes y en contacto con el agua de mar, que se encontraría saturada con respecto a estas fases minerales (se define saturación para valores de SI en torno al intervalo -0.5, 0.5).

Aquellos valores negativos muy alejados de este intervalo indicarían que bien la fase mineral no se encuentra presente, o bien que está presente, pero no es reactiva y no se alcanzaría el equilibrio (impedido por la cinética). Valores positivos mucho más elevados de 0, indicarían impedimentos cinéticos para la precipitación de la fase mineral.

En la tabla 1 se incluyen las fases minerales reactivas más comunes en el medio ambiente (suelo y acuífero), según Deutsch:

COMMON REACTIVE MINERALS IN SOIL AND AQUIFER ENVIRONMENTS	
Carbonates	Oxides/hydroxides
Calcite [CaCO ₃]	Ferrihydrite [Fe(OH) ₃]
Dolomite [CaMg(CO ₃) ₂]	Goethite [FeOOH]
Siderite [FeCO ₃]	Gibbsite [Al(OH) ₃]
Rhodochrosite [MnCO ₃]	Nsutite [MnO ₂]
Magnesian Calcite [(Ca,Mg)CO ₃]	
Sulfates	Sulfides
Gypsum [CaSO ₄ ·2H ₂ O]	Pyrite [FeS ₂]
Alunite [KAl ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆]	Mackinawite [FeS]
Jarosite [KFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆]	Orpiment [As ₂ S ₃]
Jurbanite [AlSO ₄ (OH) ₆]	
Silica	Silicates
Chalcedony	Clays
Amorphous silica	Zeolites

Tabla 1: Minerales reactivos comunes en suelos y acuíferos. Tabla extraída del libro de Deutsch (1997) "Groundwater geochemistry : fundamentals and applications to contamination"

En el caso de aragonito, calcita, ..., los valores son algo superiores a 0.5, y se puede decir que existe un ligero impedimento de precipitación de las mismas. Cuando agua de mar se introduce en un recipiente durante un tiempo, puede observarse la precipitación de CaCO₃, en concordancia con los valores de SI encontrados. La dolomita tiene un valor mucho mayor para SI, y por tanto su precipitación estaría cinéticamente muy impedida. En el caso del yeso su valor correspondería a subsaturación y por tanto se produciría disolución de esta fase sólida cuando el agua de mar interacciona con ella, en el caso de que la reacción no esté cinéticamente impedida.

Mineral	Aragonito	Calcita	Yeso
Índice de saturación	0.73	0.88	-0.64

Tabla 2: Valores de índices de saturación para agua de mar, calculados con PHREEQC a 25 °C

b) Reproducir el gráfico de barras indicando las simplificaciones que se consideren convenientes

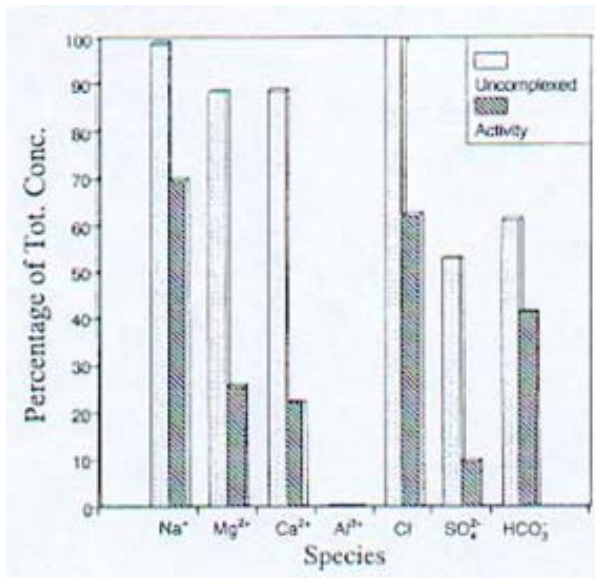


Gráfico extraído del libro de Appelo and Postma, "Geochemistry, Groundwater and Pollution" 2ª edición (2005), pag. 129: Figura 4.3. La importancia de la complejación y correcciones de actividad como porcentaje de la concentración total para agua de mar 35‰ con un pH de 8.22.

Analizando la gráfica anterior se observa que el cloruro no forma especies complejas, por lo que aproximadamente el 100% está formando cloruro como ión libre.

$$\Sigma (\text{Cl})_T = \text{Cl} \quad \Rightarrow \quad \text{Todo está como ión libre}$$

La actividad del mismo es del 60%, por ello, el coeficiente de actividad es 0.6.

$$\left. \begin{array}{l} [a_{\text{Cl}^-}] = \gamma_{\text{Cl}^-} m_{\text{Cl}^-} = 60 \% \\ m_{\text{Cl}^-} = 100 \% \end{array} \right\} \gamma_{\text{Cl}^-} = [a_{\text{Cl}^-}] / m_{\text{Cl}^-} = 0.6$$

El caso del ion sulfato es muy diferente al ion cloruro: la concentración de las especies no acomplexadas (sulfato libre) es un 50% de la concentración total de especies sulfatadas y su actividad es 10%. Para este caso el coeficiente de actividad es 0,2.

$$\Sigma (\text{SO}_4^{2-})_T = \text{SO}_4^{2-} + \text{HSO}_4^- + \dots \quad \Rightarrow \quad \text{Forma pares iónicos, especies}$$

$$\left. \begin{array}{l} [a_{\text{SO}_4^{2-}}] = \gamma_{\text{SO}_4^{2-}} m_{\text{SO}_4^{2-}} = 10 \% \\ m_{\text{SO}_4^{2-}} = 50 \% \end{array} \right\} \gamma_{\text{SO}_4^{2-}} = [a_{\text{SO}_4^{2-}}] / m_{\text{SO}_4^{2-}} = 0.2$$

Para reproducir el gráfico de barras debe calcularse la concentración de las especies libres, que no forma complejos, frente a la concentración total. También debe calcularse la actividad del elemento frente a su concentración total (tabla 3).

Concentración libre (%) = Concentración elemento / Concentración total *100

Actividad (%) = Actividad / Concentración total *100

	% Conc. Ion libre	Actividad (%)
Na ⁺	98.7	69.8
Mg ²⁺	85.9	24.8
Ca ²⁺	89.0	22.3
Al ³⁺	6,1E-08	4,9E-09
Cl ⁻	100	62.4
SO ₄ ²⁻	69.7	47.1
HCO ₃ ⁻	50.2	9.19

Tabla 3: Concentración de especies libres y actividades para agua de mar.

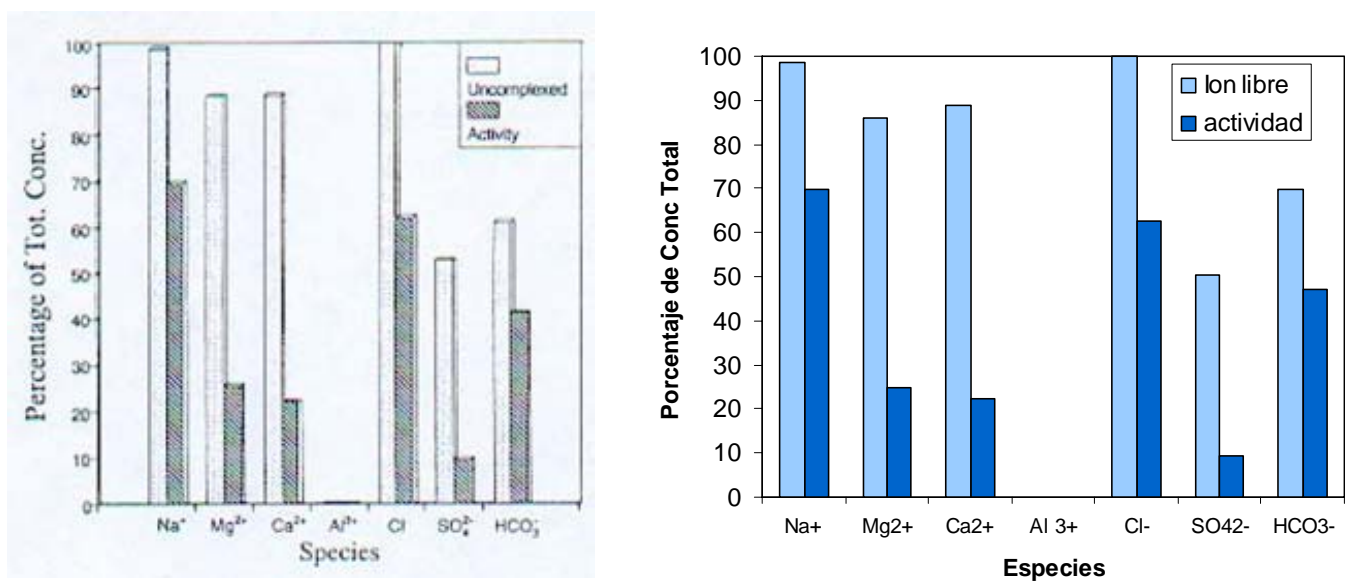


Figura 1: Comparación del gráfico proporcionado en el enunciado y del calculado a partir de los datos obtenidos con PHREEQC, donde se representan las concentraciones de los iones no acomplexados y sus actividades para agua de mar.

Los valores calculados son bastante similares a los proporcionados por el gráfico del enunciado.