

HPC AG
Niedervellmarsche Str. 30
34233 Fulda
Telefon: 0561 – 9 81 83-0
Telefax: 0561 – 9 81 83-82

Projekt-Nr.

2061178

Ausfertigungs-Nr.

Datum

18.01.2016

Anlage 2



Wienerberger

**Antrag auf Zulassung
eines obligatorischen Rahmenbetriebsplans
der Wienerberger GmbH
gem. § 52 Abs. 2 Ziffer 1 und Abs. 2a des BBergG
für die Erweiterung der Tongrube Rettigheim
in
69242 Mühlhausen OT Rettigheim,
Rhein-Neckar-Kreis**

Fachgutachten Hydrogeologie

**Geologische, hydrogeologische/hydraulische und hydrogeochemische Verhältnisse
im Bereich der Tonlagerstätte Rettigheim unter dem Aspekt der
Erweiterung der Abbaufäche**

Auftraggeber

**Wienerberger GmbH
Oldenburger Allee 26
30659 Hannover**

Bearbeiter: Dr. Carsten Munk, Prof. Dr. Bernd Volland, Dr. Uwe Hekel

Inhaltsverzeichnis	Seite
1. Veranlassung und Aufgabenstellung	7
2. Angaben zur Lagerstätte	8
2.1 Geologische und hydrogeologische Übersicht	8
2.2 Historischer Abriss der Erkundung der Tonlagerstätte Rettigheim durch das Geologische Landesamt Baden-Württemberg bzw. durch das Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg	12
2.3 Geologische Verhältnisse im Bereich der geplanten Erweiterungsfläche	22
2.3.1 Kenntnisstand nach Gutachten des Landesamtes für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg vom 11.03.2004	22
2.3.2 Geologische Erkundung im Bereich der Erweiterungsfläche in den Jahren 2014/2015 durch die Wienerberger GmbH	27
2.3.2.1 Abteufen von zwei Aufschlussbohrungen	27
2.3.2.2 Lithologische Beschreibung und stratigraphische Einstufung der erbohrten Schichtenfolge	28
2.3.2.3 Schichtlagerungsverhältnisse im Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche	29
2.3.2.4 Ausbau der Aufschlussbohrungen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 zu Grundwassermessstellen	31
2.4 Hydrogeologische Verhältnisse im Bereich der geplanten Erweiterungs-fläche	33
2.4.1 Kenntnisstand nach Gutachten des Landesamtes für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg vom 07.11.1995	33
2.4.2 Porengrundwasserleiter im Hangenden der Obtususton-Formation	34
2.4.3 Hydrogeologische Untersuchungen im Bereich der Erweiterungsfläche in den Jahren 2014/2015 durch Wienerberger GmbH	35
2.4.3.1 Zielsetzungen	35
2.4.3.3.1 GWM B 1/2015	37
2.4.3.3.2 GWM B 2/2015	38
2.4.3.3.3 Reaktionen in den Messstellen B 1/2015 und B 2/2015 im Verlauf der Pumpversuche	39
2.4.3.4 Ermittlung des Wasserandrangs für die im Tagebaubetrieb erforderliche Wasserhaltung	39
2.4.3.5 Abschätzung der Reichweite der Absenkung	40

2.4.3.6	Ermittlung der Höhenlage des Grundwasserstandes nach erfolgtem Wiedereinstau	42
2.4.3.7	Zusammenfassung der Ergebnisse der hydrogeologischen Untersuchungen	44
2.5	Hydrogeochemische Untersuchungen im Bereich der geplanten Erweiterungsfläche	45
2.5.1	Zielsetzungen der hydrogeochemischen Untersuchungen im Rahmen der Erweiterung des Tontagebaus Rettigheim	45
2.5.2	Konzept für die hydrogeochemischen Untersuchungen	45
2.5.3	Weitere Datengrundlage	49
2.5.4	Clusteranalyse und geochemische Mustererkennung	50
2.5.4.1	Chlorid-Cluster	50
2.5.4.2	Mineralisations-Cluster	53
2.5.4.3	Alkalimetall-Cluster	54
2.5.4.4	Hydrogenkarbonat-Cluster	54
2.5.4.5	Erdalkalimetall-Cluster	55
2.5.4.6	Redox-Sulfidschwefel-Cluster	56
2.5.4.7	Sulfatschwefel-Cluster	57
2.5.4.8	pH-Wert-Cluster	58
2.5.4.9	Fluorid-Cluster	59
2.5.4.10	Arsen- und Schwermetalle-Cluster	60
2.5.5	Geochemische Charakteristik der untersuchten Wässer	61
2.5.5.1	Gruppe der Sulfidschwefel-Wässer	62
2.5.5.2	Untergruppe Schwefelquellen	62
2.5.5.2.1	Untergruppe Wässer der GWM Rettigheim -2 und -3	63
2.5.5.3	Gruppe der Wässer der Obtususton-Formation	65
2.5.5.4	Gruppe der Oberflächenwässer	71
2.5.5.4.1	Untergruppe Wässer des Hengstbaches	71
2.5.5.4.2	Untergruppe Wässer des Erlengrabens	73
2.5.5.4.3	Untergruppe Wässer des Tagebausees im genehmigten Tontagebau	75
2.5.6	Isotopengeochemische Untersuchungen	77
2.5.6.1	Datenlage und Messungen	77
2.5.6.2	Tritium	79
2.5.6.3	Sauerstoff- $\delta^{18}\text{O}$ / Deuterium	80

2.5.7	Zusammenfassung des Informationsgehaltes der ermittelten geochemischen und isotopengeochemischen Daten	82
2.5.8	Abschließende Bewertung des potenziellen Einflusses der Grundwasserentnahme im Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche auf die Heil- und Thermalquellen	84

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1:	Übersichtskarte aus „ <i>Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein</i> “ /10/ mit Darstellung des Verlaufs der geologischen Profilschnitte (ohne Maßstab!)	24
Abb. 2:	Geologischer Profilschnitt A – A' aus „ <i>Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein</i> “ /10/ (ohne Maßstab!)	25
Abb. 3:	Geologischer Profilschnitt C – C' aus „ <i>Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein</i> “ /10/ (ohne Maßstab!)	26
Abb. 4:	Speziesverteilung (Hauptionen) im Thermalwasser der Karl-Siegel-Quelle	52
Abb. 5:	Speziesverteilung (Hauptionen) im Thermalwasser der Lambertusquelle	52
Abb. 6:	Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser des Rochusbrunnens	62
Abb. 7:	Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser des Ludwigbrunnens	63
Abb. 8:	Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser der GWM Rettigheim -2	64
Abb. 9:	Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser der GWM Rettigheim -3	64
Abb. 10:	Natrium- versus Hydrogenkarbonat-Charakteristik der untersuchten Grund- (blaue Signatur) und Oberflächenwässer (rote Signatur)	65
Abb. 11:	Natrium- versus Sulfat-Ionen-Konzentration (in mmol/l) der untersuchten Grund- und Oberflächenwässer	66
Abb. 12:	Sauerstoff-Isotopen-Verhältnis versus Molquotient Na/HCO_3^- der untersuchten Grund- und Oberflächenwässer	67
Abb. 13:	Speziesverteilung im Wasser der GWM B 1/2015 vor Pumpversuch	68

Abb. 14:	Speziesverteilung im Wasser der GWM B 1/2015 nach Pumpversuch	68
Abb. 15:	Speziesverteilung im Wasser der GWM B 2/2015 vor Pumpversuch	69
Abb. 16:	Speziesverteilung im Wasser der GWM B 2/2015 nach Pumpversuch	69
Abb. 17:	Speziesverteilung im Wasser der Hengstbach-Quelle	72
Abb. 18:	Speziesverteilung im Wasser Hengstbach H3	72
Abb. 19:	Speziesverteilung im Wasser Hengstbach H4	73
Abb. 20:	Speziesverteilung im Wasser der Erlengraben Quelle	74
Abb. 21:	Speziesverteilung im Wasser Erlengraben E3	74
Abb. 22:	Speziesverteilung im Wasser Erlengraben E4	75
Abb. 23:	Speziesverteilung im Wasser des Tagebausees	77
Abb. 24:	Tritium versus δ -O18	80
Abb. 25:	Korrelation Sauerstoff-18-Gehalt versus Deuterium-Gehalt	82
Abb. 26:	Ausschnitt aus der Schichtenfolge Baden-Württemberg und schematische Einordnung der Aquifere der untersuchten Grundwässer im Umfeld des Tagebaues Rettigheim	83

Tabellenverzeichnis

Tab. 1:	Lagen und Höhen der Aufschlussbohrungen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015	28
Tab. 2:	Tiefenlagen der Basis der Obtususton-Formation in den Aufschlussbohrungen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 nach Schichtenaufnahme durch das Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden Württemberg	29
Tab. 3:	Daten der für die Darstellung der Schichtlagerungsverhältnisse verwendeten Bohrungen aus dem <i>Kartenviewer</i> des Regierungspräsidiums Freiburg, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden Württemberg	30
Tab. 4:	Brunnenausbauschemata der Grundwassermessstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015	32
Tab. 5:	Verzeichnis der Wasserproben einschließlich Entnahmedatum	50
Tab. 6:	Chlorid-Cluster	51

Tab. 7:	Mineralisations-Cluster	53
Tab. 8:	Verteilung der Alkalimetallionen-Konzentrationen	54
Tab. 9:	Hydrogenkarbonat-Cluster	55
Tab. 10:	Verteilung der Erdalkalimetallionen-Konzentrationen	56
Tab. 11:	Redox-Sulfidschwefel-Cluster	57
Tab. 12:	Sulfatschwefel-Cluster	58
Tab. 13:	pH-Wert-Cluster	59
Tab. 14:	Fluorid-Cluster	60
Tab. 15:	Arsen- und Schwermetall-Cluster	61
Tab. 16:	Parameter für charakteristische Unterschiede der Wässer in B 1/2015 und B 2/2015	70
Tab. 17:	Erdalkalien als Charakteristikum der Oberflächenwässer	71
Tab. 18:	Tritium-Gehalte in für den Tagebau Rettigheim relevanten Wässern	79
Tab. 19:	Sauerstoff- und Deuterium-Isotopenverhältnisse in den für den Tagebau Rettigheim relevanten Wässern	81

Anlagen

- 1 Übersichtskarte Ausschnitt TK 25 Blatt 6718 Wiesloch, Maßstab 1 : 25.000
- 2a Geologische Karte, Ausschnitt GK 25 Blatt 6718 Wiesloch;
Maßstab 1 : 25.000
- 2b Geologischer Profilschnitt aus Geologische Karte Blatt 6718 Wiesloch;
Maßstab 1 : 25.000
- 3 Lageplan mit Darstellung der vorhandenen Abbaufäche sowie der geplanten
Erweiterungsfläche
Maßstab 1 : 2.000
- 4a Bohr- und Brunnenbauschema für die Grundwassermessstellen GWM B
1/2015 und GWM B 2/2015
M 1 : 200

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

- 4b Brunnenausbauzeichnungen der Grundwassermessstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 in Korrelation mit den erbohrten Schichtgliedern
M 1 : 60
- 5 Lageplan mit Darstellung der vorhandenen Abbaufäche sowie der Erweiterungsfläche und der verwendeten Aufschlussbohrungen sowie der tektonischen Strukturen und Lagerungsverhältnisse
Maßstab 1 : 2.000
- 6 WSW – ENE verlaufender geologischer Profilschnitt A – A'
Maßstab 1 : 2.000/200
- 7a Absenkdiagramm der Pumpmaßnahmen an der Grundwassermessstelle B 1/2015
- 7b Fluid-Logging-Messung an Grundwassermessstelle B 1/2015
- 7c Absenkdiagramm der Pumpmaßnahmen an der Grundwassermessstelle B 2/2015
- 8 Lageplan mit Darstellung der Bohrungen/Grundwassermessstellen GWM B 1/2015, GWM B 2/2015 sowie der weiteren Entnahmestellen für Grundwasserproben
Maßstab 1 : 10.000

Anhang

- 1 Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein. – Teil B: Ziegeleirohstoffe
11.03.2004; Bearbeiter: Dr. A. Gillhaus Dr. W. Werner
- 2 Schichtenverzeichnisse der Bohrungen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015, aufgenommen vom Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden Württemberg
- 3 Originalanalyseblätter der hydrochemischen Untersuchungen der HYDROISOTOP gmbh
- 4 Protokolle der PhreeqC-Modellrechnung

1. Veranlassung und Aufgabenstellung

Die Wienerberger GmbH betreibt in 69254 Malsch (Rhein-Neckar-Kreis), An der B3, ein Ziegelwerk zur Herstellung von Porotonziegeln.

Die hierfür benötigten Rohstoffe werden in der Gemarkung Mühlhausen-Rettigheim in einem seit dem Jahr 1960 betriebenen Tontagebau gewonnen, wobei es sich bei dem Rohstoff um die Tonsteine des Lias β (Unterer Jura, Obtususton-Formation, juOT) handelt.

Die Tongewinnung erfolgt auf der Grundlage des genehmigten

Rahmenbetriebsplans vom 02. Juli 1990 (Az.: 4718-241.40/5)

und der

**Ergänzung zum Rahmenbetriebsplan vom 25. Juni 1999
(Az.: 4718-241.40).**

Für die Führung des Betriebes werden Hauptbetriebspläne aufgestellt, wobei die Zulassung für den derzeit gültigen Hauptbetriebsplan mit Datum vom 25. Januar 2011 (Az. 4718-241.42/28/4) erfolgt ist, der mit Datum vom 11.08.2015 vom Regierungspräsidium Freiburg verlängert wurde bis 31. Januar 2018.

Die so genehmigte und betriebene **Abbaustätte** umfasst eine Fläche von 129.250 m² (12,92 ha), wobei diese von einem Sicherheitsstreifen von 10 m zu benachbarten Grundstücken umgeben ist, so dass die genehmigte **Abbaufäche** selbst 114.020 m² (11,4 ha) beträgt.

In dieser genehmigten Abbaufäche des Tontagebaus Rettigheim sind die Vorräte an Tonsteinen des Lias β in absehbarer Zeit erschöpft. Zum weiteren Erhalt des Ziegelwerks ist somit eine Erweiterung des bestehenden Tagebaus erforderlich. Diese Erweiterung soll westlich des genehmigten Tagebaus auf einer Fläche von 5,12 ha vorgenommen werden.

Im Rahmen der vorgesehenen Rohstoffgewinnung bis in eine Tiefenlage von 120 m NHN sollen dort ebenfalls die Tonsteine des Lias β (Obtususton-Formation) unter Nutzung der im bestehenden Tagebau verbleibenden Betriebsanlagen abgebaut werden, wobei der Abbau in insgesamt vier Abbauabschnitten vorgesehen ist. Die hierbei zu gewinnenden

Tonvorräte in einer Masse von insgesamt 610.719 m³

werden die Ziegelproduktion für einen Zeitraum von ca. 20 Jahren abdecken.

Im Rahmen einer rohstoffgeologischen Beratung für den Regionalverband Mittlerer Oberrhein hat das Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg im Rahmen des Rohstoffsicherungskonzeptes mit Datum vom 11.03.2004 (Az.: 4704//04 2107) eine

„Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein“

erarbeitet, aus der hervorgeht, dass auch die von der Wienerberger GmbH für eine Erweiterung vorgesehene Teilfläche westlich des derzeitigen Tonabbaus Teil eines Vorrang- und Vorbehaltsgebietes ist.

Für die vorgesehene Erweiterung des Tontagebaus Rettigheim stellt die Wienerberger GmbH einen Antrag auf Zulassung eines obligatorischen Rahmenbetriebsplans gemäß § 52 Abs. 2 des BBergG. In diesem Zusammenhang sind auch die geologischen, hydrogeologischen/hydraulischen Rahmenbedingungen im Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche abzuklären sowie potenzielle Beeinflussungen auf andere Grundwasserleiter zu überprüfen.

Mit den entsprechenden Untersuchungen und der Abfassung eines *Hydrogeologischen Fachgutachtens* als Teil des Antrages auf Zulassung eines obligatorischen Rahmenbetriebsplans hat die Wienerberger GmbH HPC beauftragt. Dieses Fachgutachten wird hiermit vorgelegt.

2. Angaben zur Lagerstätte

2.1 Geologische und hydrogeologische Übersicht

Die geologischen Verhältnisse im Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche sind in der

Geologischen Karte von Baden-Württemberg

1 : 25.000

Blatt Nr. 6718 Wiesloch

dargestellt (ein Ausschnitt dieses Kartenblattes ist mit Anlage 2 beigelegt) und in den

Erläuterungen

zur

Geologischen Karte von Baden Württemberg

1 : 25.0000

Blatt Nr. 6718 Wiesloch

von Hans Thürach beschrieben.

Die topographischen Lagen der genehmigten Abbaufäche und der vorgesehenen Erweiterungsfläche gehen aus Anlage 1 hervor.

Die geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse im Bereich der Tongrube Rettigheim lassen sich wie folgt zusammenfassen:

Die Geologie in der Umgebung von Rettigheim ist durch eine breite, WSW-ENE streichende Mulde mit Jura-Sedimenten geprägt, die im Osten durch den Angelbach und im Westen durch die zur Rheinebene hin auftretenden Verwerfungen begrenzt ist.

Die Jura-Sedimente werden im NW, E und SE von den leicht ansteigenden, aus Gesteinen des Oberen (ko) und Mittleren Keupers (km) bestehenden Flanken der umgebenden Hügel eingerahmt.

Bei den in der Mulde erhaltenen Jura-Sedimenten handelt es sich um Mergel und Tone des Mittleren (I 3-4) bzw. Unteren Lias (I 1-2), wobei sich im westlichen Teil jenseits einer NNW-SSE streichenden Störung zudem Unterer Dogger (dg1. u. dg2) und Oberer Lias (I 5 u. I 6) erhalten haben.

Im Bereich der derzeitigen Tonabbaufäche, die sich auf einem leicht nach SW abfallenden und SW-NE-streichenden Bergrücken befindet, steht die obere Abteilung des Unteren Lias (I 2 oder Lias β) an. Es handelt sich um die Obtususton-Formation (juOT), die sich aus grauen, schwach mergeligen Tonen zusammensetzt. Diese Tone können im Raum Rettigheim Mächtigkeiten bis 30 m erreichen.

Mit Anlage 2a ist ein Ausschnitt der Geologischen Karte von Baden-Württemberg 1 : 25.000, Blatt 6718 Wiesloch, beigelegt und – ebenfalls aus der vorgenannten Geologischen Karte übernommen – ein NW–SE verlaufender Profilschnitt (Anlage 2b), aus dem die geologischen Verhältnisse im Bereich der Jura-Mulde bei Rettigheim hervorgehen.

Bezüglich der Bedeutung und der Verwendung der Tonsteine der Obtususton-Formation wird in der „*Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein*“ des Landesamtes für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg mit Datum vom 11.03.2004 folgendes ausgeführt:

„Von den Schichten des Juras stehen am nördlichen Rand der Region Mittlerer Oberrhein das stratigraphische Intervall zwischen Unterjura (Lias) und Mitteljura (Dogger) oberflächennah an. Hier sind die Gesteine der Obtususton-Formation (Lias β , si2) potenziell als Ziegeleirohrstoffe geeignet. Sie weisen nach der geologischen Karte 1 : 25.000, Blatt 6718 Wiesloch (Thürach 1904), nur eine geringmächtige Überdeckung durch quartärzeitlichen Löss oder Gesteine der Numismalimergel-Formation (Lias γ , si 3) auf und sind daher im Tagebau gut zu gewinnen.“

Das oberflächennahe Vorkommen der Obtususton-Formation streicht im Bereich der Langenbrückener Senke auf einer Fläche von rund 600 ha zwischen Rettigheim, Mühlhausen und Östringen aus. Aufgrund einer nach Südwesten einfallenden, tektonischen Verkippung keilt die SW-NE orientierte, muldenartig gelagerte Schichtenfolge nach Nordosten aus. Somit nimmt die Restmächtigkeit der Schichten vom Zentrum der Senke nach Nordosten, Nordwesten und Südosten kontinuierlich ab. Im SW wird das oberflächennahe Vorkommen

durch eine NW-SE verlaufende Randstörung des Oberrheingrabens nordöstlich von Mingolsheim (Gemeinde Bad Schönborn) tektonisch begrenzt (vgl. Thürach 1904) bzw. um ca. 100 m abgeschoben, d.h. in die Tiefe versetzt. Die Gesamtmächtigkeit der Obtususton-Formation beträgt hier nach Bohrerergebnissen ca. 65 m (Hettich 1974).

Von dem vorgenannten 600 ha großen Ausstrich befindet sich nur ca. die Hälfte in der Region Mittlerer Oberrhein (Gemeinde Bad Schönborn und Stadt Östringen). Die andere Hälfte liegt in der Region Rhein-Neckar-Odenwald, Gemarkung Mühlhausen. Die Fa. Trost betrieb auf Gemarkung Rettigheim direkt an der Regionsgrenze eine Tongrube, deren Rohstoff im betriebseigenen Mauerziegelwerk in Malsch zur Produktion hochwärmedämmender Leichtziegel verwendet wird.“

In einer am 18.03.1980 in dem derzeitigen Tontagebau niedergebrachten Bohrung (R3477280 H5454860; Ansatzpunkt 138 m ü. NN) konnten unter einem 0,5 m mächtigen Verwitterungslehm 12,53 m Lias β erbohrt werden, dessen Mächtigkeit mit insgesamt ca. 30 m angegeben wird. Im Liegenden des Lias β wurde mit dieser Bohrung Lias alpha (I1) mit 6,97 m erbohrt. Hieraus ergibt sich, dass die Basis des Lias β dort bei ca. 125 m ü. NN anzusetzen ist.

Die hydrogeologischen Verhältnisse wurden insbesondere unter Berücksichtigung der in der Nähe zum Abbaug Gebiet befindlichen Heilquellen und staatlich anerkannten Mineral- und Thermalwasservorkommen vom Geologischen Landesamt Baden-Württemberg untersucht und beurteilt (/2/, /3/, /4/, /5/, /6/ gem. Kap. 2.2).

Hier wurde ausgeführt, dass die **Sole-Thermen** (Bad Mingolsheim und Bad Langenbrücken der Gemeinde Schönborn) ihren Ursprung im Thermalwasserhorizont des Oberen Muschelkalk der Trias haben, die **schwefelhaltigen Mineralwässer** von Bad Schönborn dem Lias epsilon (I 5) entstammen, wohingegen die **schwefelhaltigen Mineralthermen** im Schwarzsura alpha (Lias 1) und dem darunter folgenden Rhät ihren Ursprung haben. Für diese Wässer wurde vom Geologischen Landesamt Baden-Württemberg eine Beeinflussung durch den derzeitigen Tonabbau grundsätzlich ausgeschlossen.

Durch das Abteufen einer weiteren Kernbohrung im Bereich der Grube auf Veranlassung des Geologischen Landesamtes Baden-Württemberg konnten die Kenntnisse der geologischen Verhältnisse dahingehend erweitert werden, dass eine Beeinflussung der Mineralwasserhorizonte im Grenzbereich Rhät/Lias (Arieten-Kalke) durch ausreichend mächtige Deckschichten ausgeschlossen ist. Die Arieten-Kalke wurden mit der Bohrung nicht erreicht, so dass bei einer Abbausohle von seinerzeit 136 m ü. NN mindestens 18 m tonige Deckschichten über einem eventuellen Mineralwasserhorizont vorlagen, die einen hydraulischen Kontakt zwischen Niederschlagswasser in der Grube und dem Grundwasser in den Arieten-Kalken unterbunden hätten.

Aus diesem Grund wurde seinerzeit vom Geologischen Landesamt Baden-Württemberg ausgeführt, dass für die Mineral- und Thermalwässer durch den damaligen Tagebau keine Gefährdungen ausgehen würden.

Die im Tagebau anstehenden und in der Bohrung angetroffenen Tone führten aufgrund ihrer Kompaktheit kaum bzw. kein Grundwasser und wurden daher als Grundwassernichtleiter bezeichnet. So wurden Beeinflussungen der Grundwasserverhältnisse in der Umgebung durch den Tagebau ebenfalls ausgeschlossen.

Am 02.06.1998 hat die Tongrube Rettigheim GmbH mit Ergänzungen der bevollmächtigten TABERG Planungsbüro GmbH einen Antrag auf Änderung der zulässigen Abbautiefe von + 130 m ü.NN auf + 120 m ü.NN gestellt. Diesem Antrag wurde mit Entscheidung des Landesamtes für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg vom 25.Juni 1999 stattgegeben (/8/ gem. Kap. 2.2).

In der Beurteilung des beantragten tieferen Abbaus kommt das Geologische Landesamt zu dem Ergebnis, *„dass durch die Verringerung der Überdeckung über dem Rhätsandstein bei einer Abbautiefe von + 120 m ü.NN eine Beeinflussung des Grundwassers im Rhätsandstein nicht zu befürchten ist, da auch dann noch genügend abdichtende Schichten (Lias alpha, Rhätton) vorhanden sind. Von besonderer Bedeutung ist der 11 m mächtige, sehr dichte Rhätton, der den Rhätsandstein überlagert. Da der Druckspiegel des Grundwassers im Rhät über der Abbausohle liegt, ist ein Versickern von Oberflächenwasser im Bereich der Tongrube nicht zu befürchten. Somit sind aus hydrogeologischer Sicht keine Einwendungen gegen die vorgeschlagene Abbautiefe von + 120 m ü. NN zu machen.*

Bei einer Rekultivierung der Tongrube solle darauf geachtet werden, dass sich in der Tongrube kein Wasserstand über dem Druckspiegel des Rhätsandsteins einstellt. Dann ist aufgrund der Druckdifferenz gewährleistet, dass kein Wasser aus der Tongrube in den Rhätsandstein versickert“.

Auch für die Erweiterungsfläche wird die zulässige Abbautiefe mit 120 m ü. NN beantragt. Wie sich die geologischen, hydrogeologischen und hydrochemischen Verhältnisse im Bereich der Erweiterungsfläche darstellen und wie sich ein Abbau bis zu einer Tiefe von 120 m ü. NN auswirkt, wird im Folgenden dann näher beschrieben.

2.2 Historischer Abriss der Erkundung der Tonlagerstätte Rettigheim durch das Geologische Landesamt Baden-Württemberg bzw. durch das Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg

Im Folgenden wird ein historischer Abriss zur geologischen/hydrogeologischen und hydrochemischen Erkundung der Tonlagerstätte Rettigheim durch das Geologische Landesamt Baden-Württemberg bzw. des heutigen Landesamtes für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg gegeben:

/1/

Datum: 28.02.1980
Institution: Geologisches Landesamt Baden-Württemberg
Aktenzeichen: II/3-376/80
gerichtet an: Landratsamt Rhein-Neckar-Kreis (Umweltschutzamt)
betr.: Antrag der Firma Tongrube Rettigheim GmbH auf Erweiterung des Tonabbaus auf Gemarkung Mühlhausen OT Rettigheim
hier: Widerspruch der Gemeinde Bad Schönborn gegen das Abbauvorhaben

Zusammenfassung des Inhalts:

Mit diesem Schreiben nimmt das Geologische Landesamt Stellung zum Widerspruch der Gemeinde Bad Schönborn gegen das Abbauvorhaben und einer möglichen Beeinträchtigung der Heilquellen.

Die zum Teil als Heilquellen staatlich anerkannten Mineral- und Thermalwasservorkommen in den Gemarkungen Bad Langenbrücken und Bad Mingolsheim der Gemeinde Schönborn sind schwefelhaltige Mineralwässer, schwefelhaltige Mineralthermen und Sole-Thermen.

Die schwefelhaltigen Mineralthermen entstammen dem Schwarzhura alpha (Lias 1) und dem darunter folgenden Rhät.

Die schwefelhaltigen Mineralwässer zirkulieren in den Schichten des Schwarzhura epsilon (Lias 5).

Die beantragte Abbauerweiterung bezieht sich auf Schichten des Schwarzhura beta (Lias 2).

Der Thermalwasserhorizont des Oberen Muschelkalks, dessen Dach im Westen der Option ca. 410 m unter GOK liegt, wird vom gestellten Erweiterungsantrag nicht berührt, infolgedessen ist eine Beeinträchtigung nicht möglich.

Die Schichten des Schwarzkalk epsilon sind jünger als die des Schwarzkalk beta, für die die Abbauvergrößerung beantragt wird. Diese sind jedoch im Gebiet von Rettigheim abgetragen und somit nicht mehr vorhanden. Somit besteht für die in Bad Schönborn austretenden schwefelhaltigen Mineralwässer kein Zusammenhang.

Zur Überprüfung, ob die Mineralwasserhorizonte im Grenzbereich Rhät/Schwarzkalk alpha durch die Erweiterung beeinträchtigt werden können, ist an der Westgrenze des Optionsgebietes eine Kernbohrung niederzubringen, die vom Geologischen Landesamt bearbeitet wird.

Für die im Abbaubereich vorgesehene Abbausohle bei 130 m ü. NN darf die Grenze Rhät/Schwarzkalk alpha nicht freigelegt werden, sondern es muss eine ausreichend mächtige Tonlage als Puffer verbleiben.

/2/

Datum: 04.07.1980
Institution: Geologisches Landesamt Baden-Württemberg
Aktenzeichen: II/3-376/80
gerichtet an: Landratsamt Rhein-Neckar-Kreis (Umweltschutzamt)
betr.: Ergebnisse der am Westrand des Optionsgebietes niedergebrachten
Kernbohrung

Zusammenfassung des Inhalts:

Die mit Schreiben des Geologischen Landesamtes vom 28.02.1980 geforderte Kernbohrung wurde niedergebracht; der Bohransatzpunkt liegt bei +138 m NN. Die Abbausohle wurde mit 130 m ü. NN vermerkt.

Die Grenze Lias beta zu Lias alpha wurde bei +125 m NN festgestellt.

Die im Liegenden anstehenden Schichten des Lias alpha bestehen aus Tonmergelsteinen mit Mergelsteinzwischenlagen und führen kein Wasser. Die Arien-Kalke (Lias alpha 3) wurden von der Bohrung nicht mehr erreicht; sie führen im Bereich von Bad Schönborn Thermal- oder Mineralwasser. Da der Abstand von zukünftiger Abbausohle im beantragten Erweiterungsgebiet zum Dach der Arien-Kalke mehr als 12 m beträgt, ist ein ausreichend mächtiger, dichter Sicherheitspuffer vorhanden. Eine Besorgnis für den Bestand der auf Gemarkung Bad Schönborn befindlichen Thermal- und Mineralquellen ist nach Menge und Güte nicht gegeben.

/3/

Datum: 07.11.1995
Institution: Geologisches Landesamt Baden-Württemberg
Verfasser: Dr. Engesser
Aktenzeichen: 3292.01/95-4763 En/di
Betr.: geplante Vertiefung der Tongrube Rettigheim

Zusammenfassung des Inhalts:

Die Tongrube Rettigheim GmbH hat das Geologische Landesamt mit einer Überprüfung dahingehend beauftragt, ob der Abbau von 130 m NN bis auf ein Höhenniveau von 120 m NN vertieft werden kann. Die bislang genehmigte Abbautiefe beruht auf den Ergebnissen einer 20 m tiefen Kernbohrung, die in dem Gutachten des GLA vom 04.07.1980 bewertet wurde. Hier wurde festgestellt, dass die wasserführenden Arietien-Kalke mehr als 12 m unter der Abbaufäche liegen, so dass ein ausreichend mächtiger „Sicherheitspuffer“ vorhanden sei.

Zur Untersuchung der hydrogeologischen Verhältnisse wurde in der Grube Rettigheim eine Bohrung und in der unmittelbaren Umgebung der Grube weitere 5 Bohrungen durch die anstehenden Juragesteine (Lias alpha und β) hindurch bis in den Rhät-Sandstein am Top der Triasgesteine abgeteuft. Dabei wurden Durchlässigkeitsuntersuchungen (WD-Tests, Pumpversuche), hydrochemische und isotonenphysikalische Untersuchungen vorgenommen.

Im Ergebnis zeigt sich, dass der Lias alpha unterschiedliche Mächtigkeiten zwischen 33 m bis sogar 51 m aufweist; die Mächtigkeitsunterschiede sind auf unterschiedliche Tiefenlagen verschiedener tektonischer Schollen zurückzuführen.

Die hydrogeologischen Untersuchungen haben gezeigt, dass zwei nicht sehr ergiebige Grundwasserleiter existieren:

- Auflockerungszone
- Rhät-Sandstein.

Die Auflockerungszone mit einer geringen Wasserführung grenzt an die Tongrube an.

Das Grundwasser im Rhät-Sandstein ist stark gespannt; der Druckspiegel liegt bei etwa 144 m bis 147 m über NN, also über der Grubensohle. Hydraulische Untersuchungen haben gezeigt, dass der Rhät-Sandstein im Tongrubengebiet hydraulisch miteinander verbunden ist; dieser weist Durchlässigkeiten von $k_f = 10^{-6}$ m/s auf.

Die Abdichtung des Rhät-Sandsteins wird durch den 10 m bis 11 m mächtigen Rhät-Ton bewirkt (Durchlässigkeit von weniger als $k_f = 10^{-8}$ m/s); eine zusätzliche Abdichtung des Rhät stellen die Schichten des Lias dar. Im Lias β sind Durchlässigkeiten in der Größenordnung $k_f > 10^{-8}$ m/s zu erwarten; nur im tiefen Teil des Lias alpha sind auch etwas höhere Durchlässigkeiten von $k_f 10^{-6}$ m/s anzutreffen.

Das Grundwasser fließt großräumig vom Ausstrichbereich zum Tiefpunkt der Kraichgaumulde bei Bad Mingolsheim ab. In der Umgebung der Grube ergibt sich ein Grundwasserdruckgefälle nach Südwesten. Ein direkter Kontakt zum Rhät-Sandstein im Rheingraben, aus dem verschiedene Brunnen in Bad Mingolsheim Heil- und Thermalwasser fördern, besteht nicht, da eine Störung (Ostrandstörung) die Schichten versetzt.

Das Grundwasser aus dem Rhät-Sandstein weist, wie Radiokarbonmessungen zeigen, eine mittlere Verweilzeit von rd. 12.000 Jahren (Gutachten VAU) bis 20.000 Jahren (Gutachten AGK) auf. Für Wasserwegsamkeiten auf Störungen ergaben sich keine Hinweise.

Bei der geplanten Abbautiefe von 120 m NN müssen die Heilquellen von Bad Schönborn, vor allem im etwa 2 km entfernten Ortsteil Mingolsheim, besondere Beachtung finden. Die Grundwasserführung im Bereich der Auflockerungszone der Tonsteine im Bereich der Tongrube spielt dabei keine Rolle. Von Bedeutung kann nur die Grundwasserführung im Rhät-Sandstein sein. Ein direkter Zusammenhang zwischen Heilquellen, die auf einer tektonischen Scholle östlich der Grabenrandverwerfung liegen, und im Rhät im Bereich der Tongrube ist aufgrund der tektonischen Verhältnisse nicht vorhanden. Dennoch ist eine hydraulische Verbindung nicht völlig auszuschließen.

Im Ergebnis kommt das Gutachten zu dem Schluss, dass durch die Verringerung der Überdeckung über dem Rhät-Sandstein bei einer Abbautiefe von 120 m NN eine Beeinflussung des Grundwassers im Rhät-Sandstein nicht zu befürchten ist, da auch dann noch genügend abdichtende Schichten (Lias alpha, Rhät-Ton) vorhanden sind. Daher werden aus hydrologischer Sicht keine Einwendungen gegen die vorgeschlagene Abbautiefe von 120 m NN vorgebracht.

/4/

Datum: 20.05.1996
Institution: Geologisches Landesamt Baden-Württemberg
Verfasser: Dr. Engesser
Aktenzeichen: 1617.01/96-4763 En/di
gerichtet an: Landesbergamt Baden-Württemberg
betr.: Änderung der zugelassenen Endabbautiefe von 130 m NN auf
120 m NN

Zusammenfassung des Inhalts:

Die bislang vorliegenden umfangreichen geologischen und hydrogeologischen Untersuchungen im Bereich der Tongrube Rettigheim werden wie folgt zusammengefasst:

- Der Untergrundaufbau wird durch eine mächtige naturdichte Tonsteinfolge gebildet;
- Grundwasser tritt oberflächennah in der Auflockerungszone auf, ist jedoch wasserwirtschaftlich nicht relevant;
- das einzig bedeutende Grundwasservorkommen liegt im Rhät-Sandstein, der von einer mindestens 54 m mächtigen Tonsteinabfolge getrennt wird;
- die im Untersuchungsgebiet angetroffenen tektonischen Störungen sind hydraulisch nicht wirksam und das Trenngefüge unterhalb der Auflockerungszone ist dicht;
- die hydrochemischen Analysen und Isotopenbestimmungen bestätigen ein hydraulisch selbstständiges Grundwasservorkommen im Rhät-Sandstein.

Eine Beeinträchtigung der bei Bad Mingolsheim genutzten Heil- und Thermalwässer wird aufgrund der tektonischen Verhältnisse, durch die kein hydraulischer Kontakt gegeben ist, ausgeschlossen.

/5/

Datum: 20.09.1996
Institution: Geologisches Landesamt Baden-Württemberg
Verfasser: Dr. Engesser
Aktenzeichen: 2510.01/96-4761 En/Be
gerichtet an: Landesbergamt Baden-Württemberg
betr.: Ergänzende hydrogeologische Stellungnahme zur Änderung des Rahmenbetriebsplans wegen Vertiefung der Tongrube Rettigheim

Zusammenfassung des Inhalts:

Das Landesbergamt hat zu den Ergänzungen zur Stellungnahme des Geologischen Landesamtes vom 20.05.1996 um ergänzende Ausführungen zur hydrogeologischen Problematik der Rekultivierung gebeten.

Im Zuge der Rekultivierung durch Einlagerung von Fremdmaterialien ist in der Grube ein Wasseraufstau zu erwarten, so dass langfristig ein Eindringen des Grubenwassers bis in den Rhät-Sandsteinaquifer zumindest denkbar erscheint. Um jedes Risiko zu vermeiden, wurde vom Geologischen Landesamt vorgeschlagen, bei der Rekultivierung keine Abfallstoffe einzulagern und den Wasserstand in der Tongrube unter dem Druckspiegel des Rhät-Sandsteins zu halten.

Es wird gefordert, die Grube im Zuge der Rekultivierung entsprechend zu drainieren und die Grundwassermessstellen Re2 und Re7 demnächst zwei Jahre lang einmal jährlich hydrochemisch zu beproben.

/6/

Datum: 08.05.1998
Institution: Geologisches Landesamt Baden-Württemberg
Verfasser: Dr. Engesser
Aktenzeichen: 0959.01/98-4763
gerichtet an: TABERG Planungsbüro GmbH
betr.: Hydrogeologische Stellungnahme zur Entwässerungsplanung der Tongrube Rettigheim

Zusammenfassung des Inhalts:

In den bisherigen Stellungnahmen und Gutachten des Geologischen Landesamtes wurde gefordert, dass in der Grube der Wasserstand nicht höher sein sollte als der Druckspiegel im Rhät-Sandstein, damit kein Wasser aus der Grube in den Rhät-Sandsteinaquifer eindringen kann. Zur Ermittlung des Schwankungsbereichs des Druckspiegels im Rhät-Sandstein wurde vom Geologischen Landesamt mit Gutachten vom 07.11.1995 vorgeschlagen, die bestehenden Grundwassermessstellen monatlich zu messen. Der niedrigste bisher gemessene Druckspiegel lag bei etwa 146 m NN.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Modellrechnungen der TABERG Planungsbüro GmbH gehen von einem Überlauf in der Tongrube bei 136 m NN aus; die Berechnungen sollten die Geometrie der Tongrube (Umriss, Teufe) besser berücksichtigen.

Das Geologische Landesamt schlägt vor, dass mindestens eine geeignete Messstelle eingerichtet werden soll, die auch das Entnehmen einer Wasserprobe ermöglicht.

/7/

Datum: 30.07.1998 (Eingang)
Institution: Landesbergbaudirektion
Bearbeiter: Dr. Engesser
Aktenzeichen: ---
gerichtet an: Herrn Schäfer (Landesbergbaudirektion)
betr.: Hydrogeologische Stellungnahme zur Entwässerungsplanung der Tongrube Rettigheim

Zusammenfassung des Inhalts:

Die Stellungnahme gibt den Inhalt des Gutachtens des Geologischen Landesamtes vom 08.05.1998 wieder. Es wird nochmals vorgeschlagen, dass zur Beobachtung des Wasserstands in der Grube mindestens eine geeignete Messstelle eingerichtet werden soll, die auch das Entnehmen einer Wasserprobe ermöglicht. Die Grundwasserstände in den benachbarten Grundwassermessstellen sollten zur Beweissicherung ein Jahr lang mindestens 14-tägig gemessen werden.

/8/

Datum: 25.06.1999
Institution: Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg, Landesbergdirektion
Bearbeiter: E. Schäfer
Aktenzeichen: 4718-241.40
gerichtet an: Tongrube Rettigheim GmbH
betr.: Zulassung des Antrages auf Änderung des Rahmenbetriebsplans

Zusammenfassung des Inhalts:

Dem Antrag der Tongrube Rettigheim vom 02.06.1998 mit den Ergänzungen der bevollmächtigten TABERG Planungsbüro GmbH vom Juli und September 1998 auf Änderung des Rahmenbetriebsplans hinsichtlich der zugelassenen Endabbautiefe von +130 m NN auf +120 m NN wird stattgegeben.

Die Einwendungen der Gemeinde Bad Schönborn gegen den Änderungsantrag zum Rahmenbetriebsplan werden zurückgewiesen. Die Rahmenbetriebsplanzulassung vom 02.07.1990 i.d.F. der Nachtragsentscheidungen vom 03.03.1992 und 03.03.1994 gilt im Übrigen unverändert weiter.

Die Entscheidung ist bis zum 31.07.2020 befristet.

/9/

Datum: 06.11.2000
Institution: Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg, Landesbergdirektion
Verfasser: Herr Thienel
Aktenzeichen: 4718-241.40/13
gerichtet an: Tongrube Rettigheim GmbH
betr.: Zulassung der Änderung des Rahmenbetriebsplans vom 25.06.1999, Widerspruch der Gemeinde Bad Schönborn, Sofortvollzug

Zusammenfassung des Inhalts:

Das Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg ordnet die sofortige Vollziehung des Rahmenbetriebsplans für die Änderung der zugelassenen Endabbautiefe von +130 m NN auf +120 m NN an.

/10/

Datum: 11.03.2004
Institution: Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg
Verfasser: Dr. Gillhaus und Dr. Werner
Aktenzeichen: 4704//04 2107
gerichtet an: Regionalverband Mittlerer Oberrhein
betr.: Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein

Zusammenfassung des Inhalts:

In dieser rohstoffgeologischen Beurteilung wird auf die Bedeutung und Verwendung der Tonsteine der Obtususton-Formation (Unterjura) hingewiesen, die sich potenziell als Ziegeleirohstoffe eignen.

Das LGRB hat ein Erkundungsprogramm durchgeführt, das mit rohstoffgeologischen Kartierarbeiten (Profilaufnahmen, Gefügemessungen, Probenahmen) in der Tongrube begonnen wurde. Anschließend erfolgte eine geophysikalische (geoelektrische) Erkundung der Schichtenfolge zur quantitativen Erfassung potenzieller Vorkommen der Obtususton-Formation nach Tiefe und Lage. Schließlich wurden im Auftrag der Firma Trost vier Kernbohrungen abgeteuft.

Das durchgeführte Erkundungsprogramm führte zur Abgrenzung von drei Teilvorkommen:

- A) ein nachgewiesenes Vorkommen südwestlich, südlich und südöstlich der Tongrube Rettigheim (ca. 165 ha).
 - durchschnittliche Ton-Mächtigkeiten von 20 – 50 m.
 - Abraum ca. 2 m mächtig.
 - mittleres bis hohes Lagerstättenpotenzial.
- B) ein prognostiziertes Vorkommen östlich Rettigheim (ca. 40 ha)
 - durchschnittliche Ton-Mächtigkeiten von 10 – 20 m (max.: 30 m).
 - Basis des Vorkommens bislang nicht erkundet.
 - nur eine sehr sorgfältige kombinierte geologisch-abbautechnische, mineralogisch-geochemische und anwendungstechnische Untersuchung kann die Eignung des vorhandenen Rohstoffs für den industriellen Einsatz belegen.
- C) ein vermutetes Vorkommen nördlich Östringen (ca. 95 ha).
 - derzeit liegen keine ausreichend tiefen Bohrungen vor.
 - durchschnittliche Ton-Mächtigkeiten ca. 10 – 20 m (geschätzt).

Im Endergebnis wird in dem Gutachten festgestellt:

Im regionalen Größenvergleich ist die flächenhafte Gesamterstreckung des untersuchten Vorkommens der Obtususton-Formation mit ca. 600 ha relativ gering. Von dieser Fläche ist aber bereits ein großer Teil durch Überbauung nicht mehr gewinnbar. Weitere Teilflächen sind als FFH-Vorschlagsflächen aufgrund wachsender Nutzungskonflikte praktisch kaum genehmigungsfähig. Daher wird es mittel- bis langfristig für die Versorgung des Einzugsgebietes und den Standort Malsch, von dem aus auch die Region Mittlerer Oberrhein versorgt wird, notwendig sein, die besten Anteile der hier dargestellten Vorkommen des Rohstoffs beiderseits der Regionsgrenze zu sichern.

/11/

Datum: 25.07.2006
Institution: Regierungspräsidium Freiberg, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau
Verfasser: Dr. Kilger
Aktenzeichen: 4763.2//06 5507 Ki/Geh
gerichtet an: Landratsamt Karlsruhe
betr.: Hydrogeologisches Zwischengutachten zur Abgrenzung eines Heilquellenschutzgebietes für die Heilquellen in Bad Schönborn

Zusammenfassung des Inhalts:

Für die vier staatlich anerkannten Heilquellen in Bad Schönborn

- St. Rochusbrunnen (St. Rochus-Klinik, Mingolsheim)
(Unterjura, Jurensismergel, tc2 und Posidonienchiefer, tc1)
- St. Ludwigsbrunnen (St. Rochus-Klinik, Mingolsheim)
(Oberkeuper, Rhätsandstein, kos)
- Karl-Sigel-Quelle (Siegel-Klinik KG, Langenbrücken)
(Oberkeuper, Oberer Muschelkalk und Obere Dolomitformation des
Mittleren Muschelkalks (ku, mo und mmmDo))
- Lambertus-Quelle (Thermal-Sole GmbH, Mingolsheim)
(Oberkeuper, Oberer Muschelkalk und Obere Dolomitformation des
Mittleren Muschelkalks (ku, mo und mmmDo))

sind jeweils Heilquellenschutzgebiete auszuweisen, für die das Landratsamt Karlsruhe das LGRB um ein hydrogeologisches Gutachten gebeten hat.

Das LGRB führt aus, dass der vorliegende Datenbestand für die Abgrenzung des Heilquellenschutzgebietes nicht ausreicht. Für die Abgrenzung eines Heilquellenschutzgebietes sei es erforderlich, dass die Genese der Wässer möglichst gut bekannt sei, um daraus grundlegende Hinweise zum Fließsystem abzuleiten. Insofern wurde festgelegt, dass zunächst ein Zwischengutachten mit Untersuchungsprogramm erstellt werden soll.

Das LGRB schlägt für eine hydrogeologisch plausible und in der Praxis sinnvolle Abgrenzung des Heilquellenschutzgebietes eine Ergänzung der Datenglage für jede Heilquelle wie folgt vor:

Lagedaten

Ausbaudaten

Förderdaten

Wasserstandsdaten

hydrochemische Daten

mikrobiologische Daten

Isotopendaten.

Auf dieser Grundlage ist das LGRB bereit, ein entsprechendes Gutachten zu erstellen.

2.3 Geologische Verhältnisse im Bereich der geplanten Erweiterungsfläche

2.3.1 Kenntnisstand nach Gutachten des Landesamtes für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg vom 11.03.2004

Im Gutachten des Landesamtes für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg vom 11.03.2004 „*Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein*“ sind die geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse im Bereich der derzeitigen und weiterer drei Teilvorkommen detailliert dargestellt. Hierbei stellt die beantragte Erweiterungsfläche einen Abschnitt der in dem vorgenannten Gutachten als „*Teilvorkommen A*“ bezeichneten Fläche dar.

In der vorgenannten rohstoffgeologischen Beurteilung wird das *Teilvorkommen A* wie folgt beschrieben (Seite 9):

„Das erstgenannte Teilvorkommen A weist durchschnittliche Mächtigkeiten von 20 – 50 m auf. Die Rohstoffqualität entspricht den Anforderungen für Mauerziegelmassen, allerdings steigen im unteren Viertel der Abfolge (in Bohrung Ro6718/B3 unterhalb ca. 40 m Teufe) die Kalkgehalte deutlich an, und es sind häufiger Horizonte mit gröberen Kalkpartikeln und Pyritknollen eingeschaltet.

Der durchschnittlich 2 m mächtige Abraum besteht unter einer geringmächtigen anthropogenen Überdeckung oder einem Bodenhorizont aus teilweise durchwurzelter Löss mit knolligen Kalkkonkretionen.

Als Abbau-/Aufbereitungs- und Verwertungsweg ist die sogenannte Betakalkbank zu nennen, eine in Bohrung Ro6718/B3 bei 5,35 – 5,45 m Teufe durchörterte Mergelsteinbank, die den Oberen Obtususton stratigraphisch vom Unteren Obtususton trennt. Außerdem ist eine Rohstoffgewinnung durch Reißen abbautechnisch bedingt max. bis in 35 m Tiefe möglich, da das Gestein darunter kaum noch verwitterungsbedingt aufgelockert ist.

Zum Erreichen hoher Abbaumächtigkeiten ist vor allem im westlichen Teil des Teilvorkommens A bei Geländehöhen von teilweise nur 120 – 130 m NN ein Kesselabbau bis unter 100 m NN erforderlich. Hier ist vermutlich mit hydrogeologisch begründeten Bedenken seitens der Gemeinde Bad Mingolsheim zu rechnen. Die Obtususton-Formation dient als natürliche Schutzschicht über dem gespannten Rhätsandstein-Aquifer, aus dem die Heilquellen in Bad Mingolsheim gespeist werden.

Insgesamt hat das Teilvorkommen A aufgrund seiner Mächtigkeit und flächenhaften Erstreckung sowie seiner Rohstoffqualität ein mittleres bis hohes Lagerstättenpotenzial. Es wird aber darauf hingewiesen, dass nur eine sehr sorgfältige kombinierte geologisch-abbautechnische, mineralogisch-geochemische und anwendungstechnische Untersuchung einzelner Teilbereiche dieses in Karte und Profilen dargestellten Vorkommens die Eignung des vorhandenen Rohstoffs für den industriellen Einsatz belegen kann.“

Die „*Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein*“ des Landesamts für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden – Württemberg vom 11.03.2004 liegt als Kopie mit Anhang 1 bei.

Mit Abbildung 1 ist eine Kopie der Übersichtskarte dieser rohstoffgeologischen Beurteilung beigelegt, aus der die Verläufe verschiedener geologischer Profilschnitte hervorgehen, die in Abbildung 2 (geologischer Profilschnitt A – A') bzw. in Abbildung 4 (geologischer Profilschnitt C – C') dargestellt sind.

In diese beiden Profilschnitte wurde die beantragte Erweiterungsfläche mit ihrer vorgesehenen Abbautiefe bis 120 m NN eingepasst, so dass daraus deren geologische Lage hervorgeht.

Sowohl aus dem Profilschnitt A – A' als auch aus dem Schnitt C – C' geht hervor, dass die geplante Erweiterungsfläche mit ihrer vorgesehenen Abbautiefe bis 120 m NN in die Obtususton-Formation (si2) eintiefen wird. Die Basis der Obtususton-Formation liegt auf dieser Teilscholle gemäß diesen Darstellungen in einer Tiefenlage von etwa 110 bis 100 m NN, so dass hiernach der vom Geologischen Landesamt geforderte „Sicherheitspuffer“ zu den im Liegenden der Tone anstehenden Arietenkalk-Formation (si1) gegeben ist.


 geplante
 Erweiterungsfläche

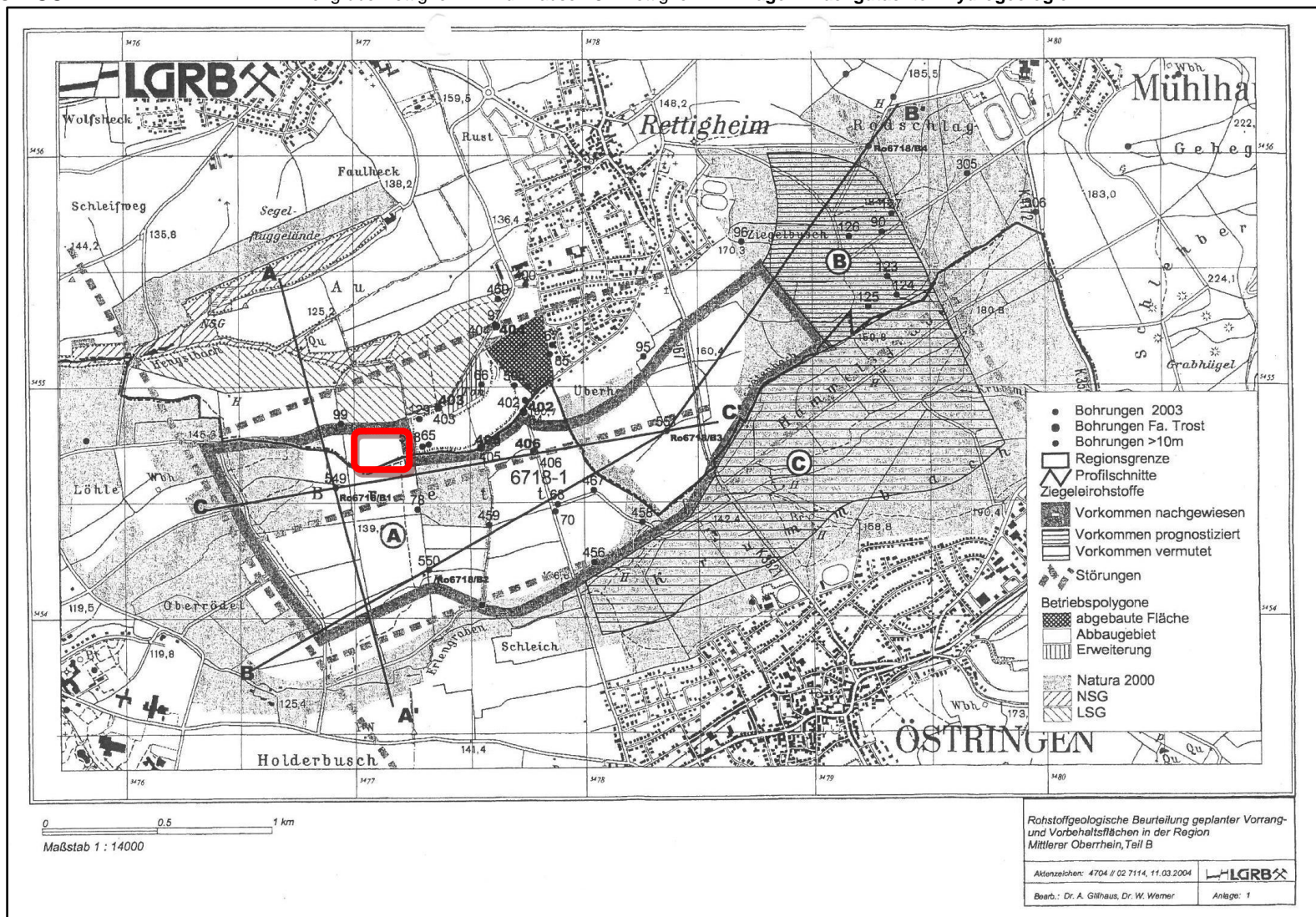


Abb. 1: Übersichtskarte aus „Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein“ /10/ mit Darstellung des Verlaufs der geologischen Profilschnitte (ohne Maßstab!)

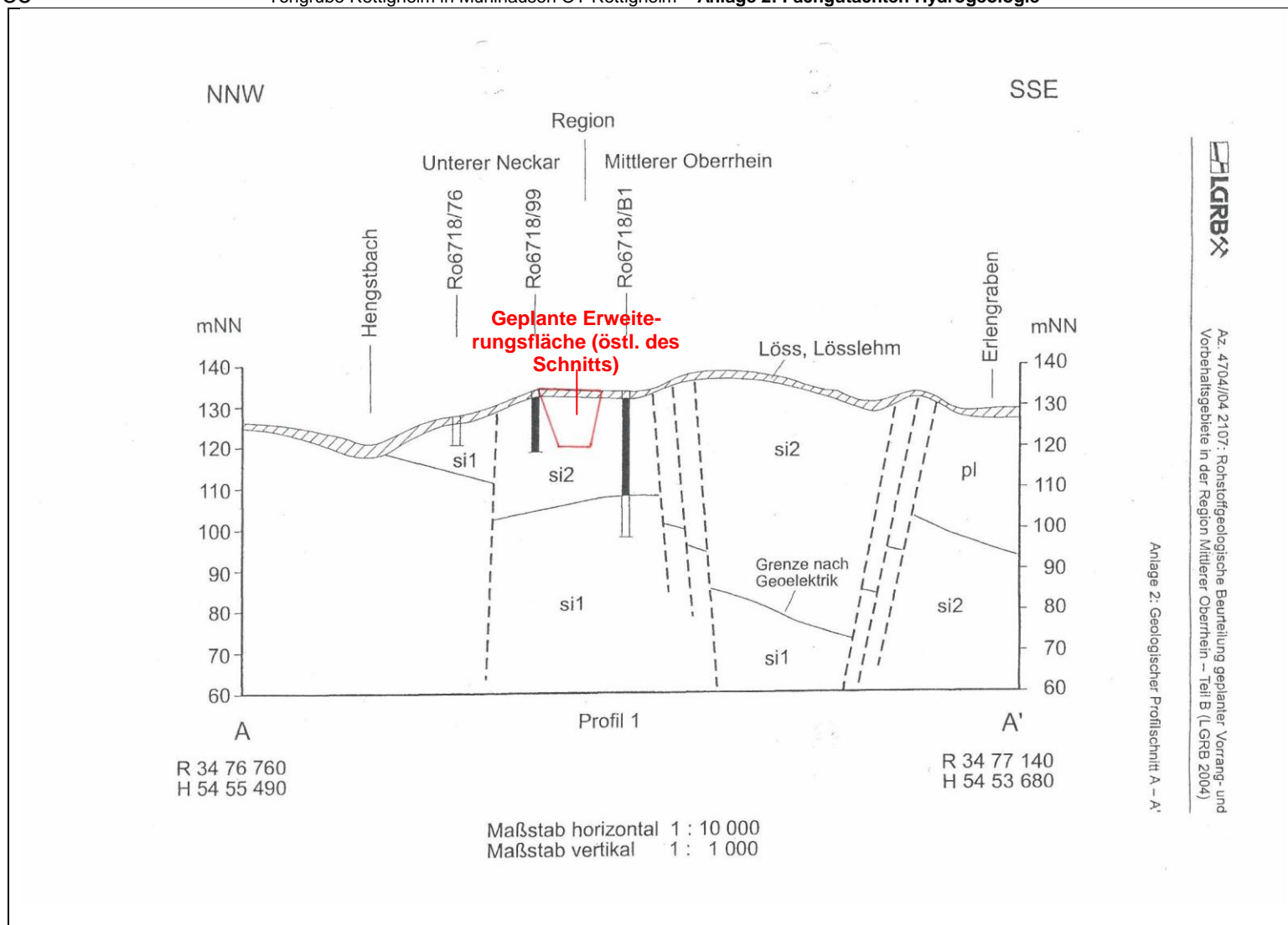


Abb. 2: Geologischer Profilschnitt A – A' aus „Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein“ /10/ (ohne Maßstab!)

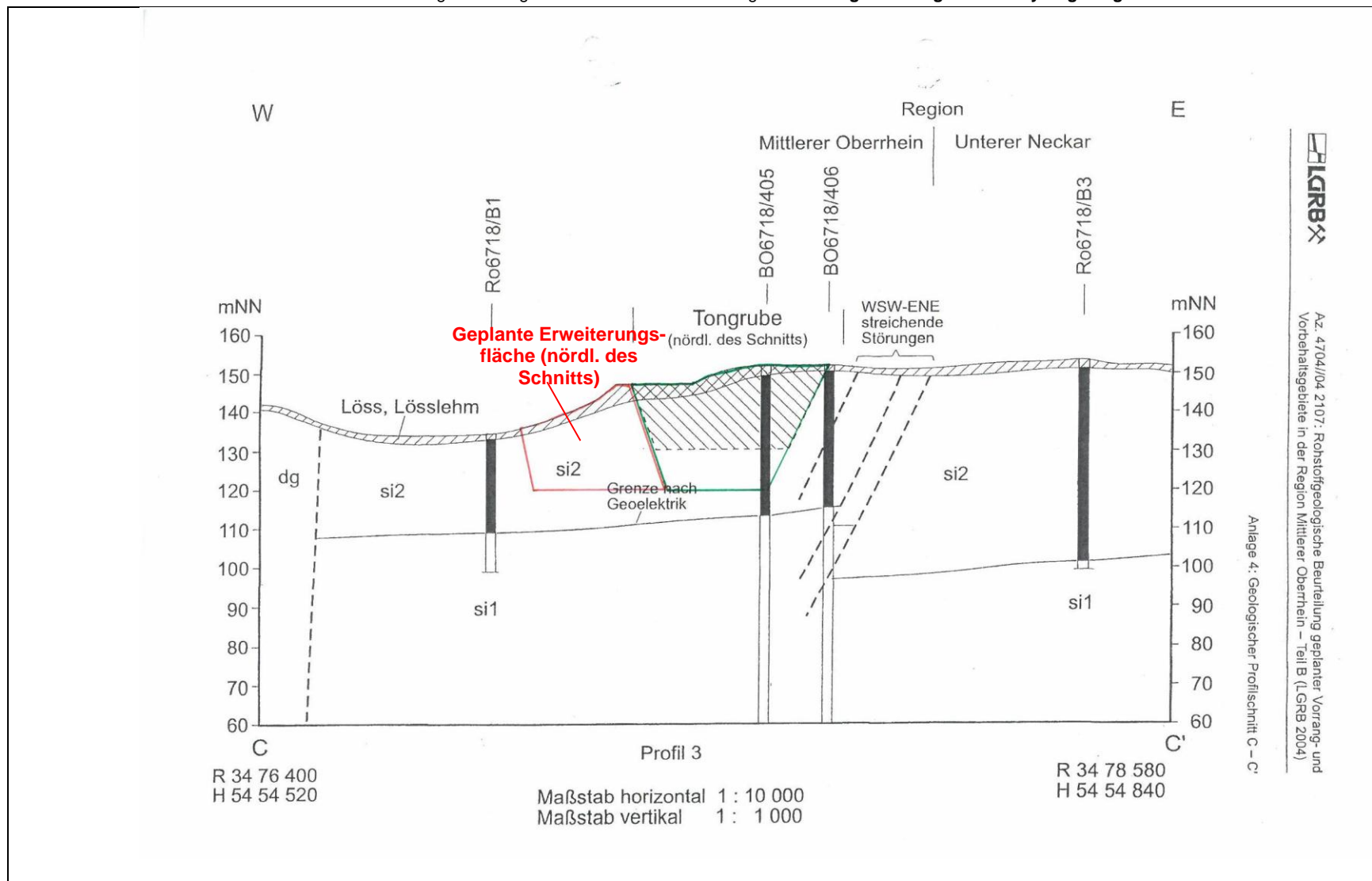


Abb. 3: Geologischer Profilschnitt C – C' aus „Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein“ /10/ (ohne Maßstab!)

2.3.2 Geologische Erkundung im Bereich der Erweiterungsfläche in den Jahren 2014/2015 durch die Wienerberger GmbH

2.3.2.1 Abteufen von zwei Aufschlussbohrungen

Zur detaillierten Darstellung der geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse im Bereich der geplanten Erweiterungsfläche und zur Erkundung der dort vorherrschenden hydrochemischen Verhältnisse im Rahmen der Überprüfung einer möglichen Beeinflussung der Heilwässer der Kurbetriebsgesellschaft mbH Bad Schönborn (Heilquellen St. Rochus-Brunnen und St. Ludwigs-Brunnen) durch den beabsichtigten Tagebaubetrieb wurden im Auftrag der Wienerberger GmbH in der Zeit vom 26.11.2014 bis zum 12.01.2015 von der celler brunnenbau gmbh, Bruchkampweg 25, 29227 Celle-Altencelle, zwei Kernbohrungen niedergebracht, die dann – entsprechend aufgeweitet - zu Grundwassermessstellen DN 125 ausgebaut wurden.

Die Kernbohrungen wurden bis in das Liegende der zukünftigen Abbausohle bei 120 m NN abgeteuft und erhielten die Bezeichnungen

GWM B 1/2015 (Archiv-Nr. LGRB: 6718/978) und
GWM B 2/2015. (Archiv-Nr. LGRB: 6718/979).

Die Einmessung der Bohrpunkte/Grundwassermessstellen nach Lage und Höhe wurden vom Vermessungsbüro Lamberger, 74889 Sinsheim, vorgenommen (siehe Tab. 1). Die Lagen der beiden Bohrungen/Grundwassermessstellen gehen darüber hinaus auch aus Anlage 4 hervor.

Die Bohrungen für die beiden Grundwassermessstellen wurden nach folgendem Schema niedergebracht:

1. Setzen eines Standrohres DN 273 von 0 bis 2,0 m u. GOK.
2. Abteufen einer Seilkernbohrung (SKL6L) (Bohrdurchmesser 178 mm; Kerndurchmesser 101 mm) von 2,0 bis Endteufe (38,0 m u. GOK).
3. Auffüllen der Kernbohrung bis 1 m unter Messstellenausbauteufe (20 m u. GOK) mit Ton (Compactonit).
4. Abteufen einer Erweiterungsbohrung (Durchmesser 195 mm) bis 20 m u. GOK.
5. Ausbau der Erweiterungsbohrungen zu Grundwassermessstellen.

Das Bohr- und Brunnenbauschema für die Grundwassermessstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 ist mit Anlage 4a beigelegt.

	GWM B 1/2015	GWM B 2/2015
Archiv-Nr. LGRB	6718/978	6718/979
Lage	R 3476956,5 H 5454745,0	R 3477055,0 H 5454641,8
Geländehöhe	135,60 m NN	137,90 m NN
Endteufe	38,00 m	38,00 m

Tab. 1: Lagen und Höhen der Aufschlussbohrungen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015

2.3.2.2 Lithologische Beschreibung und stratigraphische Einstufung der erbohrten Schichtenfolge

Die Bohrkernbeurteilungen beider Bohrungen wurden von der Wienerberger GmbH zur lithologischen Aufnahme und zur stratigraphischen Einstufung dem Regierungspräsidium Freiburg, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau (Bearbeiter/in: Dr. M. Franz, R. Stulpinaite) nach Freiburg überstellt. Die im Rahmen dieser Aufnahme erstellten Schichtenverzeichnisse liegen als Anhang 2 bei und sind beim Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau (LGRB) unter den Nummern

6718/978 (GWM B 1/2015) und
6718/979 (GWM B 2/2015)

archiviert.

Beide Aufschlussbohrungen haben unter einer geringmächtigen Oberbodenschicht (0,10 bis 0,20 m) und unterhalb einer 0,65 m bis 0,70 m mächtigen quarzärzeitlichen Abfolge aus Lößlehm und Fließerden den unteren Abschnitt der Obtususton-Formation (juOT) erbohrt, die bis zur jeweiligen Endteufe der Bohrungen bei 38 m u. GOK von der Langenbrücken-Formation (juL) unterlagert wird.

Der erbohrte Abschnitt der Obtususton-Formation stellt sich als ein schluffiger, feingeschichteter, feinglimmeriger, dunkelgrauer bis schwarzgrauer Tonstein dar, dessen Kalkgehalt zur Tiefe hin zunimmt. Bisweilen sind glänzende Horizontalharnische als Zeichen tektonischer Beanspruchung festgestellt worden.

Die Grenzen zu der im Liegenden der Obtususton-Formation anstehenden Langenbrücken-Formation wurden mit diesen beiden Bohrungen in folgenden Tiefenlagen angetroffen:

	GWM B 1/2015	GWM B 2/2015
Basis Obtususton-Formation	16,50 m u. GOK	19,54 m u. GOK
Basis Obtususton-Formation	119,10 m NN	118,36 m NN

Tab. 2: Tiefenlagen der Basis der Obtususton-Formation in den Aufschlussbohrungen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 nach Schichtenaufnahme durch das Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden Württemberg

Die Gesamtmächtigkeit der Obtususton-Formation wird für das südliche Oberrheingebiet mit ca. 60 m angegeben, so dass mit den beiden Bohrungen tatsächlich nur etwa das untere Drittel dieser Schichtenfolge erschlossen wurde.

Die das Hettangium und Unter-Sinemurium vertretende Langenbrücken-Formation im Liegenden der Obtususton-Formation erreicht im Bereich Rettigheim seine maximale Mächtigkeit von ca. 42 m. Als Synonyme für die Langenbrücken-Formation sind „*Schwarzjura alpha*“, „*Hettangium bis Unter-Sinemurium*“ und „*Pylonotenton-Formation bis Arietenkalk-Formation*“ anzuführen.

Die Langenbrücken-Formation besteht aus grauen, bioturbaten Tonmergelsteinen und bituminösen, schiefrigen Tonsteinen („Ölschiefer“), die im tieferen Teil mit mikritischen Kalkstein- und Kalkmergelsteinbänken wechsellagern.

2.3.2.3 Schichtlagerungsverhältnisse im Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche

Zur Darstellung der Schichtlagerungsverhältnisse im Bereich der Tongrube Rettigheim und insbesondere derjenigen im Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche wurden die Bohrergergebnisse der in Tabelle 3 aufgeführten Aufschlussbohrungen verwendet.

Hierbei wurde auf den *Kartenviewer* des Regierungspräsidiums Freiburg, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden Württemberg, unter

http://maps.lgrb-bw.de/?view=lgrb_adb

zurückgegriffen, und die Schichtenverzeichnisse der im Bereich der Tongrube Rettigheim niedergebrachten Bohrungen wurden beim Regierungspräsidium Freiburg angefordert. Im Rahmen der weiteren Auswertung wurden dann die Bohrungen im Umfeld der derzeitigen Abbau- und der vorgesehenen Erweiterung

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

rungsfläche verwendet, die bis in das Liegende der Obtususton-Formation abgeteufte wurden und somit über die Grenzziehung zwischen der Obtususton-Formation und der Langenbrücken-Formation eine exakte Zuordnung der Bohrprofile ermöglicht haben.

Bezeichnung der Bohrung	Lage		Höhe Ansatzpunkt (GOK) (m NN)	Bohrtiefe (m u. GOK)	Basis Obtususton-Formation (m NN)
	Rechts-Wert	Hoch-Wert			
6718/978 (B 1/2015)	3476956,5	5454745,0	135,60	38,0	119,10
6718/979 (B 2/2015)	3477055,0	5454641,8	137,90	38,0	118,36
6718/402	3477733,5	5454889,2	160,29	109,0	110,29
6718/403	3477362	5454909,1	138,15	73,0	119,50
6718/405	3477544,6	5454735,1	155,14	106,0	113,70
6718/406	3477779,2	5454718	150,98	116,0	115,20
6718/549	3476917	5454563	134,0	35,0	109,20

Tab. 3: Daten der für die Darstellung der Schichtlagerungsverhältnisse verwendeten Bohrungen aus dem *Kartenviewer* des Regierungspräsidiums Freiburg, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden Württemberg

Die Lagen dieser in Tabelle 3 aufgeführten Aufschlussbohrungen gehen aus Anlage 5 hervor.

Ebenfalls in Anlage 5 dargestellt ist die Schnittpur eines WSW – ENE verlaufenden Profilschnitts, der mit Anlage 6 beigegeben ist.

Aus dem Profilschnitt Anlage 6 geht hervor, dass sich die Tonlagerstätte Rettigheim auf zwei tektonisch bedingten Teilschollen befindet, wobei der westliche Abschnitt der Lagerstätte mit der vorgesehenen Erweiterungsfläche sowie die westlichen Abschnitte der genehmigten Abbaufäche auf einer Horstscholle liegen; der östliche Abschnitt der genehmigten Abbaufäche hingegen lagert im Verhältnis zu der Horstscholle auf einer Grabenscholle (Tiefscholle).

Zu beachten ist bei diesem Profilschnitt, dass das Streichen dieser beiden Schollen von WSW nach ENE gerichtet ist – allerdings mit gegenläufigem Einfallen der Schichtenstapel (siehe unten). Dieses Einfallen spiegelt sich auch durch die auf Höhe des Profilschnittes projizierten Bohrungen B 2/2015 (6718/979) und 6718/405 wieder, wobei die Schichtgrenzen Obtususton-Formation / Langenbrücken-Formation entsprechend dem Einfallen der Schichten durch die Projektion auf Höhe der Profilschnittlinie etwas tiefer (B 2/2015) bzw. etwas höher (6718/405) gelegen sind.

Die westlich gelegene Horstscholle wird an ihrem West- und ihrem Ostrand jeweils von NNW – SSE streichenden Vertikalstörungen begrenzt, wobei die Versatzhöhen an diesen Störungen jeweils ca. 9 m bis 10 m betragen.

Aus dem mit Anlage 5 beigefügten Lageplan gehen weiterhin tektonische Störungen hervor, die in dem Profilschnitt Anlage 6 aufgrund des Profilverlaufs nicht zur Darstellung gekommen sind.

Sowohl im Norden als auch im Süden wird die gesamte Tonlagerstätte von WSW – ENE streichenden Störungen begrenzt, zu denen jeweils rechtwinklig die in dem Profilschnitt (Anlage 6) aufgeführten NNW – SSE streichenden Störungen stehen. Diese beiden WSW – ENE streichenden Störungen konnten aus dem Gutachten des Landesamtes für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden Württemberg vom 11.03.2004 übernommen werden (siehe Abb. 1); die beiden rechtwinklig dazu stehenden NNW – SSE streichenden Störungen ergaben sich aus der Konstruktion der Darstellungen in den Anlagen 5 und 6 auch nach den aktuellen Bohrergebnissen.

Im Zuge der Entstehung dieser Störungen sind somit gleichfalls auch die beiden Teilschollen entstanden, auf denen die vorgesehene Erweiterungsfläche und der Westteil der genehmigte Abbaufäche liegen.

Wie aus Anlage 5 hervorgeht, ist die Grenzfläche Obtususton-Formation / Langenbrücken-Formation im Bereich der westlichen Teilscholle mit $< 1^\circ$ nach SSE geneigt, wohingegen die östliche Teilscholle in entgegengesetzte Richtung mit ca. 2° nach NNW einfällt.

Die Grenzfläche Obtususton-Formation / Langenbrücken-Formation liegt in den Südabschnitten der beiden vorgenannten Teilschollen sowohl im Bereich der geplanten Erweiterungsfläche als auch im westlichen Abschnitt der genehmigten Abbaufäche ca. 1,50 m oberhalb der beantragten bzw. genehmigten Abbautiefe von 120 m ü. NN und am äußersten Nordrand ca. 0,5 m oberhalb dieser Abbautiefe.

2.3.2.4 Ausbau der Aufschlussbohrungen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 zu Grundwassermessstellen

Die als Seilkernbohrungen mit einem Bohrdurchmesser von 178 mm bis in eine Tiefe von 38,0 m niedergebrachten Aufschlussbohrungen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 wurden bis in eine Teufe von jeweils 20 m u. GOK mit Ton verfüllt und dann mit einem Bohrdurchmesser von 195 mm zum Einbau einer PVC-Ausbauverrohrung DN 125 aufgeweitet.

Mit Anlage 4a ist das Bohr- und Brunnenbauschema für diese beiden Grundwassermessstellen beigefügt; aus Anlage 4b gehen die Brunnenausbauten in Korrelation mit den erbohrten Schichtgliedern hervor.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Beide Grundwassermessstellen sind an der Basis der Obtususton-Formation verfiltert, erfassen aber mit einem Abschnitt von 3,5 m (GWM B 1/2015) bzw. 0,46 m (GWM B 2/2015) auch die obersten Abschnitte der Langenbrücken-Formation.

Die Brunnenausbauschemata lassen sich wie folgt zusammenfassen:

	GWM B 1/2015	GWM B 2/2015
Oberkante geöffnete Seba-Kappe (Messpunkt MP)	136,50 m NHN	138,80 m NHN
Geländeoberkante	135,60 m NHN	137,90 m NHN
Ruhewasserspiegel (30.04.2015)	133,73 m NHN 1,87 m u. GOK	126,85 m NHN 11,05 m u. GOK
<u>Ausbauverrohrung:</u>		
Brunnenabschluss	Überflurausbau mit Seba-kappe DN 150 und Schutz-dreieck	Überflurausbau mit Seba-kappe DN 150 und Schutz-dreieck
PVC-Aufsatzrohre DN 125	+0,90 m bis 10,0 m u. GOK	+0,90 m bis 10,0 m u. GOK
PVC-Filterrohre DN 125 (Schlitzweite 0,5 mm)	10,0 m bis 18,0 m u. GOK	10,0 m bis 18,0 m u. GOK
PVC-Sumpfrohr DN 125 mit Bodenkappe	18,0 m bis 19,0 m u. GOK	18,0 m bis 19,0 m u. GOK
<u>Ringraumverfüllung:</u>		
Stahlstandrohr DN 273	0 bis 2,0 m u. GOK	0 bis 2,0 m u. GOK
Beton	0 bis 1,0 m u. GOK	0 bis 1,0 m u. GOK
Ton (Compactonit)	1,0 bis 9,0 m u. GOK	1,0 bis 9,0 m u. GOK
Filterkies (1,0 – 2,0 mm)	9,0 bis 20,0 m u. GOK	9,0 bis 20,0 m u. GOK

Tab. 4: Brunnenausbauschemata der Grundwassermessstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015

2.4 Hydrogeologische Verhältnisse im Bereich der geplanten Erweiterungsfläche

2.4.1 Kenntnisstand nach Gutachten des Landesamtes für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg vom 07.11.1995

In dem *Hydrogeologischen Gutachten zur geplanten Vertiefung der Tongrube Rettigheim* vom 07.11.1995 (/3/ gem. Kap. 2.2) hat das Geologische Landesamt Baden Württemberg die örtlichen hydrogeologischen Verhältnisse wie folgt beschrieben (Seiten 4 ff):

„Die hydrogeologischen Untersuchungen haben gezeigt, dass zwei nicht sehr ergiebige Grundwasserleiter existieren:

- *Auflockerungszone*
- *Rhätsandstein*

Die Auflockerungszone grenzt an die Tongrube an. Auch eine wenige Meter mächtige Zone unter der Grubensohle ist aufgelockert und erlaubt eine geringe Wasserführung.

Das Grundwasser im Rhätsandstein ist stark gespannt. Der Druckspiegel des Rhätsandsteins liegt bei ca. 144 bis 147 m ü. NN, also über der Grubensohle. Bei einem Pumpversuch in der Grundwassermessstelle Re 1 haben alle Grundwassermessstellen außer der Messstelle Re 8 reagiert. Dies zeigt, dass der Rhätsandstein im Tongrubengebiet hydraulisch verbunden ist. Der Rhätsandstein weist Durchlässigkeiten von $k_f \approx 10^{-6}$ m/s auf.

Zwischen der Auflockerungszone und dem Rhätsandstein besteht im Bereich der Tongrube kein hydraulischer Kontakt. Die Abdichtung des Rhätsandsteins dürfte hauptsächlich durch den etwa 10 – 11 m mächtigen Rhätton bewirkt werden, der eine Durchlässigkeit von weniger als $k_f = 10^{-8}$ m/s aufweist (vgl. Anl. 3). Eine zusätzliche Abdichtung des Rhät stellen die Schichten des Lias dar. Wie WD-Tests gezeigt haben, sind im Lias β Durchlässigkeiten in der Größenordnung $k_f < 10^{-8}$ m/s zu erwarten. Nur im tieferen Teil des Lias alpha sind auch etwas höhere Durchlässigkeiten von $k_f \sim 10^{-6}$ anzutreffen.

Das Einzugsgebiet des Rhätsandsteins ist der Ausstrichbereich nordwestlich und nordöstlich der Tongrube. Großräumig fließt das Grundwasser vom Ausstrichbereich zum Tiefpunkt der Kraichgaumulde bei Bad Mingolsheim ab. Aufgrund der Grundwasserstandsmessungen in den Messstellen ergibt sich in der Umgebung der Grube ein Grundwasserdruckgefälle nach Südwesten. Ein direkter Kontakt zum Rhätsandstein im Rheingraben, aus dem verschiedene Brunnen in Bad Mingolsheim Heil- und Thermalwasser fördern, besteht nicht, da eine Störung (Ostrandstörung) die Schichten versetzt.

Das Grundwasser aus dem Rhätsandstein weist, wie Radiokarbonmessungen zeigen, eine mittlere Verweilzeit von rd. 12.000 Jahren (Gutachten VAU) bis 20.000 Jahren (Gutachten AGK) auf. Es enthält keine jungen Komponenten. Dies zeigt, dass die Fließvorgänge im Rhätsandstein sehr langsam vor sich gehen.

Die hydrogeologischen Untersuchungen ergaben keine Hinweise auf Wasserwegsamkeiten auf den Störungszonen. Eine minimale Wasserführung auf Kalksteinbänken des Lias alpha ist allerdings nicht auszuschließen.“

Das Gutachten kommt zu dem Ergebnis, dass durch die Verringerung der Überdeckung über dem Rhät-Sandstein bei einer Abbautiefe von 120 m NN eine Beeinflussung des Grundwassers im Rhät-Sandstein nicht zu befürchten ist, da auch dann noch genügend abdichtende Schichten (Lias alpha, Rhät-Ton) vorhanden sind. Insofern wurden seinerzeit vom Geologischen Landesamt Baden Württemberg aus hydrologischer Sicht keine Einwendungen gegen die beantragte Vertiefung des genehmigten Tagebaus bis auf 120 m NN vorgetragen.

2.4.2 Porengrundwasserleiter im Hangenden der Obtususton-Formation

Sowohl im Bereich der genehmigten Abbaufäche als auch im Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche werden die Festgesteine des Unterjura (Obtususton-Formation) von bis zu ca. 2 m mächtigen quartärzeitlichen Lockersedimenten (Lößlehen, Fließerden) überlagert.

Diese Lockersedimente bilden in der Örtlichkeit gering grundwassererfüllte Aquifere, deren Basis von den Festgesteinen des Unterjura gebildet werden. Die Oberkante der Unterjura-Tonsteine ist zumeist – als ehemalige Landoberfläche vor Ablagerung der quartärzeitlichen Sedimente – bis in eine Tiefe von ca. 0,5 bis 2 m zu einem plastischen Ton unter Aufhebung des ursprünglich vorhandenen Trennflächengefüges umgewandelt, so dass diese Schicht heute als eine Grundwassersperre ausgebildet ist. Auf dieser Wassersperre staut sich das Grundwasser in den quartärzeitlichen Sedimenten, so dass sich im gesamten Bereich des heutigen Tagebaus und der vorgesehenen Erweiterungsfläche in niederschlagsreichen Perioden Staunässehorizonte bis zur Geländeoberfläche ausbilden.

Die Grundwasseroberfläche in den Unterjurasedimenten befindet sich hingegen deutlich unterhalb der Basis des quartärzeitlichen Lockergesteinsgrundwasserleiters (in der Erweiterungsfläche ca. 11 m u. GOK; siehe unten).

2.4.3 Hydrogeologische Untersuchungen im Bereich der Erweiterungsfläche in den Jahren 2014/2015 durch Wienerberger GmbH

2.4.3.1 Zielsetzungen

Im Rahmen der hydrogeologischen/hydraulischen Untersuchungen im Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche wurden folgende Zielsetzungen definiert:

- Ermittlung der stationären Zuflussraten,
- Ermittlung der hydraulischen Parameter,
- Ermittlung der Tiefenlagen von Wasserzutritten,
- Ermittlung des Wasserandrangs für die im Tagebaubetrieb erforderliche Wasserhaltung,
- Ermittlung der Höhenlage des Grundwasserstandes nach erfolgtem Wiedereinstau,
- Schaffung entsprechender Voraussetzungen für eine repräsentative Wasserprobenahme aus dem Aquifer zur Analyse hydrochemischer Parameter für eine Grundwassertypisierung (siehe Kap. 2.5 ff).

Die Ermittlung der stationären Zuflussraten und der hydraulischen Parameter sollte über entsprechende Versuche/Untersuchungen an den beiden neu errichteten Grundwassermessstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 erfolgen. In diesem Zusammenhang waren an diesen Grundwassermessstellen auch – neben anderen Probenahmestellen – Wasserproben für die geforderte Grundwassertypisierung zu gewinnen.

2.4.3.2 Untersuchungskonzept und Durchführung

Bereits beim Entsandungspumpen an den beiden Grundwassermessstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 unmittelbar nach deren Errichtung am 10.01.2015 wurde von der ausführenden Bohrfirma, der celler brunnenbau gmbh, mitgeteilt, dass beide Messstellen nur eine äußerst gering spezifische Ergiebigkeit aufweisen würden. Die maximal möglichen Pumpraten wurden mit 0,01 l/s (GWM B1) bzw. 0,001 l/s (GWM B2) eingeschätzt.

Da insbesondere der Wasseraustausch bei diesen stationären Pumpraten im Hinblick auf die geforderten Wasserprobenahmen für die hydrogeochemischen Untersuchungen unwirtschaftlich lange dauern würde, wurde bei den Pumpversuchen vom 30.04. bis 06.06 2015 folgendermaßen vorgegangen:

Grundwassermessstelle B 1/2015:

Die Untersuchungen an der Grundwassermessstelle B 1/2015 gliederten sich in folgende Teilschritte:

- Abpumpen/Austausch des Messstelleninhalts am 30.04.2015
- Abpumpen/ Austausch des Messstelleninhalts am 04.05.2015
- 8-stündiger Pumpversuch mit 1. Isotopenprobenahme am Ende des Pumpversuchs am 05.05.2015
- Wiederanstiegsmessung vom 05.-06.05.2015
- weiteres Abpumpen/ Austausch des Messstelleninhalts mit 2. Isotopenprobenahme am 06.05.2015
- Fluid-Logging-Messung zur Lokalisierung/Quantifizierung der Wasserzutritte am 06.05.2015.

Das Absenkdigramm für die Pumpmaßnahmen an der Grundwassermessstelle B 1/2015 ist mit Anlage 7a beigelegt; die graphische Darstellung der Fluid-Logging-Messung liegt als Anlage 7b bei.

Grundwassermessstelle B 2/2015:

Bei den Untersuchungen an der Grundwassermessstelle B 2/2015 wurde wie folgt vorgegangen:

- Abpumpen/Austausch des Messstelleninhalts am 30.04.2015
- Abpumpen/ Austausch des Messstelleninhalts am 04.05.2015
- zweifaches Abpumpen mit 1. Isotopenprobenahme zum Ende des Pumpversuchs am 05.05.2015
- Wiederanstiegsmessung vom 05.-06.05.2015
- Abpumpen mit 2. Isotopenprobenahme am 06.05.2015.

Das Absenkdigramm für die Pumpmaßnahmen an der Grundwassermessstelle B 2/2015 ist mit Anlage 7c beigelegt.

2.4.3.3 Ergebnisse der Pumpversuche

Aus den Daten der Wasserspiegelabsenkungen bzw. der Wasserspiegelwiederanstiege konnten die hydraulischen Kennwerte ermittelt werden. Zusätzlich lieferte die Fluid-Logging-Messung in GWM B 1/2015 Informationen über die Tiefen der Wasserzutritte.

2.4.3.3.1 GWM B 1/2015

Die Auswertung des Pumpversuchs wurde mittels diagnostischem Doppellog-Plot und instationärem Typkurvenverfahren vorgenommen. Ergänzend hierzu wurde der Pumpversuch in GWM B 1/2015 vergleichend mit dem Halblog-Plot ausgewertet.

In der Grundwassermessstelle B 1/2015 wurde ein Ruhewasserspiegel von 2,77 m u. MP (133,73 m ü. NN) angetroffen. Bei einer Filterstrecke von 10,0 bis 18,0 m u. Gel. (125,6 bis 117,6 m ü. NN) handelt es sich um einen Druckspiegel, der ca. 14 m über der geplanten Abbausohle und somit 1,87 m unter GOK liegt.

Beim achtstündigen Pumpversuch wurde mit einer Pumprate von 0,04 l/s eine Absenkung von 3,6 m erreicht.

Im Halblog-Plot (Anlage 7a) ist ab ca. 10.000 s eine Gerade ausgebildet, womit nach Abklingen der Brunneneinflüsse (Brunnenspeicherung und Skin) das Einsetzen infinit radialer Strömungen angezeigt wird. Die Dekadenabsenkung von 0,74 m liefert nach Cooper&Jacob¹ einen Transmissivitätswert von $9,8 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$.

Eine sicherere Bestimmung des Aquifermodells kann anhand des doppellogarithmischen diagnostischen Plots vorgenommen werden. (Anlage 7a) der Absenkphase erreicht die Bourdet²-Ableitung $\delta s / \delta t \cdot t$ ab ca. 10.000 s das Plateau, womit Theis'sche³ Aquiferbedingungen – also homogen infinit – indiziert werden. Der Wert des Plateaus bzw. die Anpassung mit Gringarten⁴-Typkurven für Brunnen liefert einen T-Wert von $1,1 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ – übereinstimmend für die Absenkung wie auch für den Wiederanstieg.

¹ COOPER, H.H. JR. & JACOB, C.E. (1946): A generalized graphical method for evaluating formation constants and summarizing well-field history. – Transactions, Amer. Geophys. Union, Vol. 24, No. 4, S. 526-534.

² BOURDET, D., WHITTLE, T.M., DOUGLAS, A.A. & PIRARD, Y.M. (1983a): A new set of type curves simplifies well test analysis. – World Oil (May 1983), 7 S., 10 Abb., 3 Tab.; Houston, Texas, U.S.A.

³ THEIS, C.V. (1935): The relation between the lowering of the piezometric surface and the rate and duration of discharge of a well using groundwater storage. – Transactions Amer. Geophys. Union, S. 519-524.

⁴ GRINGARTEN, A.C., BOURDET, D., LANDELL, P.A. & KNIAZEFF, V.J. (1979): A comparison between different skin and wellbore storage type-curves for early-time transient analysis. – Presented at the SPE-AIME 54th Annual Technical Conference and Exhibition, Society of Petroleum Engineers, SPE-8205; Las Vegas, Nevada.

Dies entspricht bei ca. 10 m Gebirgsmächtigkeit, die über den Filterkies angeschlossen ist, einem Durchlässigkeitsbeiwert von ca. $1 \cdot 10^{-6}$ m/s.

Nach der Fluid-Logging-Messung (Anlage 7b) liegen die Grundwasserzuflüsse in GWM B 1/2015 zu etwa gleichen Anteilen mit 54 % in ca. 11,5 m Tiefe (125,0 m ü. NN) und mit 42 % in ca. 12,5 m Tiefe (124,0 m ü. NN). Ein gerade noch erkennbarer geringer Zufluss mit max. 4 % liegt bei 16,5 m (120,0 m ü. NN). Damit liegen die Hauptzuflüsse innerhalb der Obtususton-Formation oberhalb der geplanten Abbausohle von 120 m ü. NN. Aus der Langenbrücken-Formation unterhalb der Abbausohle bis an die Unterkante der Filterkiesschüttung bei 115,6 m ü. NN sind keine Zuflüsse festzustellen. Die Durchlässigkeit der in der Grundwassermessstelle GWM B 1/2015 erschlossenen obersten 4 m der Langenbrücken-Formation unterhalb der Abbausohle liegt somit bei $< 1 \cdot 10^{-7}$ m/s (geringer als 4% der Gesamttransmissivität).

Bis zur Entnahme der ersten Isotopenprobenahme wurden ca. 2.000 l Grundwasser abgepumpt, bis zur zweiten Isotopenprobenahme insgesamt ca. 2.160 l.

2.4.3.3.2 GWM B 2/2015

In der Grundwassermessstelle GWM B 2/2015 wurde ein Ruhewasserspiegel von 11,95 m u. MP (126,85 m ü. NN) angetroffen. Bei einer Filterstrecke von 10,0 bis 18,0 m u. Gel. (127,9 bis 119,9 m ü. NN) handelt es sich um einen Grundwasserspiegel, der ca. 7 m über der geplanten Abbausohle und 11,09 m unter GOK liegt.

Aufgrund der sehr geringen Ergiebigkeit konnte kein Pumpversuch mit konstanter Förderrate durchgeführt werden. Zur Ermittlung der hydraulischen Kennwerte wurde die ca. 15-stündige Wiederanstiegsmessung nach dem Abpumpen am 04.05.2015 ausgewertet (Anlage 7c). Der mit dem instationären Typkurvenverfahren nach Cooper&Papadopoulos⁵ berechnete T-Wert beträgt $3 \cdot 10^{-8}$ m²/s. Dies entspricht bei ca. 10 m Gebirgsmächtigkeit, die über den Filterkies angeschlossen ist, einem Durchlässigkeitsbeiwert von ca. $3 \cdot 10^{-9}$ m/s.

Bis zur Entnahme der ersten Isotopenprobe wurden ca. 150 l Grundwasser abgepumpt, bis zur zweiten Isotopenprobe insges. ca. 170 l. Bei einem Messstelleninhalt von ca. 140 l (inkl. Ringraum der Steigleitung) wurde damit ein einfacher bzw. 1,2-facher Austausch erreicht.

⁵ COOPER, H.H., JR., BREDEHOEFT, J.D. & PAPADOPULOS, I.S. (1967): Response of a Finite-Diameter Well to an Instantaneous Charge of Water. – Water Resources Research, Vol. 3, No. 1, pp. 263-269.

2.4.3.3 Reaktionen in den Messstellen B 1/2015 und B 2/2015 im Verlauf der Pumpversuche

Zu Reaktionen in den Messstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 im Verlauf der Pumpversuche liegen keine Messdaten vor. Eine Reaktion war aber auch nicht zu erwarten: mit der in GWM B 1/2015 realisierten Pumprate von 0,04 l/s könnte es theoretisch im sehr gespannten Fall ($S=2 \times 10^{-4}$), in GWM B 2/2015 nach 12,5 Stunden zu einer Absenkung von 1 cm gekommen sein. Die Pumpzeit lag jedoch bei nur knapp 8 h.

2.4.3.4 Ermittlung des Wasserandrangs für die im Tagebaubetrieb erforderliche Wasserhaltung

Grundsätzlich wird mit der Erweiterung des Tagebaus eine Hohlform geschaffen, deren Sohle mit 120 m ü. NN unterhalb der Quellaustritte des Schefelgrabens (ca. 130 m ü. NN) im Norden und des Zuflusses zum Erlengraben (ca. 132 m ü. NN.) im Süden liegt. Aufgrund der damit möglichen Potenzialdifferenzen können Grundwasseraustritte im Tagebau auftreten.

Die erforderliche Wasserhaltungsmenge wurde auf Grundlage der ermittelten hydraulischen Kenndaten nach Davidenkoff⁶ für die bis 120,0 m ü. NN eingetiefte Tagebauhohlform abgeschätzt.

Die maximale Ausdehnung der mit der Rohstoffgewinnung frei gelegten Fläche umfasst mit den Abbauphasen 1 und 2 (Kap. 2.6.2.4) insgesamt 17.786 m² (Kap. 2.7); nach Gewinnung der in den Abbauphasen 1 und 2 gewonnenen Rohstoffe wird die Fläche der Abbauphase 1 sukzessive mit Erdmassen rückverfüllt.

Die in der Grundwassermessstelle GWM B 2/2015 angetroffenen Verhältnisse mit einer Transmissivität von ca. $3 \cdot 10^{-8}$ m²/s sind typisch für die gering durchlässige Obtususton-Formation in nicht oder wenig geklüfteten Bereichen. Diese Ergebnisse finden sich auch durch den Betrieb des bereits genehmigten Tagebaus bestätigt. Mit dem gemessenen Wasserstand von 126,8 m ü. NN. lässt sich für die gesamte Erweiterungsfläche eine Wasserhaltungsmenge von ca. 0,2 l/s abschätzen.

Aus den in den Anlagen 5 und 6 dargestellten tektonischen Verhältnissen wird deutlich, dass der bei der Grundwassermessstelle GWM B 1/2015 angetroffene, höher durchlässige Bereich an die unmittelbar westlich der Messstelle von NNW nach SSE verlaufende tektonische Störung gebunden ist.

Damit kann dieser mit der Grundwassermessstelle GWM B 1/2015 aufgeschlossene höher durchlässige Bereich auf eine relativ schmale tektonisch bedingte Zerrüttungszone im Störungsverlauf (die dort ermittelte Transmissivität beträgt

⁶ HERTH, W.; ARNDTS, E. (1994): Theorie und Praxis der Grundwasserabsenkung,; Ernst & Sohn, Berlin

1·10⁻⁵ m²/s) reduziert werden, die außerhalb der Abbaufäche gelegen ist. Im Falle eines abbaubedingt hergestellten hydraulischen Kontaktes mit diesem Streifen kann, bezogen auf den vorgesehenen Tagebau, ein Wasserandrang von (im Mittel) ca. 2 l/s (= >7,2 m³/h) errechnet werden.

Mit dem in der Grundwassermessstelle GWM B 1/2015 gemessenen Ruhewasserspiegel können Grundwasserzutritte grundsätzlich ab einer Tiefe von ca. 134 m ü. NN auftreten; ebenfalls kann Grundwasser im tieferen Bereich ab ca. 127 m NN zutreten.

Die erforderlichen Wasserhaltungsmengen sind entsprechend der Schwan-
kungsbreite des Druckpotenzials stark niederschlagsabhängig.

2.4.3.5 Abschätzung der Reichweite der Absenkung

Die relativ hohen Grundwasserstände der Messstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 (133,6 m ü. NN. bzw. 126,9 m ü. NN.) zeigen, dass trotz langjährig bestehender Tagebausohe bei 120 m ü. NN. die Reichweite der Grundwasserabsenkung kleiner als 200 bis 250 m anzusetzen ist.

Eine rechnerische Abschätzung der Reichweite R kann unter der Annahme des Tagebaus als Brunnen nach der im Grundbautaschenbuch⁷ angegebenen instationären Formel vorgenommen werden:

$$R = 1,5 \cdot \sqrt{\frac{k \cdot M \cdot t}{S}}$$

Die Grundwasserabsenkung in der Umgebung des Tagebaus ist demnach abhängig von

- der Durchlässigkeit k des Untergrunds
- der Mächtigkeit M
- der Pumpdauer t
- dem Speicherkoeffizient S

Die Durchlässigkeit wird nach dem Ergebnis des Pumpversuchs aus GWM B 2 /2015 mit $k_f = 1 \cdot 10^{-8}$ m²/s angesetzt.

Die grundwassererfüllte Mächtigkeit wird nach dem Ergebnis des Pumpversuchs aus GWM B 2/2015 mit 8 m angesetzt.

⁷ ODENWALD, B., HEKEL, U., THORMANN, H. (2009): Grundwasserströmung – Grundwasserhaltung. – In: Witt, K.J. (Hrsg.) Grundbau-Taschenbuch, Teil 2: Geotechnische Verfahren. 7., überarbeitete u. aktualisierte Auflage, ca. 950 Seiten, ca. 500 Abbildungen; Berlin (Ernst & Sohn)

Als „Pumpdauer“ wird der Abbauphase 3 mit 7,4 Jahren angesetzt.

Der Speicherkoeffizient wird mit $5 \cdot 10^{-3}$ abgeschätzt. Dies entspricht bei Annahme eines freien Grundwasserspiegels einem Klufthohlraumanteil von 0,5 %.

Demnach ergibt sich eine Reichweite der Grundwasserabsenkung von ca. 90 m.

Eine rechnerische Abschätzung des abgesenkten Grundwasserstands $h(x,t)$ in der Entfernung x vom Tagebau nach der Abbaudauer t kann nach Grundbautaschenbuchi als Grabenströmung analytisch berechnet werden nach:

$$h^2(x,t) = h^2 - (h_0^2 - h_1^2) \cdot f_0$$

f_0 ist die komplementäre Gauß'sche Fehlerfunktion $\text{ERFC}(\sqrt{u})$

$$\text{mit } u = \frac{x^2 \cdot a}{4 \cdot t}$$

$$\text{und } a = \frac{T}{S}$$

Die Grundwasserabsenkung in der Umgebung des Tagebaus ist demnach abhängig von

- der Transmissivität T des Untergrunds
- der wassererfüllten Mächtigkeit h_0
- der Restwasserhöhe im Tagebau h_1
- der Pumpdauer t
- dem Speicherkoeffizient S

Die Transmissivität wird nach dem Ergebnis des Pumpversuchs aus GWM B 2 / 2015 mit $5 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ angesetzt.

Die grundwassererfüllte Mächtigkeit wird nach dem Ergebnis des Pumpversuchs aus GWM B 2 / 2015 mit knapp 7 m angesetzt.

Als „Pumpdauer“ wird der Abbauphase 3 mit 7,4 Jahren betrachtet.

Der Speicherkoeffizient wird mit $7 \cdot 10^{-3}$ abgeschätzt. Dies entspricht bei Annahme eines freien Grundwasserspiegels einem Klufthohlraumanteil von 0,7 %.

Das Berechnungsergebnis ist in Abb. 4 als Grundwasserabsenkung durch den Tagebau nach 3 bzw. 7,4 Jahren dargestellt.

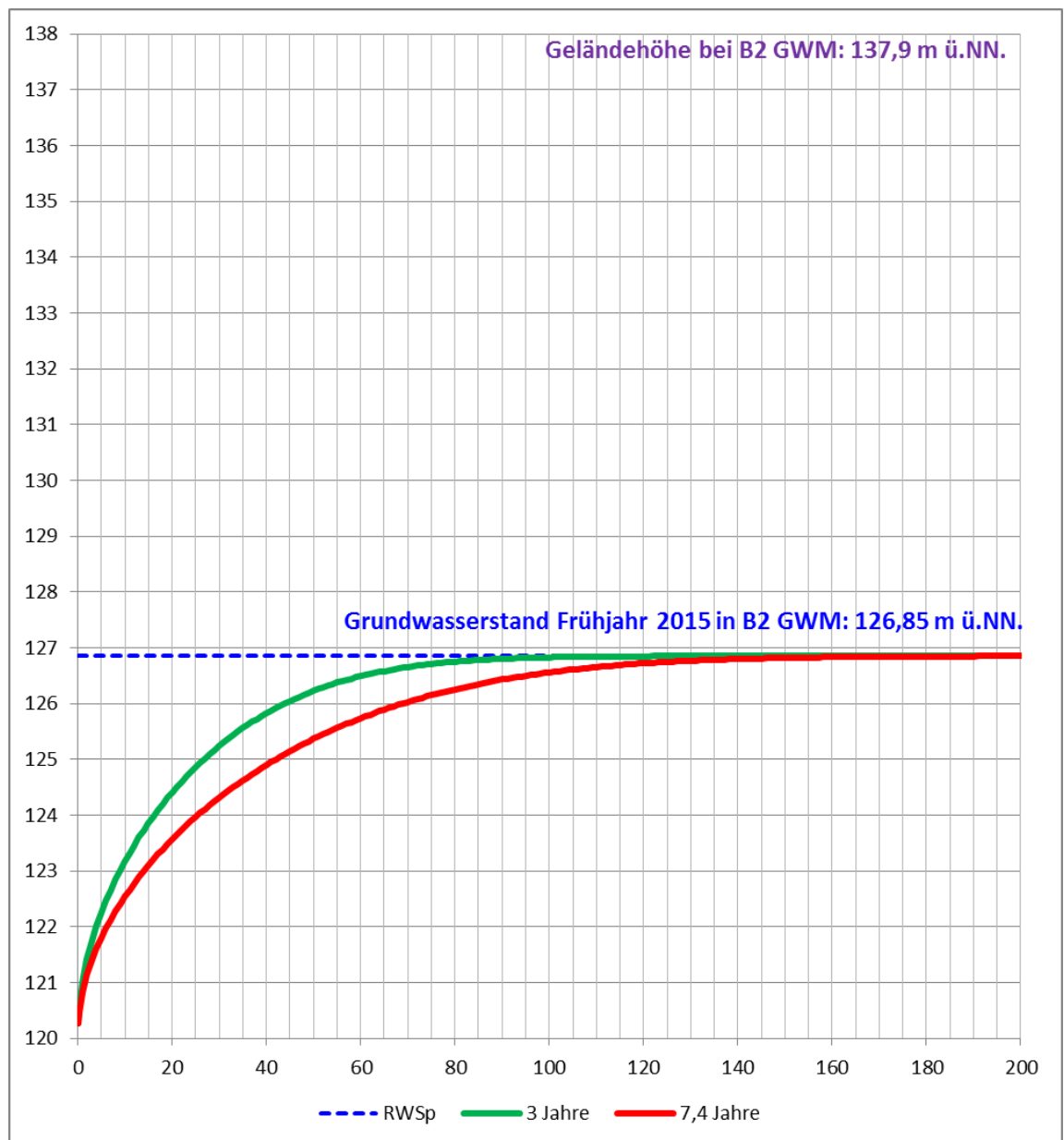


Abb. 4: Grundwasserhöhe bei Absenkung am linken Modellrand (durch Tagebau) auf 120 m ü. NN bei ungespannter Grabenströmung

2.4.3.6 Ermittlung der Höhenlage des Grundwasserstandes nach erfolgtem Wiedereinstau

Wie oben angeführt, werden die hydrogeologischen Verhältnisse innerhalb der Obtususton-Formation von der Grundwassermessstelle GWM B 2/2015 repräsentiert.

Mit dieser Messstelle wurde eine Ruhewasserspiegellage von 126,85 m NN ermittelt, wobei angemerkt werden muss, dass mit dieser Messung noch nichts

über mögliche jahreszeitlich und niederschlagsabhängige Schwankungen ausgesagt werden kann. Um diese Schwankungsbreite zu ermitteln, sind die beiden Grundwassermessstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 am 18. April 2016 mit Datenloggern zur kontinuierlichen Aufzeichnung der Wasserspiegellagen ausgestattet worden.

Unter Zugrundelegung des derzeitigen Kenntnisstandes wird für die Tiefenlage der Grundwasseroberfläche nach Wiedereinstau ein Bemessungswasserstand von ca. 128 m NN angesetzt.

2.4.3.7 Ermittlung des Oberflächenwasserandrangs

Zur Ermittlung des Oberflächenwasserandrangs sowohl in der Erweiterungsfläche als auch im genehmigten Tontagebau wurde aus dem „*Monatlicher Wetterungsbericht für Baden-Württemberg, Regierungsbezirke Freiburg und Karlsruhe / hrsg. vom Deutschen Wetterdienst, Wetteramt Freiburg*“ auf die Niederschlagsstation Wiesloch zurückgegriffen.

Die mittleren Jahresmengen einer 10-jährigen Messreihe (2006 bis 2015) werden dort mit

$$\begin{aligned} &693 \text{ mm/a} \\ &21,98 \text{ l/(s * km}^2\text{)} \end{aligned}$$

angegeben.

Somit ergeben sich für die bestehende Abbaufäche und vorgesehene Erweiterungsfläche folgende Niederschlagsmengen:

	bestehende Abbaustätte	vorgesehene Abbaustätte
Fläche	129.250 m ²	51.620 m ²
Mittlere jährliche Niederschlagsmenge in der Abbaufäche	2,84 l/s (10,22 m ³ /h)	1,13 l/s (4,07 m ³ /h)
Oberflächenwasser- andrang	1,9 l/s (6,84 m³/h)	0,74 l/s (2,66 m³/h)

Unter der Voraussetzung, dass für den Niederschlag in die tonigen Gesteine der Obtususton-Formation kaum ein unterirdischer Abfluss erfolgt, wird von den mittleren jährlichen Niederschlagsmengen in den Abbaustätten zur Ermittlung des Oberflächenwasserandrangs ein Drittel der Niederschlagsmenge als Verdunstung zum Abzug gebracht.

2.4.3.8 Zusammenfassung der Ergebnisse der hydrogeologischen Untersuchungen

Die Ergebnisse der hydrogeologischen/hydraulischen Untersuchungen lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Oberhalb der Unterjura-Festgesteine ist in den quartärzeitlichen Sedimenten ein geringmächtiger oberer freier Grundwasserleiter ausgebildet, der nicht in direktem hydraulischen Kontakt zu den nur „sehr schwach durchlässigen“ Festgesteinen gemäß DIN 18 130) steht.
- Die hydrogeologischen Verhältnisse im Bereich der für den Tonabbau vorgesehenen Erweiterungsfläche werden von der Grundwassermessstelle GWM B 2/2015 repräsentiert, mit der eine Tiefenlage der Grundwasseroberfläche bei ca. 11 m u. Gelände (Messung 30.04.2015: 126,85 m NHN) ermittelt wurde.
- Die bei Kurzpumpversuchen ermittelten stationären Zuflussraten liegen in einem weiten Bereich von 0,04 l/s (Grundwassermessstelle B 1/2015) bis ca. 0,001 l/s (Grundwassermessstelle B 2/2015).
- Die ermittelten Transmissivitätswerte liegen entsprechend zwischen $1 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ (Bereich Störungszone) und $3 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ (Obtususton-Formation), was Durchlässigkeitsbeiwerten von ca. $1 \cdot 10^{-6} \text{ m/s}$ (Bereich Störungszone) bzw. $3 \cdot 10^{-9} \text{ m/s}$ (Obtususton-Formation) entspricht.
- Wasserzutritte in die Grundwassermessstelle GWM B 1/2015 konnten mittels einer Fluid-Logging-Messung lokalisiert werden. Sie lagen zu gleichen Anteilen in einer Tiefenlage bei ca. 125 m ü. NN. und bei ca. 124 m ü. NN. Ein sehr geringer Zufluss konnte bei ca. 120 m ü. NN. lokalisiert werden. Unterhalb der Abbausohle von 120 m NN konnten bis ca. 116 m NN in der bis in eine Tiefenlage von 115,60 m NN ausgebauten Grundwassermessstelle keine Zuflüsse festgestellt werden.
- Der Grundwasserandrang und damit die für den Tagebaubetrieb erforderliche Wasserhaltungsmenge aus der Obtususton-Formation lässt sich für den Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche mit 0,2 l/s abschätzen.
- Die geförderte Wassermenge im bereits genehmigten Tagebau beträgt – geschätzt nach Einsatzzeiten der im Pumpensumpf betriebenen Pumpe – ca. 82.000 m³/a (2,6 l/s), so dass unter Berücksichtigung eines in der vorgesehenen Erweiterungsfläche ermittelten Grundwasserandrangs von 0,2 l/s und eines dortigen Oberflächenwasserandrangs von ca. 0,74 l/s im Mittel ca. 3,5 l/s Wasser aus beiden Tagebauen abzuleiten sein werden.
- Die Reichweite der Grundwasserabsenkung durch den Tonabbau in der vorgesehenen Erweiterungsfläche wird ca. 90 m betragen.

- Für die Höhenlage des Bemessungswasserstandes nach Wiedereinstau wird ein Niveau von ca. 128 m ü. NN angenommen. Diese Wasserspiegellage befindet sich somit ca. 16 bis 19 m unterhalb des Druckwasserspiegels innerhalb des Rhät-Sandsteins im Liegenden der vorgesehenen Erweiterungsfläche, der nach /3/ (siehe Kap. 2.2) mit 144 m NN bis 147 m NN angegeben wird.

2.5 Hydrogeochemische Untersuchungen im Bereich der geplanten Erweiterungsfläche

2.5.1 Zielsetzungen der hydrogeochemischen Untersuchungen im Rahmen der Erweiterung des Tontagebaus Rettigheim

Mit der vorgesehenen Erweiterungsfläche des Tontagebaus Rettigheim wird diese auch in die wasserführenden Schichten der Obtususton-Formation eintiefen, wobei im Rahmen der Rohstoffgewinnung eine Wasserhaltung mit Sammlung und Ableitung dieser Grundwässer vorzunehmen sein wird. Bei einer vorgesehenen Abbautiefe von 120 m NN liegt die zukünftige Abbausohle dieser Teilscholle aufgrund ihres Einfallens nach SSE im Norden der Erweiterungsfläche ca. 0,50 m oberhalb der Basis der Obtususton-Formation, im Süden ca. 1,50 m oberhalb hiervon (siehe Anlagen 5 und 6).

Insofern war es erforderlich zu prüfen, ob der Eingriff in diese Grundwasser führenden Schichten und deren lokale Entwässerung Auswirkungen auf die im Bereich von Rettigheim gelegenen Heil- und Thermalquellen haben wird. Diese Auswirkungen sollten auf der Grundlage hydrogeochemischer Bewertungen der Wässer von insgesamt vier Heil- bzw. Thermalquellen einerseits und Grundwasserproben aus Grundwassermessstellen in unterschiedlichen geologischen Horizonten und Oberflächenwässern andererseits überprüft werden.

2.5.2 Konzept für die hydrogeochemischen Untersuchungen

Im Rahmen der hydrogeochemischen Untersuchungen war die Entnahme und Analyse von Wasserproben aus folgenden Grundwasseraufschlüssen vorgesehen:

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Grundwasseraufschluss	Ort der Probenahme
GWM B 1/2015	69242 Mühlhausen, OT Rettigheim
GWM B 2/2015	69242 Mühlhausen, OT Rettigheim
GWM Rettigheim-2 (LGRB-Nr.: 6718/403)	69242 Mühlhausen, OT Rettigheim
GWM Rettigheim-3 (LGRB-Nr.: 6718/404)	69242 Mühlhausen, OT Rettigheim
Quelle Hengstbach	69242 Mühlhausen, OT Rettigheim
westlicher Tagebausee im heutigen Tagebau	69242 Mühlhausen, OT Rettigheim
St.-Rochus-Brunnen (LGRB-Nr.: 6718/413)	76669 Bad Schönborn (Sankt Rochus Kliniken, Sankt-Rochus-Allee 1 – 11, 76669 Bad Schönborn)

Ursprünglich war auch eine Beprobung des Heilwassers des St. Ludwigsbrunnens vorgesehen. Von der Kurbetriebsgesellschaft mbH Bad Schönborn wurde HPC jedoch mitgeteilt, dass an diesem Brunnen aufgrund dauerhafter technischer Defekte eine Probenahme nicht möglich sei.

Für folgende Heil- und Thermalquellen lagen weiterhin Wasseranalysen vor, die im Rahmen des „Hydrogeologisches Zwischengutachten zur Abgrenzung eines Heilquellenschutzgebietes für die Heilquellen in Bad Schönborn“ (Bericht des RP Freiburg vom 25.07.2006) verwendet wurden:

- St. Rochusbrunnen (St. Rochus-Klinik, Mingolsheim)
- St. Ludwigsbrunnen (St. Rochus-Klinik, Mingolsheim)
- Karl-Sigel-Quelle (Siegel-Klinik KG, Langenbrücken)
- Lambertus-Quelle (Thermal-Sole GmbH, Mingolsheim)

Die Grundwassermessstellen GWM Rettigheim-2 (LGRB-Nr.: 6718/403) und GWM Rettigheim-3 (LGRB-Nr.: 6718/404) wurden im Jahr 1990 im Zuge einer Deponiestandortsuche durch den Rhein-Neckar-Kreis errichtet und laufen aufgrund von Korrosionsschäden am Brunnenkopf unkontrolliert mit geringen Wassermengen artesisch aus. Eine Bestimmung der Druckspiegelhöhen ist derzeit

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

nicht möglich. Von Seiten Wienerberger GmbH ist beabsichtigt, diese Grundwassermessstellen ordnungsgemäß abzudichten und jeweils mit einem Manometer zur Bestimmung des hydrostatischen Drucks auszustatten.

Die Lagen dieser Entnahmestellen gehen aus dem mit Anlage 8 beigefügten Übersichtsplan M 1 : 10.000 hervor (vergrößerter Ausschnitt aus: Topographische Karte 1 : 25.000, Blätter 6717 Waghäusel und 6718 Wiesloch).

Die Probennahmen sollten zu einem Stichtag (1 bis 3 zusammenhängende Tage) erfolgen und wie folgt vorgenommen werden:

Wasserprobenahmen	
Grundwasseraufschluss	Art der Probenahme
GWM B 1/2015	Wasserprobennahme als Pumpprobe an zwei aufeinander folgenden Tagen (am Abend des ersten und am Morgen des zweiten Tages).
GWM B 2/2015	Wasserprobennahme als Pumpprobe an zwei aufeinander folgenden Tagen (am Abend des ersten und am Morgen des zweiten Tages).
GWM Rettigheim-2 (LGRB-Nr.: 6718/403)	Wasserprobennahme als Pumpprobe und Entnahme einer Wasserprobe nach Erreichung der Konstanz von Leitfähigkeit und Temperatur
GWM Rettigheim-3 (LGRB-Nr.: 6718/404)	Wasserprobennahme als Pumpprobe und Entnahme einer Wasserprobe nach Erreichung der Konstanz von Leitfähigkeit und Temperatur
Quelle Hengstbach	Entnahme einer Wasserprobe als Schöpfprobe
westlicher Tagebausee heutiger Tagebau	Entnahme einer Wasserprobe als Schöpfprobe
St.-Rochus-Brunnen (LGRB-Nr.: 6718/413)	Entnahme einer Wasserprobe über eine bereits eingebaute Pumpe (Entnahmehahn)

An allen 9 Wasserproben waren folgende Parameter zu analysieren:

Vor-Ort-Analyse:	elektrische Leitfähigkeit ph-Wert Temperatur Sauerstoff Redox-Potential Säurekapazität 4,3 Basenkapazität 8,2 Färbung Trübung Geruch
Laboranalyse:	Ca, Mg, Sr, Na, K, Al, Si, HCO ₃ , NO ₃ , SO ₄ , F, Cl, Bor (Bestimmungsgrenze 1 µg/l), NO ₂ , NO ₃ , NH ₄ , H ₂ S, Li, Fe, Mn, As, Cd, Cu, Hg, Pb, Zn,
Isotope (keine separate Probenahme zu den übrigen Parametern):	Tritium (Bestimmungsgrenze mind. 1 TU) Sauerstoff-18 Deuterium

Die Wasserprobennahmen und die hydrogeochemischen Analysen an den gewonnenen Wasserproben wurden von der HYDROISOTOP gmbh, *Laboratorium zur Bestimmung von Isotopen in Umwelt und Hydrologie*, Woelkestraße 9, 85301 Schweitenkirchen, vorgenommen.

Die Wasserprobennahmen erfolgten am 05./06. Mai 2015, wobei aus technischen Gründen der St.-Rochus-Brunnen und die beiden Grundwassermessstellen GWM Rettigheim-2 und GWM Rettigheim-3 noch nicht beprobt werden konnten.

Zusätzlich zur Beprobungsstelle „Quelle Hengstbach“ wurden noch im Bereich „Quelle Erlengraben“ sowie an den sechs Quellbereichen „Erlengraben E2, E3, und E4“ und „Hengstbach H2, H3 und H4“ Wasserproben gezogen und analysiert (siehe Anlage 8).

Die Wasserprobenahme am St.-Rochus-Brunnen wurde dann am 19.05.2015 ebenso nachgeholt wie diejenige an den beiden artesisch auslaufenden Grundwassermessstellen GWM Rettigheim-2 und -3.

In Abweichung von dem o. a. Parameterumfang wurden die Proben „Erlengraben E2, E3 und E4“ sowie „Hengstbach H2, H3 und H4“ auf nachfolgende Parameter analysiert:

Hauptinhaltsstoffe: Ca, Mg, Na, K, HCO₃, Cl, SO₄, NO₃, inkl. Ionenbilanz

Spurenstoffe: Sr, Si

Isotope: Sauerstoff-18 (18O) und Deuterium (2H).

Die Originalanalyseberichte der HYDROISOTOP gmbh sind als Anhang 3 beige-fügt.

2.5.3 Weitere Datengrundlage

Die hydrogeochemische Bewertung der Wässer im Untersuchungsgebiet erfolgt einerseits auf der Basis vorhandener Wasseranalysen der für den Raum relevanten Heil- und Thermalquellen und andererseits auf der Grundlage der oben näher beschriebenen Wasseruntersuchungen durch die HYDROISOTOP gmbh.

Für folgende Heil- und Thermalquellen lagen Wasseranalysen vor:

- St. Rochusbrunnen (St. Rochus-Klinik, Mingolsheim)
(Unterjura, Jurensismergel, tc2 und Posidonienschiefer, tc1)
- St. Ludwigsbrunnen (St. Rochus-Klinik, Mingolsheim)
(Oberkeuper, Rhätsandstein, kos)
- Karl-Siegel-Quelle (Siegel-Klinik KG, Langenbrücken)
(Oberkeuper, Oberer Muschelkalk und Obere Dolomitformation des Mittleren Muschelkalks (ku, mo und mmmDo))
- Lambertus-Quelle (Thermal-Sole GmbH, Mingolsheim)
(Oberkeuper, Oberer Muschelkalk und Obere Dolomitformation des Mittleren Muschelkalks (ku, mo und mmmDo))

Die Analysendaten sind dem „*Hydrogeologischen Zwischengutachten zur Abgrenzung eines Heilquellenschutzgebietes für die Heilquellen in Bad Schönborn*“ (Bericht des RP Freiburg vom 25.07.2006) entnommen. Die Präzisierung der geochemischen Charakteristik der Grund- und Oberflächenwässer im geplanten Erweiterungsgebiet erfolgt somit insgesamt auf der Datengrundlage folgender Aufschlüsse:

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Bezeichnung	Entnahmedatum	Quelle bzw. Labor
Karl-Sigel-Quelle	25.09.1969	RP Freiburg
Lambertusquelle	26.03.1986	RP Freiburg
St. Ludwigsbrunnen	18.03.1993	RP Freiburg,
St. Rochusbrunnen	19.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
GWM Rettigheim 2	10.06.2015	HYDROISOTOP gmbh
GWM Rettigheim 3	10.06.2015	HYDROISOTOP gmbh
B 1/2015	05.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
B 1/2015	06.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
B 2/2015	05.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
B 2/2015	06.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
Tagebausee	06.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
E1 Quelle Erlengraben	05.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
E3 Erlengraben	06.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
E4 Erlengraben	06.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
H1 = Quelle Hengstbach	05.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
H3 Hengstbach	05.05.2015	HYDROISOTOP gmbh
H4 Hengstbach	05.05.2015	HYDROISOTOP gmbh

Tab. 5: Verzeichnis der Wasserproben einschließlich Entnahmedatum

2.5.4 Clusteranalyse und geochemische Mustererkennung

2.5.4.1 Chlorid-Cluster

Die untersuchten Wässer lassen sich auf Grund ihrer geochemischen Charakteristik sehr gut unterscheiden und charakteristischen Clustern zuordnen.

Die gemessenen Chlorid-Ionenkonzentrationen weisen vier Gruppen aus:

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Bezeichnung	Chlorid (in mg/l)
Karl-Siegel-Quelle	20159
Lambertusquelle	16770
St. Ludwigsbrunnen	75,0
St. Rochusbrunnen	69,2
E1 Quelle Erlengraben	53,7
Tagebausee	49,6
H4 Hengstbach	47,2
H3 Hengstbach	26,8
E4 Erlengraben	26,5
B 1/2015 (06.05.2015)	21,8
B 1/2015 (05.05.2015)	21,6
H1 Quelle Hengstbach	20,4
B 2/2015 (05.05.2015)	18,8
B 2/2015 (06.05.2015)	17,8
E3 Erlengraben	13,0
GWM Rettigheim 2	3,6
GWM Rettigheim 3	3,0

Tab. 6: Chlorid-Cluster

Wie bekannt und erwartet ragen die Solequellwässer der Karl-Siegel-Quelle und der Lambertus-Quelle mit ihren extremen Chlorid-Ionenkonzentrationen heraus. Die mittels PhreeqC vorgenommene Modellierung dieser Wässer (Anhang 4) zeigt ihre außergewöhnliche Zusammensetzung, die durch Natriumchlorid dominiert wird (siehe Abb. 5 und Abb. 6). Ein unverwechselbares Charakteristikum für diese Thermalwässer sind ihre hohen Lithium-Konzentrationen.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

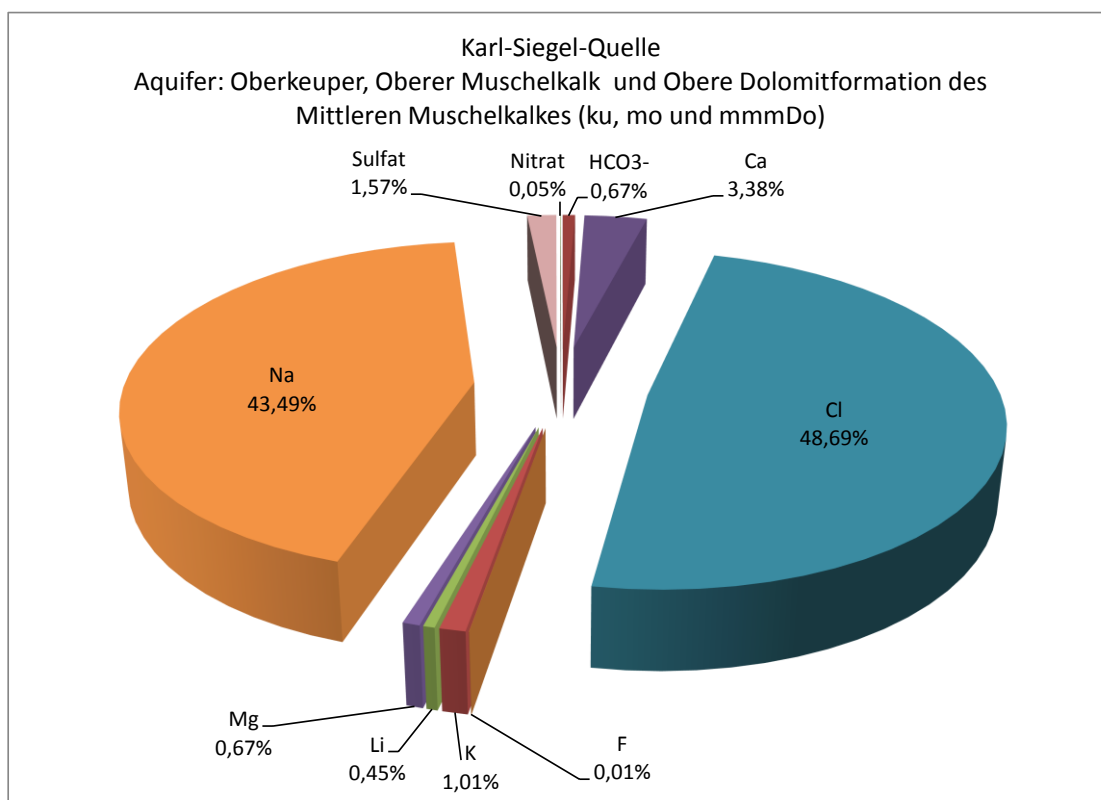


Abb. 5: Speziesverteilung (Hauptionen) im Thermalwasser der Karl-Siegel-Quelle

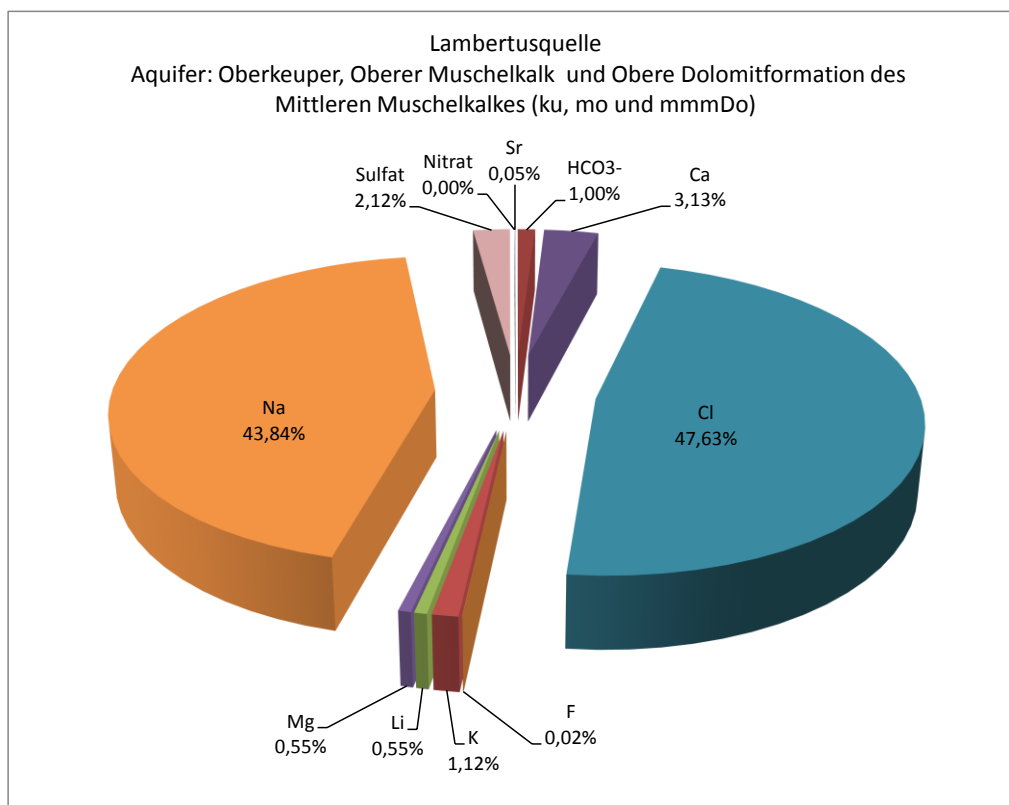


Abb. 6: Speziesverteilung (Hauptionen) im Thermalwasser der Lambertusquelle

Für diese Wässer wird auf Grund ihrer hydrogeologischen Position (Aquifer: Oberkeuper, Oberer Muschelkalk und Obere Dolomitformation des Mittleren Muschelkalks (ku, mo und mmmDo)) eine Beeinflussung durch den erweiterten Tagebaubetrieb in Rettigheim ausgeschlossen.

2.5.4.2 Mineralisations-Cluster

Die untersuchten Wässer sind sehr unterschiedlich mineralisiert. Die Anteile gelöster Substanzen im Wasser (in mmol/l) lassen hinsichtlich ihres Umfangs eine Gliederung in vier Gruppen zu (siehe Tab. 7). Die hochmineralisierten Sole-Quellwässer weisen auch hier ihre Ausnahmestellung aus. Sie können deshalb auch aus den weiteren Betrachtungen ausgeschlossen werden.

Eine relativ klare Abtrennung von den übrigen untersuchten Wässern lassen leicht erhöhte Werte für die Mineralisation der Wässer aus den neuen Grundwassermessstellen B 1/2015 und B 2/2015 zu. Das lässt darauf schließen, dass sie in ihrer genetischen Position anders zu bewerten sind.

Bezeichnung	Mineralisation in mmol/l
Karl-Sigel-Quelle	1224
Lambertusquelle	924
B 2/2015 (05.05.2015)	52,53
B 2/2015 (06.05.2015)	51,50
B 1/2015 (06.05.2015)	46,49
B 1/2015 (05.05.2015)	46,29
St. Ludwigsbrunnen	39,25
Tagebausee	38,24
St. Rochusbrunnen	33,20
Hengstbach H3	31,24
Erlengraben E3	31,24
GWM Rettigheim 2	27,94
GWM Rettigheim 3	27,04
H1 = Quelle Hengstbach	24,76
Hengstbach H4	17,98
Erlengraben E4	15,47
E1 = Quelle Erlengraben	13,43

Tab. 7: Mineralisations-Cluster

2.5.4.3 Alkalimetall-Cluster

Die Alkalimetallverteilung lässt die Bildung von vier Clustern zu. Die höchsten Konzentrationen zwischen 404 und 583 mg/l weisen die Wässer der Bohrungen B 1/2015 und B 2/2015 und des Ludwigsbrunnens auf. Ein zweites Cluster mit Konzentrationen zwischen 291 und 304 mg/l bilden die Wässer der Grundwassermessstellen Rettigheim -2 und -3 und des St. Rochusbrunnens. Deutlich setzt sich das dritte Cluster der Oberflächenwässer mit Konzentrationen zwischen 12 und 71 mg/l von den anderen ab. Eine Sonderstellung nimmt der Tagebausee ein. Er weist hohe Alkalimetallkonzentrationen mit einer auffälligen Anreicherung des Kaliums auf.

Bezeichnung	Natrium (Na+) mg/l	Kalium (K+) mg/l	Lithium (Li+) mg/l	Σ Na, K, Li mg/l
B 2/2015 (05.05.2015)	579	3,5	0,160	583
B 2/2015 (06.05.2015)	566	3,7	0,160	570
B 1/2015 (06.05.2015)	465	4,1	0,270	469
B 1/2015 (05.05.2015)	440	3,9	0,280	444
St. Ludwigsbrunnen	400	4,3	0,100	404
St. Rochusbrunnen	301	2,8	0,050	304
GWM Rettigheim 2	297	1,9	0,500	299
GWM Rettigheim 3	289	1,6	0,530	291
Quelle Hengstbach H1	69	2,2	0,050	71
Hengstbach H3	56	1,3	0,027	57
Erlengraben E3	28	1,9	0,003	30
Hengstbach H4	20	2,1	0,009	22
Erlengraben E4	15	1,6	0,007	17
E1 = Quelle Erlengraben	11	1,0	< 0,010	12
Tagebausee	344	14,4	0,400	359

Tab. 8: Verteilung der Alkalimetallionen-Konzentrationen

2.5.4.4 Hydrogenkarbonat-Cluster

Das Hydrogenkarbonat-Cluster führt zu einem mit dem Alkalimetall-Cluster vergleichbaren Muster. Es können drei Gruppen gebildet werden. Die Wässer der neuen Bohrungen B 1/2015 und B 2/2015 können deutlich von den Wässern der Heilquellen und der GWM Rettigheim -2 und -3 einerseits und andererseits von den Oberflächenwässern abgetrennt werden. Eine Ausnahmestellung nimmt der Tagebausee ein.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Bezeichnung	Hydrogenkarbonat (HCO ₃ ⁻) mg/l	Σ Na, K, Li mg/l
B 2/2015 (06.05.2015)	1120	583
B 2/2015 (05.05.2015)	1110	570
B 1/2015 (05.05.2015)	1010	469
B 1/2015 (06.05.2015)	976	444
St. Ludwigsbrunnen	891	404
St. Rochusbrunnen	769	304
GWM Rettigheim 2	677	299
GWM Rettigheim 3	653	291
H1 = Quelle Hengstbach	505	71
Hengstbach H3	492	57
Erlengraben E3	444	30
Hengstbach H4	427	22
Erlengraben E4	409	17
E1 = Quelle Erlengraben	332	12
Tagebausee	344	359

Tab. 9: Hydrogenkarbonat-Cluster

2.5.4.5 Erdalkalimetall-Cluster

Die Charakterisierung der untersuchten Wässer auf der Grundlage der Erdalkalikonzentrationen führt zu einer klaren Gliederung in vier Cluster. In der ersten Gruppe befinden sich alle Oberflächenwässer, die in der Summe Kalzium, Magnesium und Strontium Konzentrationen zwischen 156 und 381 mg/l aufweisen. Die zweite Gruppe wird gebildet von den Wässern der B 1/2015 und des St. Rochusbrunnens. Für diese Gruppe sind zusätzlich die etwas erhöhten Strontium-Konzentrationen charakteristisch. Die dritte Gruppe mit Erdalkali-Summenkonzentrationen zwischen 10 und 17 mg/l vereint die Wässer der B 2/2015 und des Ludwigbrunnens.

Die vierte Gruppe mit extrem niedrigen Erdalkali-Konzentrationen zwischen 1,8 und 1,9 mg/l vereint die Wässer der Grundwassermessstellen Rettigheim -2 und -3.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Bezeichnung	Calcium (Ca ²⁺) mg/l	Magnesium (Mg ²⁺) mg/l	Strontium (Sr ²⁺) mg/l	Σ Ca, Mg, Sr mg/l
Hengstbach H3	309	70	1,53	381
H1 = Quelle Hengstbach	204	45	1,00	250
Erlengraben E3	158	53	0,48	211
Hengstbach H4	185	19	0,41	205
Tagebausee	106	60	4,40	171
Erlengraben E4	145	22	0,30	168
E1 = Quelle Erlengraben	142	14	0,17	156
B 1/2015 (05.05.2015)	40	37	4,20	81
B 1/2015 (06.05.2015)	14	39	2,90	56
St. Rochusbrunnen	17,8	14,2	4,00	36
B 2/2015 (05.05.2015)	12,9	3,7	0,63	17
St. Ludwigsbrunnen	8,8	6,8	1,40	17
B 2/2015 (06.05.2015)	6,6	3,2	0,61	10
GWM Rettigheim 3	1,3	1	< 0,1	1,9
GWM Rettigheim 2	1,2	1	< 0,1	1,8

Tab. 10: Verteilung der Erdalkalimetallionen-Konzentrationen

2.5.4.6 Redox-Sulfidschwefel-Cluster

Das Redox-Sulfidschwefel-Cluster ist ein typischer Anzeiger für das geochemische Milieu. Im vorliegenden Fall treten zwei Muster auf. Die Oberflächenwässer und die der neuen Bohrungen B 1/2015 und B 2/2015 weisen hohe Redoxpotentiale und konsequenterweise keinen Sulfidschwefel aus. Die Wässer des St. Rochusbrunnens und des Ludwigsbrunnens (Schwefelquellen) einschließlich die der Grundwassermessstellen Rettigheim -2 und -3 weisen Redoxpotentiale im reduzierenden Bereich aus, folglich werden auch höhere Sulfidschwefel-Konzentrationen gemessen.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Bezeichnung	Redoxpotential mV	Sulfid ges. (HS-, S2-) mg/l
Erlengraben E3	n.b.	n.b.
Hengstbach H4	480	n.b.
E1 = Quelle Erlengraben	463	< 0,01
Erlengraben E4	434	n.b.
Tagebausee	408	< 0,01
H1 = Quelle Hengstbach	372	< 0,01
Hengstbach H3	323	n.b.
B 1/2015 (06.05.2015)	321	< 0,01
B 1/2015 (05.05.2015)	306	< 0,01
B 2/2015 (05.05.2015)	172	< 0,01
B 2/2015 (06.05.2015)	75	< 0,01
St. Rochusbrunnen	-128	40,9
GWM Rettigheim 3	-136	3,6
GWM Rettigheim 2	-186	7,9
St. Ludwigsbrunnen	-390	17,9

Tab. 11: Redox-Sulfidschwefel-Cluster

2.5.4.7 Sulfatschwefel-Cluster

Das Sulfatschwefel-Cluster vereint einerseits die vom Milieu abhängigen niedrigen Konzentrationen der Gruppe der Wässer der Heilquellen und GWM Rettigheim -2 und -3 und andererseits die der erhöhten Konzentrationen in den Oberflächenwässern einschließlich B 1/2015 und B 2/2015. Die Wässer des Tagebausees untermauern mit der Ausnahmesituation relativ hoher Sulfat-Konzentrationen, dass die Verdunstung von Wasser zu Anreicherungsprozessen geführt hat.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Bezeichnung	Sulfat (SO ₄ ²⁻) in mg/l
Tagebausee	884
Hengstbach H3	728
H1 = Quelle Hengstbach	378
B 1/2015 (06.05.2015)	366
B 2/2015 (05.05.2015)	358
B 1/2015 (05.05.2015)	330
B 2/2015 (06.05.2015)	310
Erlengraben E3	288
Hengstbach H4	164
Erlengraben E4	118
GWM Rettigheim 3	84
GWM Rettigheim 2	71
St. Ludwigsbrunnen	64
E1 = Quelle Erlengraben	57
St. Rochusbrunnen	7

Tab. 12: Sulfatschwefel-Cluster**2.5.4.8 pH-Wert-Cluster**

Der Säuregrad der Wässer überstreicht pH-Werte von 7,2 (nahezu neutral) bis 9,21 (schwach basisch). Die Analyse der pH-Werte zeigt, dass sich die Wässer der Grundwassermessstellen Rettigheim -2 und -3 (Aquifer: Rhätsandstein) als die basischsten von allen anderen Wässern unterscheiden. Bemerkenswert ist auch die Feststellung, dass sich die Wässer der neuen Messstellen B 1/2015 und B 2/2015 bereits im pH-Wert deutlich unterscheiden lassen.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Bezeichnung	pH-Wert (tgem) vor Ort
GWM Rettigheim 2	9,21
GWM Rettigheim 3	9,18
B 2/2015 (06.05.2015)	8,41
B 2/2015 (05.05.2015)	8,23
Tagebausee	8,12
Erlengraben E3	8,00
Erlengraben E4	7,90
Hengstbach H4	7,76
St. Rochusbrunnen	7,73
H1 = Quelle Hengstbach	7,66
St. Ludwigsbrunnen	7,60
Hengstbach H3	7,52
E1 = Quelle Erlengraben	7,44
B 1/2015 (06.05.2015)	7,27
B 1/2015 (05.05.2015)	7,27

Tab. 13: pH-Wert-Cluster

2.5.4.9 Fluorid-Cluster

Das Fluorid-Cluster weist auf zwei Gruppen hin. Die Fluorid-Ionenkonzentrationen in den Wässern von B 1/2015 und B 2/2015 weisen darauf hin, dass genetische Unterschiede sehr wahrscheinlich sind.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Bezeichnung	Fluorid (F-) in mg/l
B 2/2015 (06.05.2015)	2,20
B 2/2015 (05.05.2015)	2,00
St. Ludwigsbrunnen	1,40
GWM Rettigheim 2	0,95
St. Rochusbrunnen	0,77
Tagebausee	0,60
B 1/2015 (05.05.2015)	0,60
GWM Rettigheim 3	0,60
B 1/2015 (06.05.2015)	0,54
H1 = Quelle Hengstbach	0,35
E1 = Quelle Erlengraben	0,16
Hengstbach H4	n.b.
Hengstbach H3	n.b.
Erlengraben E4	n.b.
Erlengraben E3	n.b.

Tab. 14: Fluorid-Cluster

2.5.4.10 Arsen- und Schwermetalle-Cluster

Soweit die Arsen- und Schwermetall-Konzentrationen gemessen wurden, konnten sie auch auf Musterbildung untersucht werden. Die Konzentrationen für Arsen, Blei, Cadmium, Kupfer und Quecksilber liegen in den meisten Fällen im Bereich der Bestimmungsgrenzen. Die Zink-Konzentrationen in den Wässern der GWM Rettigheim -2 und -3 sind leicht erhöht. Diese Erhöhung ist eine Folge der hohen pH-Werte dieser Wässer, da im basischen Bereich die Zinklöslichkeit wieder ansteigt. Insgesamt sind die Arsen- und Schwermetall-Konzentrationen als „unauffällig“ zu bewerten.

Bezeichnung	As mg/l	Pb mg/l	Cd mg/l	Cu mg/l	Hg mg/l	Zn mg/l
GWM Rettigheim 2	< 0,001	< 0,001	< 0,0002	< 0,001	< 0,0002	0,068
GWM Rettigheim 3	< 0,001	< 0,001	< 0,0002	< 0,001	< 0,0002	0,021
B 1/2015 (06.05.2015)	< 0,001	< 0,001	< 0,0002	< 0,001	< 0,0002	0,015
B 2/2015 (06.05.2015)	0,004	< 0,001	< 0,0002	< 0,001	0,0003	0,015
B 2/2015 (05.05.2015)	0,005	< 0,001	< 0,0002	< 0,001	0,0003	0,011
B 1/2015 (05.05.2015)	< 0,001	< 0,001	< 0,0002	< 0,001	< 0,0002	0,005
E1 = Quelle Erlengraben	< 0,001	< 0,001	< 0,0002	< 0,001	< 0,0002	0,003
H1 = Quelle Hengstbach	< 0,001	< 0,001	< 0,0002	< 0,001	< 0,0002	0,003
Tagebausee	< 0,001	< 0,001	< 0,0002	0,001	< 0,0002	0,002
St. Rochusbrunnen	0,002	< 0,001	< 0,0002	< 0,001	< 0,0002	0,002

Tab. 15: Arsen- und Schwermetall-Cluster

2.5.5 Geochemische Charakteristik der untersuchten Wässer

Die Cluster-Analyse hat zu klaren Gruppierungen der Wässer geführt:

- Gruppe der Oberflächenwässer (mit Sonderstellung des Tagebausees).
- Gruppe der Wässer der Obtususton-Formation, repräsentiert durch die Wässer der GWM B 2/2015 (mit der Sonderstellung der durch Oberflächenwässer beeinflussten Wässer im Bereich von Auflockerungs- bzw. Störungszonen in der Obtususton-Formation, repräsentiert durch GWM B 1/2015).
- Gruppe der Sulfidschwefel-Wässer (Ludwigsbrunnen, St. Rochusbrunnen, GWM Rettigheim -2 und GWM Rettigheim -3).

Die weitere Interpretation der geochemischen Charakteristik innerhalb dieser Gruppen erfolgt auf der Basis der Untersuchung der Speziesverteilung der Hauptkomponenten und der Phreeqc-Modellierung, deren Protokolle als Anhang 4 beiliegen.

2.5.5.1 Gruppe der Sulfidschwefel-Wässer

2.5.5.2 Untergruppe Schwefelquellen

Die Verteilung der Spezies in den untersuchten Wässern lässt eine weitere Unterteilung und Charakterisierung zu. Innerhalb der Gruppe der Sulfidschwefel-Wässer lassen sich z.B. die Wässer des St. Rochusbrunnens und des Ludwigbrunnens (siehe Abb. 7 und Abb. 8) als chloridreiche Natriumhydrogenkarbonat-Wässer charakterisieren. Ihre Speziesverteilung ist nahezu übereinstimmend, obwohl der St. Rochusbrunnen Wässer aus dem stratigraphisch höher liegenden Jurensismergel und Posidonienschiefer fördert, während der Ludwigbrunnen aus dem stratigraphisch viel tiefer liegenden Rhät-Sandstein fördert.

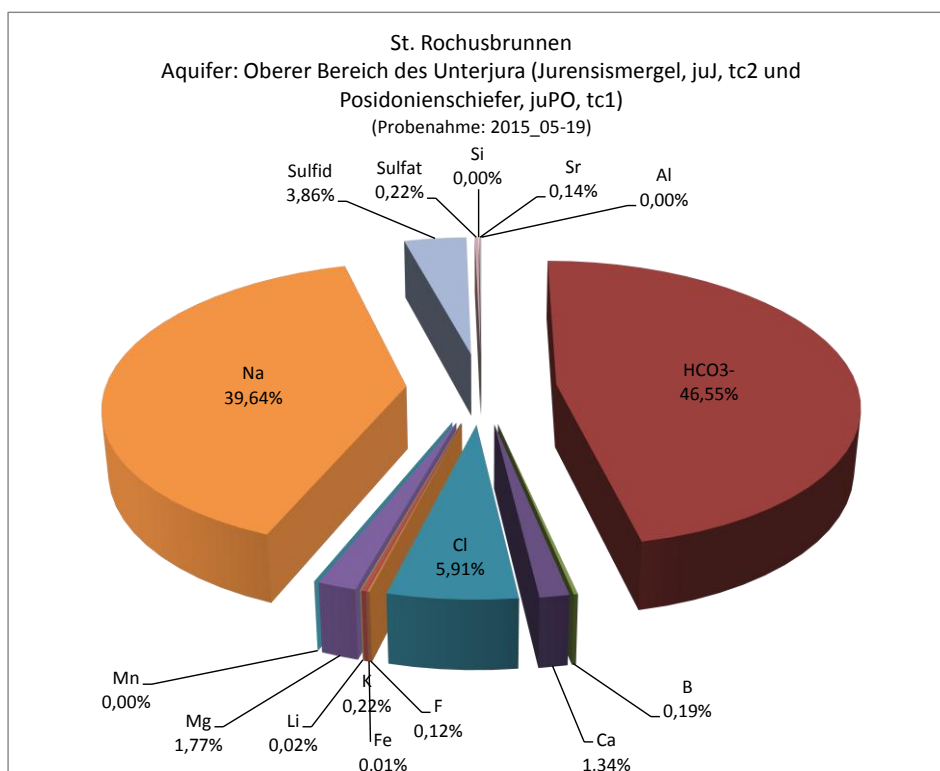


Abb. 7: Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser des Rochusbrunnens

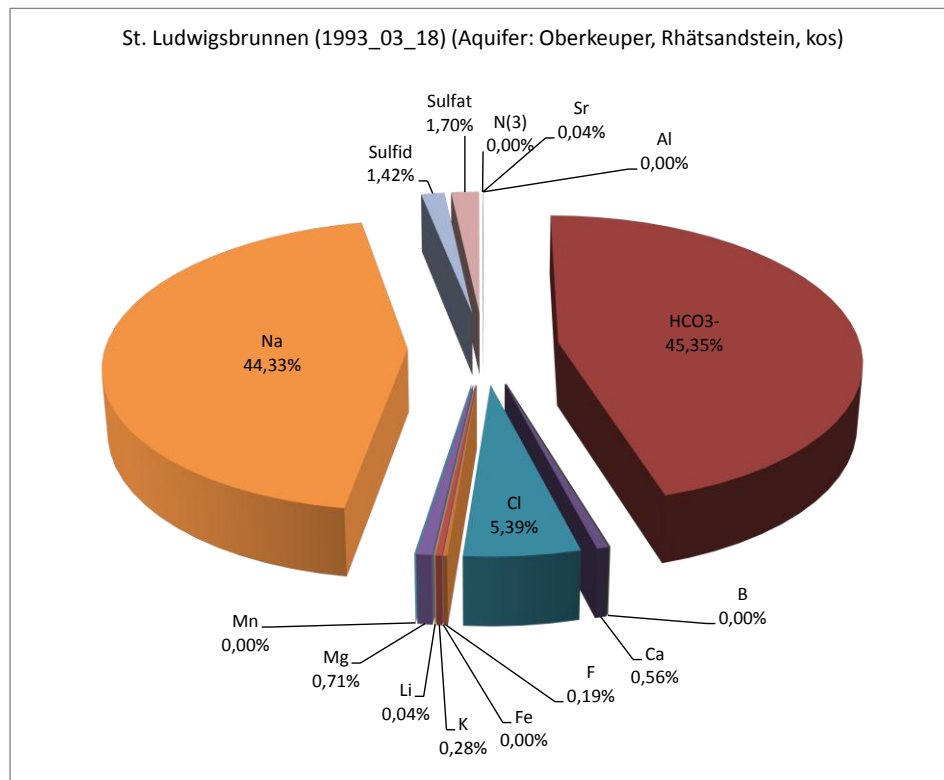


Abb. 8: Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser des Ludwigbrunnens

2.5.5.2.1 Untergruppe Wässer der GWM Rettigheim -2 und -3

Die Grundwassermessstellen Rettigheim -2 und -3 sind im Rhät-Sandstein verfiltriert. Ihre Speziesverteilung ist nahezu identisch (siehe Abb. 9 und Abb. 10). Die Verteilung zeigt zugleich die nahe Verwandtschaft zu den Wässern der Schwefel-Quellen. Der Unterschied liegt im niedrigeren Anteil an Chlorid.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

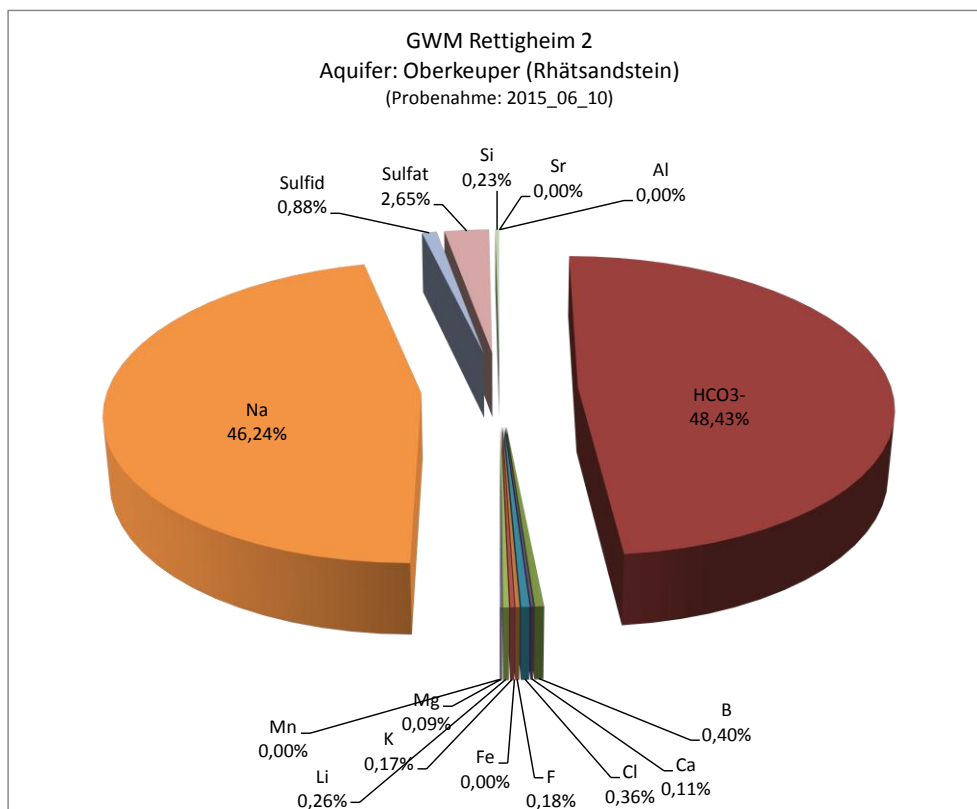


Abb. 9: Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser der GWM Rettigheim -2

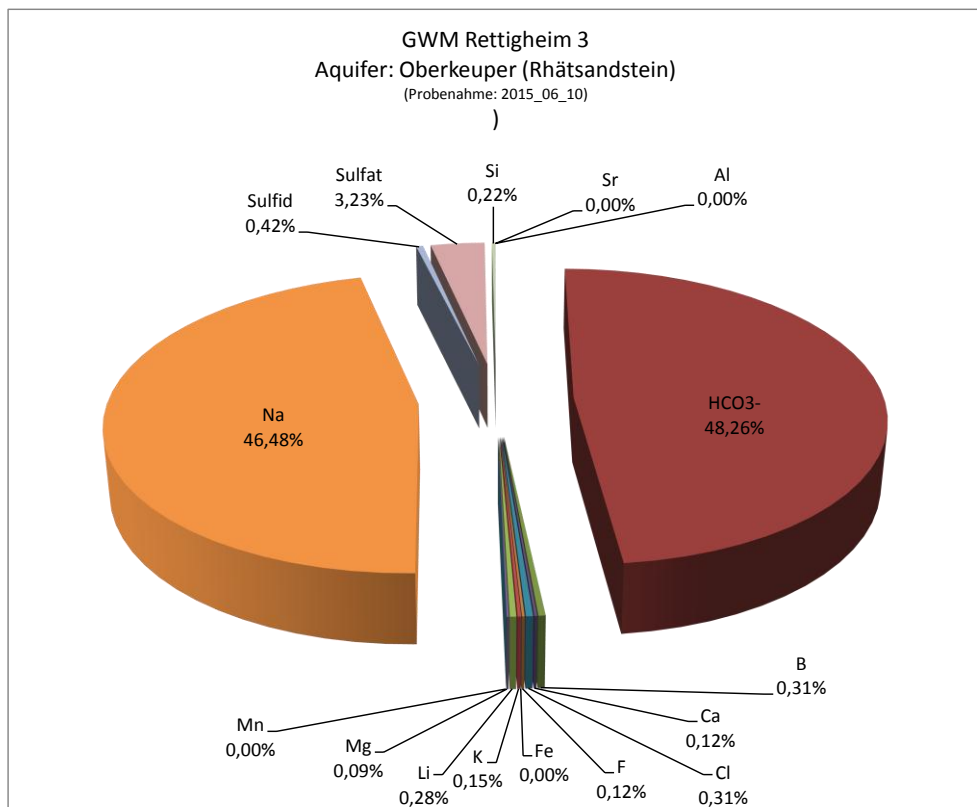


Abb. 10: Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser der GWM Rettigheim -3

2.5.5.3 Gruppe der Wässer der Obtususton-Formation

Die Wässer der neuen Aufschlüsse B 1/2015 und B 2/2015 lassen sich hinsichtlich ihrer geochemischen Charakteristik deutlich von allen anderen hier untersuchten Wässern abtrennen. Die detaillierte Untersuchung der B 1/2015- und B 2/2015-Wässer vor und nach dem Pumpversuch (siehe oben) erbringt darüber hinaus eine klare geochemische Unterscheidung der Wässer aus B 1/2015 im Vergleich zu B 2/2015.

Um die eigenständige Stellung dieser wenig ergiebigen Grundwässer im Vergleich zu den übrigen untersuchten Grund- und Oberflächenwässern aufzuzeigen, wird hier zunächst auf die Darstellung der Mol-Konzentrationen des Natriums versus Hydrogenkarbonat zurückgegriffen. Aus der Abb. 11 wird deutlich, dass die Wässer der GWM B 2/2015, gefolgt von denen der GWM B 1/2015, die höchsten Natrium- und Hydrogenkarbonat-Konzentrationen aufweisen. Das zeigt ihre Eigenstellung unter den untersuchten Wässern und spricht für eine lange Verweilzeit dieser Wässer in den Sedimenten der Obtususton-Formation. Die etwas niedrigeren Konzentrationen in GWM B 1/2015 sind Folge der Vermischung mit oberflächennahen Wässern im Bereich der Störungszone.

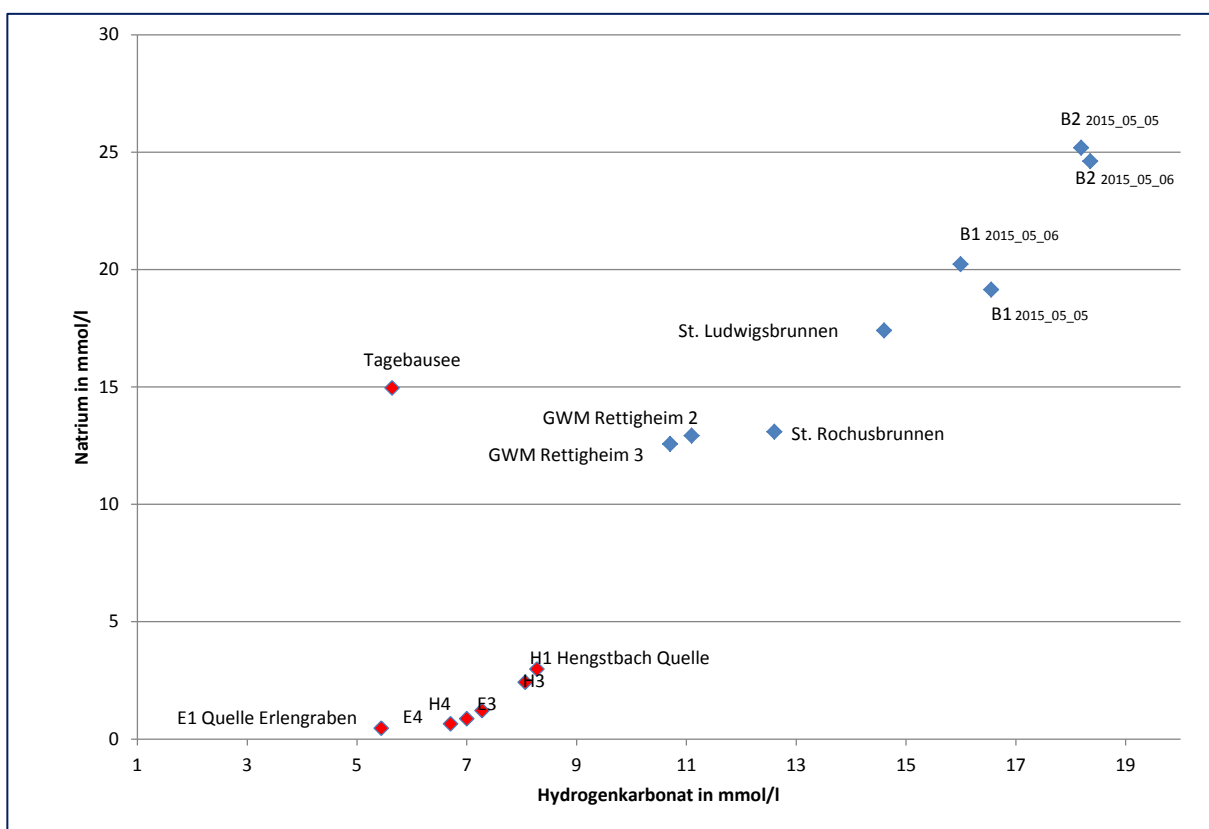


Abb. 11: Natrium- versus Hydrogenkarbonat-Charakteristik der untersuchten Grund- (blaue Signatur) und Oberflächenwässer (rote Signatur)

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Die hohe Aufhärtung der Wässer der Obtususton-Formation zeigt sich auch in der folgenden Darstellung (Abb. 12) der Relationen Natrium- versus Sulfat-Ionen-Konzentration.

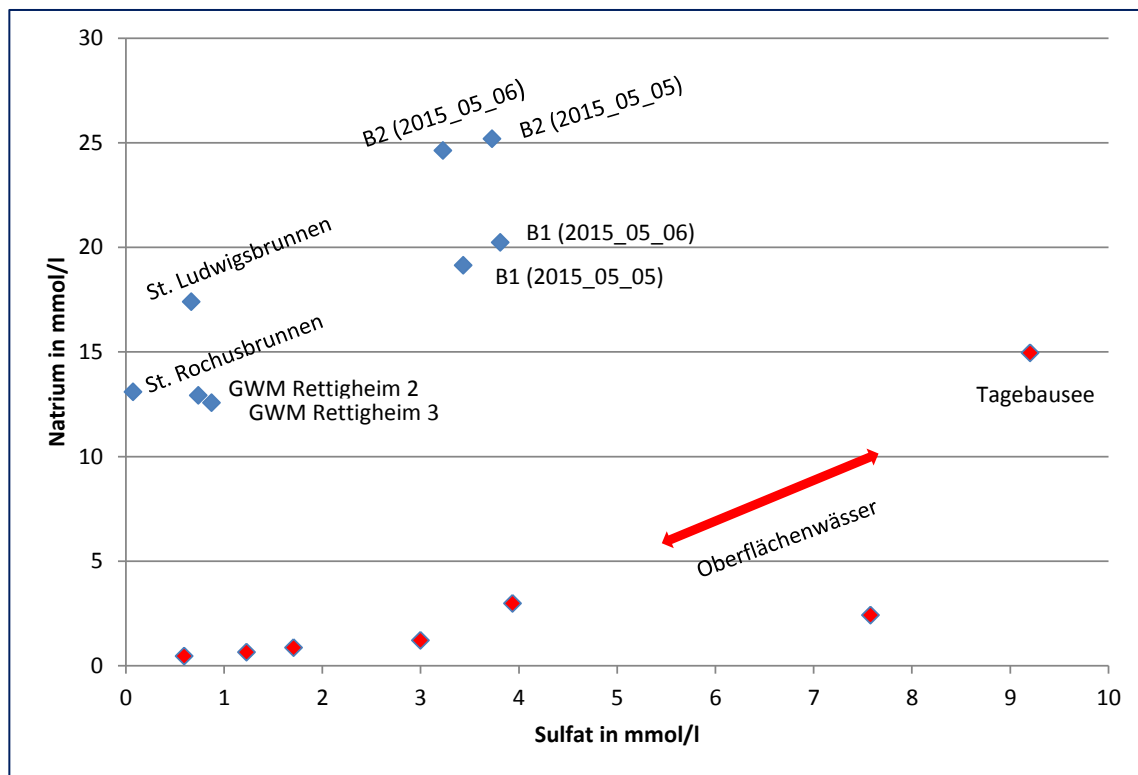


Abb. 12: Natrium- versus Sulfat-Ionen-Konzentration (in mmol/l) der untersuchten Grund- und Oberflächenwässer

Auch die graphische Darstellung der Sauerstoff-Isotopen-Verhältnisse ($\delta^{18}\text{O}$) versus Molverhältnis Na/HCO_3^- weist auf die Eigenständigkeit der Wässer der Obtususton-Formation in GWM 2/2015 und auf die Beeinflussung durch oberflächennahe Wässer in GWM 1/2015 hin (Abb. 13).

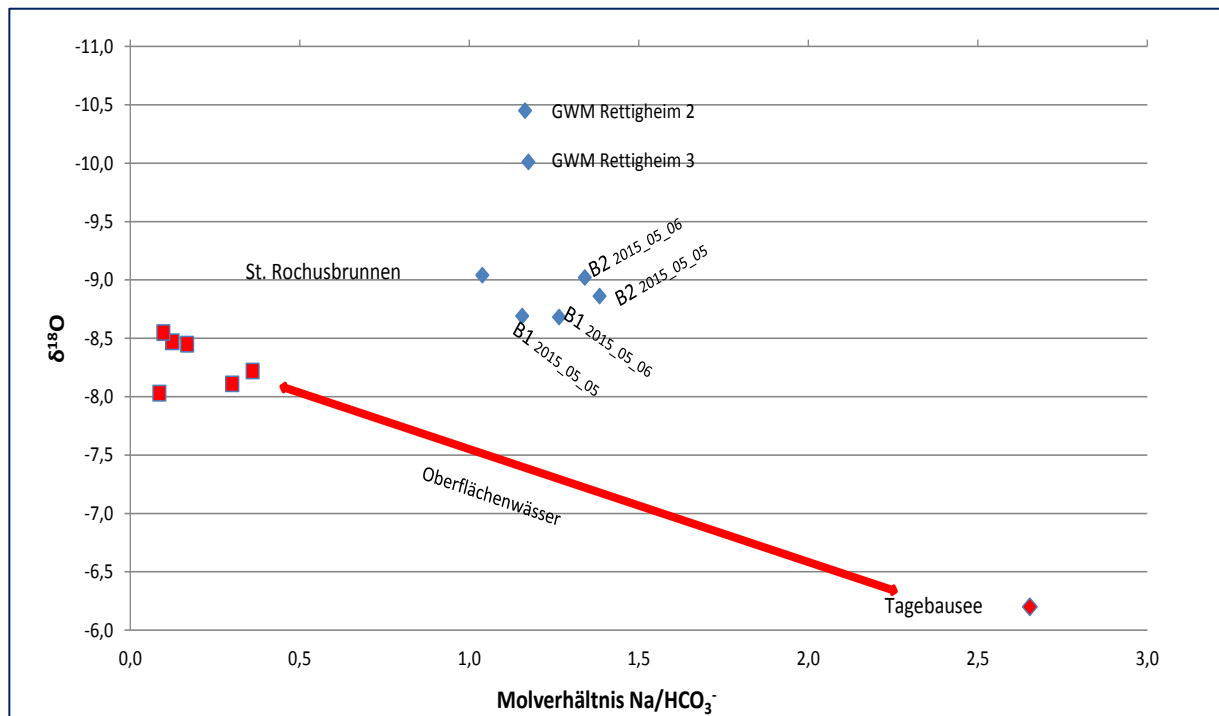


Abb. 13: Sauerstoff-Isotopen-Verhältnis versus Molquotient Na/HCO₃⁻ der untersuchten Grund- und Oberflächenwässer

Neben der Eigenständigkeit der Wässer der Obtususton-Formation gegenüber allen anderen untersuchten Grundwässern weisen die Wässer der GWM B 1/2015 und B 2/2015 feine geochemische Unterschiede auf. Das zeigt sich auch in der Speziesverteilung.

Die Speziesverteilung der Hauptkomponenten (siehe: Abb. 14 bis Abb. 17) zeigt einerseits die hohe Ähnlichkeit beider Wassertypen, andererseits wird im Wasser der B 2/2015 der niedrige Anteil der Erdalkalien deutlich.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

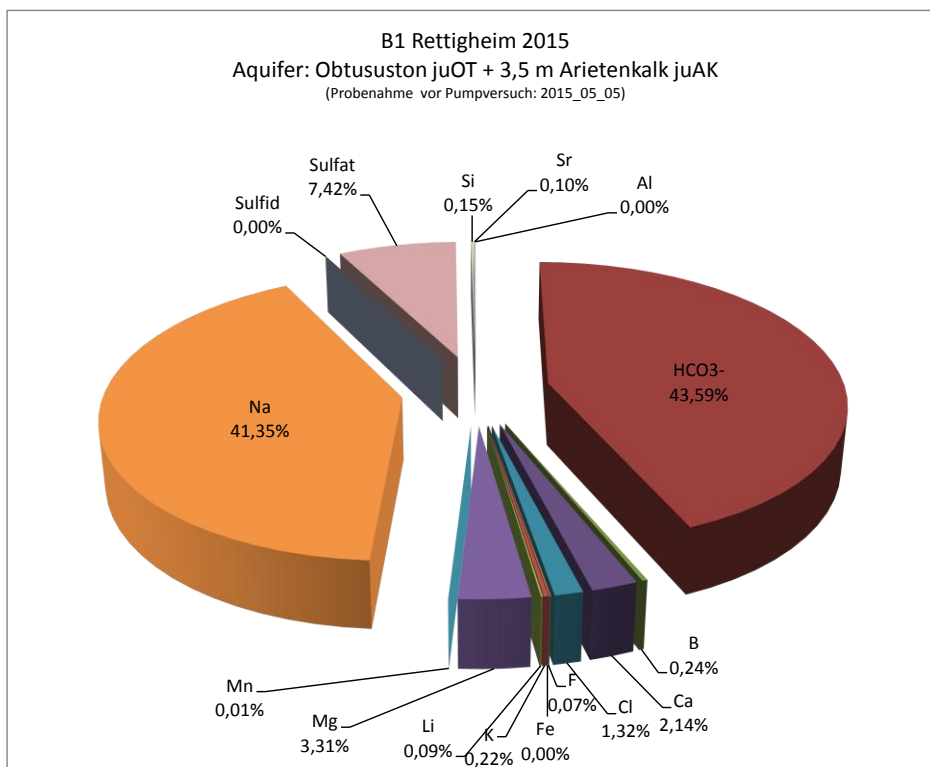


Abb.: 14 Speziesverteilung im Wasser der GWM B 1/2015 vor Pumpversuch

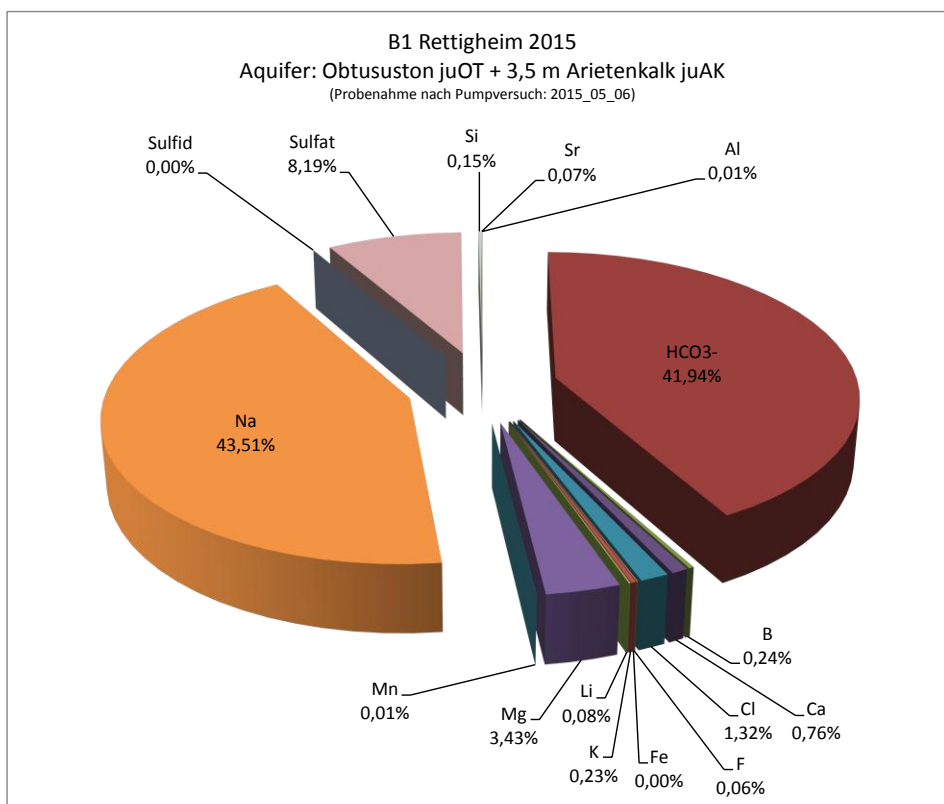


Abb. 15: Speziesverteilung im Wasser der GWM B 1/2015 nach Pumpversuch

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

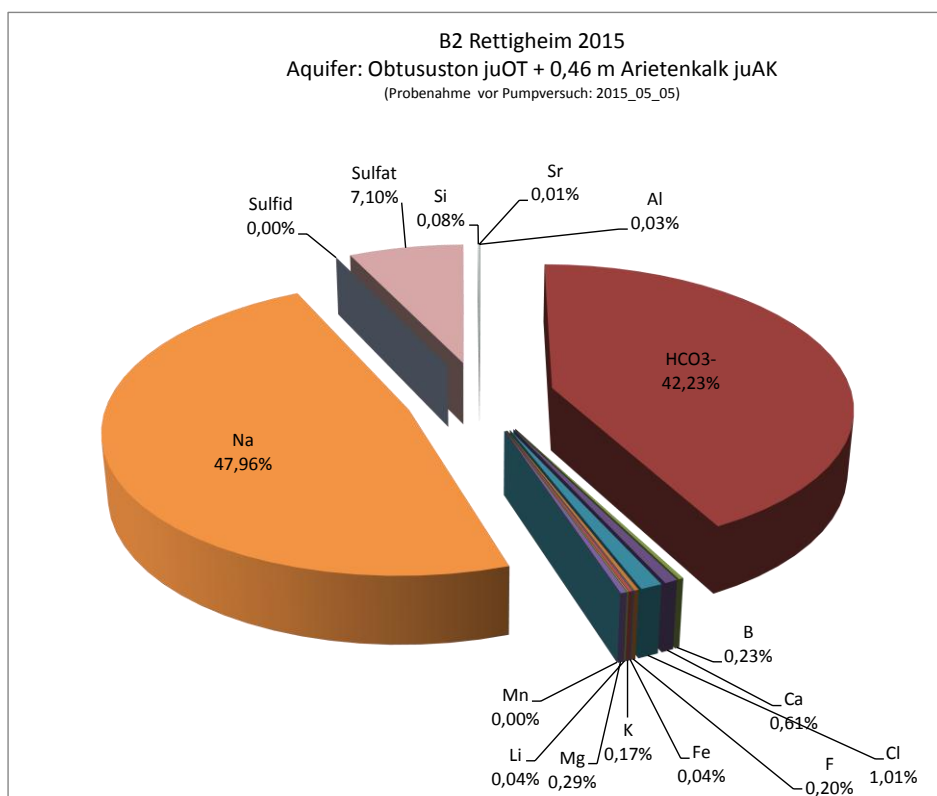


Abb. 16: Speziesverteilung im Wasser der GWM B 2/2015 vor Pumpversuch

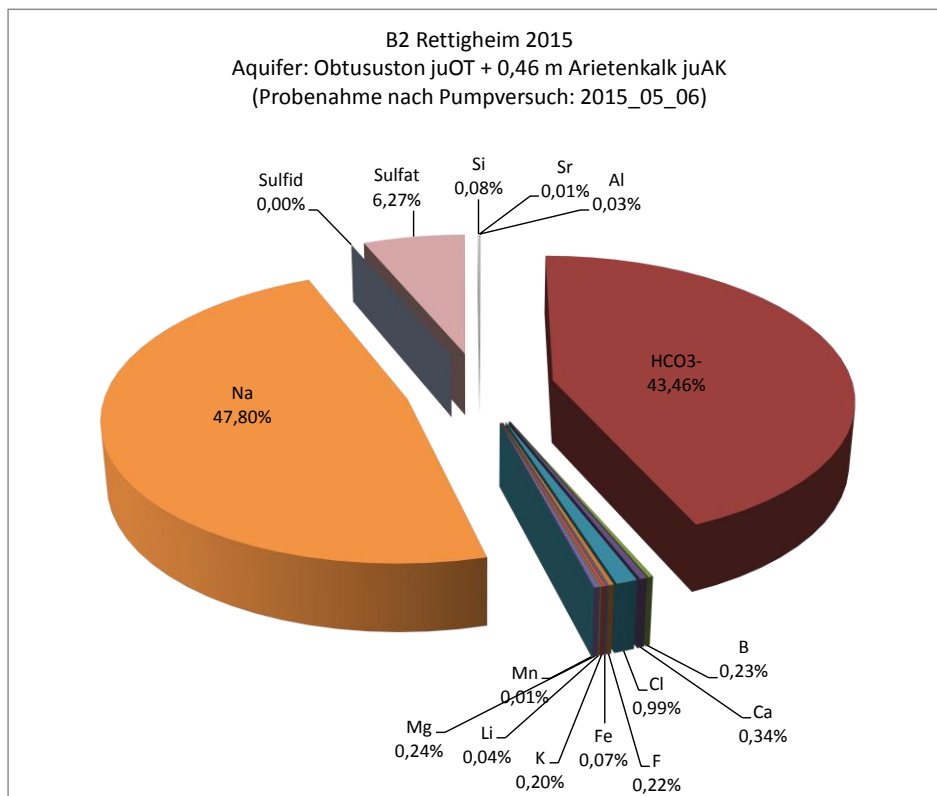


Abb. 17: Speziesverteilung im Wasser der GWM B 2/2015 nach Pumpversuch

In Tab. 16 sind die Parameter zusammengestellt, die als „Marker“ die charakteristischen Unterschiede in der geochemischen Zusammensetzung der beiden Wässer anzeigen.

Bezeichnung	Einheit	B 1/2015 (05.05.2015)	B 1/2015 (06.05.2015)	B 2/2015 (05.05.2015)	B 2/2015 (06.05.2015)
Vor / nach Pumpversuch		vor PV	nach PV	vor PV	nach PV
pH Wert Labor		7,41	7,34	8,38	8,43
Calcium	mg/l	39,7	14,1	12,9	6,6
Magnesium	mg/l	37,2	38,8	3,7	3,2
Strontium	mg/l	4,2	2,9	0,63	0,61
Fluorid	mg/l	0,6	0,54	2,0	2,2
Aluminium	mg/l	0,037	0,075	0,460	0,440
Tritium	TU	6,1 ± 0,7	4,9 ± 0,7	1,8 ± 0,6	1,1 ± 0,8

Tab. 16: Parameter für charakteristische Unterschiede der Wässer in B 1/2015 und B 2/2015

Die Wässer in B 1/2015 weisen gegenüber denen in B 2/2015 niedrigere pH-Werte, höhere Calcium-, Magnesium- und Strontium-Konzentrationen und niedrigere Fluor- und Aluminium-Konzentrationen auf.

Geochemisch sprechen diese Verhältnisse dafür, dass die Kalzium-, Magnesium- und Strontium- reicheren Wässer der B 1/2015 genetisch mit von oben zugeführten jüngeren Wässern (erhöhte Tritium-Werte) verbunden sind.

Die Kalzium-, Magnesium- und Strontium- ärmeren, dafür an Fluor und Aluminium wesentlich reicheren Wässer der B 2/2015, sprechen eher dafür, dass sie genetisch mit tonigen Gesteinen verbunden sind.

Die Filterstrecken beider Messstellen erfassen zwar in B 1/2015 3,5 m und in der B 2/2015 0,46 m der Langenbrücken-Formation (Filterstrecken je 10,0 – 18,0 m), so dass die Wässer im Wesentlichen die Obtususton-Formation repräsentieren.

Dennoch weichen die Wässer der B 1/2015 in ihrer geochemischen Zusammensetzung von derjenigen der B 2/2015 ab. Die Messstelle B 1/2015 weist mit $T=1 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ eine höhere Transmissivität als B 2/2015 mit $T=3 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ auf. Die höhere Transmissivität in Messstelle B 1/2015 weist auf eine Auflockerungszone hin, die an eine Störungszone gebunden ist. Damit sind Voraussetzungen gegeben, dass in B 1/2015 ein höherer Einfluss von Wässern der Geländeoberfläche vorliegt. Nach der Fluid-Logging-Messung liegen die Grundwasserzuflüsse in der Messstelle B 1/2015 zu etwa gleichen Anteilen mit 54 % in ca. 11,5 (124,1 m ü. NN) und mit 42 % in ca. 12,5 m Tiefe (123,1 m ü. NN). Ein gerade noch erkennbarer geringer Zufluss mit max. 4% liegt bei 16,5 m (119,1 m ü. NN). Damit liegen die Hauptzuflüsse oberhalb der geplanten Abbausohle von 120 m ü. NN. Unterhalb der Abbausohle bis an die Unterkante der Filterkiesschüttung bei 115,6 m ü. NN sind keine Zuflüsse festzustellen.

2.5.5.4 Gruppe der Oberflächenwässer

Die Oberflächenwässer unterscheiden sich von den tieferen Wässern grundsätzlich hinsichtlich ihrer Erdalkalidominanz. Es handelt sich um Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Wässer mit einem erhöhten Sulfat-Anteil. Innerhalb dieser Gruppe lassen sich drei geochemisch unterschiedliche Untergruppen abtrennen.

Bezeichnung	Calcium mg/l	Magnesium mg/l	Strontium mg/l
Hengstbach H3	309	70	1,53
H1 = Quelle Hengstbach	204	45	1,00
Hengstbach H4	185	19	0,41
Erlengraben E3	158	53	0,48
Erlengraben E4	145	22	0,30
E1 = Quelle Erlengraben	142	14	0,17
Tagebausee	106	60	4,40

Tab. 17: Erdalkalien als Charakteristikum der Oberflächenwässer

2.5.5.4.1 Untergruppe Wässer des Hengstbaches

Die Untergruppe des Hengstbaches ist durch höhere Kalzium- und z.T. höhere Magnesium- und durch höhere Strontium-Konzentrationen im Vergleich zum Erlengraben charakterisiert. Das spricht dafür, dass die Wässer des Hengstbaches in einer geochemischen Landschaft durch Karbonatgesteine geprägt werden. Besonders die hohen Strontium-Konzentrationen lassen einen Zusammenhang zu der Langenbrücken-Formation vermuten. Der erhöhte Anteil an Sulfat-Ionen in der Probe H3 Hengstbach bestätigt den Einfluss der Einleitung von Tagebauwässern in diesem Bereich.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

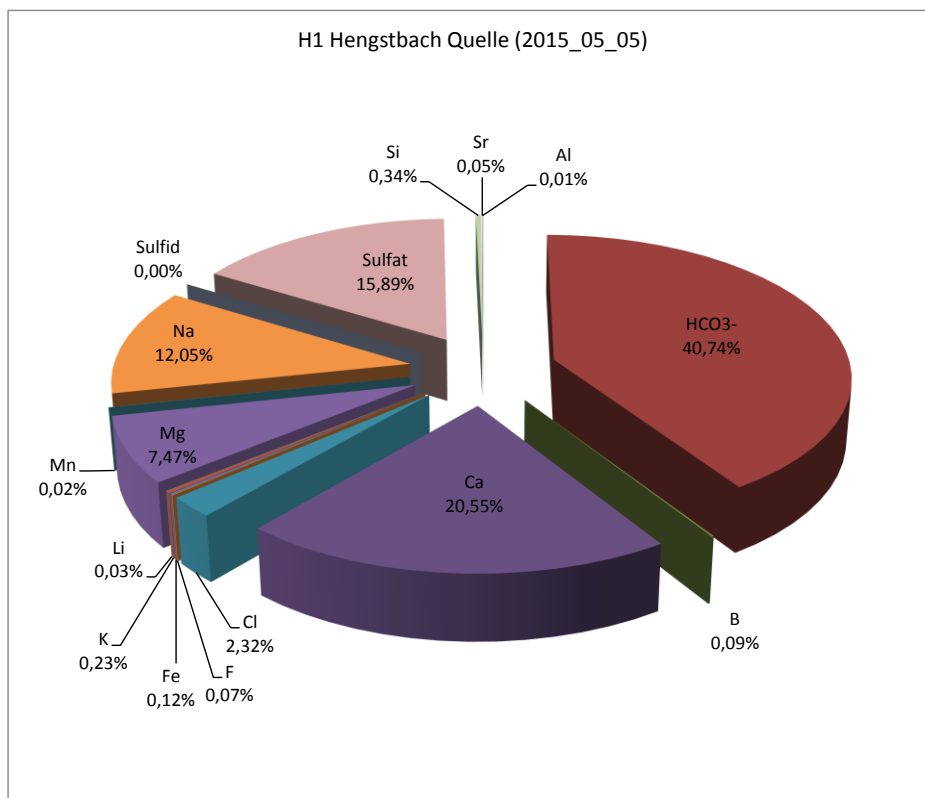


Abb. 18: Speziesverteilung im Wasser der Hengstbach-Quelle

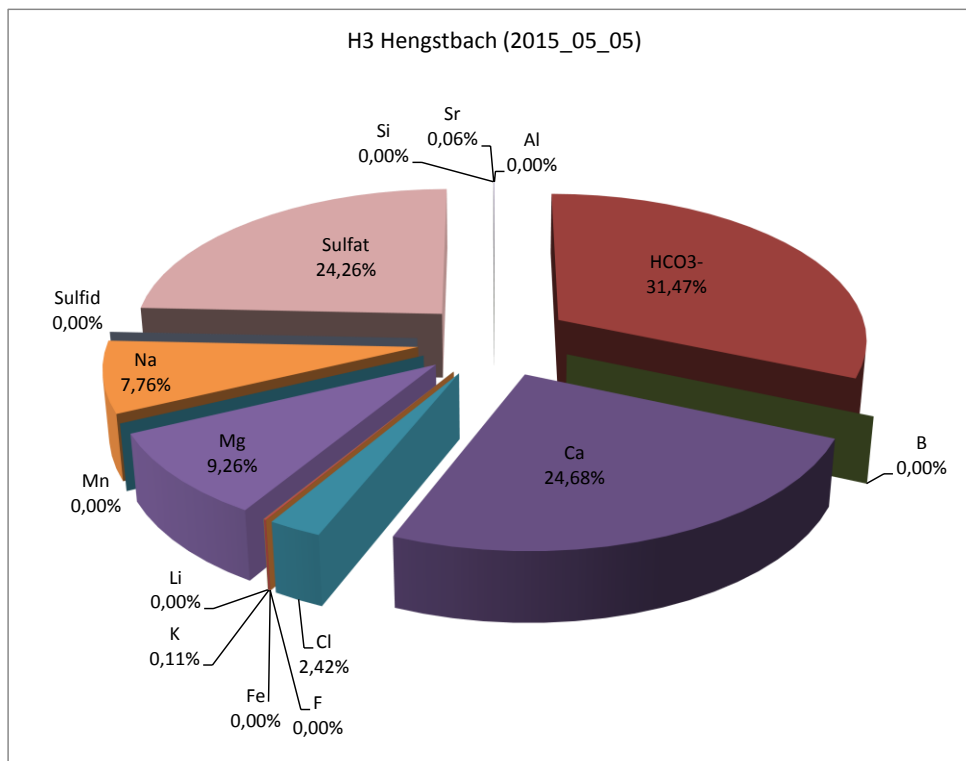


Abb. 19: Speziesverteilung im Wasser Hengstbach H3

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

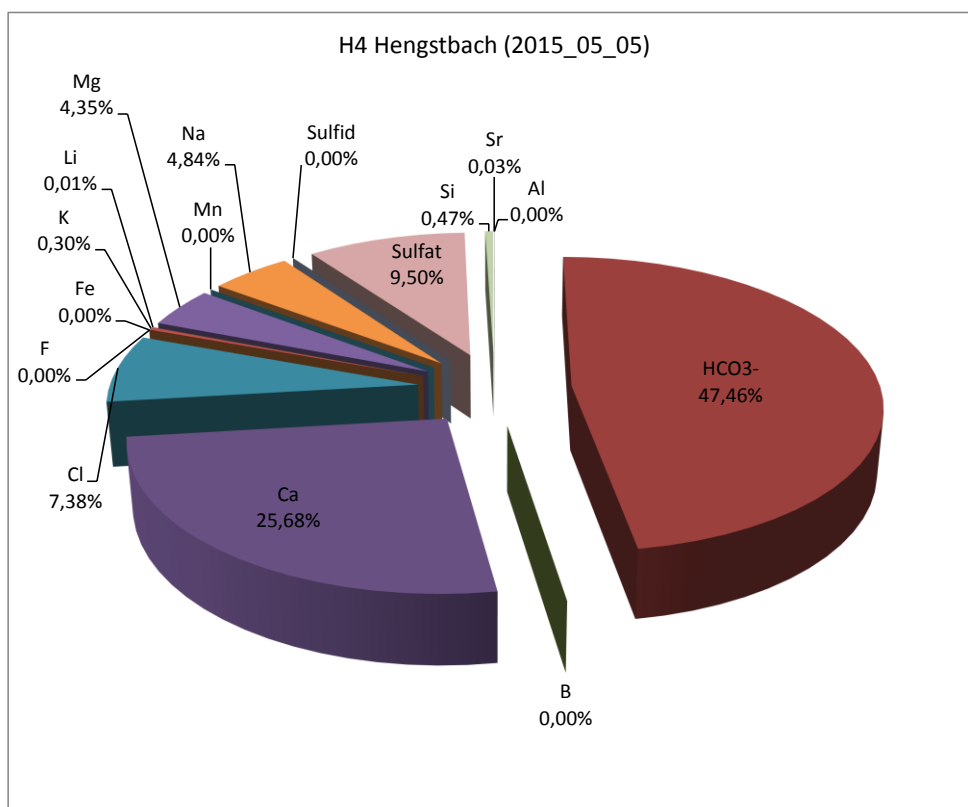


Abb. 20: Speziesverteilung im Wasser Hengstbach H4

2.5.5.4.2 Untergruppe Wässer des Erlengrabens

Die Wässer des Erlengrabens weisen auf Grund ihres geochemischen Musters darauf hin, dass sie durch eine andere geochemische Umgebung als die des Hengstbaches geprägt werden. Es muss sich dabei auch um eine karbonatische Umgebung handeln. Möglich ist eine geochemische Prägung durch Numismatismergel.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

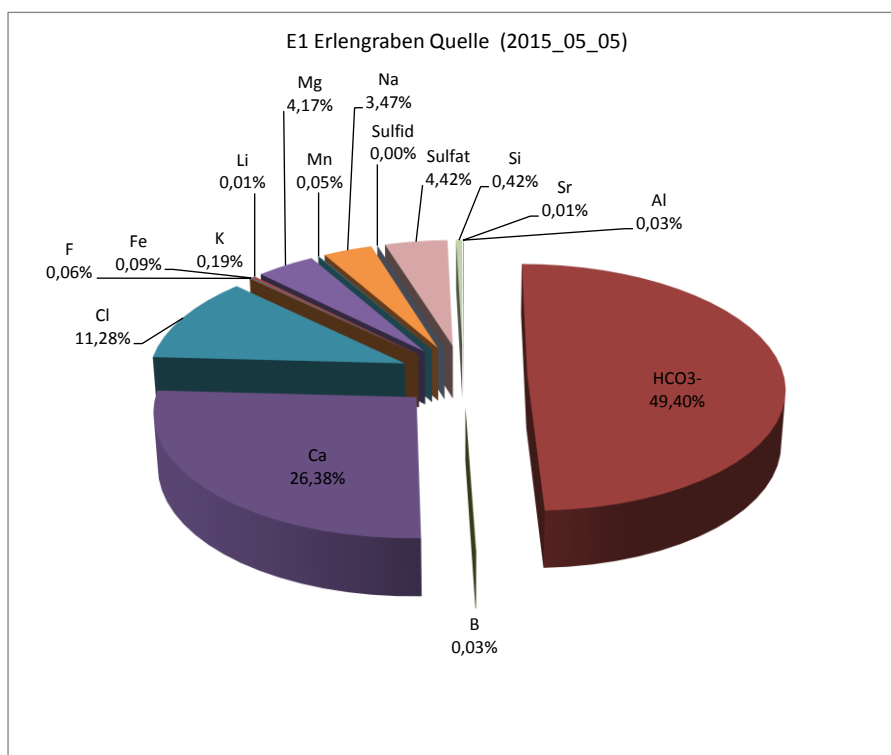


Abb. 21: Speziesverteilung im Wasser der Erlengraben Quelle

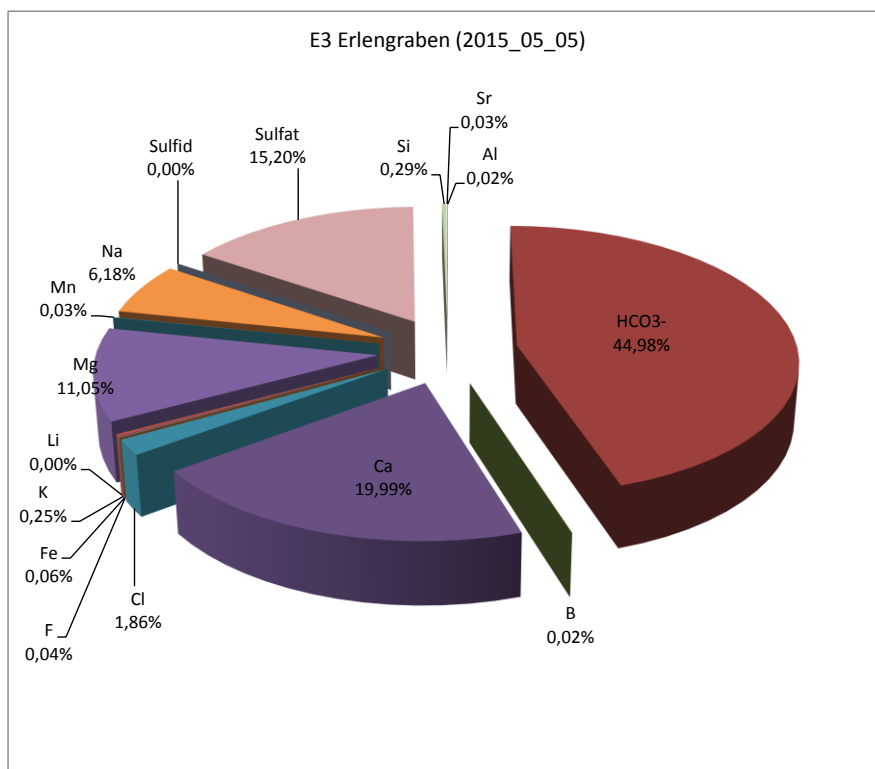


Abb. 22: Speziesverteilung im Wasser Erlengraben E3

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

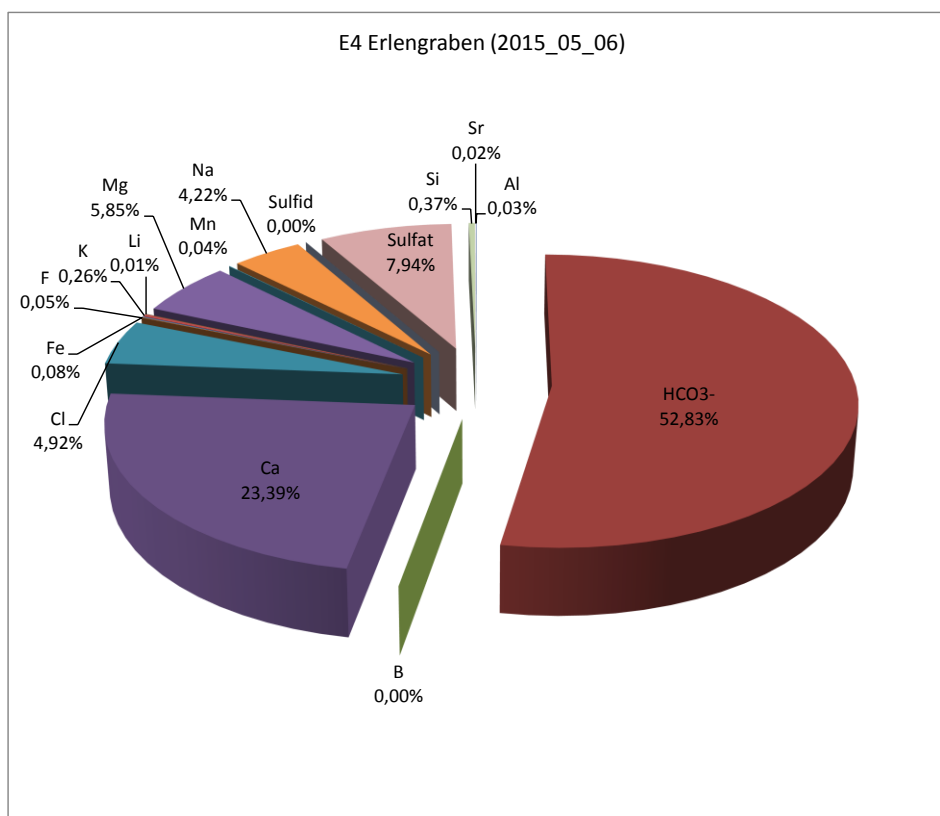


Abb. 23: Speziesverteilung im Wasser Erlengraben E4

2.5.5.4.3 Untergruppe Wässer des Tagebausees im genehmigten Tontagebau

Wie die Speziesverteilung in den Tagebauwässern (Abb. 24) zeigt, besteht keine Vergleichbarkeit mit den übrigen Oberflächenwässern.

Um der Frage der Genese nachzugehen, wurde, wie für alle anderen Wässer auch, eine PhreeqC-Modellierung durchgeführt (Protokolle siehe Anhang 4).

Die Lösungssimulation mittels PhreeqC erlaubt über die Berechnung der Ionenaktivitätsprodukte Aussagen zum Verhalten der Lösung hinsichtlich möglicher Mineralausfällungen bzw. Mineralauflösungen.

Experimentelle Ergebnisse zur Mitfällung und Ausfällung stehen nicht zur Verfügung, so dass nur eine theoretische Bewertung dieser Mechanismen möglich ist. Diese basiert auf der Berechnung der Ionenaktivitätsprodukte (IAP) solcher Ionen, die an einer Mineralausfällung / -auflösung beteiligt sind.

Ein Ionenkristall geht so lange in Lösung, bis das Produkt aus den Ionenaktivitäten seiner Bestandteile (Ionenaktivitätsprodukt IAP) einen bestimmten, nur von der Temperatur abhängigen Wert (Gleichgewichtsprodukt bzw. Gleichgewichtskonstante K) erreicht hat.

Umgekehrt fallen bzw. kristallisieren Minerale nur solange aus, wie die Ionenaktivitätsprodukte (IAP) über den Gleichgewichtswerten liegen, bzw. bis diese erreicht sind. Daraus leitet sich als Kriterium für die Auflösung/Ausfällung der Sättigungsindex (SI), ausgedrückt als Logarithmus des Ionenaktivitätsprodukts IAP zum Sättigungsprodukt, gleichbedeutend mit der thermodynamischen Konstante (K_{Mineral}) des Mineralgleichgewichts ab.

$$SI = \log \left[\frac{IAP}{K_{\text{Mineral}}} \right]$$

Der Wert des Sättigungsindex bestimmt das Auflösungs-/Ausfällungs-Verhalten.

$$SI \begin{cases} > 0 & \text{Ausfällung} \\ = 0 & \text{Gleichgewicht} \\ < 0 & \text{Auflösung} \end{cases}$$

Die Auswertung der Modellrechnungen führte zu dem Ergebnis, dass im Tagebausee Karbonate des Kalziums und Magnesiums ebenso wie Oxide und Hydroxide des Eisens und Mangans ausgefällt werden können. Für Tonminerale, wie Illit und Kaolinit, bestehen ebenfalls Bedingungen für die Abscheidung. Für Gips bestehen Bedingungen, dass er noch in Lösung bleibt. Die Alkalien und Halogenide bleiben in Lösung.

Unter Bedingungen der ständigen Verdunstung von H₂O wird ein Wasser generiert, das sich durch hohe Alkali- und Sulfat-Konzentrationen auszeichnet.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

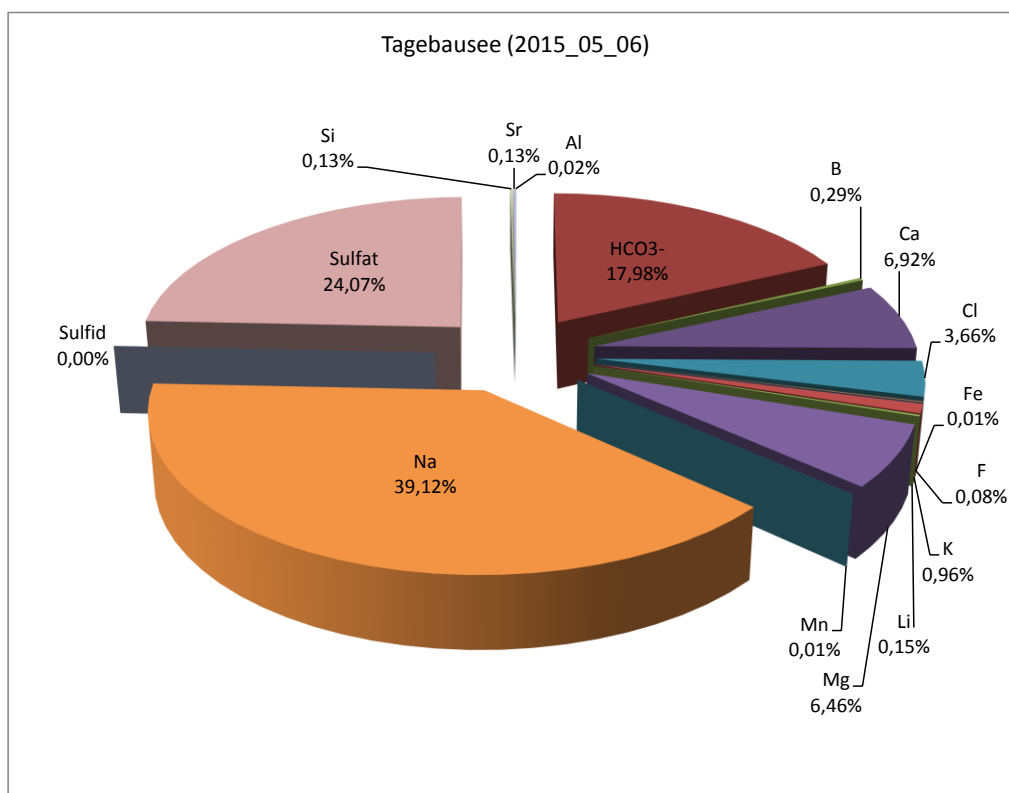


Abb. 24: Speziesverteilung im Wasser des Tagebausees

2.5.6 Isotopengeochemische Untersuchungen

2.5.6.1 Datenlage und Messungen

Im „Hydrogeologischen Zwischengutachten zur Abgrenzung eines Heilquellenschutzgebietes für die Heilquellen in Bad Schönborn“ des RP Freiburg, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau vom 25.07.2006 ist unter Kapitel 5 „Isotopendaten“ der bisherige Kenntnisstand zusammengefasst.

Im Gutachten wird festgestellt, dass die Daten kaum belastbar sind, da die Messwerte stark streuen und teilweise nur Einzelwerte vorliegen. Um den bisherigen Kenntnisstand zu charakterisieren wird hier aus dem Gutachten vollständig zitiert:

Tritium (³H): Die Muschelkalk-Grundwässer in Bad Schönborn (Karl-Siegel- und Lambertus-Quelle) sind tritiumfrei. Sie besitzen somit keine Zuflusskomponenten mit einem Alter von weniger als 50 Jahren und sind vor lokalen Einträgen sehr gut geschützt. Für höher liegende Grundwasserleiter (St. Rochus- und St. Ludwigsbrunnen) wurden Tritiumgehalte zwischen ca. 1 und 30 TU bestimmt. In diesen Brunnen sind z.T. sehr junge Grundwässer enthalten. Da bislang meist nur 1 Tritiumwert je Tiefbrunnen vorliegt (Anfang der 1990-er Jahre), sind weitergehende Aussagen zur Grundwasserverweilzeit noch nicht möglich.

Kohlenstoff-13 und -14 (^{13}C und ^{14}C): Nach bisherigen Messungen sind die Muschelkalk-Grundwässer (Karl-Siegel- und Lambertus-Quelle) ^{14}C frei. Daraus kann jedoch nicht zwangsläufig auf ein hohes Grundwasseralter geschlossen werden, da die ^{13}C -Werte deutlich erhöht sind. Ursächlich hierfür sind Ionen- und Isotopenaustauschvorgänge zwischen Grundwasser und Gestein, die durch den hohen Salzgehalt begünstigt werden und die nur in langen Zeiträumen ablaufen können. Die Kohlenstoffisotopenuntersuchungen erbringen daher nur einen qualitativen Hinweis auf ein hohes Grundwasseralter (Radiokarbonmethode, möglicherweise größer als einige Tausend Jahre).

Im St. Rochus- und St. Ludwigsbrunnen ist ^{14}C deutlich nachweisbar. Aus den rel. hohen Hydrogenkarbonatgehalten der Grundwässer im Zusammenhang mit vergleichsweise niedrigen ^{13}C -Gehalten ergeben sich hier Hinweise auf komplexe chemische Prozesse im Grundwasser, die die ursprünglichen Isotopengehalte grundlegend verändert haben. Diese Methode kann daher für eine weitergehende Alterseinstufung der Grundwässer hier nur bedingt angewendet werden.

Deuterium und Sauerstoff-18 (^2H und ^{18}O): Die stabilen Isotope Deuterium und Sauerstoff-18 im Wassermolekül zeigen unter anderem, unter welchen klimatischen Bedingungen Grundwässer neu gebildet wurden. So lässt sich bei tiefen Grundwässern (zusammen mit Vergleichsdaten) feststellen, ob sie unter heutigen (d.h. warmzeitlichen) oder noch unter kaltzeitlichen (eiszeitlichen) Bedingungen neu gebildet wurden. Als Vergleichswerte für aktuelle Grundwässer können Daten von Brunnen und Quellen aus dem Raum Östringen mit jungen Grundwässern herangezogen werden. Danach können 3 Gruppen unterschiedlicher Grundwasserkomponenten identifiziert werden:

- Gruppe 1. Aktuell neu gebildete Grundwässer, Brunnen und Quellen im Bereich Östringen,
- Gruppe 2. Eiszeitlich neu gebildete Grundwässer mit einem Alter von über 10.000 Jahren, Bereich Tongrube Rettigheim,
- Gruppe 3. Qualitativ sehr alte Grundwässer, Karl-Siegel- und Lambertus-Quelle (deutlich unterhalb der Niederschlagsgeraden mit Hinweis auf komplexe Wasser-Gesteins-Reaktionen).

Die Grundwässer aus Lias und Rhät erscheinen demnach als Mischwassersysteme (Übergangsbereich zwischen Gruppe 1 und 2) aus sehr altem Grundwasser mit Zumischung deutlich jüngerer Anteile. Dies deutet darauf hin, dass sie besonders schutzbedürftig sind.

Im Rahmen der hier vorgelegten neuen Untersuchungen wurden durch die HYDROISOTOP gmbh die Isotope Tritium (Messwerte in TU, Tritium Units), Sauerstoff ($\delta^{18}\text{O}$ bezogen auf VSMOW, Vienna Standard Mean Ocean Water) und Deuterium ($\delta^2\text{O}$, ebenfalls bezogen auf VSMOW) mittels Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS) gemessen.

Die Ergebnisse werden im Folgenden dargestellt und interpretiert. Dabei zeigt sich, dass die bisherigen Erkenntnisse in den Grundzügen bestätigt werden.

2.5.6.2 Tritium

Die gemessenen Tritium-Gehalte sind in der Tab. 18 zusammengestellt.

Die Messergebnisse bestätigen, dass die artesisch auslaufenden Grundwässer der Messstellen Rettigheim -2 und -3 Tritium-frei sind. Sie wurden somit vor 1953 neugebildet (d.h. die Mittlere Verweilzeit (MVZ) ist > 60 Jahre).

Die Tritium-Konzentrationen der Proben "B 2/2015" und des St. Rochusbrunnens liegen unterhalb von 3 TU, was eindeutig dominant alte Tritium-freie Grundwasserkomponenten anzeigt (der Anteil von > 60 Jahre alten Grundwasserkomponenten liegt bei etwa 60-90 %). Die erhöhten Tritium-Werte in B 1/2015 weisen auf einen Einfluss von oberflächennahen Wässern hin.

Die Tritium-Gehalte der Quelle Erlengraben, der Quelle Hengstbach, des Tagebausees und der Probe "B 1/2015" liegen im Bereich der aktuellen Niederschläge (5-10 TU).

Messstelle	Tritium (^3H) TU
GWM Rettigheim 2	< 0,6
GWM Rettigheim 3	< 0,6
B 2/2015 (06.05.2015)	1,1 ± 0,8
B 2/2015 (05.05.2015)	1,8 ± 0,6
St. Rochusbrunnen	1,9 ± 0,7
B 1/2015 (06.05.2015)	4,9 ± 0,7
B 1/2015 (05.05.2015)	6,1 ± 0,7
Tagebausee	6,3 ± 1,0
H1 = Quelle Hengstbach	7,3 ± 1,0
E1 = Quelle Erlengraben	7,5 ± 0,9

Tab. 18: Tritium-Gehalte in für den Tagebau Rettigheim relevanten Wässern

In Abb. 24 sind die Verhältnisse graphisch im Vergleich zu den $\delta^{18}\text{O}$ Werten dargestellt.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

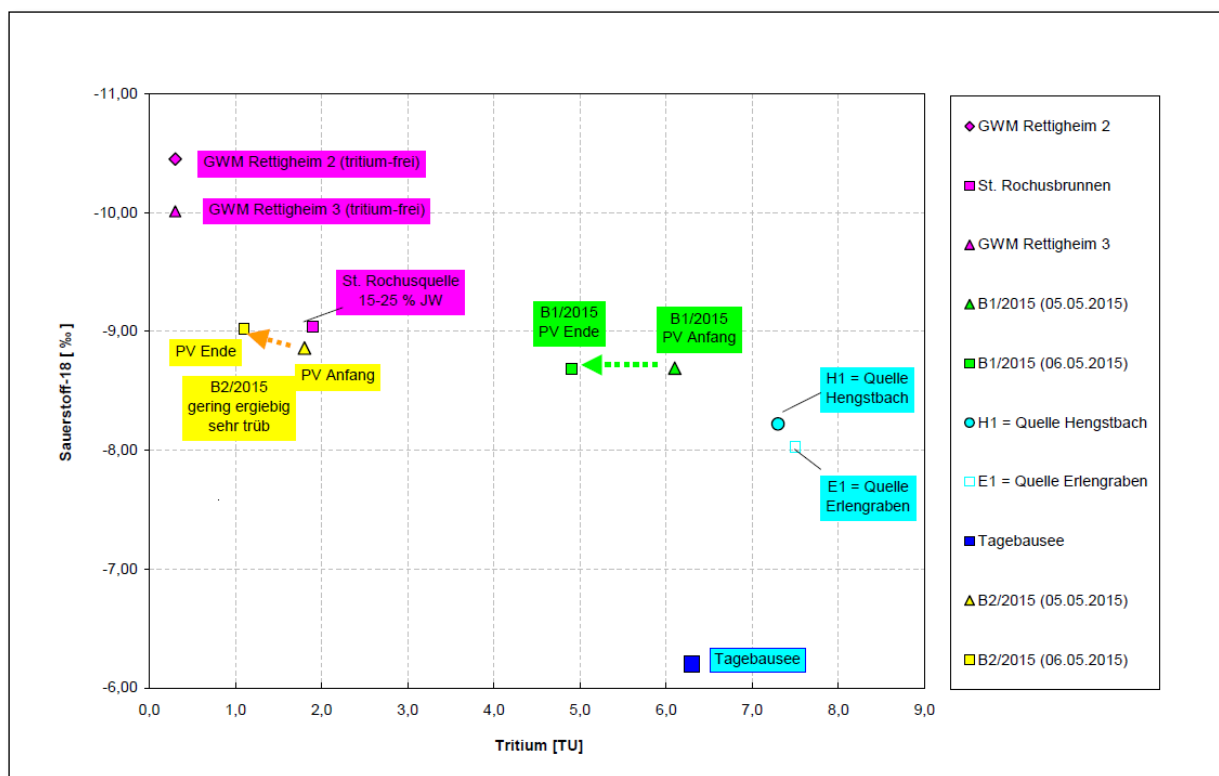


Abb. 25: Tritium versus $\delta\text{-O}18$

2.5.6.3 Sauerstoff- $\delta 18\text{O}$ / Deuterium

Die Sauerstoff- und Deuterium-Isotopenverteilung weist für den Tagebausee auf einen starken Einfluss der Verdunstung hin. Das Isotop ^{16}O geht bei Verdunstung leichter in die Atmosphäre über. Dieser Vorgang führt zur Anreicherung des schwereren Isotops im Wasser des Tagebausees.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

Bezeichnung	Sauerstoff-18 ($\delta^{18}\text{O}$) ‰	Deuterium ($\delta^2\text{H}$) ‰	Deuterium-Ex- zess ‰
Tagebausee	-6,20	-48,5	1,10
E1 = Quelle Erlengraben	-8,03	-53,3	10,94
Hengstbach H3	-8,11	-54,8	10,08
H1 = Quelle Hengstbach	-8,22	-55,6	10,16
Erlengraben E2	-8,37	-55,6	11,36
Hengstbach H2	-8,40	-56,4	10,80
Erlengraben E3	-8,45	-56,0	11,60
Hengstbach H4	-8,47	-57,2	10,56
Erlengraben E4	-8,55	-56,7	11,70
B 1/2015 (06.05.2015)	-8,68	-57,6	11,84
B 1/2015 (05.05.2015)	-8,69	-59,1	10,42
B 2/2015 (05.05.2015)	-8,86	-60,4	10,48
B 2/2015 (06.05.2015)	-9,02	-61,2	10,96
St. Rochusbrunnen	-9,04	-61,0	11,32
GWM Rettigheim 3	-10,01	-68,1	11,98
GWM Rettigheim 2	-10,45	-71,9	11,70

Tab. 19: Sauerstoff- und Deuterium-Isotopenverhältnisse in den für den Tagebau Rettigheim relevanten Wässern

Wie aus der graphischen Darstellung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte zu den $\delta^2\text{H}$ -Werten (Abb. 26) hervorgeht, liegen die übrigen Wertepaare auf der mittleren Niederschlagsgeraden. Eine Abweichung davon weist die Probe H3 Hengstbach auf. Dies weist darauf hin, dass hier ein Wasser vorliegt, welches vom Tagebausee beeinflusst wird. Ein Mischungsanteil von Tagebausee-Wasser an der Probe "Hengstbach H3" von bis zu 15 % ist rein rechnerisch möglich. In diesem Fall bestätigen die isotopengeochemischen Ergebnisse die Aussagen, die aus der Auswertung der geochemischen Speziesverteilung gemacht wurden.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

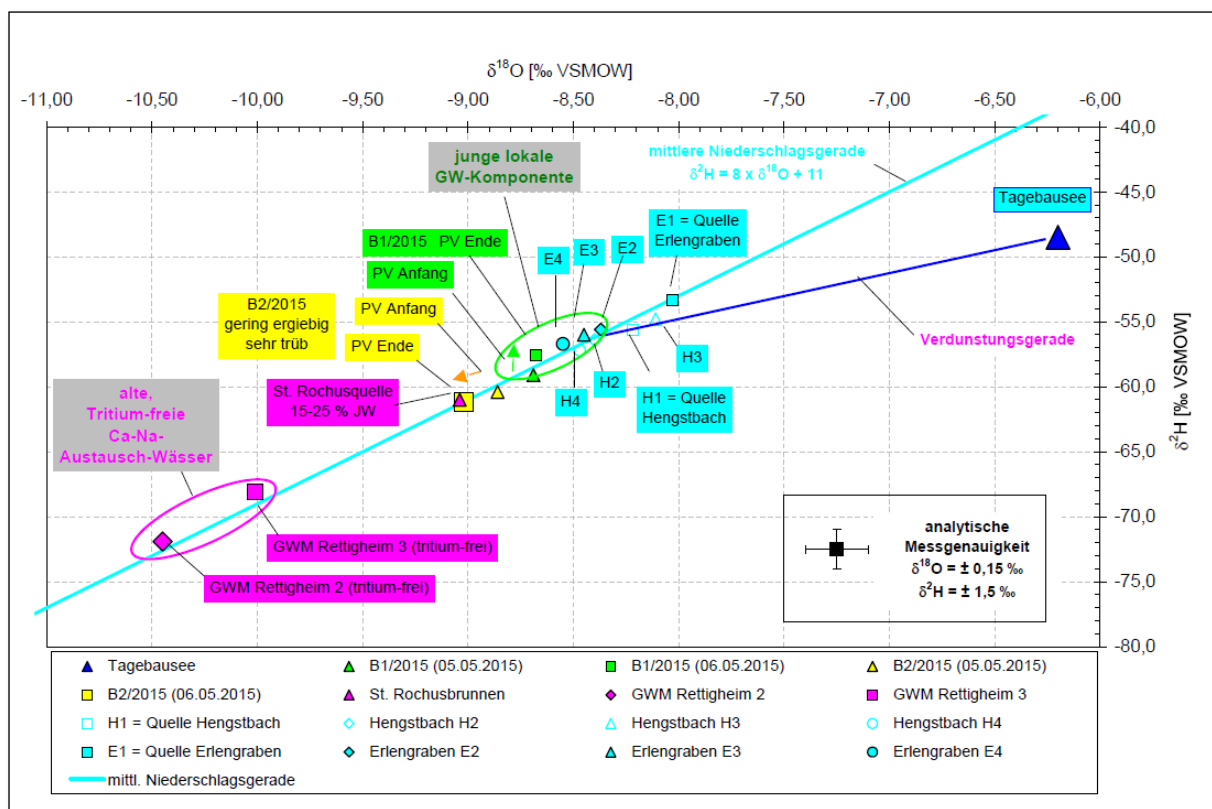


Abb. 26: Korrelation Sauerstoff-18-Gehalt versus Deuterium-Gehalt

2.5.7 Zusammenfassung des Informationsgehaltes der ermittelten geochemischen und isotopengeochemischen Daten

In Auswertung der Untersuchungen kann zusammenfassend festgestellt werden, dass die geochemischen und isotopengeochemischen Ergebnisse zu übereinstimmenden Aussagen führen.

Die Oberflächenwässer des Hengstbaches und des Erlengrabens sind geochemisch durch die Landschaft geprägt, die sie durchfließen. Die Messstelle H3 Hengstbach ist offensichtlich durch Mischung mit Tagebauwasser beeinflusst.

Die Wässer des Tagebausees sind sehr stark in ihrer Zusammensetzung durch Verdunstungs- und Fällungsprozesse charakterisiert.

Die untersuchten Grundwässer lassen sich auf Grund ihrer unterschiedlichen und charakteristischen geochemischen und isotopengeochemischen Zusammensetzung eindeutig unterscheiden und dem jeweiligen Aquifer zuordnen. In Abb. 26 ist der schematische Versuch unternommen, die stratigraphische Stellung der Herkunftsbereiche der untersuchten Wässer darzustellen. Insgesamt befinden sich die neuen Ergebnisse in Übereinstimmung mit bisher vorhandenen Erkenntnissen.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

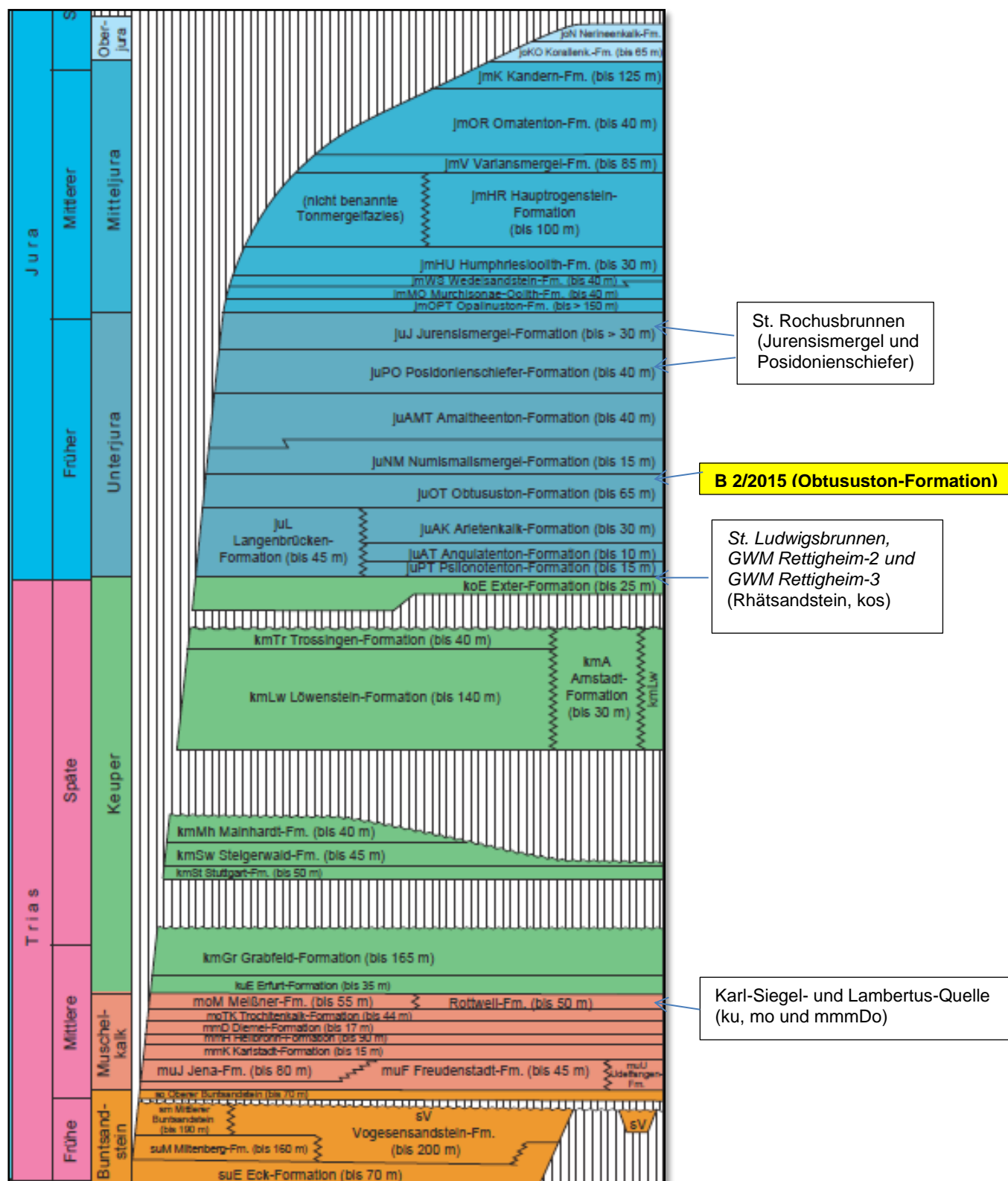


Abb. 27: Ausschnitt aus der Schichtenfolge Baden-Württemberg und schematische Einordnung der Aquifere der untersuchten Grundwässer im Umfeld des Tagebaues Rettigheim

2.5.8 Abschließende Bewertung des potenziellen Einflusses der Grundwasserentnahme im Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche auf die Heil- und Thermalquellen

Auf der Grundlage der hydrogeochemischen und isotopengeochemischen Untersuchungsergebnisse können die folgenden hydrogeologischen Aussagen getroffen werden:

- Die aus dem stratigraphisch am tiefsten liegenden Aquifer (Oberkeuper, Oberer Muschelkalk und Obere Dolomitformation des Mittleren Muschelkalks (ku, mo und mmmDo)) entstammenden Wässer (Karl-Siegel-Quelle und der Lambertus-Quelle) sind als Solequellwässer mit extremen Chlorid-Ionenkonzentrationen und unverwechselbar hohen Lithium-Konzentrationen zu charakterisieren. Für diese Wässer wird auf Grund ihrer hydrogeologischen Position eine Beeinflussung durch den erweiterten Tagebaubetrieb in Rettigheim ausgeschlossen.
- Die aus dem nächst höherem Aquifer (Rhätsandstein kos) entstammenden artesischen Wässer (St. Ludwigsbrunnen der St. Rochus-Klinik in Mingolsheim und GWM -2 und GWM -3 in Rettigheim) sind als Sulfidschwefel Wässer zu charakterisieren. Die niedrigen Tritium Werte weisen auf einen relativ hohen Geschütztheitsgrad hin. Ursächlich verantwortlich dafür sind die stratigraphisch über dem Rhätsandstein lagernden Rhättone. Für diese Wässer wird auf Grund ihrer hydrogeologischen Position eine Beeinflussung durch den erweiterten Tagebaubetrieb in Rettigheim ausgeschlossen.
- Die Wässer aus der Obtususton-Formation (GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015) weisen auf Grund ihrer geochemischen Charakteristik eine Eigenstellung gegenüber den anderen hier untersuchten Grundwässern auf. Die Wässer der GWM B 2/2015, gefolgt von denen der GWM B 1/2015, weisen die höchsten Natrium- und Hydrogenkarbonat-Konzentrationen auf. Das zeigt ihre Eigenstellung unter den untersuchten Wässern und spricht für eine lange Verweilzeit dieser Wässer in den Sedimenten der Obtususton-Formation. Die etwas niedrigeren Konzentrationen in GWM B 1/2015 sind Folge der Vermischung mit oberflächennahen Wässern im Bereich einer Störungszone. Auch die graphische Darstellung der Sauerstoff-Isotopen-Verhältnisse ($\delta^{18}\text{O}$) versus Molverhältnis Na/HCO_3^- weist auf die Eigenständigkeit der Wässer der Obtususton-Formation in GWM B 2/2015 und auf die Beeinflussung durch oberflächennahe Wässer in GWM B 1/2015 hin. Die Wässer in B 1/2015 weisen gegenüber B 2/2015 niedrigere pH-Werte, höhere Calcium-, Magnesium- und Strontium-Konzentrationen und niedrigere Fluor- und Aluminium-Konzentrationen auf. Geochemisch sprechen diese Verhältnisse dafür, dass die Kalzium-, Magnesium- und Strontium-reicheren Wässer der B 1/2015 genetisch mit von oben zugeführten jüngeren Wässern (erhöhte Tritium-Werte) verbunden sind.

Anlage 2: Fachgutachten Hydrogeologie

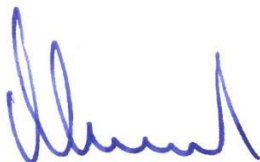
- Die aus dem stratigraphisch viel höher liegenden Aquifer (Jurensismergel und Posidonienschiefer) im St. Rochusbrunnen geförderten Wässer werden auf Grund ihrer geologischen Position durch einen erweiterten Tagebaubetrieb in Rettigheim nicht beeinflusst.
- Die Fließgewässer (Hengstbach und Erlengraben) werden in ihrer Beschaffenheit durch den geochemischen Charakter der durchflossenen Landschaft geprägt. Die Messstelle H3 Hengstbach ist offensichtlich durch Einleitung von Tagebauwässern beeinflusst.
- Die Wässer des Tagebausees sind in ihrer Zusammensetzung durch Verdunstungs- und Fällungsprozesse charakterisiert. Diese Vorgänge dominieren, da ein Versickern der Tagebauwässer durch den Obtususton offensichtlich nicht stattfindet.

Bearbeiter:

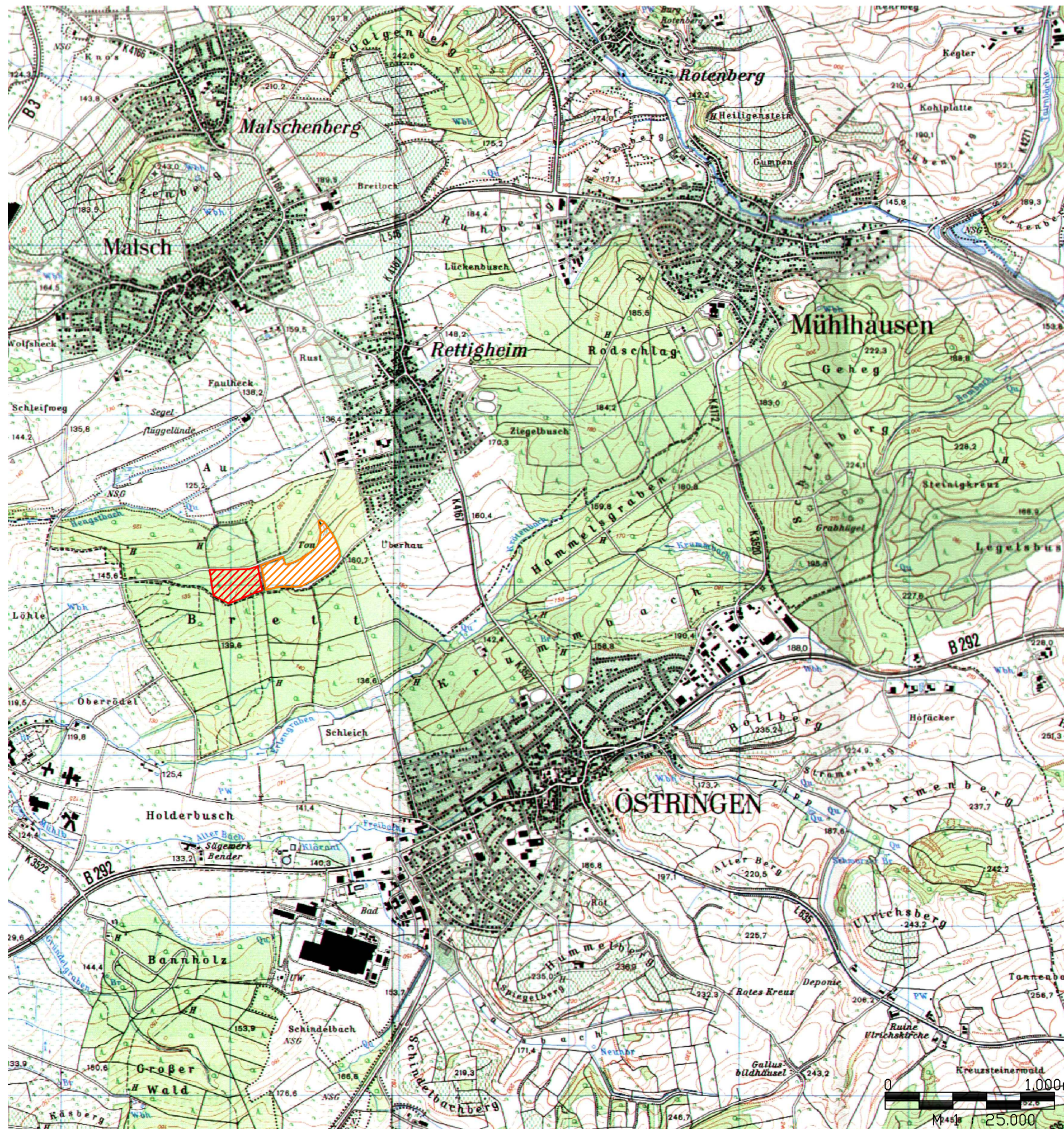
Dr. Carsten Munk, Dr. Uwe Hekel, Prof. Dr. Bernd Volland

HPC AG



ppa.



Dr. Carsten Munk



Legende

-  geplante Erweiterungsfläche
Tontagebau Röttigheim
-  derzeitige Abbaufäche der
Wienerberger GmbH

Projekt: **Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung
eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der
Tongrube Röttigheim in Mülhausen OT Röttigheim**

Darstellung:	Anlage:	1
	Projekt-Nr.:	2061178
	Maßstab:	1:25.000
	Zeichnungs-Nr.:	Anl01_TK25.dwg
	Datum	Name
	gezeichnet:	26.01.2016 mh
Bauherr/Auftraggeber:	geprüft:	26.01.2016 cm

Bauherr/Auftraggeber:



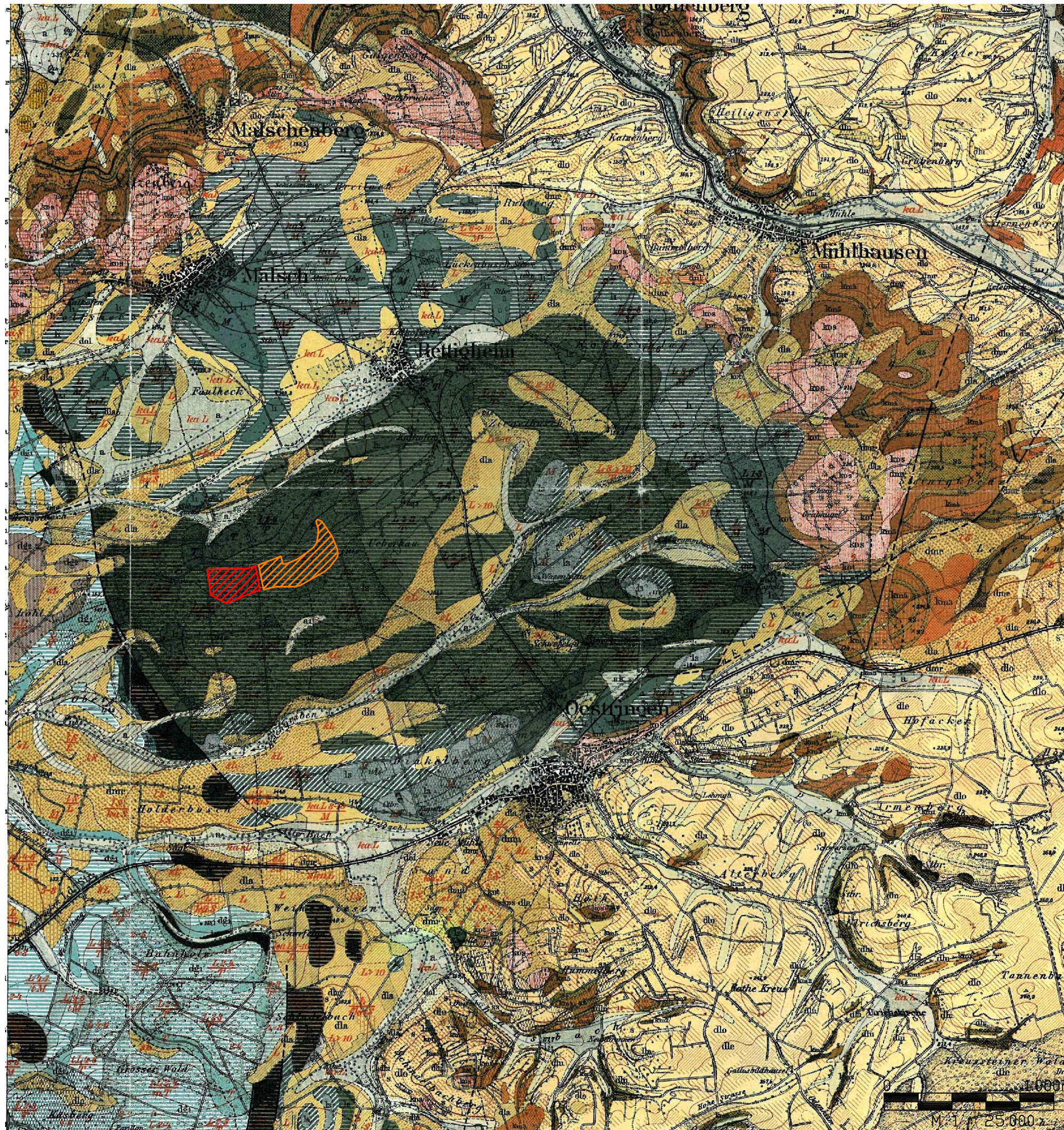
Wienerberger
Wienerberger GmbH
Oldenburger Allee 26
D-30659 Hannover

Planverfasser:

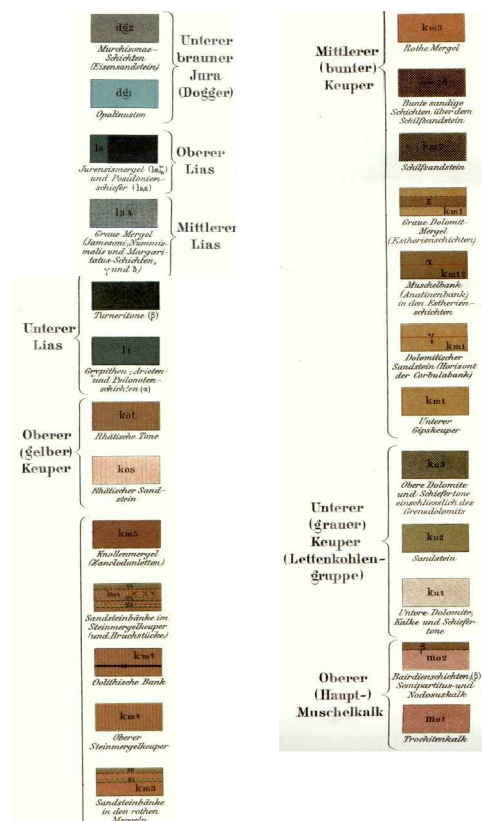




HPC AG
Postfach 11 13, 34226 Fulda
Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fulda
Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82


Pfad: N:\WIN32APPI\Projekte\wienerberger\Röttigheim\macad\2016_01_26_Antrag\Anl01_TK25.dwg



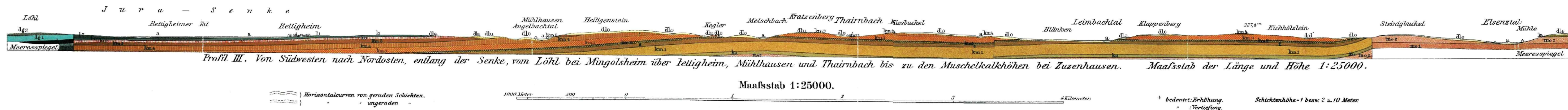
Legende



-  geplante Erweiterungsfläche
Tontagebau Rottigheim
-  derzeitige Abbaufäche der
Wienerberger GmbH

Projekt: Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rottigheim in Mülhausen OT Rottigheim		
Darstellung: Geologische Karte Ausschnitt G 25 Blatt 6718 Wiesloch	Anlage:	2a
	Projekt-Nr.:	2061178
	Maßstab:	1:25.000
	Zeichnungs-Nr.:	Anl02a_Geo.dwg
	gezeichnet:	26.01.2016 mh
	geprüft:	26.01.2016 cm
Bauherr/Auftraggeber:  Wienerberger Wienerberger GmbH Oldenburger Allee 26 D-30659 Hannover		Planverfasser:  HPC AG Postfach 11 13, 34226 Fuldatal Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fuldatal Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82
Pfad: N:\WIN32APPI\Projekt\wienerberger\Rottigheim\acad\2016_01_26_Antrag\Anl02a_Geo.dwg		
Layout: DIN_A3 Geologische Karte		

Geologischer Profilschnitt



Legende

Jüngste Bildungen

- Künstlich bewegtes Land
- Schlacken römischen Bergbaues
- Schuttkegel am Ausgange der Nebentäler
- Gehäufgeschutt
- Kalktuff
- Torf und Moore
- Jüngste Anhöhen am Haupt- und Nebentäler, mergelig, lehmig, humos

Jung-diluviale Aufschüttungen

- Verschwennter Löss und Lehm der Böden und in Terrassen

Mittel-diluviale Aufschüttungen

- Jüngerer Löss kalkreich, z.T. entkalkt & sandig
- Jüngerer Löss lehmig z.T. sandig & Lössanteile liegen nicht nachgewiesen
- Alterer Löss z.T. sandig
- Alterer Lösslehm z.T. sandig
- Schwache Decke von Lehm oder Löss auf Muschelkalk und unterem Keuper
- Desgleichen auf mittlerem Keuper
- Desgleichen auf jüngeren Schichten
- Lehm mit Blockanhäufungen
- Rheinsand und Flugsand kalkreich, entkalkt
- Derselbe, mit schwacher Lehmdecke
- Einhelmische Sande und Kiese

Alt-diluviale Aufschüttungen

- Rheinische Sande und Kiese
- Einhelmische Sande und Kiese
- Tone
- Hochliegende Geröllschichten, vorwiegend von rhätischem Sandstein
- Oligocene Mergel ohne mit schwacher Lehmdecke
- Oligocene Conglomerate (Bohneconglomerat von Wiesloch)

Tertiär

- Unterer brauner Jura (Dogger)
- Oberer Lias
- Mittlerer Lias

Unterer Lias

- Turnerilone (S)
- Gryphiten, Brachen- und Polanoten-schichten (a)

Oberer (gelber) Keuper

- Rhätische Tone
- Rhätischer Sandstein
- Knochenmergel (Zancladonitellen)
- Sandsteinbänke im Steinmergelkeuper (und Bruchstücke)
- Oolithische Bank
- Oberer Steinmergelkeuper

Unterer (grauer) Keuper (Lettenkohlen-gruppe)

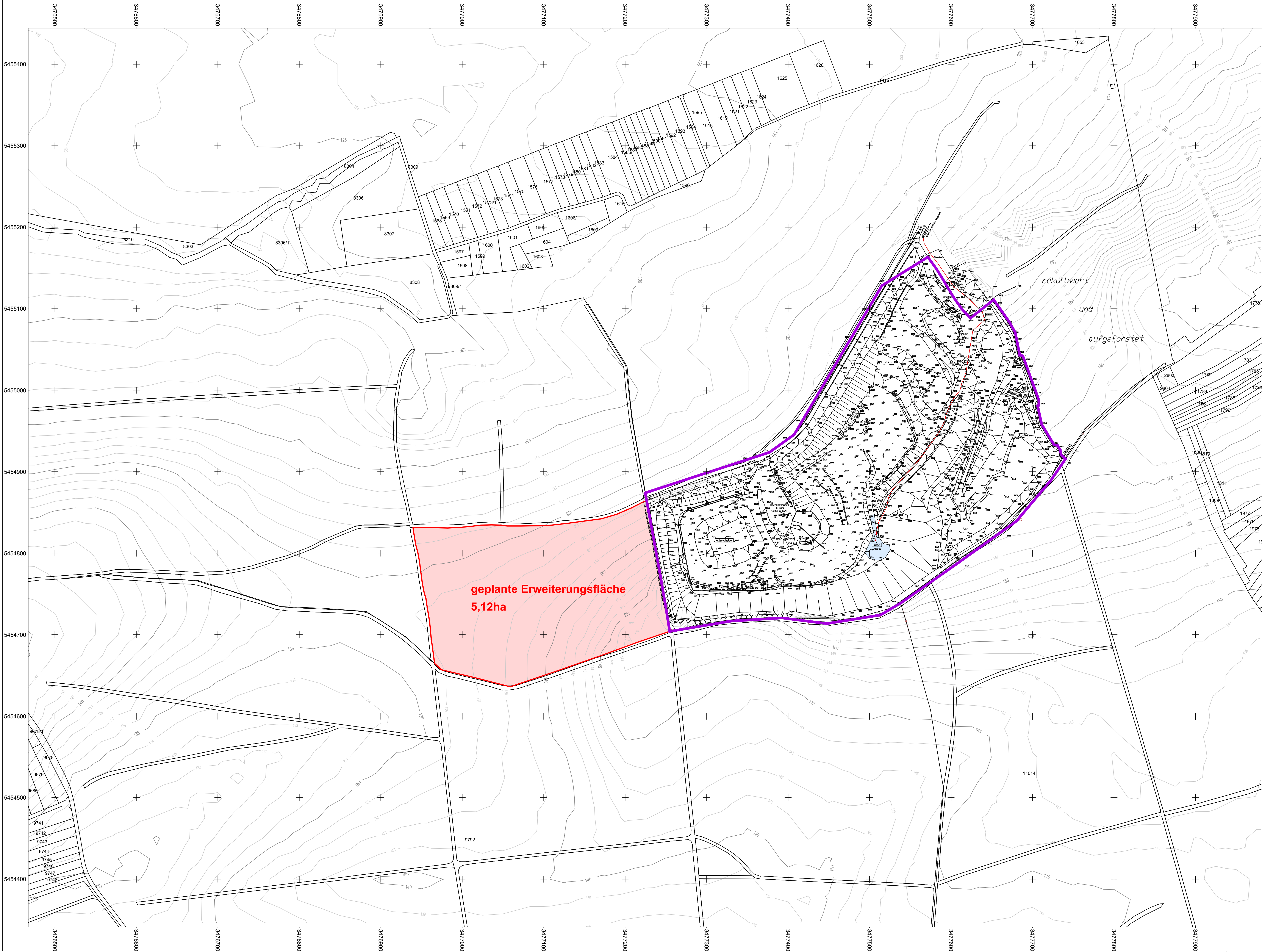
- Sandsteinbänke in den roten Mergeln
- Rote Mergel
- Munde sandige Schichten über dem Schilfsandstein

Mittlerer (bunter) Keuper



Unterer Muschelkalk

- Schilfsandstein
- Graue Dolomit-Mergel (Estherien-schichten)
- Muschelbank (Anatolienbank) in den Estherien-schichten
- Dolomitischer Sandstein (Flurizont der Grottebank)
- Unterer Gipskeuper
- Oberer Dolomit und Schieferung einschließlich des Grottebank
- Sandstein
- Untere Dolomit, Kalk und Schiefer-tone
- Bairdionschichten (S) Senipartius- und Nodonskalk
- Trochitenkalk

Projekt: Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rettigheim in Mühlhausen OT Rettigheim		
Darstellung: <		



Legende

-  vorgesehene Erweiterungsfläche
-  genehmigte Rahmenbetriebsplangrenze für den Tontagebau Rettigheim

Plangrundlage:
Betriebszustandsriss:
TABERG Ingenieur - und Sachverständigenbüro GmbH&Co.KG,
Stand 04.03.2015
ALK - Daten: Stand 03/2015
GOK Höhenlinien: Stand 5/2010

Nr.	Änderungen	gezeichnet	Name	geprüft	Name
Projekt: Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rettigheim in Mülhausen OT Rettigheim					
Darstellung:	Lageplan mit Darstellung der vorhandenen Abbaufäche sowie der geplanten Erweiterungsfläche				
	Anlage:	3			
	Projekts-Nr.:	2061178			
	Maßstab:	1:2.000			
	Zeichnungs-Nr.:	Antr3_Lage_Flaechen_A_dwg			
	Datum:				
	gezeichnet:	29.02.2016	ag/mh/vml	geprüft:	29.02.2016 cm

Bauherr/Auftraggeber:

Wienerberger

Wienerberger GmbH
Oldenburger Allee 26
D-30659 Hannover

Planverfasser:

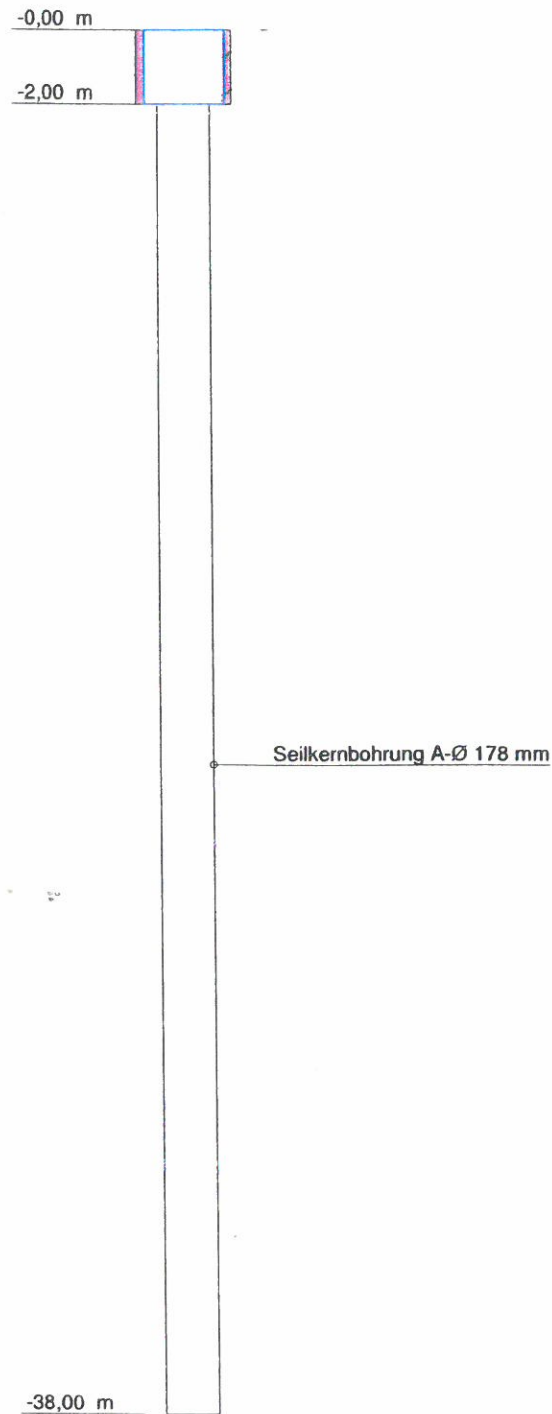
HPC AG

Postfach 11 13, 34226 Fuldaatal
Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fuldaatal
Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82

Projekt: Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rettigheim in Mühlhausen OT Rettigheim			
Darstellung: Bohr- und Brunnenbauschema für die Grundwassermessstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015	Anlage:	4a	
	Projekt-Nr.:	2061178	
	Maßstab:	1:200	
	Zeichnungs-Nr.:	Anl04a+04b_Spiegel.dwg	
		Datum	Name
	gezeichnet:	26.01.2016	mh
	geprüft:	26.01.2016	cm
Bauherr/Auftraggeber:  Wienerberger Wienerberger GmbH Oldenburger Allee 26 D-30659 Hannover		Planverfasser:  HPC AG Postfach 11 13, 34226 Fulda Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fulda Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82	
Pfad: N:\WIN32APPI\Projekt\wienerberger\Rettigheim\Abgabe\2016_01_26_Antrag zur Erweiterung\Anl04a+04b_Spiegel.dwg			

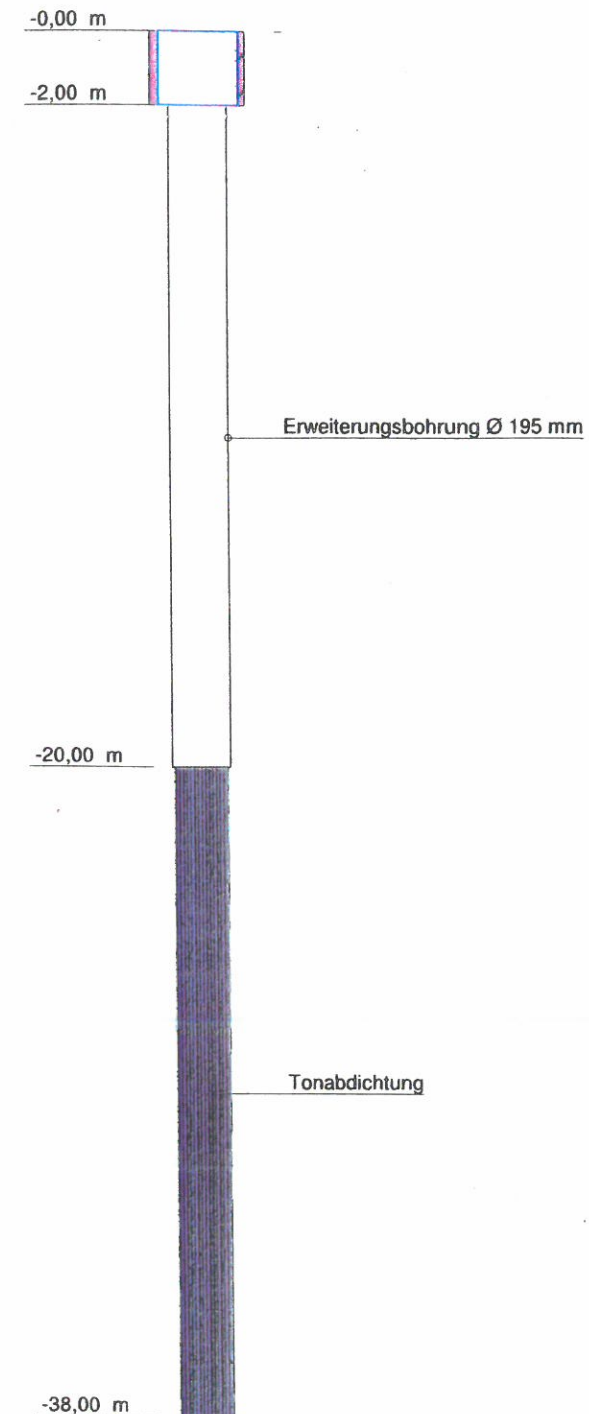
Schritt 1.2

Seilkernbohrung (SK6L), Kern-Ø 101 mm
bis Endteufe - 38,0 m



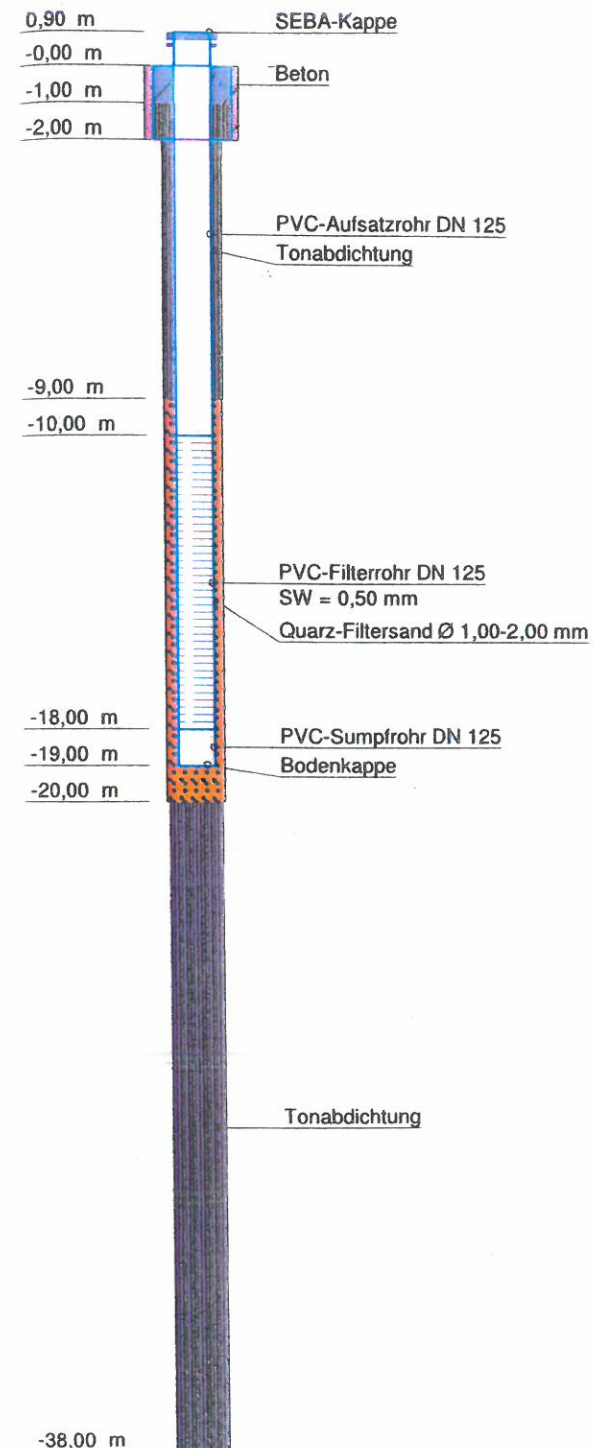
Schritt 1.3

Auffüllen der Kernbohrung bis 1,0 m
unter Pegelausbauerteile,
Erweiterungsbohrung Ø 195 mm bis 20,0 m



Schritt 1.4

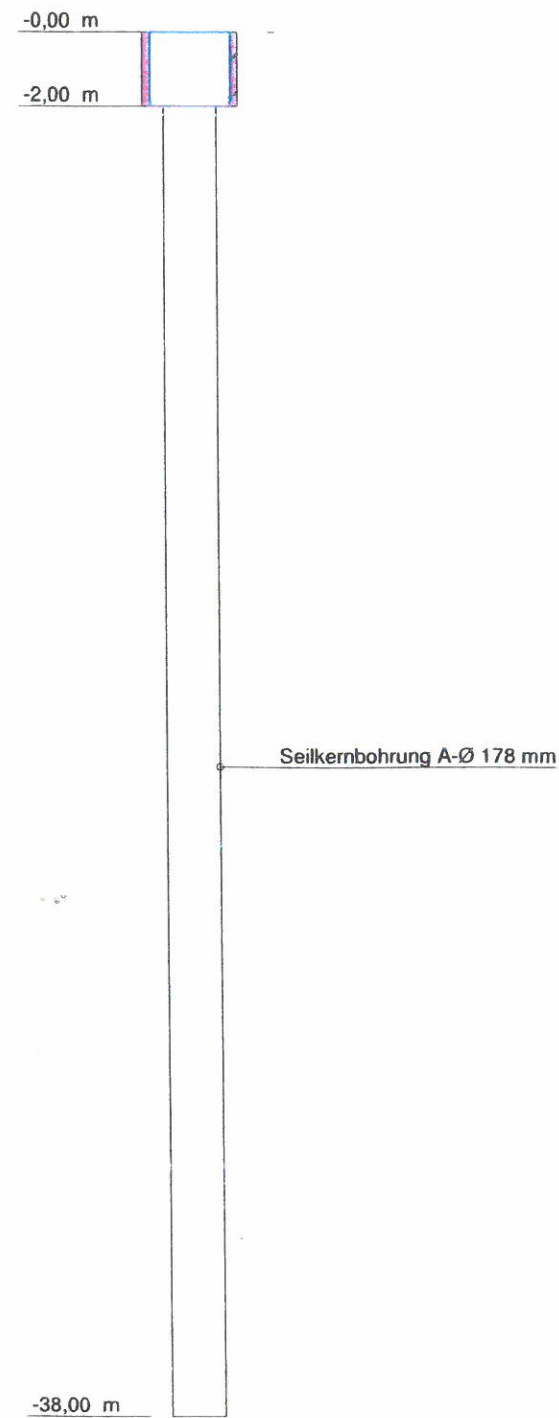
Pegelausbau und Verfüllung
(Schematisch)



Projekt: Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rettigheim in Mühlhausen OT Rettigheim			
Darstellung: Brunnenausbauzeichnungen der Grundwassermessstellen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015 in Korrelation mit den erbohrten Schichtgliedern	Anlage:	4b	
	Projekt-Nr.:	2061178	
	Maßstab:	1:60	
	Zeichnungs-Nr.:	Anl04a+04b_Spiegel.dwg	
		Datum	Name
	gezeichnet:	26.01.2016	mh
	geprüft:	26.01.2016	cm
Bauherr/Auftraggeber:  Wienerberger Wienerberger GmbH Oldenburger Allee 26 D-30659 Hannover	Planverfasser:  HPC AG Postfach 11 13, 34226 Fuldatal Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fuldatal Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82		
Pfad: N:\WIN32APP\Projekt\wienerberger\Rettigheim\Abgabe\2016_01_26_Antrag zur Erweiterung\Anl04a+04b_Spiegel.dwg			

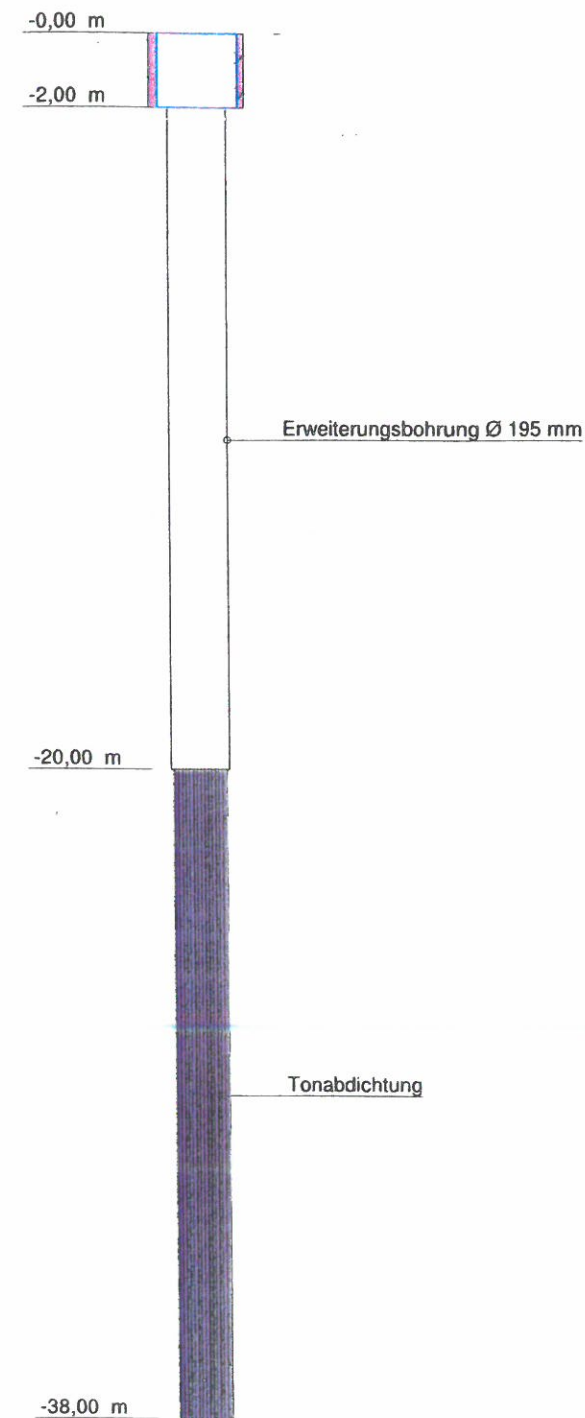
Schritt 1.2

Seilkernbohrung (SK6L), Kern-Ø 101 mm
bis Endteufe - 38,0 m



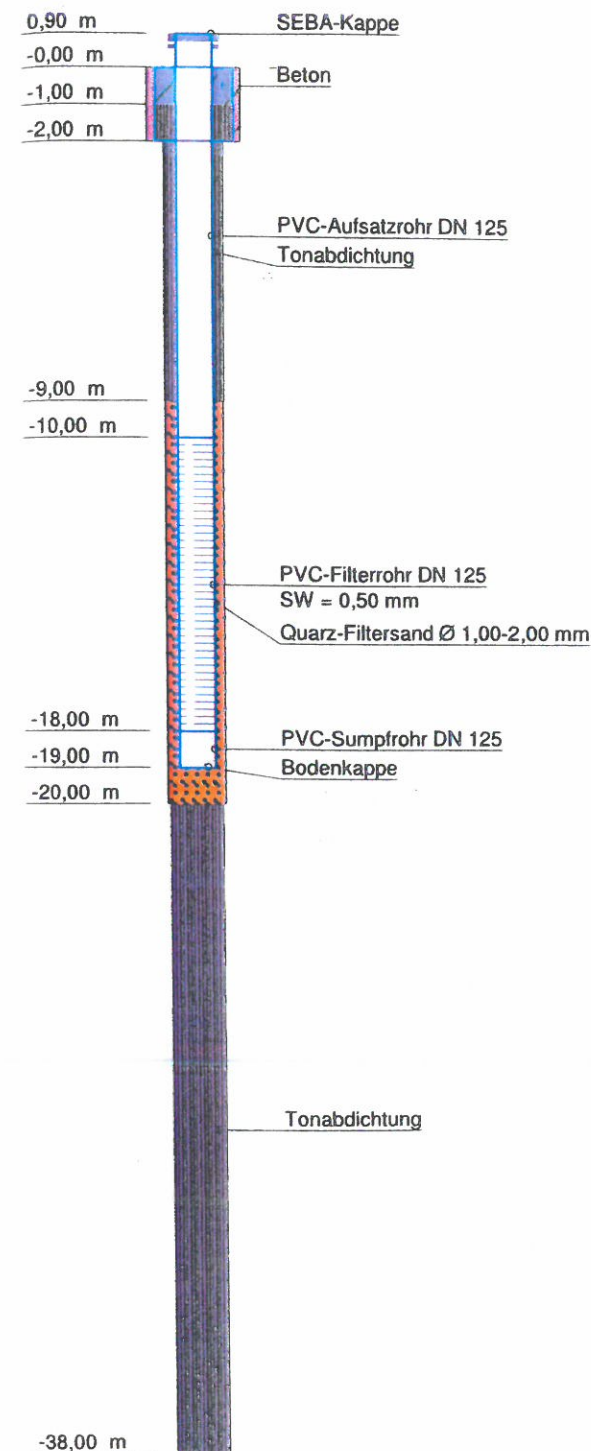
Schritt 1.3

Auffüllen der Kernbohrung bis 1,0 m
unter Pegelausbauerteufe,
Erweiterungsbohrung Ø 195 mm bis 20,0 m



Schritt 1.4

Pegelausbau und Verfüllung
(Schematisch)



celler brunnenbau gmbh 
Postbox 1171 • D-29201 Celle
Fon.: 0 51 41/88 44-0 • Fax: 0 51 41/88 44-10
e-Mail: cb@celler-brunnenbau.de
www.celler-brunnenbau.de

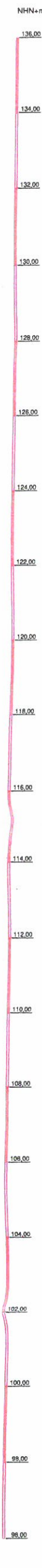
  

AUFTRAGGEBER:
Wienerberger GmbH
Oldenburger Allee 26
30659 Hannover

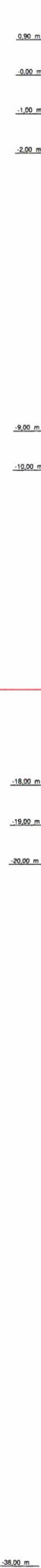
PROJEKT:
Rettigheim
Kern- und Pegelbohrungen
Bohr- und Verrohrungsplan

Plan-Nr.:	12140299-3
Auftrag-Nr.:	12140299
Datum:	14.01.2015
Maßstab:	1 : 200
Bearbeiter:	dö/lü

Re 3476856.5
H= 5454745.0



OK Rohr NHN+136,50m



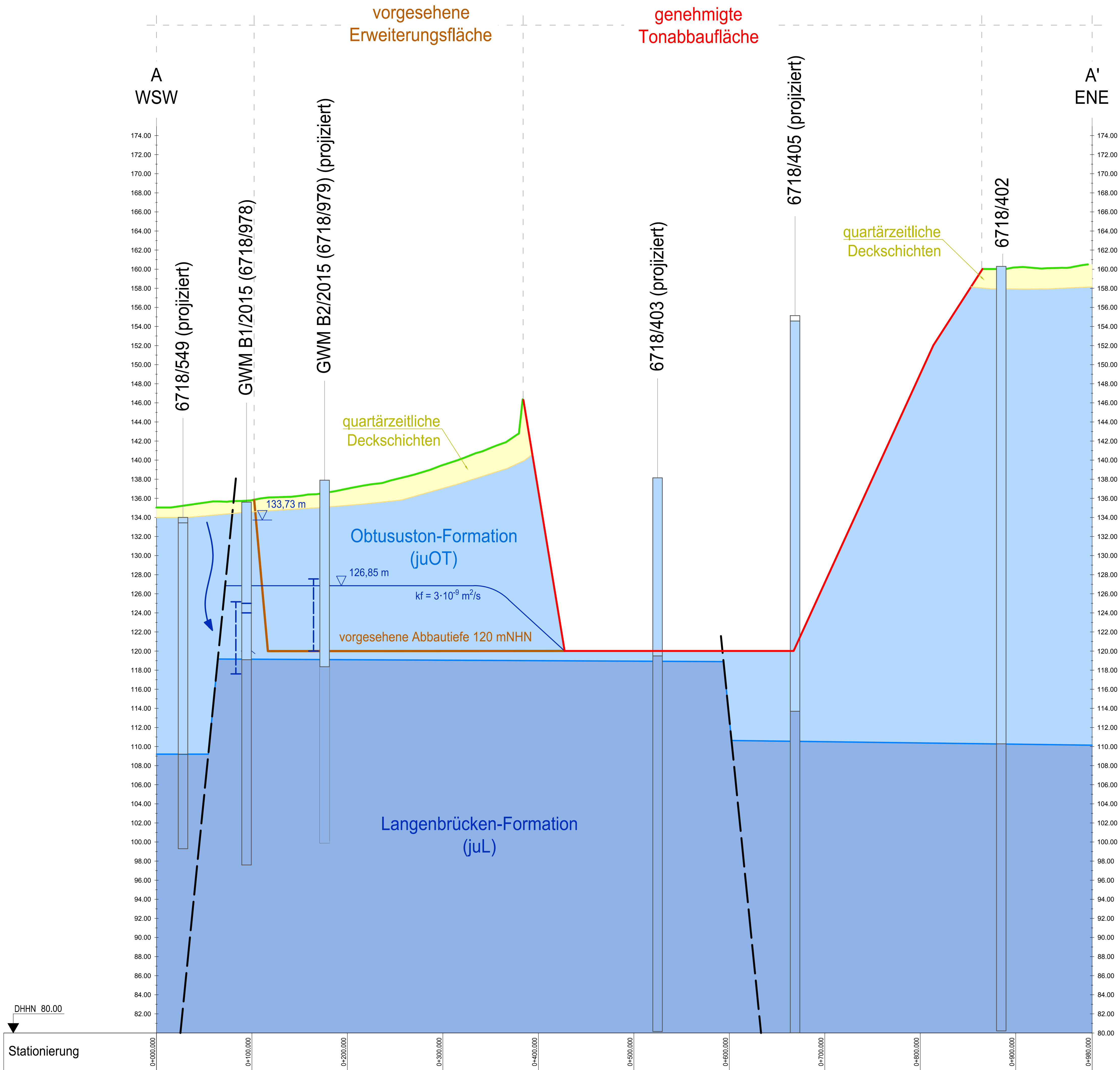
Postbox 1171 * D-29201 Celle
Fon.: 0 51 41/88 44-0 * Fax: 0 51 41/88 44-10
e-Mail: cb@celler-brunnenbau.de
www.celler-brunnenbau.de



PROJEKT:
Rettigheim
Kern- und Pegelbohrungen
Bohr- und Verrohrungsplan

Plan-Nr.:	12140299-1
Auftrag-Nr.:	12140299
Datum:	14.01.2015
Maßstab:	1 : 60
Bearbeiter:	dö/lü





Profil 10-fach überhöht !

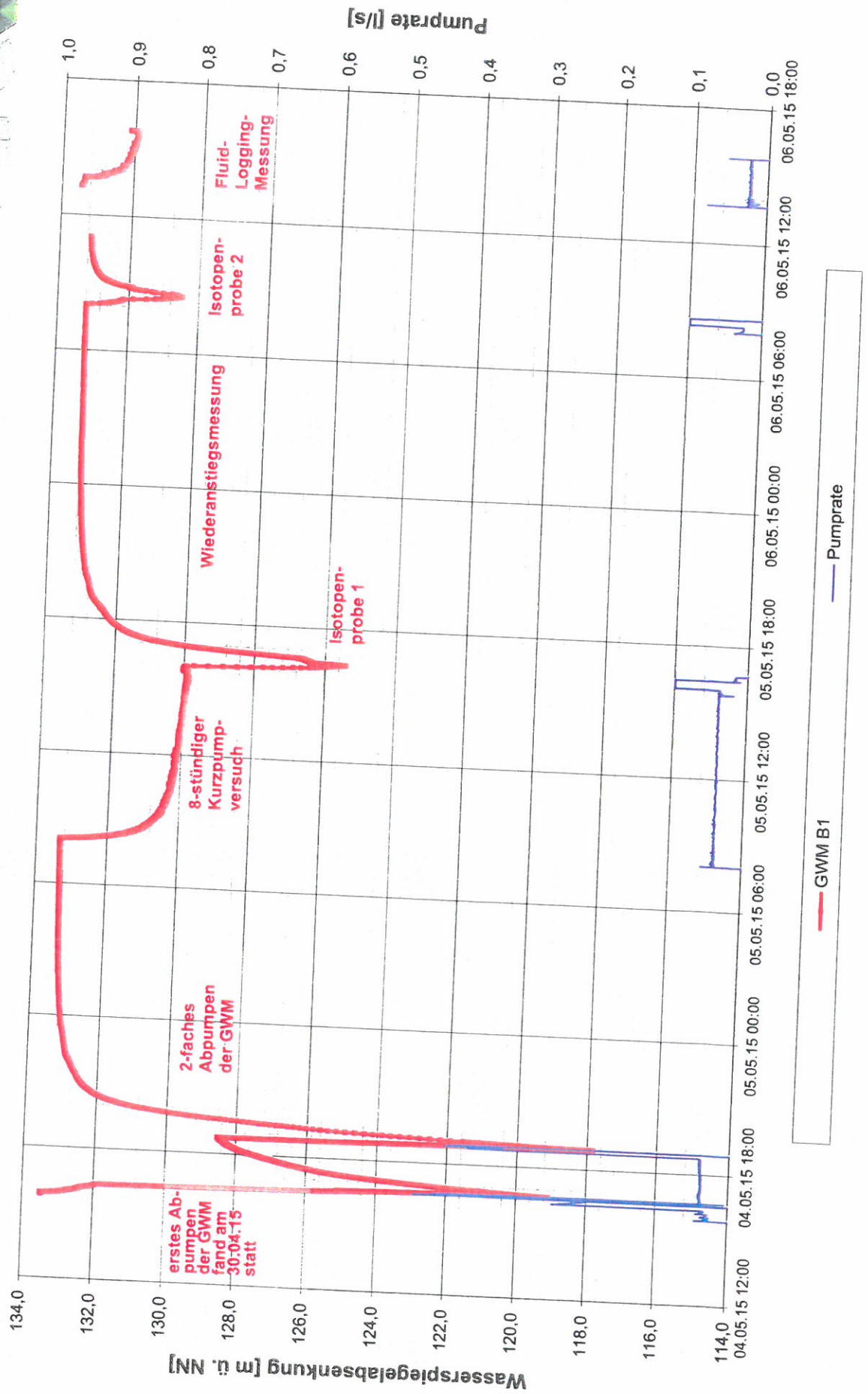
Legende

- Störung, vermutet
- ~ Grundwasserbewegung
- I Filterstrecke
- ▽ 133,73 m Ruhewasserspiegel (m ü. NN)
- $T = 3,0 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ Transmissivität

Projekt: Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rettigheim in Mühlhausen OT Rettigheim			
Darstellung:	Anlage:	6	
	Projekt-Nr.:	2061178	
	Maßstab:	1:2000 / 1:200	
	Zeichnungs-Nr.:	2016_06_23_Profilschnitt.dwg	
	Datum	26.01.2016	Name
Bauherr/Auftraggeber:	gezeichnet:	mh	
	geprüft:	cm	
Wienerberger Wienerberger GmbH Oldenburger Allee 26 D-30659 Hannover		HPC AG HPC AG Postfach 11 13, 34226 Fuldatal Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fuldatal Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82	

Projekt: Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rettigheim in Mühlhausen OT Rettigheim			
Darstellung: Absenkdiagramm der Pumpmaßnahmen an der Grundwassermessstelle GWM B 1/2015	Anlage:	7a	
	Projekt-Nr.:	2061178	
	Maßstab:	o.M.	
	Zeichnungs-Nr.:	Anl07a-07c_Spiegel.dwg	
		Datum	Name
	gezeichnet:	26.01.2016	mh
	geprüft:	26.01.2016	cm
Bauherr/Auftraggeber:  Wienerberger Wienerberger GmbH Oldenburger Allee 26 D-30659 Hannover		Planverfasser:  HPC AG Postfach 11 13, 34226 Fulda Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fulda Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82	
Pfad: N:\WIN32APPI\Projekte\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_01_26_Antrag\Anl07a-07c_Spiegel.dwg			

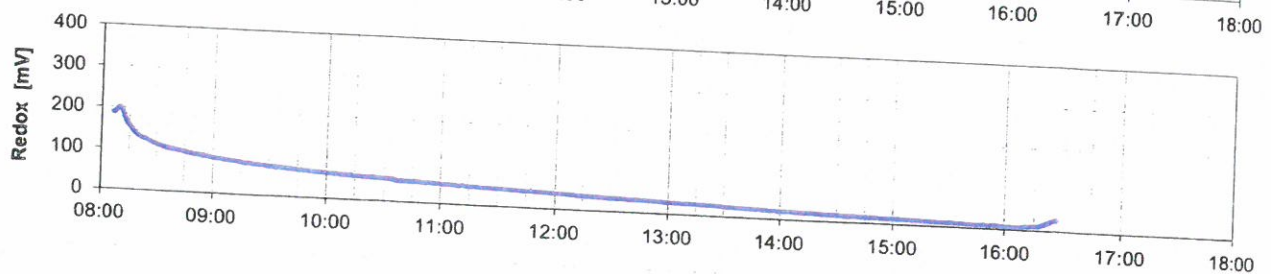
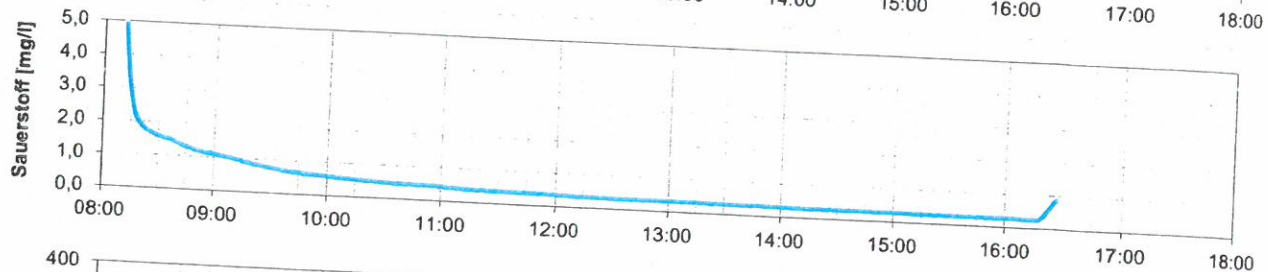
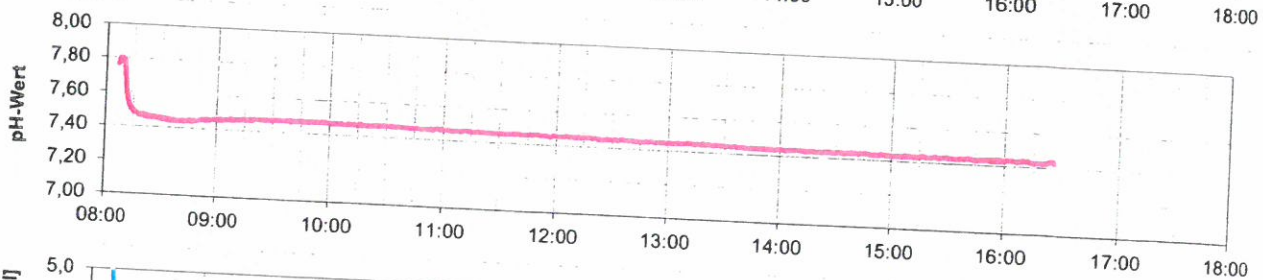
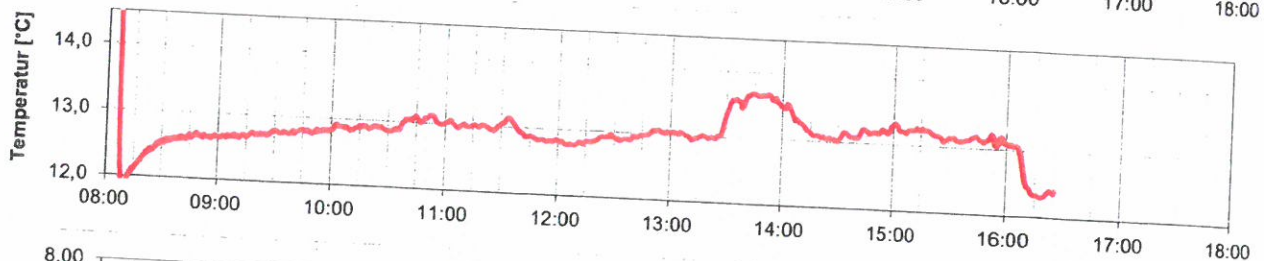
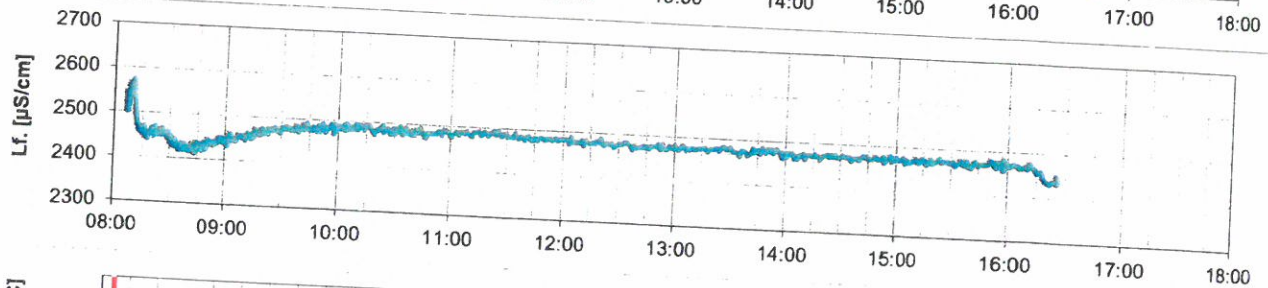
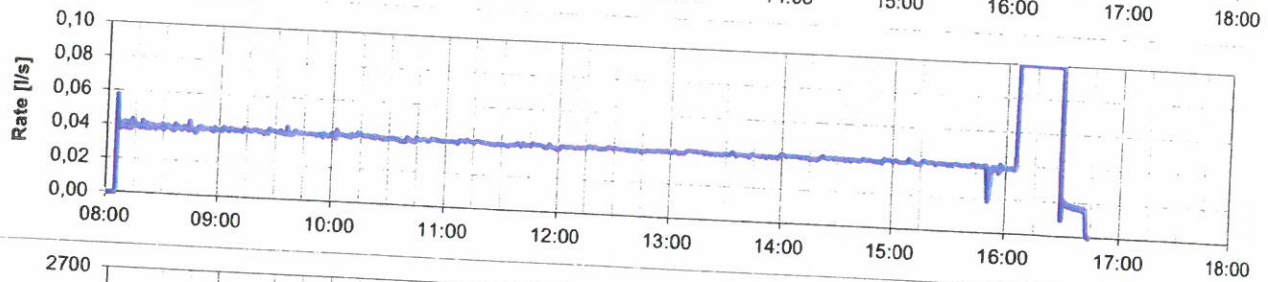
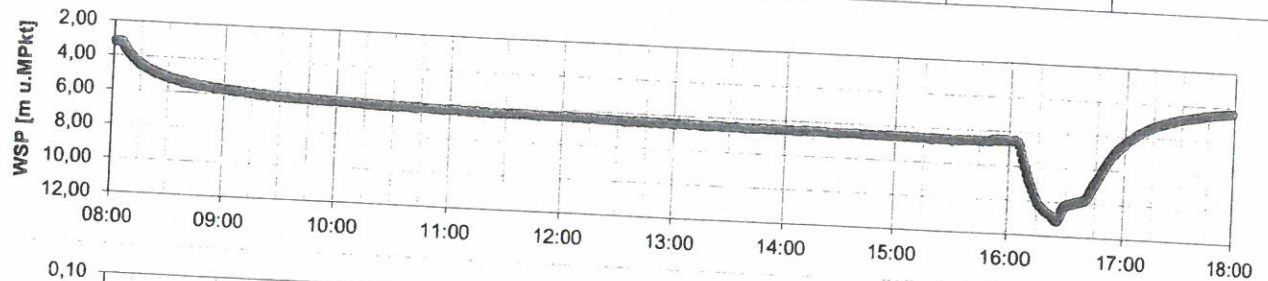
Erweiterung der Tongrube Rettigheim - Wienerberger GmbH Pumpversuch und Probenahme in GWM B1



Pumpversuchsdokumentation



Projekt	Erw. Tongrube	Projektnr.	2061178	Ort	Rettigheim	Datum	05.05.2015
Brunnen	GWM B1	RWSP	3,00	Filter	10 - 18 m	Bemerkung	
		[m u. POK]		[m u. GOK]			

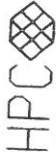


HYDRA 2.0 - AUSWERTUNG GRUNDWASSERHYDRAULISCHER TESTS

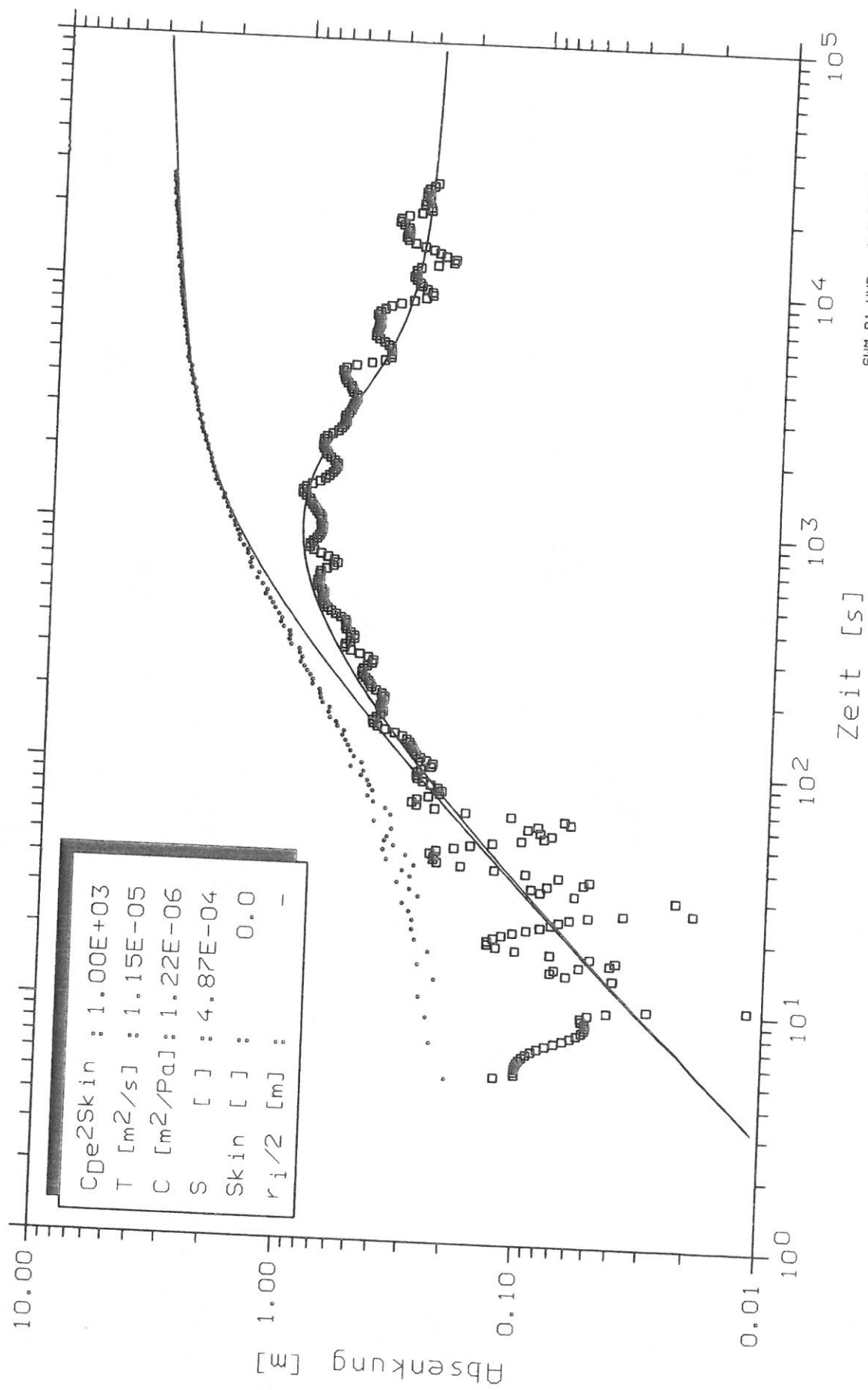
Projekt: Tongrube
Bohrung: GW1 B1
Datum : 05.05.2015

Aquifer : 10.0-18.0m
Geologie: Lias

Projektnummer: 061178
RWSP[m u.MP.]: 3.000
Pumprate[l/s]: 0.0400



Geohydraulik / Hydrogeologie
Schütte 12, 72108 Rottenburg
Telefon 0049 (0)7472 158-170



HYDRA 2.0 - AUSWERTUNG GRUNDWASSERHYDRAULISCHER TESTS

Projekt: Tongrube

Bohrung: GWM BI

Datum : 05.05.2015

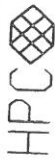
Aquifer : 10.0-18.0m

Geologie: Lias

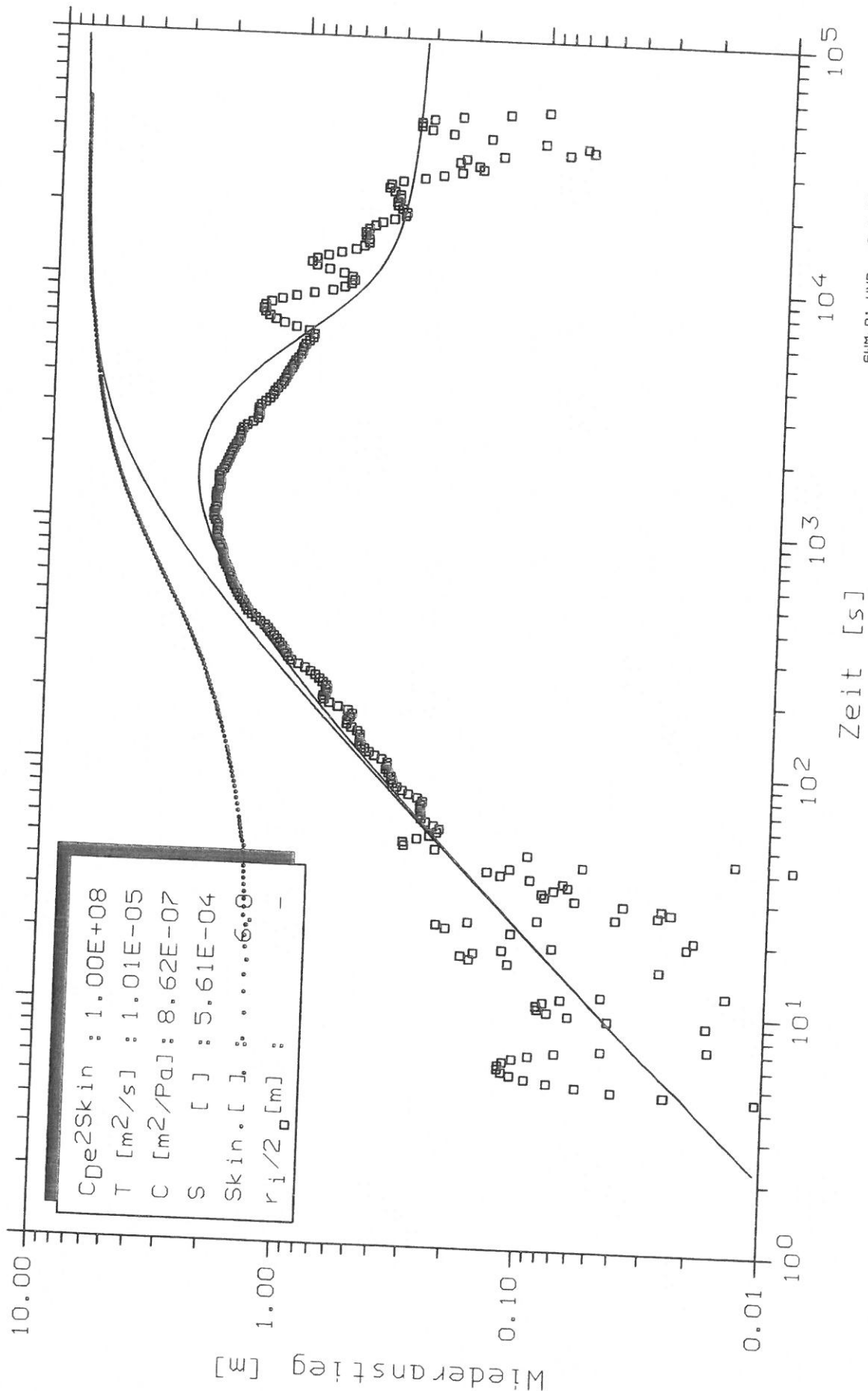
Projektnummer: 061178

RWSP[m u.MP.]: 3.000

Pumprate[l/s]: 0.0400



Geohydraulik / Hydrogeologie
Schütte 12, 72108 Rottenburg
Telefon 0049 (0)7472 158-170



Pumpversuchsauswertung

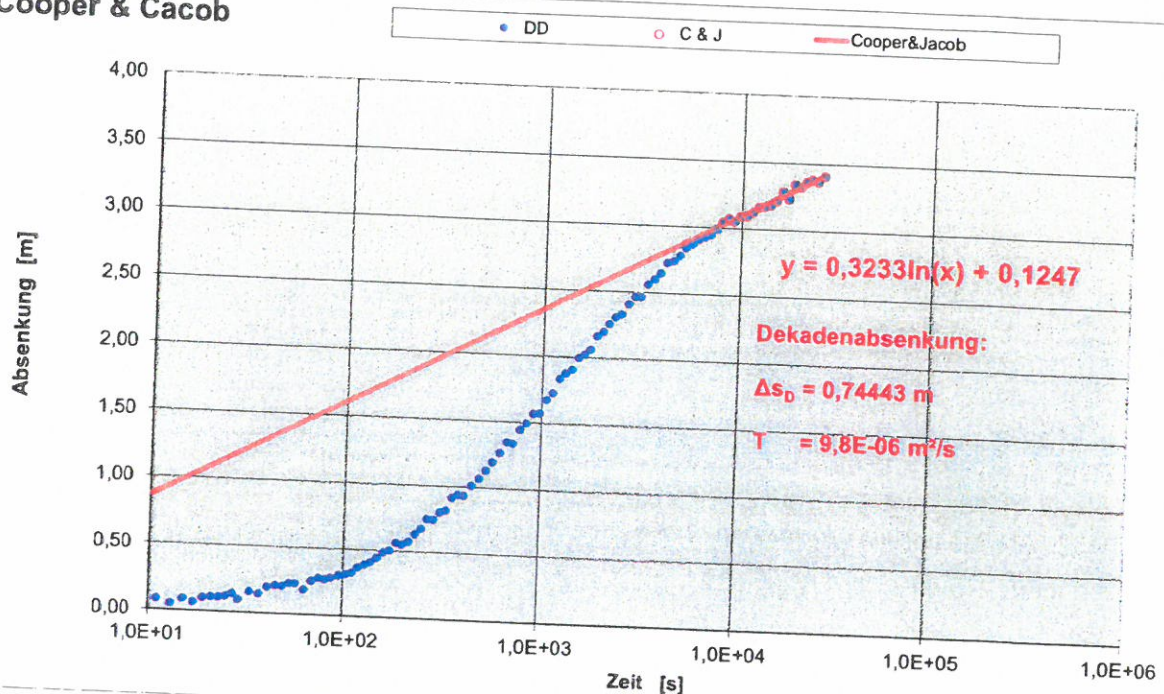
Absenkung



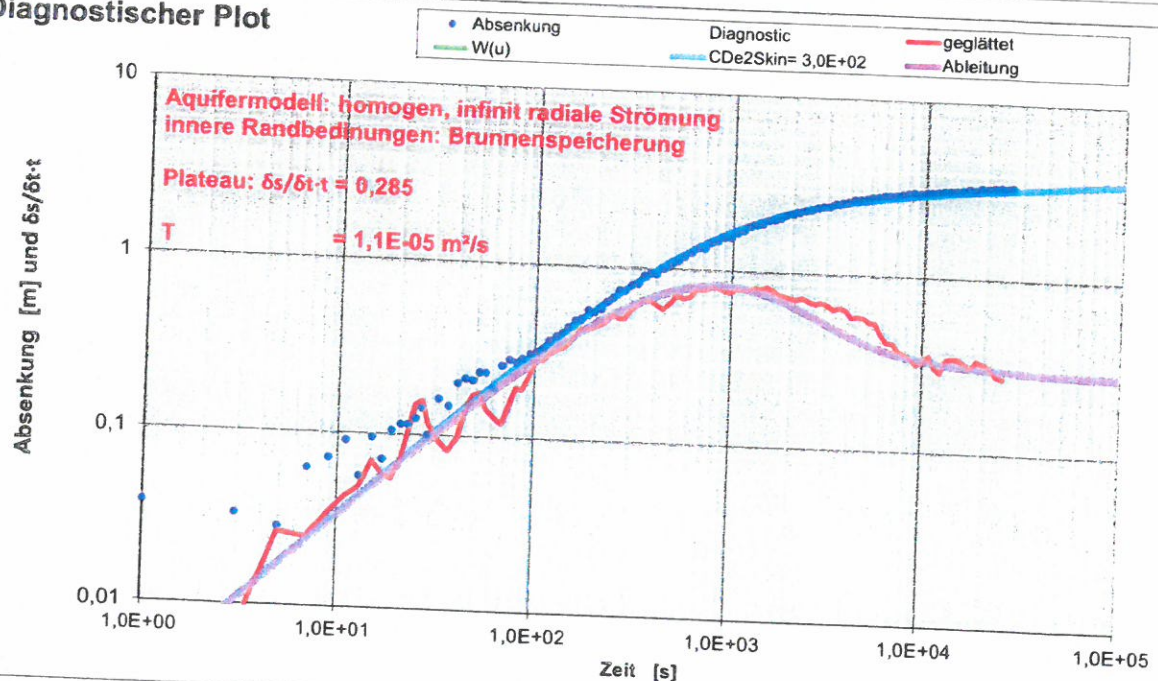
Projekt Erw. Tongrube
 Projektnummer 2061178
 RWSP gespannt 3,17 m
 Pumprate $Q = 0,00004 \text{ m}^3/\text{s}$
 Radius $r = 0,0625 \text{ m}$
 $r_E = 0,06 \text{ m}$

Brunnen GWM B1
 GWM GWM B1
 Aquifertop 10,0 m
 Aquiferbasis 18,0 m
 Plateau 0,285 m $T = 1,1E-05 \text{ m}^2/\text{s}$
 $t_{1/10} 1 \text{ s}$ $S = 1,7E-03$
 Brunnentypkurve Nr.: 8 / 1.Rand (+/-) m
 $C_{De}^{2Skin} = 300$ L 2.Rand (+/-) m
 Skin 0 // 2.Rand (+/-) m

Cooper & Jacob



Diagnostischer Plot



Pumpversuchsauswertung

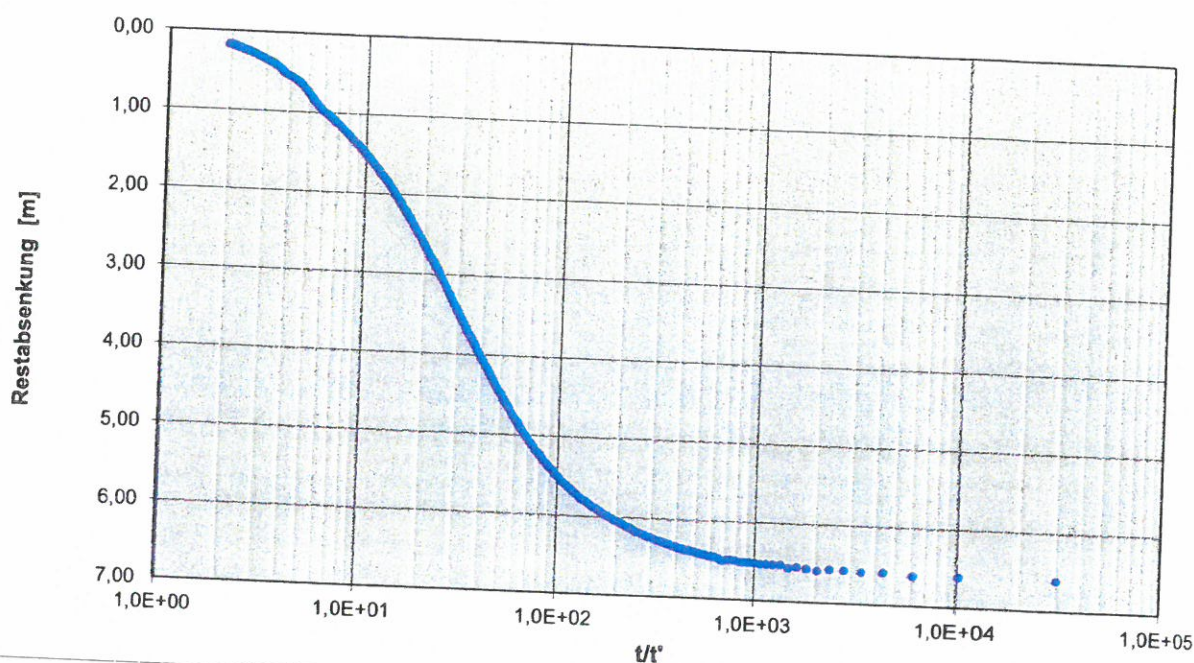
Wiederanstieg



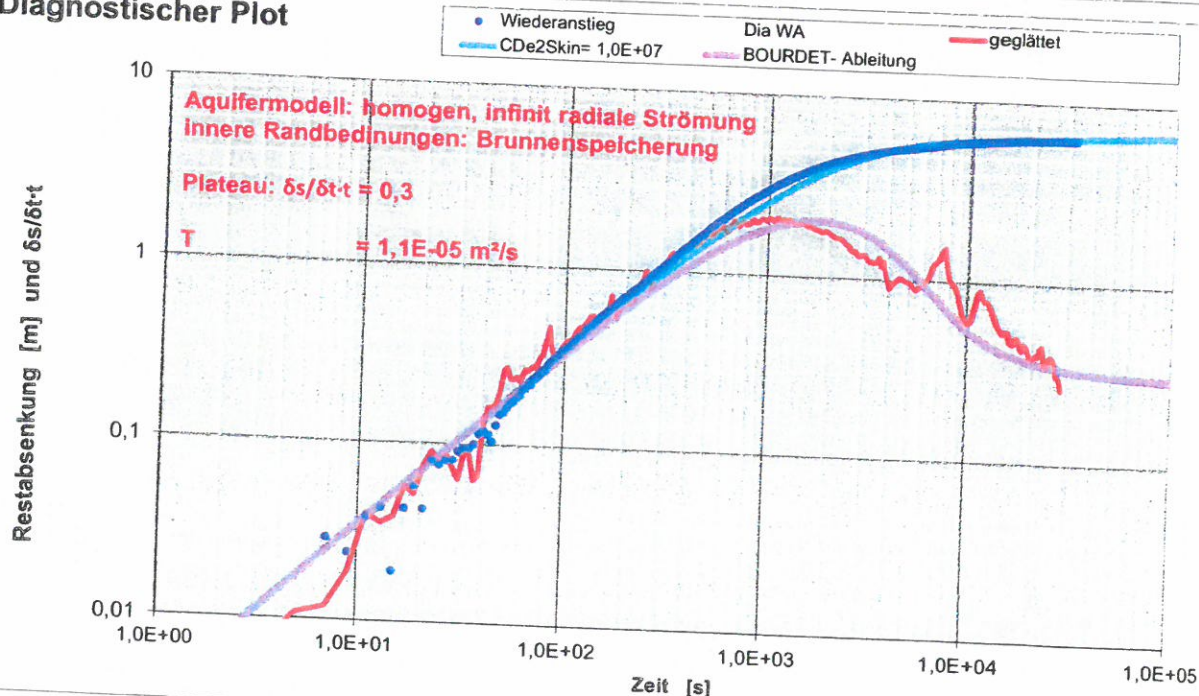
Projekt Erw. Tongrube
Projektnummer 2061178
RWPS gespannt 3,17 m
Pumprate $Q = 0,00004 \text{ m}^3/\text{s}$
Radius $r = 0,0625 \text{ m}$
 $r_B = 0,00 \text{ m}$

Brunnen GWM B1
GWM GWM B1
Aquifertop 10,0 m
Aquiferbasis 18,0 m
Plateau 0,3 m $T = 1,1E-05 \text{ m}^2/\text{s}$
 $t_{1/10}$ 1 s $S = 1,1E-03$
Brunnentypkurve Nr.: 15 / 1.Rand (+/-) m
 $C_D e^{2S_{\text{skin}}} = 1,0E+07$ L 2.Rand (+/-) m
Skin 5 // 2.Rand (+/-) m

Theis Wiederanstieg



Diagnostischer Plot



☐ Slug/Bail ☐ _____
Schurfabmessungen siehe Rückseite

Projekt

Pr.-Nr. 2061178

☐ GOK ☐ ROK ☒ _____

Grundwasserleiter

Pumpentyp

SQ 3-40

Einbautiefe Pumpe

19,50 m Schlauchleitung

Meßfahrzeug Nr.

MDL-Nummer

Dateiname

Religheim - B.1 - 0.1

125 mm bis 19 m

von 100 m bis 180 m

von 90 m bis 20,0 m

14.01.2011

Protokoll
GWM-Test
Schurf

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!
☒ Pump ☐ Auffüll ☐ KRI
☐ Pump ☐ Versickerung

☐ Slug/Bail ☐ _____
 Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle

B1

Projekt

Wienerberger Zieg-
industrie

Pr.-Nr.

206.1178

Bezugspunkt

für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

☐ GOK ☐ ROK

X 0,82 u. GOK

Grundwasserleiter

Pumpentyp

SP 2 A6

Einbautiefe Pumpe

13,49 m Schlauchleitung 50 m

Meßfahrzeug Nr.

5-HP-801 MDL-Nummer 118

Dateiname

Reichheim-B1.02 (Beaver)

81-040515, 81B-040515

Rohrdurchmesser gemessen/geleitet 125 mm bis 20,69 m
 Filterrohr 10 von 40 m bis 40 m
 Filterkies von m bis m

Datum:	WSP	WSP	Rate	Leitf.	Temp.	pH	O ₂	Bemerkungen und Vorgänge	
Uhrzeit	Lichtlot	Sonde	Werteablesungen direkt von den Meßgeräten in ca. 10 (Versuchsbeginn) bis 20-minütigen Abständen						
m	m	l/s	µS/cm	°C			mg/l		
5.5.15									
13.30									Ankunft
13.39	2,86								
14.53	2,69								WSP vor Einbau DL
14.55	2,69	2,69							Meßbeginn (Beaver: Reichheim-B1.02)
15.27		15,90	PUS						Eichung DL
15.29	2,78	2,78							Meßbeginn DL
15.34		2,78	0,04						Eichung
15.38	2,52	?	0,03						Pumpe an 381,5371 m ³
15.48									zuerst kein Fall! Sande -> Pumpe an
15.52		15,64	PUS						Meßbeginn
15.54	2,99	2,99							Meßbeginn DL (81B-040515)
15.57		2,97	0,043						381,5477 m ³
16.00	4,45	4,47	0,040	2450	13,3	7,47	1,10	21	Eichung
16.20		4,52	0,075						Pumpe an
16.35		11,91	0,72						381,5590 m ³
16.43		17,09	>0,4						Q ↑
18.45	PUS	10,63	0,043	2510	12,8	7,51	7,25	83	Pumpe an -> Pumpe an, Pumpe an
18.56		18,63	0,38						Ranf 0,04 l
5.5.15									Q ↑ 382,2130 m ³
7.59	3,16	3,18							Pumpe an 382,4186 m ³
8.04		3,18	0,04						
8.09		4,04	0,04	2540	11,7	7,72	5,45	201	Pumpe an
									382,4333 m ³
Vorgabe für Testdauer/Ziel:									Meßende
Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt				Testleiter				Ende Ausbau	
Ort								Bauüberwachung	

**Protokoll
GWM-Test
Schurf**

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!
☒ Pump ☐ Auffüll ☐ KRI
☐ Pump ☐ Versickerung

☐ Slug/Bail ☐ _____
 Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle

B1

Projekt

Wienerberger Ziegelindustrie
GmbH

Pr.-Nr. 206.1178

Bezugspunkt

für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

☐ GOK ☐ ROK ☒ 0,82-604

Grundwasserleiter

Pumpentyp

SP2 A6

Einbautiefe Pumpe

19,49 m Schlauchleitung 50 m

Meßfahrzeug Nr.

SHP-801 MDL-Nummer 118

Dateiname

B1B-04515

Rohrdurchmesser
gemessen/geleitet

125 mm bis 20,69 m

Filterrohr

von 10 m bis 18 m [60x]

Filterkies

von m bis m

Datum:	WSP	WSP	Rate	Leitf.	Temp.	pH	O ₂	Redox	Bemerkungen und Vorgänge
5.5.15	Lichtlot	Sonde	Werteablesungen direkt von den Meßgeräten in ca. 10 (Versuchsbeginn) bis 20-minütigen Abständen						z. B. Schalten Pumpe, Ein/Austauschen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.
Uhrzeit	m	m	l/s	µS/cm	°C		mg/l	mV	
									Ankunft
									WSP vor Einbau
									Meßbeginn
									Eichung
8:19		4,74	0,0397	2,46	12	7,48	2,05	130	
8:29	5,17	5,20	0,0408	2,45	12,2	7,46	1,63	117	Wasser Trieb (mittel) 392,4565
8:39		6,40	0,0393	2,43	12,3	7,45	1,45	105	392,4797
8:49		5,59	0,0395	2,44	12,7	7,46	1,25	96	392,5029
9:00	5,71	5,73	0,0395	2,46	12,7	7,47	1,05	84	392,5275
9:09		5,86	0,0395	2,46	12,7	7,47	1,05	84	
9:29		5,99	0,0402	2,48	12,8	7,48	0,80	75	392,5744
9:30	5,98	6,00							392,6226
9:49		6,09	0,0395	2,48	12,8	7,48	0,65	68	
10:00	6,10	6,12							392,6702
10:09		6,15	0,0393	2,49	12,9	7,48	0,60	63	
10:40		6,23	0,0392	2,49	13,1	7,47	0,50	54	392,7175
11:03	6,28	6,28	0,0395	2,49	13,1	7,47	0,45	50	H ₂ O leiser 392,793543
11:36		6,30	0,0387	2,49	13,1	7,47	0,40	45	392,8182
11:49			0,0402	2,13	13,6	7,31	0,81	90	392,9255
11:55	6,34	6,37	0,0408	2,49	12,9	7,47	0,40	42	WTW Refer 24 am Ende Ablauf 392,9696
12:16		6,37	0,0403	2,49	12,9	7,47	0,40	38	
12:36	6,42	6,44	0,0297	2,49	13,0	7,46	0,35	35	393,0186
12:56		6,48	0,0396	2,49	13,1	7,46	0,35	32	393,0658
									393,1180
Vorgabe für Testdauer/Ziel:									Meßende
Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt									Ende Ausbau
Ort Reutheim, den 5.5.15									Bauüberwachung
Testleiter Zisch									

**Protokoll
GWM-Test
Schurf**

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!
☒ Pump ☐ Auffüll ☐ KRI
☐ Pump ☐ Versickerung

☐ Slug/Bail ☐ _____
 Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle

B1

Projekt

Wienerberger Ziegelfabrik
Industrie GmbH

Pr.-Nr.

206 1178

Bezugspunkt

für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

☐ GOK ☐ ROK ☒ 0,92 m über

Grundwasserleiter

Rohrdurchmesser
gemessen/gefütet

125 mm bis 20,63 m

Filterrohr

von 10 m bis 18 m [GOK]

Filterkies

von m bis m

Pumpentyp

SP2 A6

Einbautiefe Pumpe

19,4 m Schlauchleitung 50 m



Meßfahrzeug Nr.

S-AP 801 MDL-Nummer 118

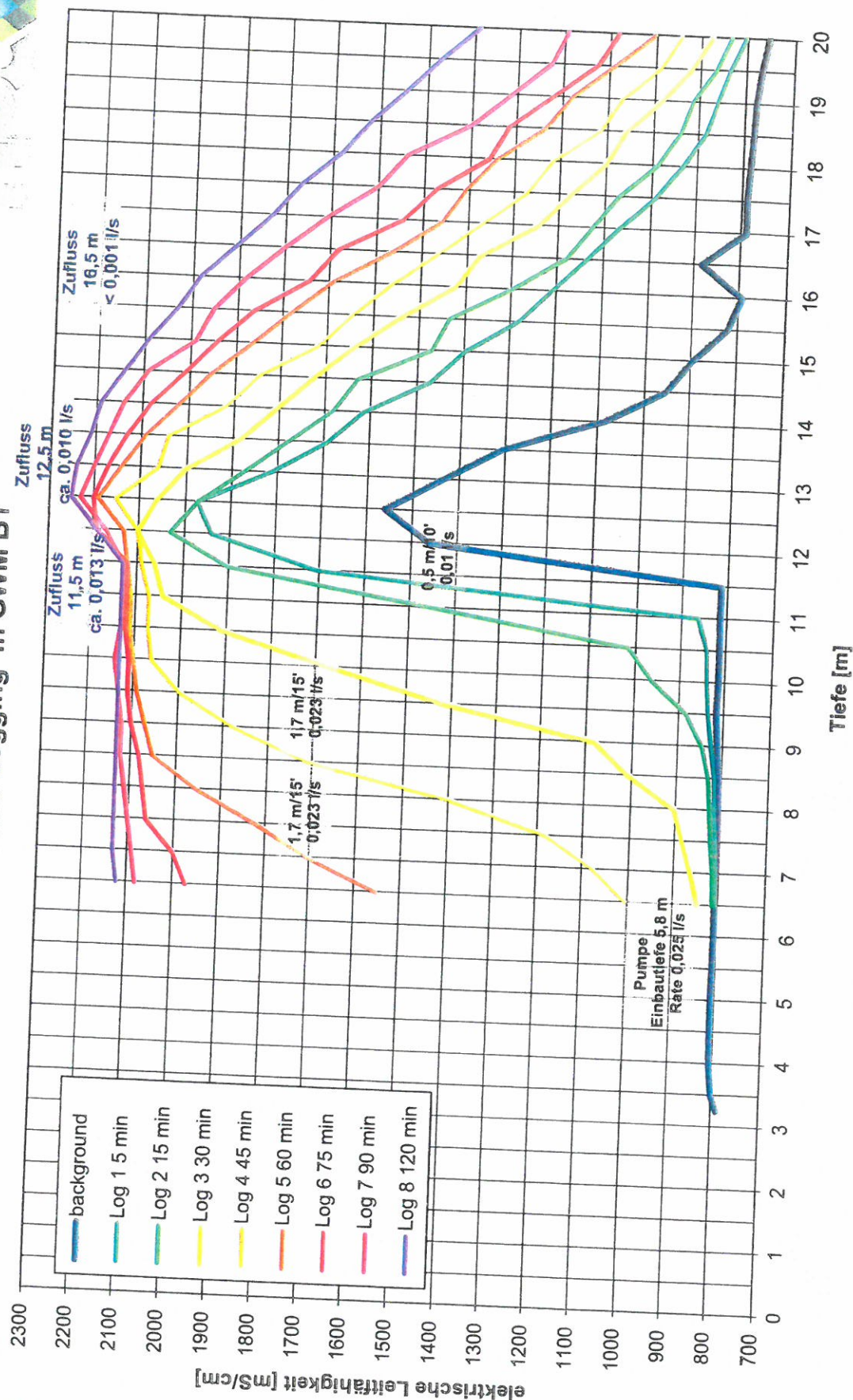
Dateiname

B1B-04515

Datum:	WSP	WSP	Rate	Leitf.	Temp.	pH	O ₂	Redox	Bemerkungen und Vorgänge
<u>5.5.15</u>	Lichtlot	Sonde	Werteablesungen direkt von den Meßgeräten in ca. 10 (Versuchsbeginn) bis 20-minütigen Abständen						z. B. Schalten Pumpe, Ein/Austauschen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.
Uhrzeit	m	m	l/s	µS/cm	°C		mg/l	mV	
									Ankunft
<u>5.5.15 16:20</u>	<u>6,50</u>		<u>0,04</u>	<u>2140</u>	<u>11,8</u>	<u>7,27</u>	<u>1,58</u>	<u>+90</u>	WSP vor Einbau
									Meßbeginn Isotopenlesung Werte
<u>13:16</u>	<u>6,46</u>	<u>6,48</u>	<u>0,0401</u>	<u>2,49</u>	<u>13,1</u>	<u>7,46</u>	<u>0,35</u>	<u>29</u>	Eichung
<u>13:37</u>		<u>6,50</u>	<u>0,0352</u>	<u>2,49</u>	<u>13,5</u>	<u>7,45</u>	<u>0,35</u>	<u>26</u>	
<u>13:58</u>	<u>6,52</u>	<u>6,50</u>	<u>0,0406</u>	<u>2,48</u>	<u>13,6</u>	<u>7,45</u>	<u>0,35</u>	<u>23</u>	
<u>14:19</u>		<u>6,55</u>	<u>0,0404</u>	<u>2,48</u>	<u>13,2</u>	<u>7,45</u>	<u>0,35</u>	<u>20</u>	
<u>14:42</u>	<u>6,53</u>	<u>6,54</u>	<u>0,0380</u>	<u>2,48</u>	<u>13,3</u>	<u>7,45</u>	<u>0,35</u>	<u>17</u>	
<u>15:04</u>		<u>6,54</u>	<u>0,0386</u>	<u>2,48</u>	<u>13,3</u>	<u>7,44</u>	<u>0,30</u>	<u>15</u>	
<u>15:26</u>	<u>6,58</u>	<u>6,61</u>	<u>0,040</u>	<u>2,48</u>	<u>13,2</u>	<u>7,45</u>	<u>0,30</u>	<u>13</u>	
<u>15:54</u>	<u>6,49</u>	<u>6,51</u>	<u>0,0382</u>	<u>2,48</u>	<u>13,1</u>	<u>7,44</u>	<u>0,30</u>	<u>13</u>	* 15:52 Probennehmer-ventil getestet
<u>16:04</u>									
<u>16:40</u>	<u>9,20</u>	<u>9,58</u>		<u>2,48</u>	<u>13,0</u>	<u>7,47</u>	<u>0,85</u>	<u>23</u>	Isotopenlesung
<u>6.5.15</u>									Pumpe aus
<u>7:51</u>	<u>3,28</u>								
<u>8:03</u>	<u>3,28</u>	<u>3,30</u>	<u>0,02</u>						
<u>8:20</u>		<u>4,36</u>							Pumpe an
<u>8:25</u>	<u>5,21</u>	<u>5,30</u>		<u>2140</u>	<u>11,9</u>	<u>7,27</u>	<u>0,80</u>	<u>+105</u>	Isotopenlesung
<u>8:51</u>	<u>4,56</u>	<u>4,64</u>							Werte vom Isotopenlesung
<u>11:03</u>	<u>3,34</u>	<u>3,36</u>							Pumpe aus
<u>11:03</u>									
<u>15:52</u>	<u>6,40</u>	<u>6,54</u>	<u>0,0382</u>	<u>2,48</u>	<u>13,1</u>	<u>7,44</u>	<u>0,30</u>	<u>13</u>	Meßende
Vorgabe für Testdauer/Ziel:									Meßende
Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt									Ende Ausbau
Ort <u>Rehlfeld</u> , den <u>5.5.15</u>									Bauüberwachung
Testleiter <u>Zisch</u>									

Projekt: Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rettigheim in Mühlhausen OT Rettigheim			
Darstellung: Fluid-Logging-Messung an der Grundwassermessstelle GWM B 1/2015	Anlage:	7b	
	Projekt-Nr.:	2061178	
	Maßstab:	o.M.	
	Zeichnungs-Nr.:	Anl07a-07c_Spiegel.dwg	
		Datum	Name
	gezeichnet:	26.01.2016	mh
	geprüft:	26.01.2016	cm
Bauherr/Auftraggeber:  Wienerberger Wienerberger GmbH Oldenburger Allee 26 D-30659 Hannover		Planverfasser:  HPC AG Postfach 11 13, 34226 Fulda Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fulda Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82	
Pfad: N:\WIN32APP\Projekt\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_01_26_Antrag\Anl07a-07c_Spiegel.dwg			

Erweiterung der Tongrube Rettigheim - Wienerberger GmbH Fluid-Logging in GWM B1



Fluid-Logging-Messungen



Projekt Tongrube Rettigheim
Messstelle B 1
Rohrdurchmesser 125 mm bis 19,0 m
Filterrohr von 10,0 m bis 18,0 m
Filterkies von 9,0 m bis 20,0 m

Pr.-Nr. 2061178
Geolog. Schicht Schwarzjura-Tonstein
Pumpentiefe 5,77 m
Pumpbeginn 13:41 Uhr
Pumprate 0,025 l/s

Pumpbeginn Zeit 13:41	background 12:54	Log 1 5 min 13:46	Log 2 15 min 13:56	Log 3 30 min 14:11	Log 4 45 min 14:26	Log 5 60 min 14:41	Log 6 75 min 14:56	Log 7 90 min 15:11	Log 8 120 min 15:41
WSP m uROK	3,68	3,23	3,91	4,12	4,32	4,41	4,48	4,52	4,60
Leitf.	$\mu\text{S/cm}$	$\mu\text{S/cm}$	$\mu\text{S/cm}$	$\mu\text{S/cm}$	$\mu\text{S/cm}$	$\mu\text{S/cm}$	$\mu\text{S/cm}$	$\mu\text{S/cm}$	$\mu\text{S/cm}$
3,25	788								
3,50	800								
4,00	807								
4,50	808								
5,00	808								
5,50	807								
6,00	806								
6,50	806	805	812	845	1004	1551	1970	2080	2120
7,00	805	806	813	861	1076	1705	2000	2090	2130
7,50	805	809	820	883	1180	1822	2060	2100	2130
8,00	805	814	825	903	1399	1953	2070	2110	2130
8,50	807	816	830	1007	1712	2050	2080	2120	2130
9,00	811	826	847	1081	1878	2070	2100	2120	2130
9,50	816	835	883	1416	1997	2090	2110	2130	2130
10,00	813	840	963	1665	2060	2100	2110	2140	2130
10,50	813	843	1016	1910	2070	2110	2120	2130	2130
11,00	814	863	1449	2040	2070	2110	2120	2130	2130
11,50	813	1703	1903	2060	2090	2120	2120	2130	2130
12,00	1460	1941	2030	2100	2100	2130	2190	2170	2190
12,50	1560	1973	1972	2060	2150	2190	2200	2230	2250
13,00	1437	1816	1873	2000	2060	2140	2170	2200	2240
13,50	1307	1693	1778	1884	2040	2090	2130	2170	2210
14,00	1086	1615	1682	1805	1918	2020	2080	2140	2190
14,50	952	1473	1631	1727	1848	1952	2010	2090	2140
15,00	896	1398	1471	1640	1718	1865	1943	1989	2090
15,50	820	1281	1435	1539	1646	1782	1865	1953	2030
16,00	792	1208	1296	1423	1563	1692	1745	1886	1983
16,50	883	1135	1180	1370	1464	1565	1683	1801	1907
17,00	787	1068	1125	1243	1368	1458	1544	1709	1830
17,50	789	990	1070	1174	1271	1409	1473	1601	1768
18,00	784	932	988	1099	1217	1341	1359	1541	1682
18,50	780	884	940	1061	1115	1235	1317	1402	1621
19,00	777	860	914	982	1072	1179	1220	1314	1545
19,50	767	834	865	920	989	1090	1126	1226	1472
20,00	755	803	833	876	944	1003	1083	1192	1389

**Protokoll
GWM-Test
Schurf**

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!

☐ Pump ☐ Auffüll ☐ KRI
☐ Pump ☐ Versickerung

fluid logging

☐ Slug/Bail ☐ _____

Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle

B1

Projekt

Reithaus

Pr.-Nr. 20.1178

Bezugspunkt

für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

☐ GOK ☒ ROK ☐ _____

Rohrdurchmesser
gemessen/geleitet

125 mm bis m

Filterrohr

von m bis m

Filterkies

von m bis m

Grundwasserleiter

Pumpentyp

SQ-2-35

Einbautiefe Pumpe

5.77 m

Schlauchleitung m

Meßfahrzeug Nr.

18

MDL-Nummer 118

Dateiname

31.065.mdl

Datum:	WSP	WSP	Rate	Leitf.	Temp.	pH	O ₂	Bemerkungen und Vorgänge
<u>6.5.15</u>	Lichtlot	Sonde	Werteablesungen direkt von den Meßgeräten in ca. 10 (Versuchsbeginn) bis 20-minütigen Abständen					z. B. Schalten Pumpe, Ein/Austauschen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.
Uhrzeit	m	m	l/s	µS/cm	°C		mg/l	
								Ankunft
<u>11:40</u>	<u>3.34</u>							
<u>12:08</u>	<u>3.32</u>							WSP vor Einbau SQ
<u>12:14</u>	<u>3.32</u>							Meßbeginn
<u>12:26</u>			<u>0.38 l/s</u>					Eichung Start Fluidaustausch
<u>12:29</u>	<u>3.23</u>							aus; erneut an
<u>12:41</u>	<u>3.2</u>		<u>0.38 l/s</u>					
<u>12:42</u>								
								Ende Fluidaustausch
<u>13:19</u>								
<u>13:21</u>	<u>3.05</u>	<u>401</u>						Meßbeginn
<u>13:40</u>	<u>3.13</u>	<u>3.11</u>						Eichung
<u>13:41</u>	<u>3.12</u>	<u>0.025</u>						
<u>13:46</u>	<u>3.62</u>	<u>0.027</u>						Start PV für FL
<u>13:53</u>	<u>3.72</u>	<u>0.025</u>						
<u>14:00</u>	<u>3.98</u>	<u>0.0254</u>						
<u>14:01</u>	<u>4.06</u>	<u>4.05</u>						
<u>14:40</u>	<u>4.41</u>	<u>4.38</u>						
<u>15:17</u>	<u>4.54</u>	<u>4.52</u>	<u>0.0253</u>	<u>2224</u>	<u>16.1</u>	<u>7.41</u>	<u>2.96</u>	
<u>15:38</u>	<u>4.59</u>	<u>4.57</u>	<u>0.0248</u>	<u>2334</u>	<u>14.9</u>	<u>7.40</u>	<u>2.11</u>	
<u>15:47</u>	<u>4.56</u>	<u>4.53</u>						
								Pumpe aus
<u>15:49</u>								
Vorgabe für Testdauer/Ziel:								Meßende
Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt								Ende Ausbau
Ort <u>Reithaus</u> , den <u>6.5.15</u>								Bauüberwachung
Testleiter <u>mbw / josh.</u>								

Projekt: Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rettigheim in Mühlhausen OT Rettigheim			
Darstellung: Absenkdiagramm der Pumpmaßnahmen an der Grundwassermessstelle GWM B 2/2015	Anlage:	7c	
	Projekt-Nr.:	2061178	
	Maßstab:	o.M.	
	Zeichnungs-Nr.:	Anl07a-07c_Spiegel.dwg	
		Datum	Name
	gezeichnet:	26.01.2016	mh
	geprüft:	26.01.2016	cm
Bauherr/Auftraggeber:  Wienerberger Wienerberger GmbH Oldenburger Allee 26 D-30659 Hannover	Planverfasser:  HPC AG Postfach 11 13, 34226 Fuldatal Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fuldatal Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82		
Pfad: N:\WIN32APP\Projekt\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_01_26_Antrag\Anl07a-07c_Spiegel.dwg			

HYDRA 2.0 - AUSWERTUNG GRUNDWASSERHYDRAULISCHER TESTS

Projekt: Tongrube

Bohrung: GWM B2

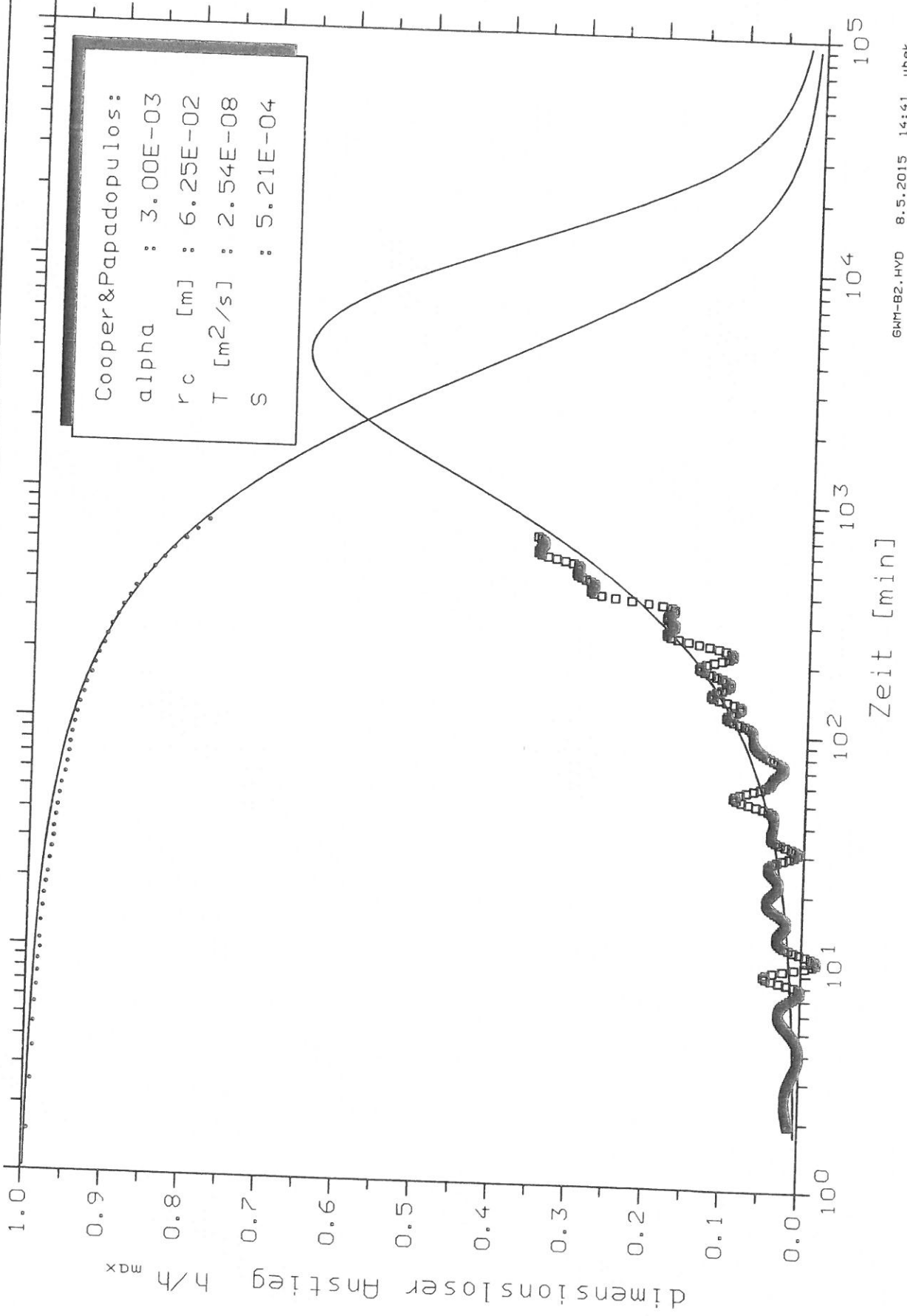
Datum : 04.05.2015

Aquifer : 10.0-18.0m
Geologie: Lias

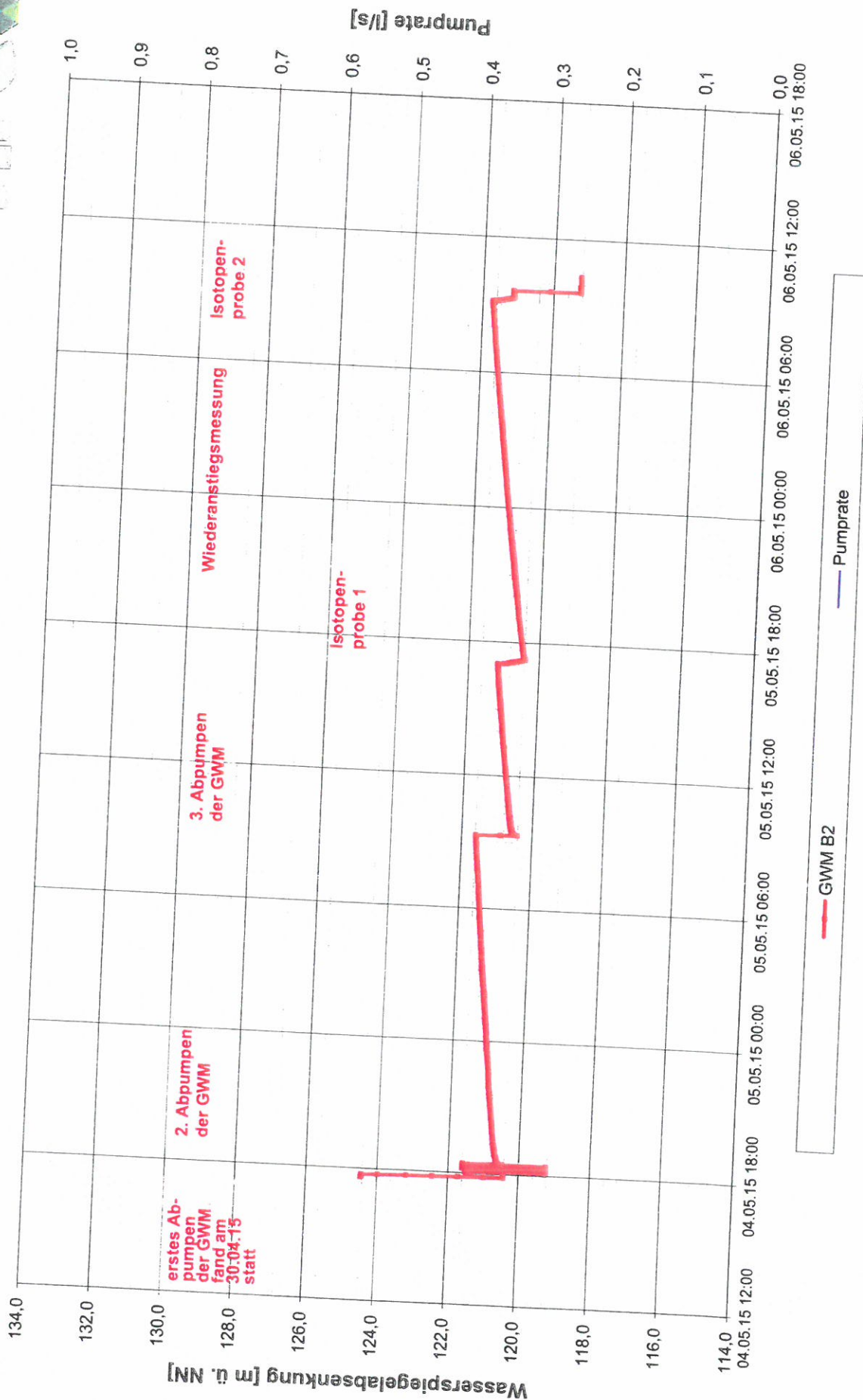
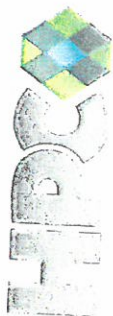
Projektnummer: 061178
RWSP[m u.MP.]: 14.36
Pumprate[l/s]: 0.0000



Geohydraulik / Hydrogeologie
Schütte 12, 72108 Rottenburg
Telefon 0049 (0)7472 158-170



Erweiterung der Tongrube Rettigheim - Wienerberger GmbH Pumpversuch und Probenahme in GWM B2



HYDRA 2.0 - AUSWERTUNG GRUNDWASSERHYDRAULISCHER TESTS

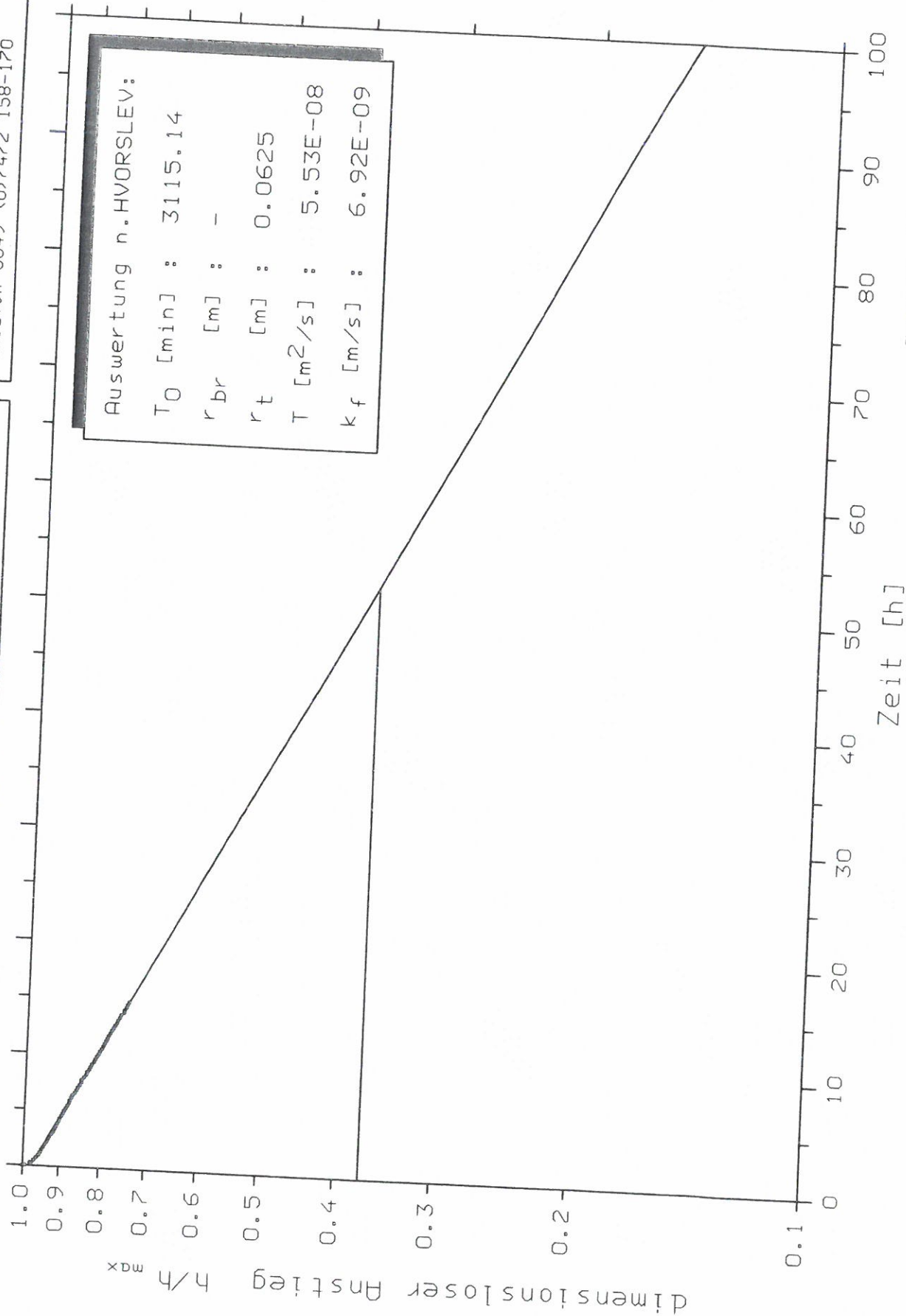
Projekt: Tongrube
Bohrung: GW B2
Datum : 04.05.2015

Aquifer : 10.0-18.0m
Geologie: Lias

Projektnummer: 061178
RWSP[m u.Mp.]: 14.36
Pumprate[l/s]: 0.0000



Geohydraulik / Hydrogeologie
Schütte 12, 72108 Rottenburg
Telefon 0049 (0)7472 158-170



Auswertung n.HVORSLEV:

T_0 [min] : 3115.14
 r_{br} [m] : -
 r_t [m] : 0.0625
 T [m²/s] : 5.53E-08
 k_f [m/s] : 6.92E-09

☐ Slug/Bail ☐ _____
Schurfabmessungen siehe Rückseite

Schurfabmessungen siehe Rückseite

B2

Tongrube Rethysheim

Pr.-Nr.: 206.1178

☐ GOK ☐ ROK ☒ _____

für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

[REDACTED]

~~D1082~~ SQ2-35

19,70 m Schlauchleitung m

MDL-Nummer

Reitheim - B2 - 0.1

125 mm bis 19,0 m

von 10,0 m bis 18,0 m

von 9,0 m bis 20,0 m

[illegible]

☐ Slug/Bail ☐ _____
Schurfabmessungen siehe Rückseite

Pr.-Nr. 206 1178

Grundwasserleiter

50-2-35

18,52 m Schlauchleitung

TU-HP 103 MDL-Nummer

Reicheim-B2-02

Datum:	WSP	WSP	Rate	Leitf.	Temp.	pH	O ₂	Bemerkungen und Vorgänge
4.5/5.5	Lichtlot	Sonde	Wertablesungen direkt von den Meßgeräten in ca. 10 (Versuchsbeginn) bis 20-minütigen Abständen					
Uhrzeit	m	m	l/s	µS/cm	°C		mg/l	
17:28								Ankunft
17:28	14,52							
17:40		5,20	P.C.S					WSP vor Einbau
17:36	14,36	14,36						Meßbeginn
17:48	14,36	0,24						Eichung
17:50	16,50							Pumpe an
17:51	16,90							
17:51	17,32							
17:52	17,80							
17:53	18,20							
18:28	17,19	0,24						Pumpe aus
18:29	17,64							Pumpe an
18:29	17,78							
18:30	18:28							
5.5.15								Pumpe aus
8:17	17,37	17,22						
8:20		17,72	0,19					
8:22		18,42	0,2	2430	17,1	8,28	0,74	88
8:27	18,52	18,25						
12:02	18,06							
15:30	17,82							
Vorgabe für Testdauer/Ziel:								Meßende
Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt								Ende Ausbau
Ort R. Baum, den 5.5.15	Testleiter Zischr							Bauüberwachung

☐ Slug/Bail ☐ _____
Schurfabmessungen siehe Rückseite

32

Wieneberger Biegelindustrie GmbH

Pr.-Nr. 206 1178

☐ GOK ☐ ROK ☒ 0,75 € per uur

für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

Grundwasserleiter

Rohrdurchmesser 125 mm bis 19,72 m

Pumpentyp

500-2-35

Filterrohr von 16 m bis 18 m hoch

Einbautiefe Pumpe

18,52 m Schlauchleitung m

Filterkies von m bis m

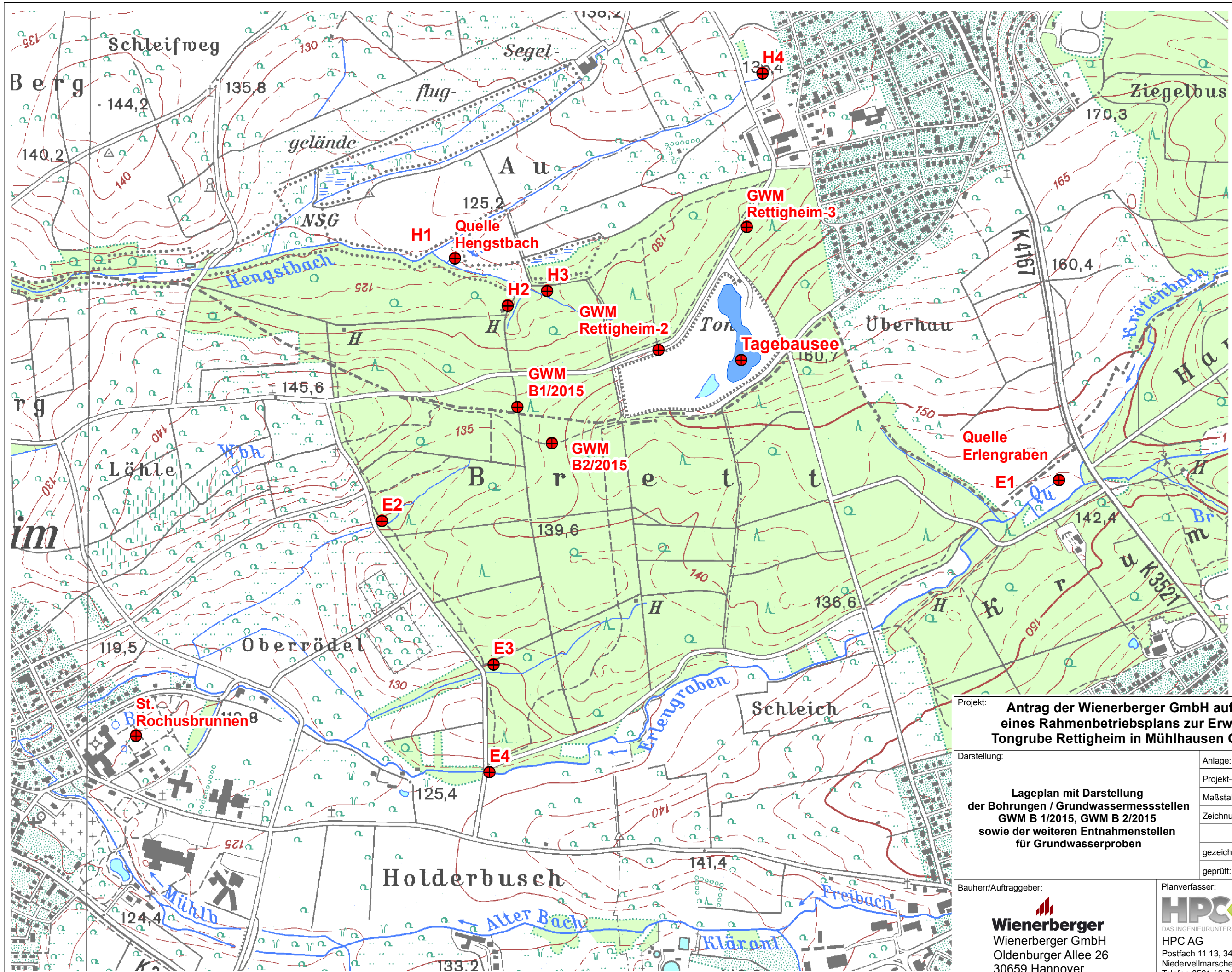
Meßfahrzeug Nr.

MDL-Nummer

Dateiname

Redenheim - B2_02

[illegible]



Projekt:
**Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung
eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der
Tongrube Rettigheim in Mühlhausen OT Rettigheim**

Darstellung:

**Lageplan mit Darstellung
der Bohrungen / Grundwassermessstellen
GWM B 1/2015, GWM B 2/2015
sowie der weiteren Entnahmenstellen
für Grundwasserproben**

Anlage:	8	
Projekt-Nr.:	2061178	
Maßstab:	1:10.000	
Zeichnungs-Nr.:	2061178c_UebGWM	
	Datum	Name
gezeichnet:	26.01.2016	ura
geprüft:	26.01.2016	cm

Bauherr/Auftraggeber:

Wienerberger
Wienerberger GmbH
Oldenburger Allee 26
30659 Hannover

Planverfasser:
HPC
DAS INGENIEURUNTERNEHMEN
HPC AG
Postfach 11 13, 34226 Fulda
Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fulda
Telefon 0561 / 9 81 83-10, Telefax 0561 / 9 81 83-82

Pfad: N:\WIN32APP\Projekte\wienerberger\Rettigheim\2061178c_UebGWM.mxd



Anhang 1

**Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten
Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den
Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer
Oberrhein. – Teil B: Ziegeleirohstoffe
10.03.2004;
Bearbeiter: Dr. A. Gillhaus, Dr. W. Werner**



LANDESAMT FÜR GEOLOGIE, ROHSTOFFE UND BERGBAU
BADEN-WÜRTTEMBERG

79095 Freiburg i. Br. • Albertstr. 5 • Telefon: (0761) 2 04-0 • Telefax: (0761) 2 04-44 38

**Rohstoffgeologische Beurteilung
von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten
für den Festgesteinsabbau
in der Region Mittlerer Oberrhein**

Teil B: Ziegeleirohstoffe

– Arbeiten zur Umsetzung des Rohstoffsicherungskonzepts –

Az.: 4704//04 2107

Datum: 11.03.2004

Bearbeiter: Dr. A. Gillhaus & Dr. W. Werner

Mitarbeiter: Dipl.-Ing. (FH) J. Hahn, J. Crocoll

Seitenzahl: 11

Anlagen: 1 Karte im Maßstab 1 : 14 000, 3 geol. Profile, 4 Bohrprofile mit
Schichtenverzeichnissen (6 S.), Fotodokumentation der Bohrkerne (13 S.),
geochemisch-mineralogische Analyseergebnisse (1 S.)

Auftraggeber: Regionalverband Mittlerer Oberrhein, Baumeisterstr. 2,
76137 Karlsruhe sowie
Fa. Trost Terracotta GmbH & Co., Postfach 1153,
69227 Rauenberg

Bezug: Auftrag des Regionalverbands Mittlerer Oberrhein vom 27.11.2002 (Az.:
6.3.3.116/5) sowie Schreiben der Fa. Trost vom 21.05.2003
(R. Göhringer/Schu) und vom 26.06.2003 (C. Herrmann)

Betreff: Rohstoffgeologische Beratung des Regionalverbands Mittlerer Oberrhein
im Rahmen des Rohstoffsicherungskonzepts und
betriebliche Rohstoffsicherung für die Fa. Trost, Tongrube Rettigheim

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung, Veranlassung, Vorgehensweise.....	3
2. Bedeutung und Verwendung der Tonsteine der Obtususton-Formation (Unterjura)	3
3. Durchgeführte Arbeiten und ihre Ergebnisse.....	4
3.1 Übersicht.....	4
3.2 Geoelektrische Erkundung	5
3.3 Erkundungsbohrungen – Geologie und Petrographie der Obtususton-Formation.....	5
3.4 Geochemische und mineralogische Untersuchungen.....	7
4. Zusammenfassende Bewertung.....	8
Zitierte Schriften.....	10

Anhang

- Anlage 1: 1 Karte im Maßstab 1 : 10 000
- Anlagen 2–4: 3 geologische Profilschnitte
- Anlage 5–7: Bohrprofile der Bohrungen Ro6718/B1–B3
- Anlage 8: Schichtenverzeichnisse der Bohrungen Ro6718/B1–B4
- Anlage 9: Fotodokumentation der Bohrkerne
- Anlage 10: Graphische Darstellung der geochemisch-mineralogischen Analyseergebnisse

1. Einleitung, Veranlassung, Vorgehensweise

Der Regionalverband Mittlerer Oberrhein (RV MO) bereitet derzeit die Fortschreibung des Regionalplankapitels „Oberflächennahe Rohstoffe“, Teilkapitel „Festgesteinsabbau“ vor. Als fachliche Grundlage für die Ausweisung von Vorrang- und Sicherungsgebieten sind aktuelle Informationen über die Abbaubetriebe in der Region sowie über die Lage und Größe von Gesteinsvorkommen erforderlich, die sich aufgrund ihrer Beschaffenheit für einen Rohstoffabbau eignen. Im Bezugsschreiben hat der Regionalverband Mittlerer Oberrhein das Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg (LGRB) mit der Durchführung der dafür erforderlichen Arbeiten im Rahmen des Rohstoffsicherungskonzeptes (RSK) beauftragt. Die Arbeiten sind auch von unmittelbarer Bedeutung für die Fa. Trost, Rettigheim, weshalb von dieser Firma der Auftrag erteilt wurde, die Betreuung der Erkundungsbohrungen und die Auswertung der Bohrproben zu übernehmen.

Im Herbst 2003 wurde dem RVMO der Teil A der rohstoffgeologischen Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein vorgelegt (LGRB 2003). Darin wurden die Natursteine, Untergruppen Kalksteine und Plutonite, sowie Zementrohstoffe und Naturwerksteine (Sandstein und Granit) in der Umgebung der in Betrieb befindlichen Rohstoffgewinnungsstellen behandelt. Eine Beurteilung der Ziegeleirohstoffe in der Region wurde im Teil A zunächst ausgespart, da ein von Sommer bis Herbst 2003 gemeinsam von Industrie und LGRB durchgeführtes Erkundungsprogramm noch nicht abgeschlossen war.

In der Region Mittlerer Oberrhein stellen **Keuper- und Juratone** ebenso wie **quartärzeitliche Lösslehme** potentielle Ziegeleirohstoffe dar, von denen derzeit jedoch nur die Tonsteine der **Obtususton-Formation des Unterjuras** (ca. 195–192 Mio Jahre) im Raum Rettigheim, unmittelbar an der nördlichen Grenze zur Region gelegen, genutzt werden. Dieses Vorkommen reicht in die Region Mittlerer Oberrhein hinein und stellt mittel- bis langfristig eine wichtige Reserve an hochwertigen Ziegeleirohstoffen dar.

Die durchgeführten Arbeiten umfassen zunächst eine Auswertung vorhandener Daten aus den Arbeitsbereichen Geologische Landesaufnahme, Hydrogeologie, Rohstoffgeologie und Landesbergdirektion des LGRB. Für eine sichere Beurteilung der Mächtigkeit und flächenhaften Erstreckung dieses tektonisch stark gestörten und nur in der Tongrube Rettigheim aufgeschlossenen Vorkommens wurde das vorerwähnte Erkundungsprogramm mit geophysikalischen (geoelektrischen) Untersuchungen und Erkundungsbohrungen durchgeführt. Da gerade die Qualitätsprüfung keramischer Rohstoffe makroskopisch nur eingeschränkt möglich ist (vgl. Kap. 3), erfolgten ergänzend geochemisch-mineralogische Analysen im Labor des LGRB.

2. Bedeutung und Verwendung der Tonsteine der Obtususton-Formation (Unterjura)

Von den Schichten des Juras steht am nördlichen Rand der Region Mittlerer Oberrhein das stratigraphische Intervall zwischen Unterjura (Lias) und Mitteljura (Dogger) oberflächennah an. Hier sind die Gesteine der Obtususton-Formation (Lias β , si2) potenziell als Ziegeleirohstoffe geeignet. Sie weisen nach der geologischen Karte 1 : 25.000, Blatt 6718 Wiesloch (THÜRACH 1904), nur eine geringmächtige Überdeckung durch quartärzeitlichen Löss oder Gesteine der Numismalmergel-Formation (Lias γ , si 3) auf und sind daher im Tagebau gut zu gewinnen.

Das oberflächennahe Vorkommen der Obtususton-Formation streicht im Bereich der Langenbrückener Senke auf einer Fläche von rund 600 ha zwischen Rettigheim, Mühlhausen und Östringen aus. Aufgrund einer nach Südwesten einfallenden, tektonischen Verkipfung keilt die SW–NE orientierte, muldenartig gelagerte Schichtenfolge nach Nordosten aus. Somit nimmt die Restmächtigkeit der Schichten vom Zentrum der Senke nach Nordosten, Nord-

westen und Südosten kontinuierlich ab. Im SW wird das oberflächennahe Vorkommen durch eine NW-SE verlaufende Randstörung des Oberrheingrabens nordöstlich von Mingolsheim (Gemeinde Bad Schönborn) tektonisch begrenzt (vgl. THÜRACH 1904) bzw. um ca. 100 m abgeschoben, d. h. in die Tiefe versetzt. Die Gesamtmächtigkeit der Obtususton-Formation beträgt hier nach Bohrerergebnissen ca. 65 m (HETTICH 1974).

Von dem vorgenannten 600 ha großen Ausstrich befindet sich nur ca. die Hälfte in der Region Mittlerer Oberrhein (Gemeinde Bad Schönborn und Stadt Östringen). Die andere Hälfte liegt in der Region Rhein-Neckar-Odenwald, Gemarkung Mühlhausen. Die Fa. Trost betreibt auf Gemarkung Rettigheim direkt an der Regionsgrenze eine Tongrube, deren Rohstoff im betriebseigenen Mauerziegelwerk in Malsch zur Produktion hochwärmedämmender Leichtziegel verwendet wird.

Bei der Ziegelproduktion kommen in der Regel Rohstoffmischungen aus verschiedenen Tongruben zum Einsatz, da die erforderlichen Material- und Produktanforderungen bei der Herstellung hochwertiger Mauerziegel von nur einer Tonsorte nicht eingehalten werden können. Im Mauerziegelwerk in Malsch wird eine Mischung verwendet, die zu etwa 45–50 % Tonstein aus der Grube Rettigheim enthält. Als günstige Rohstoffeigenschaften sind hier neben einem sehr fein verteilten und recht gleichmäßigen Kalkgehalt vor allem ideale Mengen an Stützkorn und Eisenoxidkomponente (Farbgebung des Scherbens) zu nennen (vgl. Georg-Simon-Lobenfeld im östlichen Rhein-Neckar-Kreis angeliefert, wo ein stark entkalkter quartärer Löss gewonnen wird. Die ungünstigen Eigenschaften von quartärzeitlichem Löss der Tongrube Malsch (hoher Gehalt an groben Kalkpartikeln, ungünstiges Schwindverhalten) verbieten den Einsatz in Mengen von mehr als 5–8 % in der Rohstoffmischung.

3. Durchgeführte Arbeiten und ihre Ergebnisse

3.1 Übersicht

Zur Untersuchung der Ziegeleirohstoffe im Raum Rettigheim wurde ein vom LGRB betreutes Erkundungsprogramm durchgeführt, das mit rohstoffgeologischen Kartierarbeiten (Profil-aufnahmen, Gefügemessungen, Probenahmen) in der Tongrube Rettigheim begonnen wurde. Anschließend erfolgte eine geophysikalische (geoelektrische) Erkundung der Schichten-tiefe und Lage durch das Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA, Hannover). Schließlich wurden im Auftrag der Fa. Trost vier Kernbohrungen abgeteuft (Ro6718/B1–B4, vgl. Anlage 1), um die nutzbare Mächtigkeit und die Qualität der Gesteine als Ziegeleirohstoffe für grobkeramische Erzeugnisse prüfen zu können.

Nach Abschluss der Geländearbeiten wurden die Bohrkerne im Kernlager des LGRB in Freiburg petrographisch untersucht und die Proben aus der Tongrube hinsichtlich ihrer Kornverteilung analysiert. Detaillierte geochemische und mineralogische Untersuchungen erfolgten dann an 14 Mischproben der Bohrung Ro6718/B3 (Endteufe 53,20 m) an 0,1–6,45 m mächtigen Kernabschnitten, um die Eignung der Gesteine als Mauerziegelmassen über einen mächtigeren Abschnitt der Obtususton-Formation prüfen zu können. Außerdem wurde an 6 Einzelproben der Bohrungen Ro6718/B1 und B3 der Gehalt an organischem Material (C_{org}) in den bituminösen Einschaltungen im stratigraphischen Übergangsbereich zwischen der Obtususton-Formation (si2) und der Arietenkalk-Formation (si1) bestimmt.

3.2 Geoelektrische Erkundung

Zur **räumlichen Erfassung** der Obtususton-Formation um Rettigheim wurden Teilbereiche des Ausstrichs mit Hilfe eines geoelektrischen Verfahrens von der Oberfläche aus erkundet (GGA 2003). Bei dem Verfahren der geoelektrischen Tiefensondierung wird der scheinbare elektrische Widerstand des Untergrundes gemessen, indem über zwei Stromsonden ein Stromsystem in den Untergrund gespeist und zwischen zwei weiteren Sonden die Spannung gemessen wird. Während die Spannungssonden bei der Messung eines Punktes am selben Ort bleiben, wird der Abstand zwischen den Stromsonden sukzessive erhöht, sodass die Feldlinien jeweils tiefer in den Untergrund eindringen. Auf diese Weise erhält man eine Sondierungskurve, welche die Widerstandsverteilung im Untergrund abbildet. Da unterschiedliche geologische Schichten verschiedene elektrische Widerstände aufweisen, ist die Kalibration des Systems anhand von Bohrergebnissen der lokalen geologischen Schichtenfolge sinnvoll bzw. unerlässlich. Für Details und Literatur zu dieser Methode sei auf BOCK & KOBLER (2003) verwiesen.

Die Ergebnisse der geoelektrischen Erkundung dienen zusammen mit den Ergebnissen der Rohstofferkundungsbohrungen Ro6718/B1–B4 zur Konstruktion der drei in der Karte (Anlage 1) eingezeichneten Profile (Anlagen 2–4). Zusätzlich wurden ältere Bohrdaten aus dem Archiv des LGRB berücksichtigt und in die Profilebenen hineinprojiziert. Es zeigte sich, dass die Obtususton-Formation **südwestlich, südlich und südöstlich von Rettigheim** im Kern der oben erläuterten geologischen Muldenstruktur **hohe Mächtigkeiten (20–50 m)** aufweist, nach Osten und Nordosten aber auskeilt (vgl. Bohrung Ro6718/B4). An teilweise staffelartig angeordneten Sprüngen in den geoelektrischen Profilen kann eine insgesamt hohe tektonische Überprägung nachvollzogen werden (vgl. auch AGK 1991). Die Orientierung dieser Störungen entspricht den in der Tongrube Rettigheim eingemessenen Hauptkluftrichtungen und spiegelt die randnahe Lage zum Oberrheingraben wider.

3.3 Erkundungsbohrungen – Geologie und Petrographie der Obtususton-Formation

Es wurden zwei Kernbohrungen mit je 35 m Endteufe (Ro6718/B1 und B2) auf Gemarkung Mingolsheim (Gemeinde Bad Schönborn) und weitere zwei Kernbohrungen mit 53,2 m (Ro6718/B3) und 7,2 m (Ro6718/B4) auf Gemeindegebiet Mühlhausen niedergebracht. Die Bohransatzpunkte sind in Anlage 1 eingetragen, die Anlagen 5 bis 8 enthalten die zugehörigen Bohrprofile und Schichtenverzeichnisse. Anlage 9 zeigt eine durchgehende Fotodokumentation der Bohrkerns.

Der auf Stadtgebiet Östringen liegender Teil des Ausstrichs (ca. 30 ha) direkt südöstlich der Tongrube Rettigheim wurde u. a. im Rahmen betrieblicher Erkundungsbohrungen der Firma Trost (LGRB Archiv Nr. BO6718/456–461, vgl. Planungsbüro Taberg 1998) und eines hydrogeologischen Gutachtens des Geologischen Landesamtes Baden-Württemberg (GLA 1995) durch Bohrungen ausreichend erkundet. In diesem Gebiet konnte auf weitere Bohrungen verzichtet werden, da durchgehend hohe Mächtigkeiten (25–45 m) des Rohstoffs nachgewiesen wurden.

Die stratigraphisch als Obtususton-Formation (früher: Turneritone) zusammengefassten Gesteine werden im Folgenden entsprechend ihrer Korngrößenzusammensetzung als Ton- und Schluffsteine bzw. als tonige Schluffsteine bezeichnet. Da die herkömmlich genutzten Begriffe „Ton“ und „Tonmineral“ leider nicht immer eindeutig verwendet werden, sei hier eine kurze Erläuterung vorangestellt: Die „Tonfraktion“ als Korngrößenbezeichnung beschreibt Korngrößen < 2 Mikrometer (Obtususton-Fm.: < 20 %, vgl. Tab. 1) während „Schluff“ Korngrößen zwischen 2 und 63 Mikrometern entspricht. Als „Tonminerale“ werden definierte, meist plättchenförmige Schichtsilikate (Obtususton-Fm.: 40–60 %, vgl. Anl. 10) bezeichnet.

Die Gesteine der Obtususton-Formation zeigen in den Bohrungen Ro6718/B1–B4 eine **lithostratigraphische Zweiteilung** von rohstoffgeologischer Bedeutung.

- In den oberen Abschnitten (ca. $\frac{3}{4}$ der Schichtenfolge) sind überwiegend monotone, graue bis dunkelgraue, tonige Schluffsteine mit makroskopisch erkennbarem Glimmeranteil ausgebildet. Die dunkle Farbe des Gesteins wird durch geringe Prozentanteile von feinstverteiltem Pyrit und fossilem organischen Material verursacht. Der Kalkgehalt schwankt insgesamt leicht auf niedrigem Niveau und ist fein verteilt. Nur bei 5,35–5,45 m Teufe ist eine Mergelsteinbank eingeschaltet (Betakalkbank, s.u.). Regelmäßig treten 1–3 mm mächtige sideritische Horizonte (FeCO_3) auf.
- In den unteren Abschnitten (ca. $\frac{1}{4}$) der Formation sind in die oben beschriebene Grundsedimentation häufiger Horizonte mit Crinoidenbruchstücken (bis 1 cm), Kalkschalen (bis 3 cm) und Belemnitenrohren (0,5 x 4 cm) eingeschaltet. Außerdem nimmt der organoleptisch wahrnehmbare Bitumengehalt deutlich zu und es treten häufiger cm-große Pyritknollen auf. In den bituminösen Horizonten treten häufig 1–2 mm mächtige Nagelkalklagen auf.

Der Übergang zur unterlagernden Arietenkalk-Formation (si1) ist lithostratigraphisch mit der ersten Einschaltung von Mergelstein- oder Kalksteinbänken erreicht.

Das Eindringen kalkaggressiver und oxidierender Oberflächenwässer bewirkt eine 4–6 m von der Geländeoberfläche in die Tiefe reichende blättrige, bräunliche Aufwitterung (Fe-Oxidation, s.u.), die in allen Bohrungen und im Profil der Tongrube Rettigheim deutlich zu erkennen ist. Insgesamt reicht die oberflächennahe Auflockerung/Verwitterung jedoch unterschiedlich weit in die Tiefe. Dies ist auf einen deutlichen Unterschied im Ausmaß der tektonischen Brekzierung der Schichtenfolge im Raum Rettigheim zurückzuführen (vgl. Bohrprofile, Anlagen 5–8). Teilweise tiefgründige Auflockerungen in den Bohrungen Ro6718/B2 und B3 führten zwar zunächst zur Kristallisation von Kluftcalciten (1–10 mm), begünstigen dafür aber rezent eine verbesserte Zufuhr kalklösender Oberflächenwässer.

Für eine Beurteilung von Ton- und Schluffsteinen der Obtususton-Formation hinsichtlich ihrer Eignung zur Erzeugung „grobkeramischen“ Massen, ist ihre **Korngrößenzusammensetzung** von Bedeutung. An insgesamt vier Mischproben von der südwestlichen Wand der Tongrube Rettigheim wurde die Korngrößenverteilung durch Schlämmung nach DIN 18 123 bestimmt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 1 zusammengefasst und stimmen weitgehend mit der durchschnittlichen Korngrößenverteilung in Ziegeltonen für Voll- und Hochlochlochziegel überein (vgl. SCHMIDT 1973).

Tabelle 1: Korngrößenverteilung von Ton- und Schluffsteinen der Tongrube Rettigheim.

Probe	< 0,002 mm	0,002–0,020 mm	> 0,020 mm	Teufe [m]	Gesamtkarbonatgehalt	Verwitterungszustand
Ro6718/EP5	15,0 %	26,7 %	58,6 %	0–3	3,8 %	stark aufgewittert, braun
Ro6718/EP6	15,6 %	27,7 %	56,7 %	>3–6	4,4 %	stark aufgewittert, braun
Ro6718/EP7	14,4 %	49,5 %	36,1 %	>6–9	11,7 %	mäßig verwittert, grau
Ro6718/EP8	17,8 %	48,3 %	33,9 %	>9–12	9,2	mäßig verwittert, grau

Auffallend ist ein deutlicher Einfluss der oberflächennahen Verwitterung auf die Kornfraktionen 0,002–0,020 mm und >0,020 mm. Die beiden stärker verwitterten Proben Ro6718/EP5 und EP6 zeigen im Vergleich zu den tiefer entnommenen Proben Ro6718/EP7 und EP8 eine Anreicherung der Kornfraktion >0,020 mm auf Kosten der Fraktion 0,002–

0,020 mm. Diese Verschiebung ist vermutlich auf die oberflächennahe Verwitterung von Siderit (FeCO_3), Pyrit (FeS_2) und anderen eisenhaltigen Mineralen, wie adsorptiv an Tonminerale gebundenes Fe_2O_3 (Hämatit) zurückzuführen. Das dabei entstehende Fe-Oxyhydrat Limonit, $\text{FeO}(\text{OH})$, kann entweder Komponenten der Fraktion 0,002–0,020 mm „verbacken“ oder durch Aufwachsen der Mineralneubildung auf Partikeln dieser Kornfraktion die Kornverteilung verändern.

Eine Bestimmung der Kornverteilung an tiefer liegenden Schichtabschnitten in den Bohrungen wurde nicht durchgeführt, da in größeren Tiefen als 10–15 m die verwitterungsbedingte Auflockerung des Gesteinsverbands so gering ist, dass die Kornverteilung (nach DIN 18 123) ohne aufwendige Probenaufbereitung nicht mehr bestimmbar ist. In der Praxis werden stärker verfestigte Ziegeleirohstoffe nach der Gewinnung entweder zur Aufwitterung einige Jahre zwischengelagert oder für eine sofortige Verarbeitung aufgemahlen, wodurch sich die ursprüngliche Kornverteilung verändert.

3.4 Geochemische und mineralogische Untersuchungen

An insgesamt 14 Gesteinsproben der Bohrung Ro6718/B3 wurde die geochemische und mineralogische Zusammensetzung untersucht, um teufenabhängig die Qualität als Ziegeleirohstoff für grobkeramische Erzeugnisse zu prüfen. Die Ergebnisse sind in der Tabelle 2 im Vergleich mit Durchschnittswerten für Mauerziegelmassen nach SCHMIDT (1973) zusammengestellt. In der Anlage 10 sind die Analyseergebnisse im Detail und im Vergleich mit Maximalwerten für die Parameter Gesamtkarbonatgehalt (CaCO_3), Siderit, Dolomit+Ankerit sowie CaO graphisch dargestellt. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung der Werte mit den Angaben von SCHMIDT (1973, vgl. Tabelle 2) und somit **eine Eignung des in dieser Bohrung erkundeten Rohstoffs mindestens bis zu einer Teufe von ca. 40 m.**

Die Tonminerale wurden in der vorliegenden Bearbeitung halbquantitativ zu $\frac{2}{3}$ als Kaolinit und $\frac{1}{3}$ als Illit bestimmt. Eine weitere Aufschlüsselung wurde nicht vorgenommen, da die Tonmineralverteilung für Mauerziegelmassen im Gegensatz zu feinkeramischen oder Feuertest-Rohstoffen weniger kritisch ist. Zum Vergleich sei erwähnt, dass „Lias-Schiefertone“ nach SCHMIDT (1981) durchschnittlich 48 % Tonminerale (35 % Kaolinit-Fire clay, 13 % Illit+Sericit), 30 % Quarz, 4 % Feldspat, 7 % Calcit sowie 11 % röntgenamorphen Rest enthalten.

Ein 10 cm mächtiger Mergelsteinhorizont mit einem Gesamtkarbonatgehalt von 42 % CaCO_3 entspricht in der Bohrung Ro6718/B3 aufgrund seiner Position im Bohrprofil (5,35–5,45 m Teufe) stratigraphisch ungefähr der sogenannten Betakalkbank. Sie stellt im Ziegeleirohstoff eine störende Beimengung dar und ist als Abbau- und Aufbereitungserschwerung anzusehen.

Die Ursachen für die deutlichen chemisch-mineralogischen Änderungen unterhalb von 40 m werden im Folgenden kurz diskutiert.

- Ein Anstieg des Gesamtkarbonatgehalts (CaCO_3) geht mit zunehmenden Calcitgehalten einher, die sowohl auf die Zunahme gröberer Kalkpartikel als auch auf einen erhöhten Gehalt an feinverteiltem Kalk zurückzuführen ist, der makroskopisch nicht eindeutig erkennbar ist.
- Der zum Liegenden zunehmende Glühverlust (GV) belegt in seiner Gesamtheit unterschiedliche Parameter des Rohstoffs. Hier sind ausgeglühtes organisches Material und der Verlust von CO_2 der Karbonatanteile zu nennen, beides Parameter, die dementsprechend nach unten zunehmen. Der ebenfalls in den GV eingehende Verlust des strukturell gebundenen Wassers vieler Mineralphasen (v. a. Tonminerale) ist hier als gegenläufiger Trend entwickelt, weil der Tonmineralgehalt abnimmt. Dieser Einfluss wird aber offensichtlich kompensiert.

- Ein Rückgang des Al_2O_3 , Fe_2O_3 , SiO_2 und K_2O steht im Einklang mit einer Abnahme des Gehalts an Tonmineralen und ggf. Feldspat sowie Siderit. Dieser Entwicklung steht eine Zunahme des CaO , GV und $\text{SO}_4\text{-S}$ gegenüber, die durch mehr Calcit, organisches Material (C_{org} -Gehalte max. 4,7–8,1 %, $n = 6$) und Pyrit verursacht wird.

Tabelle 2: Durchschnittswerte der geochemisch-mineralogischen Untersuchungen an Bohrung Ro6718/B3 (LGRB Archivnummer BO6718/551) im Vergleich mit Durchschnittswerten für Mauerziegelmassen nach SCHMIDT (1973).

Parameter	Ton- und Schluffsteine der Obtususton-Formation bei Rettigheim	Durchschnittswerte für Mauerziegelmassen nach SCHMIDT (1973)
Tonminerale [%]	40–60 (davon $\frac{2}{3}$ Kaolinit und $\frac{1}{3}$ Illit)	Kaolinit-Fire clay 0–15 Sericit + Illit 10–20 Montmorillonit 0–5 Chlorit 0–5
Quarz [%]	29–37	30–55
Gesamtkarbonat CaCO_3 [%]	3–28 (Betakalkbank: 42)	0–18 (max. 30)
Calcit [%]	< 2–26	0–10
Siderit [%]	< 2–4	< 1
Dolomit [%]	< 2–3	< 1 (Dolomit + Ankerit)
Glühverlust (GV) [%]	9,6–22,5	4,2–9,1
SiO_2 [%]	36,6–54,4	49,2–68,0
Al_2O_3 [%]	14,0–21,1	10,2–19,4
CaO [%]	1,4–15,1	0,3–9,4 (max. 17)
MgO [%]	1,6–2,5	0,5–2,9
Fe_2O_3 [%]	5,6–8,1	2,7–8,0
$\text{SO}_4\text{-S}$ [%]	< 0,01–1,4	0,04–0,56

Von den ermittelten Spurenelementen ist zunächst Fluor zu nennen. Bei gleichbleibend geringen Gehalten um 0,05 % sind schädliche Emissionen von Fluorverbindungen im Zuge der Ziegelproduktion unwahrscheinlich. Die Elemente Barium (ca. 250–400 ppm) und Strontium (ca. 140–570 ppm) sind als Spuren u. a. in Karbonaten typisch vertreten. Der Sr-Gehalt korreliert in der Bohrung Ro6718/B3 gut mit dem Gesamtkarbonatgehalt. Die ermittelten Gehalte von Vanadium (ca. 140–180 ppm), einem typischem Spurenelement in Pyrit, sind nicht ungewöhnlich.

Brennversuche sollten auch an Mauerziegelmassen grundsätzlich durchgeführt werden. Sie gehören aber zur betrieblichen Produktsteuerung bzw. Forschung und Entwicklung und sollten im Falle einer detaillierten betrieblichen Exploration an den tatsächlich zum Einsatz kommenden Rohstoffmischungen durchgeführt werden. Der grundsätzliche Einfluss des hier untersuchten Rohstoffs auf die Eigenschaften des gebrannten Scherbens wurde bereits in Kapitel 2 kurz diskutiert (vgl. Georg-Simon-Ohm FH-Nürnberg 2002).

4. Zusammenfassende Bewertung

Der vorliegende Teil B der rohstoffgeologischen Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsflächen in der Region Mittlerer Oberrhein behandelt im Raum Rettigheim die an der Nordgrenze der Region in Abbau befindlichen Ziegeleirohstoffe der Obtususton-Formation (Unterjura, si2). Die weitgehend monotonen Ton- und Schluffsteine dieser Formation sind vor allem wegen ihres Stützkornanteils, ihres insgesamt geringen und überwiegend fein verteilten Kalkgehalts sowie ihrer Brenneigenschaften (u.a. Farbgebung durch Eisenoxidgehalt) ein wichtiger Hauptbestandteil für Mauerziegelmassen zur Produktion hochwärmedämmender Leichtziegel im Ziegelwerk der Fa. Trost in Malsch.

Das durchgeführte Erkundungsprogramm führte zur Abgrenzung von drei Teilvorkommen, nachfolgend und auf der beiliegenden Karte (Anlage 1) mit A, B und C bezeichnet.

- A) Ein nachgewiesenes Vorkommen südwestlich, südlich und südöstlich der Tongrube Rettigheim (ca. 165 ha)
- B) Ein prognostiziertes Vorkommen östlich Rettigheim (ca. 40 ha)
- C) Ein vermutetes Vorkommen nördlich Östringen (ca. 95 ha)

Das erstgenannte Teilvorkommen A weist durchschnittliche Mächtigkeiten von 20–50 m auf. Die Rohstoffqualität entspricht den Anforderungen für Mauerziegelmassen, allerdings steigen im unteren Viertel der Abfolge (in Bohrung Ro6718/B3 unterhalb ca. 40 m Teufe) die Kalkgehalte deutlich an und es sind häufiger Horizonte mit gröberen Kalkpartikeln und Pyritknollen eingeschaltet.

Der durchschnittlich 2 m mächtige Abraum besteht unter einer geringmächtigen anthropogenen Überdeckung oder einem Bodenhorizont aus teilweise durchwurzeltem Löss mit knolligen Kalkkonkretionen.

Als Abbau-/Aufbereitungs- und Verwertungsschwernis ist die sogenannte Betakalkbank zu nennen, eine in Bohrung Ro6718/B3 bei 5,35–5,45 m Teufe durchörterte Mergelsteinbank, die den Oberen Obtususton stratigraphisch vom Unteren Obtususton trennt. Außerdem ist eine Rohstoffgewinnung durch Reißen abbautechnisch bedingt max. bis in 35 m Tiefe möglich, da das Gestein darunter kaum noch verwitterungsbedingt aufgelockert ist.

Zum Erreichen hoher Abbaumächtigkeiten ist vor allem im westlichen Teil des Teilvorkommens A bei Geländehöhen von teilweise nur 120–130 m NN ein Kesselabbau bis unter 100 m NN erforderlich. Hier ist vermutlich mit hydrogeologisch begründeten Bedenken seitens der Gemeinde Bad Mingolsheim zu rechnen. Die Obtususton-Formation dient als natürliche Schutzschicht über dem gespannten Rhätsandstein-Aquifer, aus dem die Heilquellen in Bad Mingolsheim gespeist werden.

Insgesamt hat das Teilvorkommen A aufgrund seiner Mächtigkeit und flächenhaften Erstreckung sowie seiner Rohstoffqualität ein mittleres bis hohes Lagerstättenpotenzial. Es wird aber darauf hingewiesen, dass nur eine sehr sorgfältige kombinierte geologisch-abbautechnische, mineralogisch-geochemische und anwendungstechnische Untersuchung einzelner Teilbereiche dieses in Karte und Profilen dargestellten Vorkommens die Eignung des vorhandenen Rohstoffs für den industriellen Einsatz belegen kann.)

Für das prognostizierte Teilvorkommen B (vgl. Karte Anlage 1) östlich Rettigheim werden geringere Mächtigkeiten von durchschnittlich nur 10–20 m (max. 30 m) erwartet. Die Basis des Vorkommens ist derzeit allerdings nicht erkundet, da sie bisher weder durch Bohrungen noch durch die geoelektrische Erkundung erreicht wurde. Für die Gewinnung dieses Vorkommens ist ggf. die Anlage spezieller Mischhalden erforderlich, da die unteren Schichten der Obtususton-Formation mit höheren Kalkgehalten und etwas ungünstigeren Rohstoffeigenschaften bereits in geringerer Tiefe anstehen. Das Vorkommen liegt vollständig in einer FFH Vorschlagsfläche (Gebietsmeldungen NATURA 2000 Vorschlagsflächen 2001).

Die Abgrenzung des vermuteten Vorkommens nördlich von Östringen (vgl. Karte Anlage 1) wurde durch Interpretation der geologischen Karte (THÜRACH 1902) vorgenommen, da derzeit keine ausreichend tiefen Bohrungen vorliegen und südwestlich des Krötenbachs keine geoelektrische Erkundung durchgeführt wurde. Aufgrund der komplizierten Tektonik des Arbeitsgebiets können durchschnittliche Mächtigkeiten von 10–20 m nur geschätzt werden. Das Vorkommen liegt vollständig in einer FFH Vorschlagsfläche (Gebietsmeldungen NATURA 2000 Vorschlagsflächen 2001).

In der Region Mittlerer Oberrhein werden derzeit keine Ziegeleirohstoffe gefördert, d. h. alle keramischen Produkte, die in der Region verbraucht werden, müssen in die Region geliefert werden. Die Gesamtförderung an Ziegeleirohstoffen in Baden-Württemberg beträgt ca. 1,9–2,6 Mio. t/a (Zeitraum: 1995–2000). Die meisten Ton- und Lehmgruben fördern weniger als 100.000 t/a, bei einer durchschnittlichen Fördermenge von 40.000 t/a sollte eine Lagerstätte für keramische Rohstoffe mindestens Vorräte für 50 Jahre enthalten (vgl. Rohstoffbericht Baden-Württemberg, WERNER et al. 2002). Das Teilvorkommen A weist bei einer angenommenen Abbaumächtigkeit von 30 m voraussichtlich geologische Vorräte von über 100 Mio. t auf und würde nominell – ausgehend von der o. g. durchschnittlichen Förderrate in Baden-Württemberg von nur 40.000 t/a – für mehr als 2500 Jahre reichen.

Im regionalen Größenvergleich ist die flächenhafte Gesamterstreckung des untersuchten Vorkommens der Obtususton-Formation mit ca. 600 ha relativ gering. Von dieser Fläche ist aber bereits ein großer Teil durch Überbauung nicht mehr gewinnbar. Weitere Teilflächen sind als FFH Vorschlagsflächen (Gebietsmeldungen NATURA 2000 Vorschlagsflächen 2001) aufgrund wachsender Nutzungskonflikte praktisch kaum genehmigungsfähig. Daher wird es mittel- bis langfristig für die Versorgung des Einzugsgebietes um den Standort Malsch, von dem aus auch die Region Mittlerer Oberrhein versorgt wird, notwendig sein, die besten Anteile der hier dargestellten Vorkommen des Rohstoffs beiderseits der Regionsgrenze zu sichern.

Zitierte Schriften

AGK: Büro für Angewandte Geologie Karlsruhe, Universität Karlsruhe.

BOCK, H. & KOBLER, H.-U., mit Beiträgen von BOCK, W.-D., PATZELT, A., REIMANN, M., SIMON, TH., WALDHÖR, M. & WERNER, W. (2003): Erläuterungen zu Blatt L 6924 Schwäbisch Hall. – Kt. mineral. Rohst. Baden-Württ. 1 : 50.000: 181 S., 28 Abb., 6 Tab., 1 Kt.; Freiburg i. Br. (L.-Amt Geol., Rohst. u. Bergb. Baden-Württ.). – [KMR 50].

Büro für Angewandte Geologie Karlsruhe, Universität Karlsruhe (1991): Geologische Untersuchungen zur geplanten Erdaushub-, Bauschutt- und Restedeponie in der Tongrube Rettigheim auf der Gemarkung Mühlhausen – Rettigheim – Geologische und hydrologische Untersuchungen der Untersuchungsstufe 2. – 192 S., Anlagen; Karlsruhe. – [Bearbeiter: HÖTZL, H.] – [unveröff.].

DIN 18 123 (1996): Baugrund – Untersuchung von Bodenproben – Bestimmung der Korngrößenverteilung. – 12 S, Berlin.

Gebietsmeldungen NATURA 2000 Vorschlagsflächen (2001): Internet-Publikation – (Ministerium Ländlicher Raum Baden-Württemberg).

Geologisches Landesamt Baden-Württemberg (1995): Hydrogeologisches Gutachten zur geplanten Vertiefung der Tongrube Rettigheim. – 7 S., 3 Anl.; Freiburg i. Br. – [Bearbeiter: ENGESSER, W.] – [Az.: 3292.01/95-4763, unveröff.].

Georg-Simon-Ohm FH-Nürnberg (2002): Gutachten über die Eigenschaften verschiedener eingesetzter Tonkomponenten zur Produktion hochwärmedämmender Leichtziegel im Mauerziegelwerk Malsch der Fa. Trost. – 5 S; Nürnberg. – [Bearbeiter: KRCMAR, W] – [unveröff.].

GGA: Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben.

GLA: Geologisches Landesamt Baden-Württemberg.

HETTICH, M. (1974): Ein vollständiges Rhät/Lias-Profil aus der Langenbrückener Senke, Baden-Württemberg (Kernbohrung Mingolsheim 1968). – Geol. Jb., A16, 71–105; Hannover.

Institut für geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (2003): Bericht zur geoelektrischen Erkundung im Raum Rettigheim. – 3 S., 1 Karte, 4 Profile; Hannover. – [Bearbeiter: BROST, E. & SAUER, A.] – [unveröff.].

LGRB: Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg.

Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg (2003): Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsflächen für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein. – 42 S., 1 Kt.; Freiburg i. Br. – [Bearbeiter: GILLHAUS, A. & WERNER, W.] – [Az.: 4704//02 7114, unveröff.].

Planungsbüro Taberg (1998): Verbreitung von Lias-Tonsteinen im Raum Rettigheim – Östringen. Geologische Lagerstättenerkundung im Umfeld der bestehenden Tongrube Rettigheim. – 5 S., 4 Anl.; Karlsruhe. – [Bearbeiter: LOTZ, U.] – [Unveröff.].

SCHMIDT (1973): Rohstoffkenndaten der verschiedenen Erzeugnisarten der Ziegelindustrie. – ZI Ziegelindustrie International, H.6, 212–216; Bonn.

SCHMIDT (1981): Chemische und physikalische Reaktionen in grobkeramischen Scherben beim Brennen, Teil I. – ZI Ziegelindustrie International, 34/7, 387–397; Bonn.

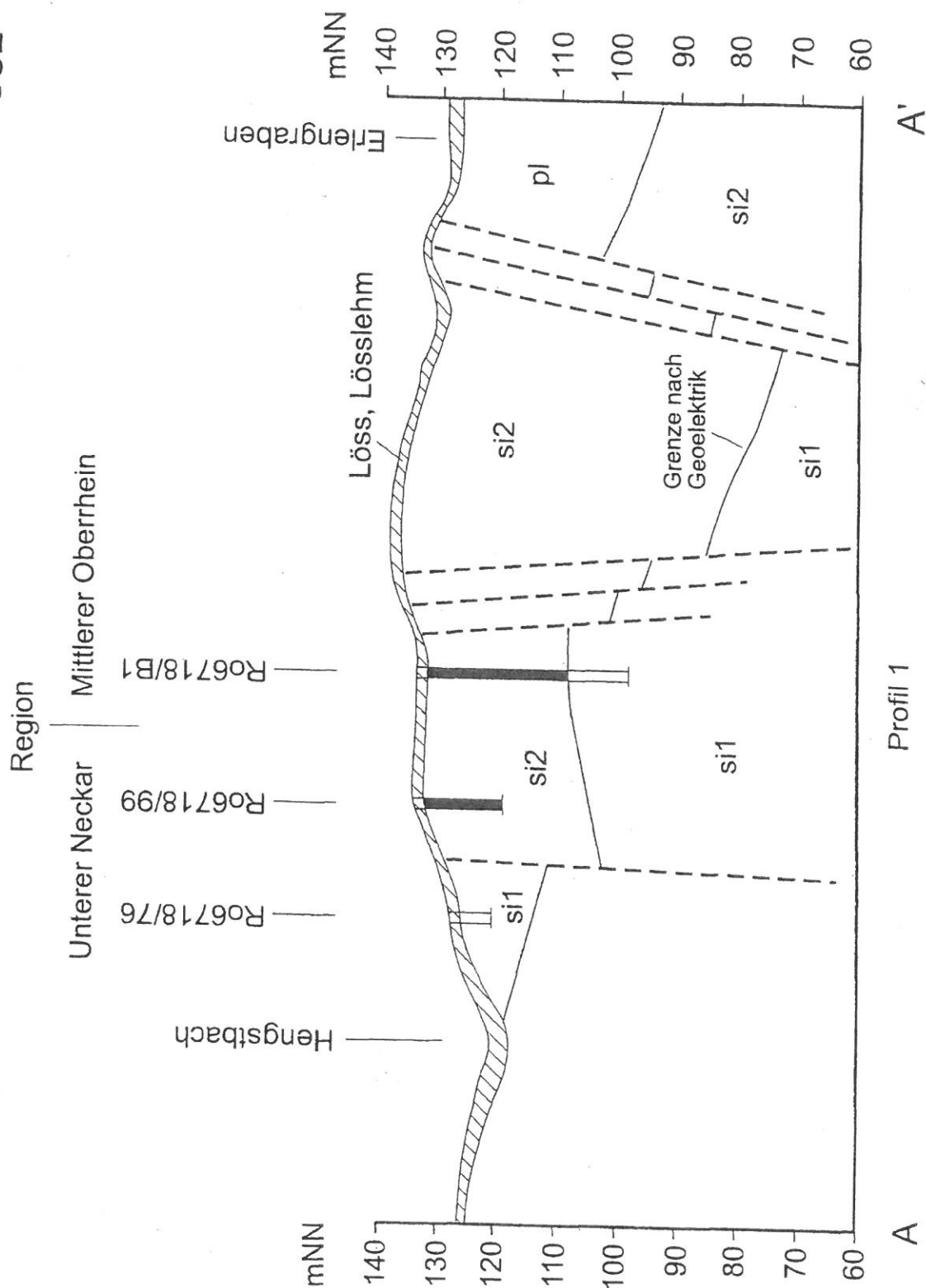
THÜRACH, H. (1902): Blatt 41 (6718) Wiesloch – Geol. Spec.- Kt. Baden 1 : 25 000 – Freiburg i. Br. (Großherzogl. Bad. Geol. L.-Anstalt).

WERNER, W., KIMMIG, B., BRASSE, A., BOCK, W.D., FINGER, P., TRAPP, C., SCHLOZ, W., WEINZIERL, W., DENNERT, V., FROMM, F., BOCK, H., KÖBERLE, G., KÜCK, J. & ANDRÄ, H. (2002): Rohstoffbericht Baden-Württemberg 2002. – Informationen: 14: 92 S., 58 Abb., 12 Tab.; Freiburg i. Br. (Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg).

Anlage 2: Geologischer Profilschnitt A – A'

SSE

NNW

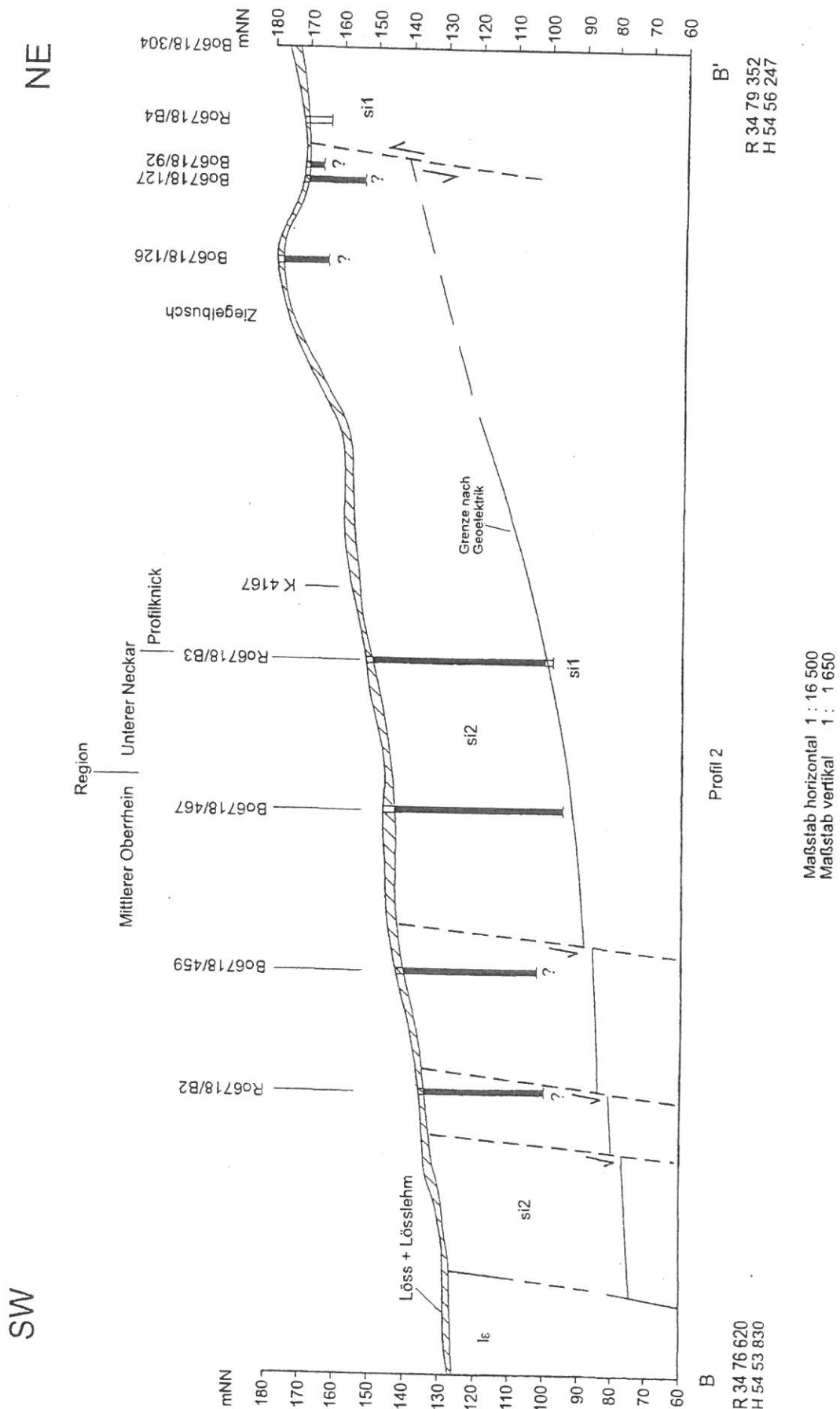


R 34 77 140
H 54 53 680

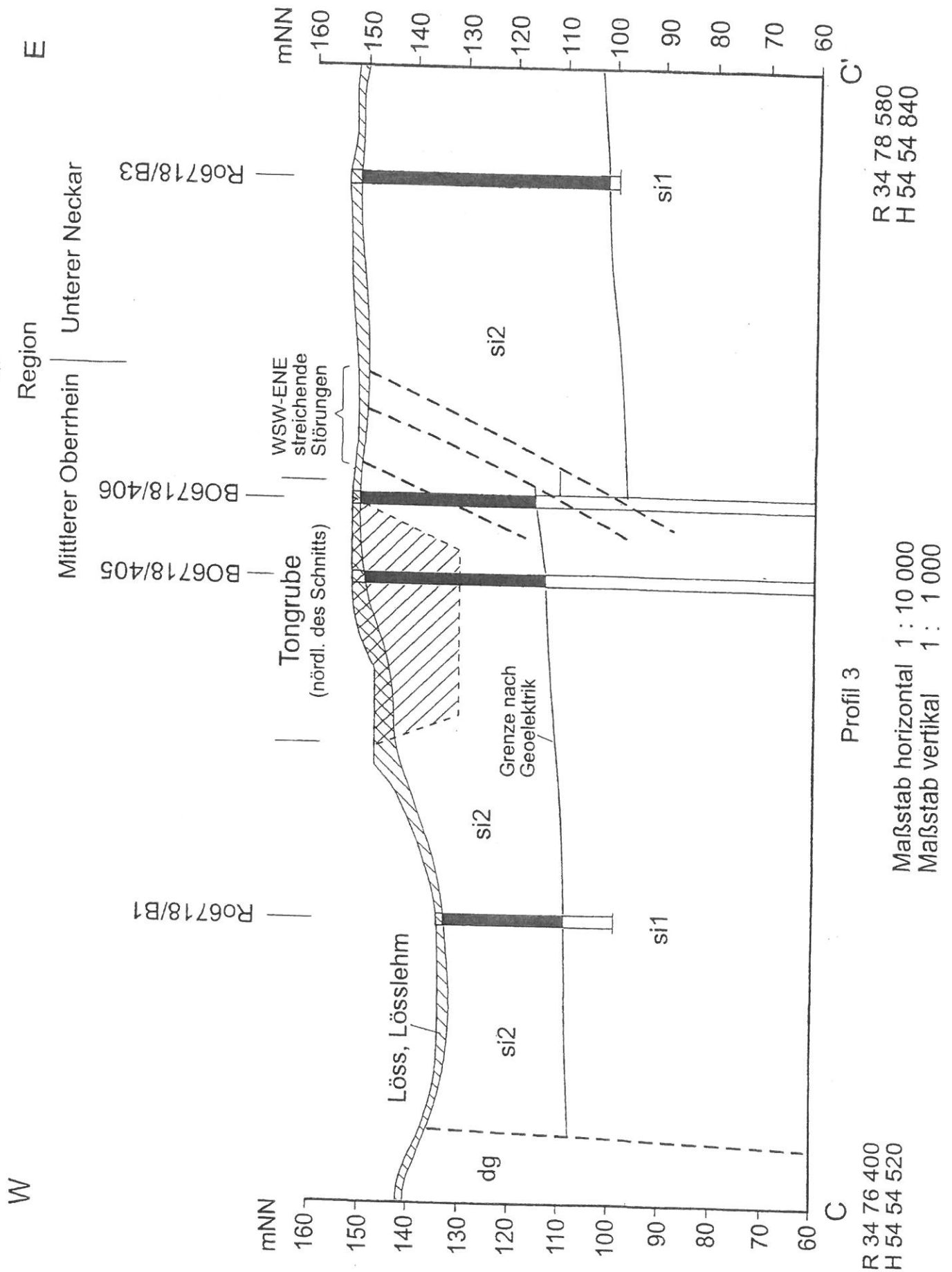
Maßstab horizontal 1 : 10 000
Maßstab vertikal 1 : 1 000

R 34 76 760
H 54 55 490

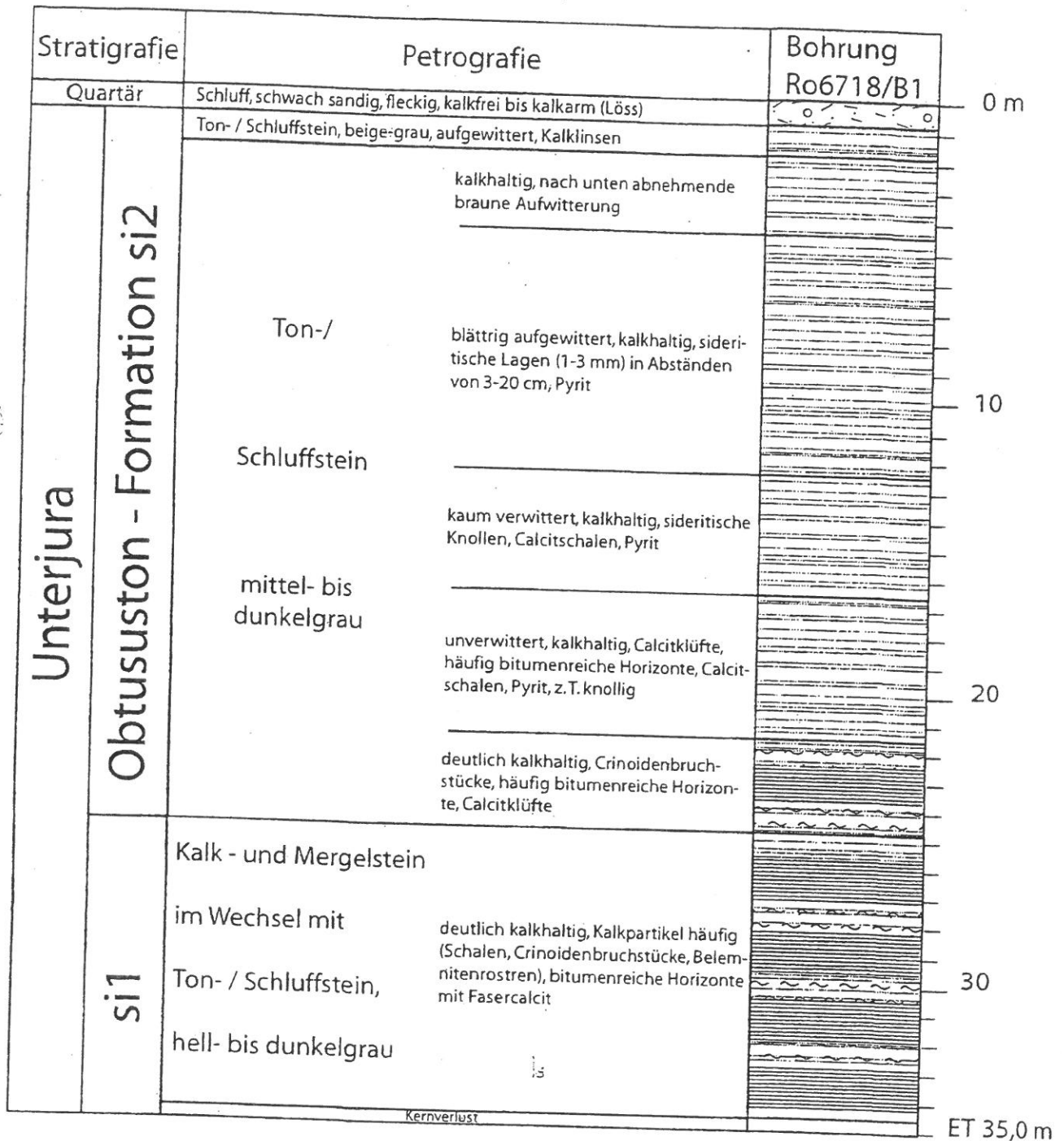
Anlage 3: Geologischer Profilschnitt B – B'



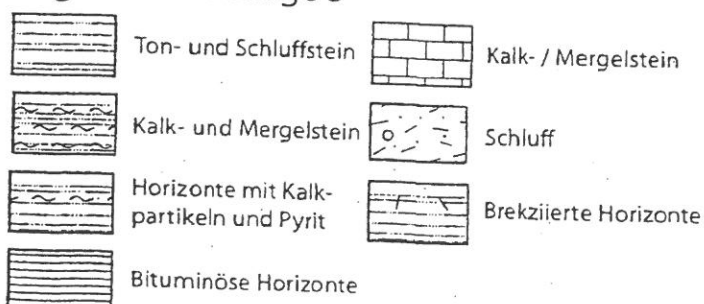
Anlage 4: Geologischer Profilschnitt C – C'



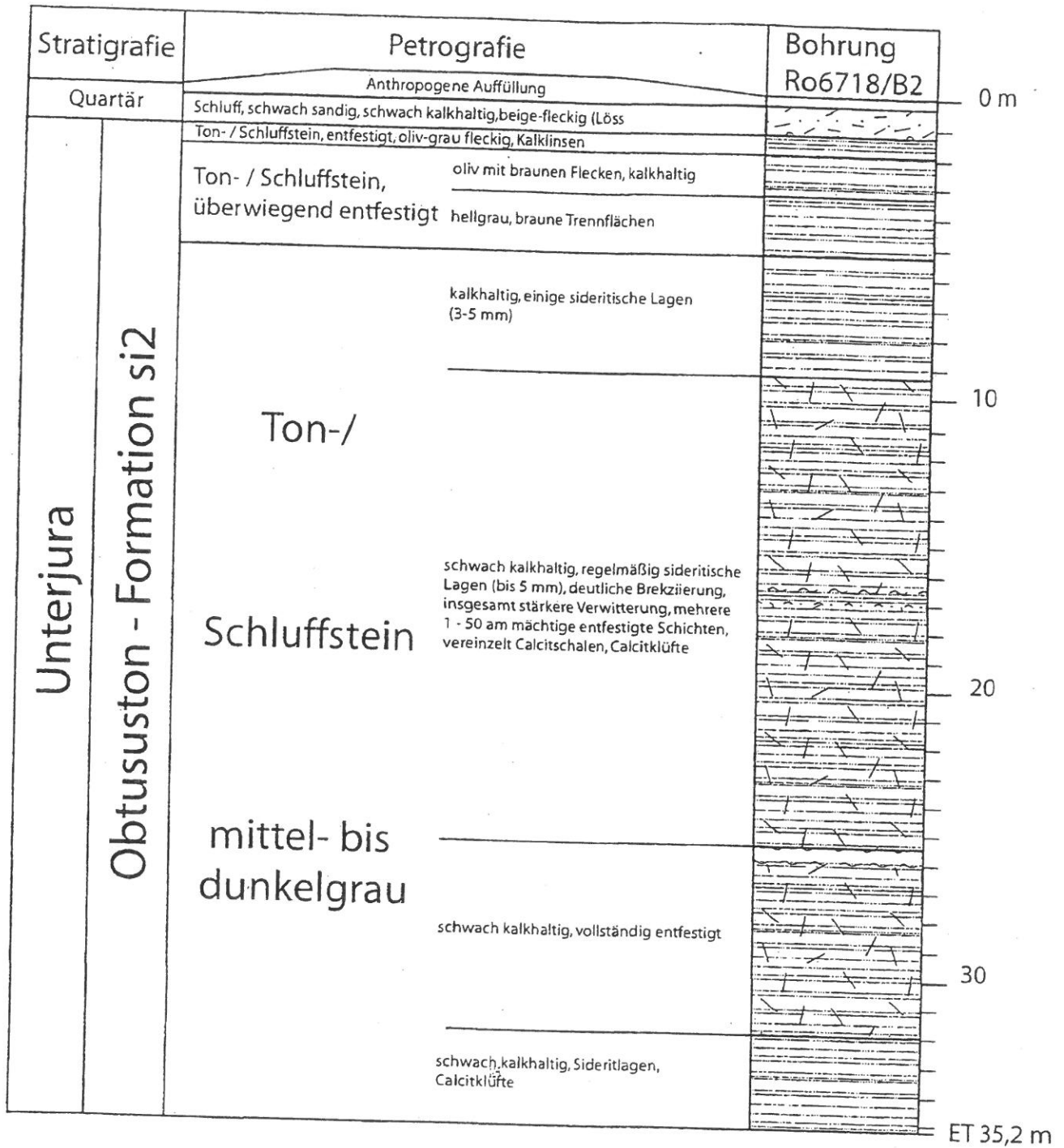
Anlage 5: Bohrprofil der Bohrung Ro6718/B1



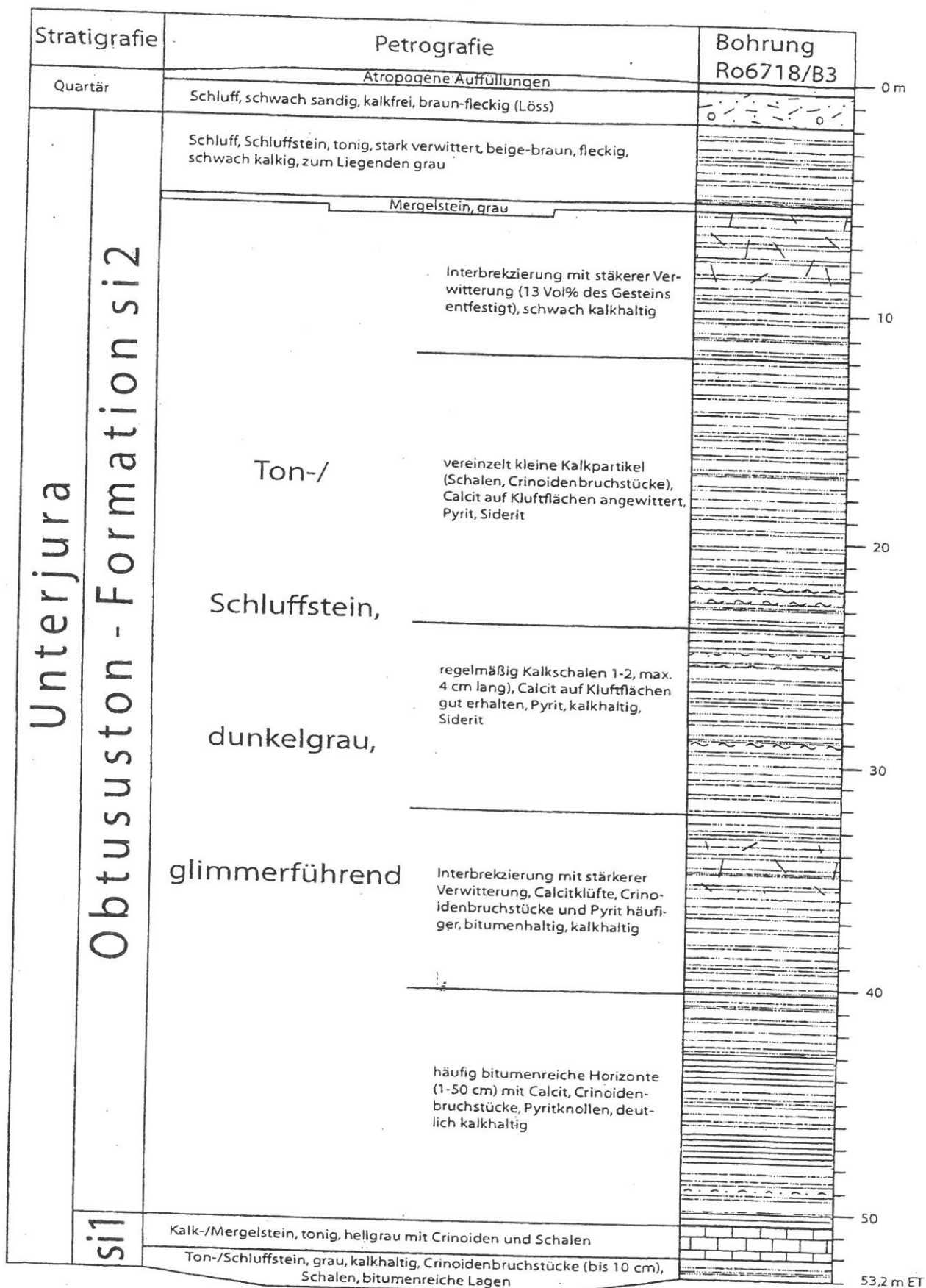
Legende zu Anlage 5



Anlage 6: Bohrprofil der Bohrung Ro6718/B2



Anlage 7: Bohrprofil der Bohrung Ro6718/B3



Anlage 8: Schichtenverzeichnisse der Bohrungen Ro6718/B1–B4

Bezeichnung: Obtususton-Formation, Rettigheim
Erkundungsbohrung Ro6718/B1
Lage: ca. 400 m südwestlich Tongrube Rettigheim
Bohrzeit: 28.–31.10.2003
Bohrverfahren: Seilkernbohrung

LGRB-Archiv-Nr.: BO6718/549
R: 3476 917 **H:** 5454 563
Ansatzpunkt: ca. 134 m NN
Ruhewasserspiegel: k. Angabe

Kurzprofil (mit stratigraphischer Deutung):

- 0,57 Löss (lo)
- 24,80 Obtususton-Formation (si 2)
- 34,70 Arietenkalk-Formation (si 1)

Petrographisches Detailprofil:

- 0,35 Schluff, schwach sandig, durchwurzelt, braun-beige mit rostroten und dunkelbraunen, mm-großen Flecken, kalkfrei (Löss)
- 0,57 Schluff, schwach sandig, schwach durchwurzelt, beige-olivbraun fleckig, schwach kalkhaltig (Löss)
- 1,90 Ton-/Schluffstein, stark verwittert, mittelgrau und beige mit rostbraunen Flecken, Wurzelreste und -spuren, kalkhaltig, 1–10 mm große hellgraue Kalkflecken/-linsen (Obtususton-Fm.)
- 4,50 Ton-/Schluffstein, mittelgrau, deutlich verwittert, kalkhaltig, zum Liegenden kontinuierlich abnehmende olivfarbene Vwitterung: im oberen Abschnitt nur fleckig auftretende 1–4 cm große, mittelgraue Ton-/Schluffsteinrelikte, im unteren Abschnitt nur noch Schicht- und Kluffflächen des mittel- bis dunkelgrauen Ton-/Schluffsteins braun-oliv verfärbt (Obtususton-Fm.)
- 12,43 Ton-/Schluffstein, dunkelgrau, blättrig aufgewittert, struktur- und fossilarm, kalkhaltig, Abdrücke von 0,5–1,0 cm großen Bivalvenschalen in Teufenlagen von 4,95 m und 10,50 m, in 3–20 cm Teufenabstand 1–3 mm mächtige beigefarbene, knollig-konkretonäre sideritische Lagen, makroskopisch wenig Pyrit erkennbar (Obtususton-Fm.)
- 16,59 Ton-/Schluffstein, dunkelgrau, makroskopisch unverwittert, sehr monoton, kalkhaltig, häufig Abdrücke von < 0,5 cm großen Bivalvenschalen z. T. mit Pyrit, insgesamt schwach bituminös, vereinzelt beige-graue sideritische Lagen (1–3 mm) (Obtususton-Fm.)
 - 10,16–10,53 mehrere beige-graue sideritische Knollen bis 0,5 cm
 - 13,43 beige-graue sideritische Knolle (2,5 cm)
 - 13,73 beige-graue sideritische Knolle (2,5 cm)
 - 15,41 drei karbonatisch erhaltene Schalen (Länge 1 cm, Dicke 1–2 mm)
- 21,60 Ton-/Schluffstein, dunkelgrau, makroskopisch unverwittert, kalkhaltig, häufig Abdrücke von < 0,5 cm großen Bivalvenschalen, Pyrit häufig, insgesamt etwas stärker bituminös als der hangende Profilabschnitt, die bitumenreichen Abschnitte fallen oft mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm) zusammen, an der Basis einzelne kalkreichere Horizonte (Obtususton-Fm.)
 - 17,52 dünne calcitische Bivalvenschale (mehrere cm)
 - 18,20 Pyritknollen (bis 0,4 cm)
 - 18,50 dünne calcitische Bivalvenschale (mehrere cm)
 - 19,90 Pyritknollen (bis 1,0 cm)
 - 20,28 Pyritknolle (2,0 cm)
 - 20,00–20,33 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm) und mit Pyritknollen bei 21,07
 - 20,47–20,71 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm)
 - 21,00–21,12 Bitumenreicher Horizont wie oben
 - 21,27–21,42 Bitumenreicher Horizont (21,33–21,37 mit 19 % CaCO_3 und 6,1 % C_{org}) mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm), außerdem ein Ammonit der Gattung *Arnioceras* sp. (?)
 - 21,55–21,58 kalkreicher Horizont (57 % CaCO_3)
 - 22,37–22,43 kalkreicher Horizont (43 % CaCO_3)
- 24,80 Ton-/Schluffstein, dunkelgrau, makroskopisch unverwittert, insgesamt deutlich kalkhaltig, Kalkgehalt schwankend, häufig Crinoidenbruchstücke lagenweise angereichert, Pyrit, deutlich bituminös, die bitumenreichen Abschnitte fallen oft mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm) zusammen (Obtususton-Fm.)

Anlage 8: Schichtenverzeichnisse der Bohrungen Ro6718/B1–B4

- 21,60–21,65 zahlreiche Crinoidenbruchstücke (0,1–1,0 cm)
- 21,87–21,95 Bitumenreicher Horizont
- 22,21–22,28 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelem Nagelkalk (2 mm)
- 22,57–22,59 zahlreiche Crinoidenbruchstücke (0,1–1,0 cm)
- 22,62–22,68 Fucoidenreicher Horizont
- 22,72–22,94 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm)
- 23,47–23,51 Bitumenreicher Horizont wie oben
- 23,55–23,65 zahlreiche Crinoidenbruchstücke (0,1–1,0 cm)
- 23,66–23,78 Bitumenreicher Horizont (23,66–23,70 mit 32 % CaCO_3 und 8,1 % C_{org}) mit 2 Muscheln der Gattung *Palaeosolen* sp.
- 23,90–23,92 zahlreiche Crinoidenbruchstücke (0,1–1,0 cm)
- 24,17–24,21 Bitumenreicher Horizont
- 24,58–24,62 zahlreiche Crinoidenbruchstücke (0,1–1,0 cm)
- 24,76–24,80 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm)
- 34,70 Kalk-/Mergelstein, mittelgrau bis dunkelgrau, im Wechsel mit Ton-/Schluffsteinhorizonten, insgesamt deutlich kalkhaltig, Kalkgehalt schwankend, lagenweise deutlich bituminös, verstreut 0,5 bis über 5 mm große Kalkpartikel erkennbar, in Ton-/Schluffsteinabschnitten häufig Abdrücke von <0,5 cm großen Bivalvenschalen, Ton-/Schluffsteinabschnitte bitumenreicher und oft mit makroskopisch erkennbarem Pyrit (1 mm bis 1 cm), die bitumenreichen Abschnitte fallen häufig mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm) zusammen. Die Übergänge der Nagelkalke zum Ton-/Schluffstein sind schwarz glänzend mit Streifung. Im Bereich von Materialwechseln ist oft feine Bioturbation zu erkennen. Zwischen 26,00 und 28,00 m durchschlägt eine spitzwinklig zur Kernachse orientierte Calcitkluft (0,5 mm) das Gestein (Arietenkalk-Fm.)
- 26,34–26,36 Bitumenreicher Horizont
- 26,68–26,76 Bitumenreicher Horizont (26,69–26,72 mit 24 % CaCO_3 und 7,4 % C_{org})
- 27,36–27,39 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm)
- 27,78–27,80 zahlreiche Crinoidenbruchstücke (0,1–1,0 cm) und feiner Schill (<1 cm)
- 28,06–28,08 knolliger Pyrit
- 28,08–28,16 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm) und unbestimmbaren Ammoniten
- 28,20 Belemnitenrostrum
- 28,29 Calcitschale (2–3 cm)
- 28,55–28,59 Bitumenreicher Horizont
- 28,64–28,67 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm)
- 28,73–28,75 zahlreiche Crinoidenbruchstücke (0,1–1,0 cm)
- 28,85–28,88 zahlreiche Crinoidenbruchstücke (0,1–1,0 cm) und feiner Schill (<1 cm)
- 28,92–28,93 Bitumenreicher Horizont
- 29,12–29,16 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm)
- 29,28 Belemnitenrostrum
- 29,37–29,38 Bitumenreicher Horizont
- 29,56–29,58 feiner Schillhorizont
- 30,02–30,03 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm)
- 30,10–30,11 Bitumenreicher Horizont
- 30,15–30,20 Bitumenreicher Horizont mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm)
- 30,28 Belemnitenrostrum
- 30,46–30,50 flaserig-lappige Ausbildung am Übergang vom liegenden Siltstein zum hangenden Mergelstein (???)
- 30,52–30,68 Bitumenreicher Horizont (30,55–30,61 mit 18 % CaCO_3 und 6,6 % C_{org}) mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm)
- 31,20–31,23 Fucoidenhorizont
- 31,50–31,54 Schillhorizont calcitische Schalen mit phosphoritischem (?) Aufwuchs
- 32,07–32,09 zahlreiche Crinoidenbruchstücke (0,1–1,0 cm)
- 32,51–32,79 insgesamt partikelreich (Crinoidenbruchstücke und Schalen bis 4 cm)
- 33,73–33,78 flaserig-lappige Ausbildung am Übergang vom liegenden Siltstein zum hangenden Mergelstein
- 35,00 Kernverlust

Anlage 8: Schichtenverzeichnisse der Bohrungen Ro6718/B1–B4

Bezeichnung: Obtususton-Formation, Rettigheim
Erkundungsbohrung Ro6718/B2
Lage: ca. 500 m südlich Tongrube Rettigheim
Bohrzeit: 06.–11.11.2003
Bohrverfahren: Seilkernbohrung

LGRB-Archiv-Nr.: BO6718/550
R: ³⁴77 318 **H:** ⁵⁴54 207
Ansatzpunkt: ca. 136 m NN
Ruhewasserspiegel: k. Angabe

Kurzprofil (mit stratigraphischer Deutung):

- 0,22 Auffüllung (y)
- 1,31 Löss (lo)
- 35,20 Obtususton-Formation (si 2)

Petrographisches Detailprofil:

- 0,22 Schluff, braun, durchwurzelt, sandig, mit Steinen und Betonresten (Auffüllung im Bereich der Schutzhütte)
- 1,31 Schluff, feinsandig, fleckig hell-/dunkelbeige, kalkfrei, mit braunen max. 1 cm großen Flecken-/Wurzelresten, (Löss)
- 1,96 Schluff, olivgrau, leicht hell/dunkel fleckig, kalkhaltig, mit schichtparallelen (max. 1 cm mächtigen) Kalkablagerungen, teilweise rostfleckig (Obtususton-Fm., verwittert)
- 3,29 Ton/Schluff, olivgrün mit vereinzelt braunen und rostbraunen Flecken (max. 1 cm), kalkhaltig (Obtususton-Fm., verwittert)
- 4,72 Ton-/Schluffstein (Ton/Schluff), hellgrau, stark verwittert, kalkhaltig, braunfleckige Trennflächen, bis 4,22 m Tiefe überwiegend Kernschlag (Obtususton-Fm.)
- 9,09 Ton-/Schluffstein, hellgrau, kalkhaltig, relativ gute Erhaltung des Schichtverbands, Trennflächen unregelmäßig, überwiegend parallel zur Kernachse und nicht lang durchhaltend, im unteren Bereich gelegentlich Sideritlagen zu erkennen (Obtususton-Fm.)
 - 8,10 sideritische Lage (3–5 mm)
 - 8,42 sideritische Lage (3–5 mm)
 - 8,50 sideritische Lage (3–5 mm)
 - 8,88 schichtparallele Cc-Kluft (1 mm)
- 27,75 Ton-/Schluffstein, grau, schwach kalkhaltig, sideritische Lagen und -linsen bis 0,5 cm mächtig und in Abständen von 1 cm bis 1 dm, insgesamt deutliche Breccierung mit unterschiedlich orientierten Klufttrichtungen: parallel und spitzwinklig zur Kernachse, stumpf zur Kernachse und ca. 45° zur Kernachse, Verwitterung insgesamt mäßig bis deutlich, im Abstand von 10–50 cm sind schichtparallel 1–2 cm mächtige Schluffe (= „entfestigter“ Siltstein) eingeschaltet, im Abstand von 10–50 cm treten Cc-Klüfte (mm-cm mächtig) auf (Obtususton-Fm.)
 - 12,44–12,55 Schluff (= verruschelter Siltstein), mit kleinen Siltsteinstücken
 - 17,17 calcitische Schalen (1–3 cm)
 - 20,54–20,77 Schluff (= verruschelter Siltstein), mit kleinen Siltsteinstücken
 - 24,55 calcitische Schalen (1–3 cm)
 - 24,75–25,28 Schluff (= verruschelter Siltstein), mit kleinen Siltsteinstücken
- 33,00 Ton/Schluff (= entfestigter Siltstein), grau, schwach kalkhaltig, mit kleinen Siltsteinstücken, Kontakt zum Hangenden spitzwinklig zur Kernachse, Kontakt zum Liegenden eher stumpfwinklig zur Kernachse (Obtususton-Fm.)
- 35,20 Ton-/Schluffstein, grau, schwach kalkhaltig, regelmäßig sideritische Lagen und Knollen (max. 1,5 cm mächtig), mäßig brecciert, regelmäßig feine kluftgebundene Cc-Mineralisationen (Obtususton-Fm.)

Anlage 8: Schichtenverzeichnisse der Bohrungen Ro6718/B1–B4

Bezeichnung: Obtususton-Formation, Rettigheim
Erkundungsbohrung Ro6718/B3
Lage: ca. 600 m südöstlich Tongrube Rettigheim
Bohrzeit: 13.–18.11.2003
Bohrverfahren: Seilkernbohrung

LGRB-Archiv-Nr.: BO6718/551
R: ³⁴78 360 **H:** ⁵⁴54 804
Ansatzpunkt: ca. 152 m NN
Ruhewasserspiegel: k. Angabe

Kurzprofil (mit stratigraphischer Deutung):

- 0,50 Auffüllung (y)
- 1,95 Löss (lo)
- 50,64 Obtususton-Formation (si 2)
- 53,20 Arietenkalk-Formation (si 1)

Petrographisches Detailprofil:

- 0,50 Auffüllung: Ziegeleireste vermischt mit Boden, mittelbraun, kalkfrei, gepflügter Horizont
- 0,85 Schluff, schwach sandig, kalkfrei, schwach durchwurzelt, mittelbraun, leicht fleckig (Löss)
- 1,15 Schluff, schwach sandig, kalkfrei, schwach durchwurzelt, Wurzelreste, stark fleckig, mittelbraun-beige-rostbraun (Löss)
- 1,95 Schluff, schwach sandig, kalkfrei, Wurzelreste, dunkelbraun mit rostfarbenen Flecken (Löss)
- 3,60 Ton-/Schluff (Residualgestein), stark verwittert mit bröcklig-lehmiger Konsistenz, schwach kalkhaltig, beige-braun mit cm großen Rostflecken, darin cm große Schluffsteinstücke ohne festen Schichtenverband (Oberer Obtususton)
- 4,80 Ton-/Schluffstein, tonig, stark verwittert, schwach kalkhaltig, rostfleckige Farbe, zerfällt plattig in cm große Stücke (Oberer Obtususton)
- 5,35 Ton-/Schluffstein, deutlich verwittert, schwach kalkhaltig, grau mit schichtparallelen rostfarbenen Flecken und Linsen (Oberer Obtususton)
- 5,45 Mergelstein, grau, durch Bohrvorgang knollig abgerundet, darunter weniger verwittert (Beta-kalkbank)
- 11,90 Ton-/Schluffstein, tonig, schwach kalkhaltig, grau, glimmerführend, alle 1–5 cm feine 1–2 mm mächtige, beige-graue Horizonte und Linsen (sideritisch), insgesamt brecciiert, was zu typischem Bruchverhalten (parallel und spitzwinklig zur Kernachse) und zu stärkerer Verwitterung (13 Vol.-% „entfestigt“) führt (Unterer Obtususton)
 - 6,11–6,12 stärker verwittert und lehmig
 - 6,34–6,36 stärker verwittert und lehmig
 - 6,50–6,60 stärker verwittert und lehmig
 - 6,70–6,75 stärker verwittert und lehmig
 - 6,95–7,00 stärker verwittert und lehmig
 - 7,25–7,61 stärker verwittert und lehmig
 - 8,25–8,27 stärker verwittert und lehmig
 - 8,40–8,46 stärker verwittert und lehmig
 - 8,68–8,81 stärker verwittert und lehmig
 - 9,07–9,10 stärker verwittert und lehmig
 - 9,24–9,27 stärker verwittert und lehmig
 - 9,42–9,43 stärker verwittert und lehmig
 - 9,98–9,99 stärker verwittert und lehmig
 - 10,23–10,29 stärker verwittert und lehmig
 - 10,61–10,62 stärker verwittert und lehmig
 - 11,63–11,78 stärker verwittert und lehmig
- 23,87 Ton-/Schluffstein, tonig, kalkhaltig, grau, glimmerführend, alle 1–5 cm feine 1–2 mm mächtige, beige-graue Horizonte und Linsen (sideritisch) z.T. mit Pyrit, selten und nur verstreut kleinste Cc-Partikel und Pyrit, calcitische Schalen und Schalenabdrücke (max. 5mm), Klüftung parallel und spitzwinklig zur Kernachse, Calcitmineralisationen auf den Klüftflächen vorhanden aber schon stark verwittert (Unterer Obtususton)
 - 22,50–23,87 häufiger bis 2 mm große Schalen aus Calcit mit Aufwuchs zentral oder außen (Calcit und Pyrit, auch Siderit)
 - 21,78–21,81 sideritische Knollen
 - 22,75 Pyritknolle (1 cm)

Anlage 8: Schichtenverzeichnisse der Bohrungen Ro6718/B1-B4

- 32,32 Ton-/Schluffstein, tonig, kalkhaltig, grau, glimmerführend, sideritische Lagen und Linsen hier bis 1 cm mächtig, darin oft <1 mm große Calcitkristalle/-partikel, regelmäßig 1–2 selten 3–4 cm große Schalen aus Calcit mit radiaalfaserigem Aufwuchs zentral oder außen (Calcit und Pyrit), Klüftung parallel und spitzwinklig zur Kernachse, Calcitmineralisationen (bis 1 mm mächtig) auf den Klüftflächen vorhanden und gut erhalten (Unterer Obtususton)
 - 25,21–25,22 Schillhorizont mit Aufwuchs zentral oder außen (Calcit und Pyrit)
 - 26,00–26,21 stärkere Verwitterung
 - 26,37–26,42 stärkere Verwitterung mit Lehmabdruck
 - 26,63 Ammonitenabdruck
 - 27,17 Pyritknollen bis 1 cm
 - 27,58–27,70 stärkere Verwitterung
 - 30,29 schalenreicher Horizont mit Aufwuchs zentral oder außen (Calcit und Pyrit)
 - 30,55–30,63 Schillhorizont mit Aufwuchs zentral oder außen (Calcit und Pyrit)
- 40,28 Ton-/Schluffstein, tonig, kalkhaltig, grau, selten kleine Calcitschalen (1–3 cm), kleine Crinoidenbruchstücke (max. 1 mm) und Pyritkristalle häufig, Bitumengehalt vorhanden, Klüftung parallel und spitzwinklig zur Kernachse, Calcitmineralisationen (bis 1 cm mächtig) führt zu Internbrekzierung mit hohem fitting, Versatzbeträge max. 1 cm, sideritische Lagen und Linsen (bis 1–2 cm mächtig) werden versetzt (Unterer Obtususton)
 - 32,37–32,38 stärkere Verwitterung
 - 32,44–32,45 stärkere Verwitterung
 - 33,40–33,42 stärkere Verwitterung unter Sideritlage (oben) und Nagelkalken
 - 33,40–35,48 Zone der stärksten Brekzierung
 - 38,42–38,53 stärkere Verwitterung
- 50,64 Ton-/Schluffstein, tonig, deutlich kalkhaltig, grau, glimmerführend, Bitumengehalt deutlich in häufig auftretenden 1–50 cm mächtigen Horizonten, Calcitschalen selten (wenn vorh., dann vor allem in bitumenreichen Abschnitten), Schalenabdrücke regelmäßig vorhanden, Lagen mit Crinoidenbruchstücken (bis 1 dm mächtige Horizonte) häufig (Unterer Obtususton)
 - 42,37–42,70 bitumenreicher Horizont (bräunlich)
 - 43,28–43,47 bitumenreicher Horizont (bräunlich) mit feinen, schichtparallelen Cc-Klüften
 - 43,45 *Asteroceras* sp.
 - 44,18–44,71 bitumenreicher Horizont (bräunlich)
 - 45,45–45,55 bitumenreicher Horizont (bräunlich) mit feinen Nagelkalkhorizonten
 - 45,92–46,24 bitumenreicher Horizont (bräunlich) mit calcitischen Schalen und Rissen
 - 46,83–46,94 bitumenreicher Horizont (bräunlich) mit feinen calcitischen Rissen
 - 47,10–47,18 bitumenreicher Horizont (bräunlich) mit feinen calcitischen Rissen
 - 48,29–48,31 bitumenreicher Horizont (bräunlich)
 - 48,58–48,62 Crinoidenschuttlage (Partikel max. 1 mm)
 - 48,70–48,74 bitumenreicher Horizont (bräunlich) mit vielen feinen, calcitischen Rissen
 - 49,10 dünne calcitische Schale, wellig, 5 cm lang
 - 49,17–49,18 bitumenreicher Horizont (bräunlich)
 - 49,22–49,51 bitumenreicher Horizont (49,35–49,37 mit 12 % CaCO_3 und 5,2 % C_{org}) mit feinen calcitischen Schalen und Rissen, Pyritknollen (bis 2 cm)
 - 49,56–49,59 *Fucoiden*horizont
 - 50,02–50,07 bitumenreicher Horizont (bräunlich) mit feinen calcitischen Rissen
 - 50,09–50,11 knolliger Pyrit
 - 50,41–50,43 knolliger Pyrit
 - 50,49–50,51 bitumenreicher Horizont (mit 29 % CaCO_3 und 4,7 % C_{org})
 - 50,57–50,59 bitumenreicher Horizont (bräunlich) mit vielen feinen, calcitischen Rissen
- 52,13 Kalkstein, hellgrau, mergelig, vereinzelt Schalen (*Arietenkalk*-Formation)
 - 51,15–51,17 Crinoidenschuttlage
 - 51,65–51,69 Crinoidenschuttlage
 - 52,08–52,13 Crinoidenschuttlage u.a. mit *Pentacrinus*
- 53,20 Ton-/Schluffstein, grau, kalkhaltig, dm-Wechselfolge mit vereinzelt Crinoiden und Schalen (max. 1–2 cm), (*Arietenkalk*-Formation)
 - 52,50–52,57 Bitumenreicher Horizont
 - 52,98–53,02 Crinoidenschuttlage
 - 53,15–53,18 Bitumenreicher Horizont

Anlage 8: Schichtenverzeichnisse der Bohrungen Ro6718/B1–B4

Bezeichnung: Obtususton-Formation, Rettigheim
Erkundungsbohrung Ro6718/B4
Lage: ca. 800 m östlich Rettigheim
Bohrzeit: 19.–20.11.2003
Bohrverfahren: Seilkernbohrung

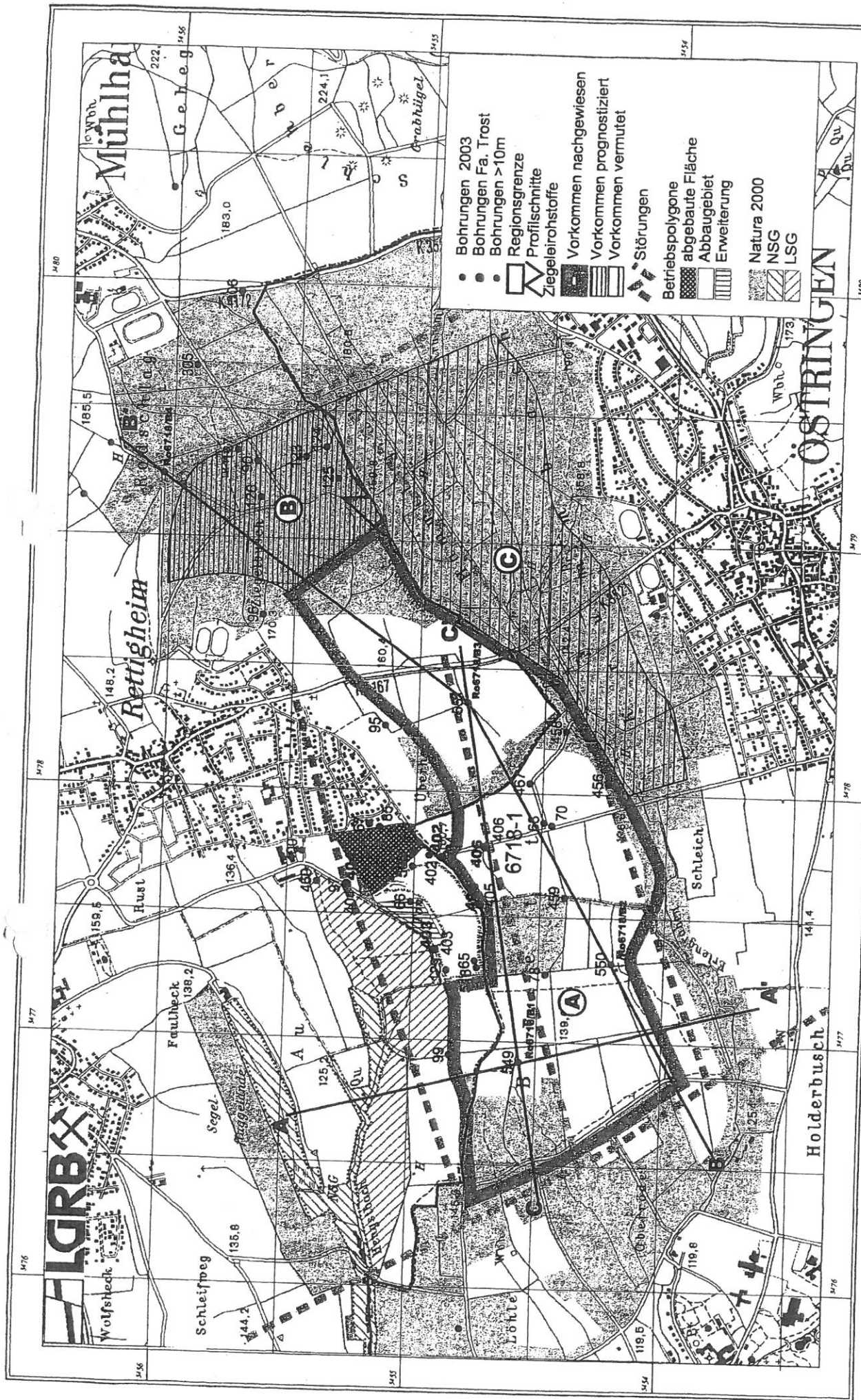
LGRB-Archiv-Nr.: BO6718/552
R: ³⁴79 235 **H:** ⁵⁴56 050
Ansatzpunkt: ca. 172,5 m NN
Ruhewasserspiegel: k. Angabe

Kurzprofil (mit stratigraphischer Deutung):

- 0,70 Auffüllung (y)
- 1,08 Löss (lo)
- 7,20 Arietenkalk-Formation (si1)

Petrographisches Detailprofil:

- 0,30 Beton mit 5 mm Bitumenbelag (Straßenbelag)
- 0,70 Schluff, sandig, steinig, beige, schwach kalkhaltig (Auffüllung)
- 1,08 Schluff, beigebraun, oben durchwurzelt, unten mit braunfleckigen Wurzelresten, kalkhaltig (Löss)
- 1,62 Mergel/Mergelstein, stark verwittert, dunkelgrau-braun, vereinzelt Wurzelreste (Arietenkalk-Formation)
- 2,66 Mergel/Mergelstein, stark verwittert, hellbeige-grau, braunfleckig (Arietenkalk-Formation)
- 2,79 Kalkstein, mergelig, hellgrau, beige angewittert (Arietenkalk-Formation)
 - 2,72 zweischalig erhaltene Bivalvenschale, calcitisch, 3 cm groß
- 3,36 Mergel/Mergelstein, beige-hellgrau, stark verwittert, plattig zerfallend, mit spitzwinklig zur Kernachse orientierten Trennflächen (Arietenkalk-Formation)
- 3,54 Mergelstein, dunkelgrau, plattig bis flach linsenförmig zerfallend (Arietenkalk-Formation)
- 4,31 engständige Wechselfolge aus Kalkstein (grau) und Mergelstein (hellbeige), deutlich verwittert (Arietenkalk-Formation)
- 4,56 engständige Wechselfolge aus Kalkstein (grau) und Mergelstein (hellbeige), deutlich angewittert (Arietenkalk-Formation)
- 4,73 Mergelstein, dunkelgrau, leicht bituminös, plattig zerfallend (Arietenkalk-Formation)
- 4,88 engständige Wechselfolge aus Kalkstein (grau) und Mergelstein (hellbeige), deutlich angewittert (Arietenkalk-Formation)
- 7,20 Kalkstein, hellgrau, mit Kalkmergelsteineinschlüssen im dm-Bereich (Arietenkalk-Formation)
 - 5,20–6,35 calcitisch zementierte Klüfte (1 mm) spitzwinklig zur Kernachse
 - 5,22 zweischalig erhaltene Bivalvenschale, calcitisch, 1,5 cm groß
 - 6,65–6,70 Fucoidenhorizont



Rohstoffgeologische Beurteilung geplanter Vorrang-
und Vorbehaltsflächen in der Region
Mittlerer Oberrhein, Teil B

Aktualisierung: 4704, 8.02.2014, 11.03.2014

Bearb.: Dr. A. Giffhaus, Dr. W. Werner

HLGRB X

Anlage: 1



Anhang 2

Schichtenverzeichnisse der Bohrungen GWM B 1/2015 und GWM B 2/2015, aufgenommen vom Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Württemberg

BOHRPROFIL

Bezeichnung:	GWM B1/2015 Rettigheim	TK 25 Nr.:	6718	Archiv-Nr.:	978
Projekt:	Erweiterung Tgr. Rettigheim	Blatt:	Wiesloch		
Lage:		Koordinaten (nach):			
		R:	34 76 956,50	H:	54 54 745,00
Gemeinde:	Malsch	Höhen (nach):			
Teilort:		Ansatzpunkt:	135,60		m ü. NN
Kreis:	Rhein-Neckar-Kreis	Messpunkt:			m ü. NN
Geol. Aufnahme:	18.02.2015	Ruhewasserspiegel:			m u. A.
Bearbeiter/in:	Dr. Franz, R. Stulpinaite				m ü. NN
Bohrfirma:	Celler Brunnenbau				m ü. NN
Bohrzeit:	03.12. - 06.12.2014				m ü. NN
Bohrverfahren (m u. A./Ø mm):		Endteufe:	38		m u. A.

Filterstrecken (m u. A./Ø mm):

Abdichtungen (m u. A.):

Bemerkungen:

Kurzprofil (mit stratigr. Deutung):

- 0 – 0,10 m Boden
- 0,80 m Quartär
 - 0,10 - 0,40 m Lösslehm
 - 0,40 – 0,80 m Fließerde
- 16,50 m Obtususton-Formation (juOT)
- 38,00 m Langenbrücken-Formation (juL)

Bezeichnung/Projekt:**Az.:** 4721.5//00-00000**Profilbeschreibung (Fortsetzung):****Teufe** (m u. A.): Gesteinsart (Haupt-, Nebengemengeteile usw.), Farbe, Gefüge Verwitterungsgrad, Konsistenz, Fossilinhalt, Klüftung u. a.

- 0 – 0,10 m Humus, durchwurzelt, braun
- 0,40 m Schluff, schwach tonig, hellbraun, schwach Fe-fleckig
- 0,80 m Schluff, tonig, Fe-fleckig, braun, nach unten zunehmend durchsetzt mit verwitterten, z.T. leicht entfestigten Tonstein-Bröckchen
- 3,00 m Tonstein, feingeschichtet, dunkelgrau, braun verwittert, kleinstückig zerfallen, nach unten abnehmend verwittert
- 4,25 m Tonstein, feingeschichtet, oliv, leicht plastifiziert, von 3,85 – 4,00 m kleinstückig zerfallen
- 16,50 m Tonstein, schluffig, feinstglimmerig, feingeschichtet, dunkelgrau bis schwarzgrau, schwach kalkig
- 16,60 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 19,30 m Tonstein, schluffig, feinstglimmerig, feingeschichtet, dunkelgrau bis schwarzgrau, schwach kalkig (nach unten zunehmend)
- 19,38 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 20,15 m Tonstein, schluffig, feingeschichtet, dunkelgrau, schwach kalkig
- 20,45 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 20,85 m Tonstein, dunkelgrau
- 20,90 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 21,38 m Tonstein, dunkelgrau
- 21,48 m Mergelstein, grau
- 22,00 m Tonstein, dunkelgrau
- 22,15 m Mergelstein, grau
- 22,23 m Tonstein, dunkelgrau
- 22,45 m Kalkmergelstein, grau
- 22,52 m Tonstein, dunkelgrau
- 22,58 m Kalkmergelstein, grau
- 22,70 m Tonstein, dunkelgrau
- 22,76 m Kalkmergelstein, grau
- 23,00 m Tonstein, dunkelgrau
- 23,37 m Kalkmergelstein, grau

Bezeichnung/Projekt:

Az.: 4721.5//00-00000

Profilbeschreibung (Fortsetzung):

- 23,83 m Tonstein, bioturbat, 23,37 – 23,40 m „Seegrasschiefer“
- 23,85 m Kalkmergelstein, grau
- 24,26 m Tonstein bis Tonmergelstein, dunkelgrau, 23,85 – 23,94 m „Seegrasschiefer“
- 24,38 m Kalkmergelstein, grau
- 24,56 m Tonstein bis Tonmergelstein, dunkelgrau, bis 24,41 m „Seegrasschiefer“; mit unscharfer Untergrenze übergehend in:
- 24,80 m Kalkmergelstein bis Kalkstein, Karbonatgehalt nach oben und unten abnehmend, Crinoiden
- 24,85 m Tonstein bis Tonmergelstein, dunkelgrau
- 24,89 m Kalkmergelstein, grau
- 25,55 m Tonstein bis Tonmergelstein, dunkelgrau
- 25,58 m Schilllage, tonig (Muschelbrut)
- 25,65 m Kalkmergelstein, grau
- 25,87 m Kalkstein, fossilführend, grau (Crinoiden, Muscheln)
- 25,90 m Kalkmergelstein, grau
- 26,00 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 26,36 m Kalkstein, grau
- 26,42 m Kalkmergelstein, dunkelgrau
- 26,48 m Kalkstein, grau, bioturbat (Fucoiden), unterschiedlich dicke Grabspuren, heller und dunkler als Grundmasse; bis 26,44 m „Seegrasschiefer“
- 26,59 m Kalkmergelstein, grau
- 27,13 m Kalkstein, grau, lagenweise übergehend in Kalkmergelstein, grau; mäßig fossilführend (Muscheln, Crinoiden); bioturbat (Fucoiden), unterschiedlich dicke Grabspuren, heller und dunkler als Grundmasse
- 27,17 m Tonmergelstein, dunkelgrau, bioturbat (Fucoiden)
- 27,24 m Kalkmergelstein, grau
- 27,60 m Tonstein bis Tonmergelstein, untere 5 cm stark bioturbat (Fucoiden)
- 27,82 m Kalkmergelstein bis Kalkstein, grau, bioturbat
- 27,85 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 28,11 m Kalkmergelstein bis Kalkstein, tonig, grau
- 28,14 m Tonmergelstein, stark bioturbat („Seegrasschiefer“)
- 28,22 m Tonstein bis Tonmergelstein, dunkelgrau

Bezeichnung/Projekt:**Az.: 4721.5//00-00000****Profilbeschreibung (Fortsetzung):**

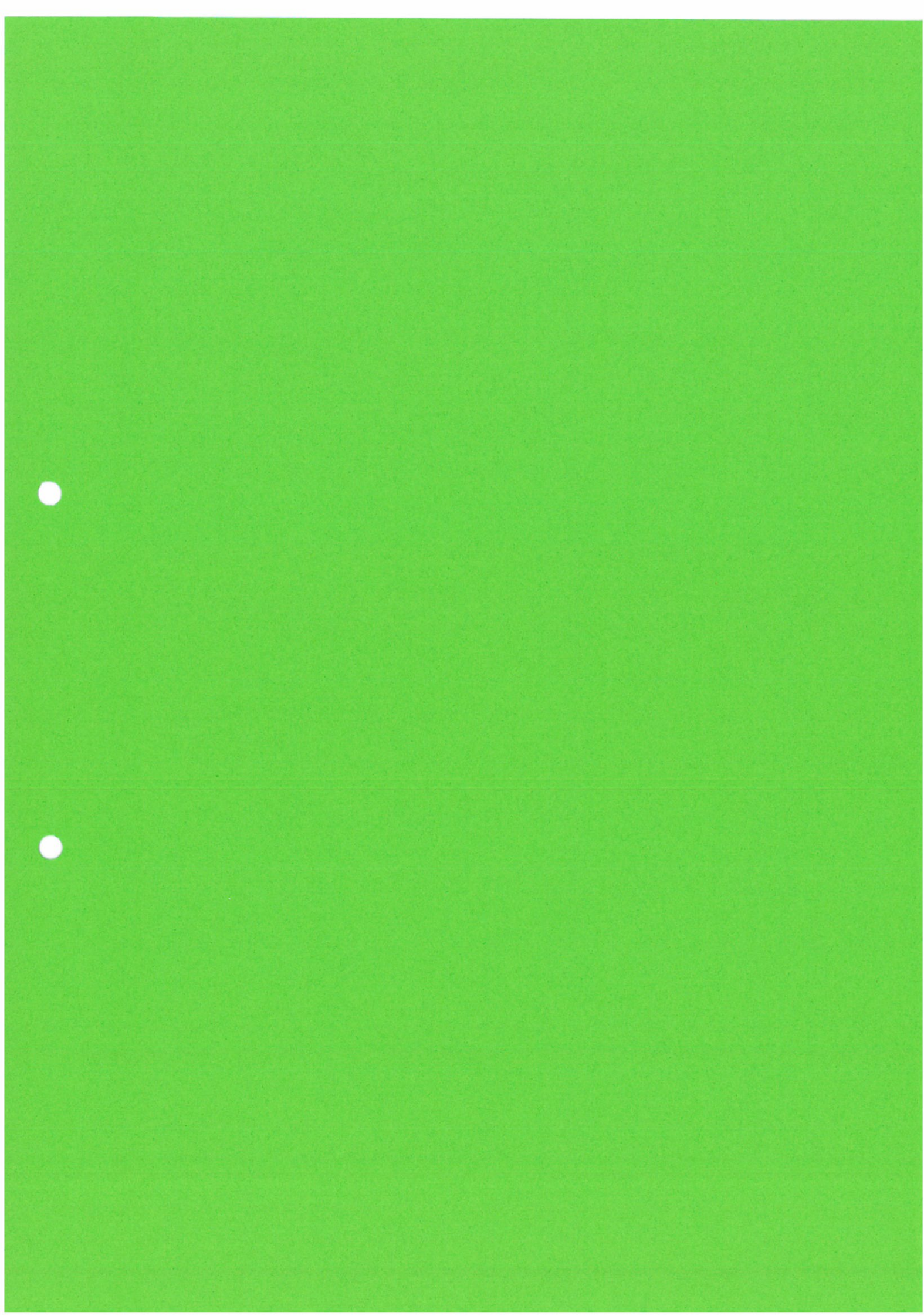
- 28,28 m Mergelstein, dunkelgrau
- 28,31 m Tonstein, dunkelgrau
- 28,46 m Tonmergelstein bis Kalkmergelstein, dunkelgrau, Karbonatgehalt nach unten zunehmend
- 28,76 m Kalkstein, grau, schwach bioturbat
- 28,80 m Kalkmergelstein, stark bioturbat („Seegrasschiefer“)
- 29,08 m Tonstein, dunkelgrau
- 29,31 m Kalkstein, grau
- 29,40 m Kalkmergelstein, grau
- 29,56 m Tonstein, dunkelgrau
- 29,71 m Kalkmergelstein, grau
- 29,78 m Tonmergelstein, dunkelgrau, „Seegrasschiefer“
- 29,88 m Kalkmergelstein, grau
- 30,09 m Tonstein bis Tonmergelstein, dunkelgrau, z.T. stark bioturbat (Fucoiden)
- 30,20 m Kalkstein, grau
- 30,29 m Tonmergelstein, dunkelgrau, „Seegrasschiefer“
- 30,33 m Kalkmergelstein, grau
- 30,46 m Tonstein, dunkelgrau, Fucoiden
- 30,57 m Kalkstein, tonig, grau
- 30,84 m Kalkstein, grau
- 30,89 m Mergelstein, grau
- 31,09 m Tonstein, dunkelgrau
- 31,38 m Kalkmergelstein, grau, bioturbat
- 31,61 m Tonstein, dunkelgrau, bis 31,43 m „Seegrasschiefer“
- 32,13 m Kalkmergelstein, grau, Fucoiden
- 32,48 m Tonstein, dunkelgrau
- 32,54 m Mergelstein, grau
- 32,67 m Tonstein, dunkelgrau, bei 32,57 m Ammonit (schlecht erhalten)
- 33,00 m Kalkmergelstein bis Kalkstein, grau
- 33,11 m Mergelstein, grau
- 33,15 m Tonstein, dunkelgrau

Bezeichnung/Projekt:

Az.: 4721.5//00-00000

Profilbeschreibung (Fortsetzung):

- 33,28 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 33,38 m Tonstein, dunkelgrau, Fucoiden
- 33,43 m Tonmergelstein, dunkelgrau, Fucoiden
- 33,88 m Kalkstein, tonig, Crinoiden
- 33,90 m Mergelstein, grau
- 34,00 m Tonstein, dunkelgrau
- 34,33 m Kalkstein bis Kalkmergelstein, hellgrau
- 34,59 m Tonstein, dunkelgrau, bis 34,39 m einzelne Muschelschalen
- 34,61 m Mergelstein, grau
- 34,96 m Tonstein, dunkelgrau, bis 34,65 m „Seegrasschiefer“, 34,84 – 34,85 m Muschelschilllage
- 35,30 m Mergelstein, grau, Fucoiden
- 35,47 m Kalkstein, hellgrau
- 35,51 m Mergelstein, dunkelgrau
- 35,73 m Tonstein, stark bituminös („Ölschiefer“)
- 35,94 m Kalkstein, tonig, grau
- 36,10 m Tonmergelstein bis Tonstein, dunkelgrau
- 36,38 m Kalkmergelstein, grau
- 36,93 m Kalkstein, ab 36,65 m tonig, hellgrau
- 37,06 m Tonstein, dunkelgrau, stark fucoidenführend („Seegrasschiefer“)
- 37,23 m Kalkstein, mikritisch, hellgrau
- 37,78 m Tonstein bis Tonmergelstein, dunkelgrau, Karbonatgehalt schwankend
- 37,91 m Mergelstein, grau
- 38,00 m Tonmergelstein, dunkelgrau



BOHRPROFIL

Bezeichnung:	GWM B 2/2015	TK 25 Nr.:	6718	Archiv-Nr.:	979
Projekt:	Erweiterung Tgr. Rettigheim	Blatt:	Wiesloch		
Lage:		Koordinaten (nach):			
		R:	34 77 055,00	H:	54 54 641,80
Gemeinde:	Malsch	Höhen (nach):			
Teilort:		Ansatzpunkt:	137,90		m ü. NN
Kreis:	Rhein-Neckar-Kreis	Messpunkt:			m ü. NN
Geol. Aufnahme:	19.02.2015	Ruhewasserspiegel:			m u. A.
Bearbeiter/in:	Dr. Franz				m ü. NN
Bohrfirma:	Celler Brunnenbau				m ü. NN
Bohrzeit:	09.12. - 07.01.2015				m ü. NN
Bohrverfahren (m u. A./Ø mm):		Endteufe:	38		m u. A.

Filterstrecken (m u. A./Ø mm):

Abdichtungen (m u. A.):

Bemerkungen:

Kurzprofil (mit stratigr. Deutung):

- 0 – 0,20 m Boden
- 0,85 m Quartär
 - 0,45 m Lösslehm
 - 0,85 m Fließerde
- 23,39 m Obtususton-Formation (juOT)
- 38,00 m Langenbrücken-Formation (juL)

Bezeichnung/Projekt:**Az.:** 4721.5//00-00000**Profilbeschreibung (Fortsetzung):**

Teufe (m u. A.): Gesteinsart (Haupt-, Nebengemengeteile usw.), Farbe, Gefüge Verwitterungsgrad, Konsistenz, Fossilinhalt, Klüftung u. a.

- 0 – 0,15 m Humus, durchwurzelt, braun
- 0,20 m Ton, schluffig, humos, braun
- 0,45 m Schluff, schwach tonig, hellbraun, schwach Fe-fleckig
- 0,85 m Schluff, tonig, Fe-fleckig, braun, stark durchsetzt mit verwitterten, z.T. leicht entfestigten Tonstein-Bröckchen
- 3,00 m Tonstein, feingeschichtet, dunkelgrau, braun verwittert, kleinstückig zerfallen, nach unten abnehmend verwittert
- 13,00 m Tonstein, schluffig, feinstglimmerig, schwach kalkig (nach unten zunehmend), feingeschichtet, dunkelgrau bis schwarzgrau, bis 4 m braun verwittert; 3,65 – 3,75 und 3,85 – 4,00 m kleinstückig zerfallen
- 14,00 m kein Kern
- 19,54 m Tonstein, schluffig, feinstglimmerig, schwach kalkig, feingeschichtet, dunkelgrau bis schwarzgrau; bei 14,75 m flache, braune Phosphoritkonkretionen bis 5 cm Ø, wiederholt glänzende Horizontalharnische
- 19,63 m Tonmergelstein, dunkelgrau, sehr schwach bioturbat (einzelne, sehr feine Grabgänge, < 1 mm Ø)
- 23,39 m Tonstein, schluffig, feinstglimmerig, feingeschichtet, dunkelgrau, schwach kalkig, oben schwach bioturbat, an der Basis stark bioturbat; im unteren Teil steilstehende Kluft, Calcit-verheilt
- 23,60 m Tonmergelstein, dunkelgrau; steilstehende Kluft, Calcit-verheilt
- 24,68 m Tonstein, dunkelgrau, dunkelgrau, 23,80 – 23,85 m kleine Ammoniten; 24,32 – 24,33 m Tonmergellage
- 24,80 m Mergelstein, dunkelgrau, bei 24,74 m *Arnioceras* sp.
- 25,36 m Tonstein, dunkelgrau
- 25,47 m Mergelstein, dunkelgrau, fossilführend
- 25,86 m Tonstein, dunkelgrau
- 25,93 m Mergelstein, dunkelgrau, fossilführend
- 26,16 m Tonstein, dunkelgrau
- 26,47 m Mergelstein, dunkelgrau
- 27,17 m Tonstein, bituminös, dunkelgrau
- 27,23 m Mergelstein, dunkelgrau

Bezeichnung/Projekt:**Az.: 4721.5/00-00000****Profilbeschreibung (Fortsetzung):**

- 27,45 m Tonstein, dunkelgrau
- 27,72 m Mergelstein, dunkelgrau
- 27,93 m Tonstein, dunkelgrau
- 28,00 m Mergelstein, dunkelgrau
- 28,52 m Tonstein, dunkelgrau
- 28,58 m Mergelstein, dunkelgrau
- 28,78 m Tonstein, dunkelgrau
- 29,09 m Kalkstein, grau, am Top übergehend in 2 cm Kalkmergelstein, dunkelgrau
- 29,13 m Tonmergelstein, dunkelgrau, stark bioturbat („Seegrasschiefer“)
- 29,48 m Kalkmergelstein bis Kalkstein, tonig, dunkelgrau bis grau
- 29,53 m Tonmergelstein, dunkelgrau, stark bioturbat („Seegrasschiefer“)
- 29,69 m Kalkstein, tonig, grau
- 29,73 m Tonmergelstein, dunkelgrau, stark bioturbat („Seegrasschiefer“)
- 30,00 m Kalkstein, tonig, dunkelgrau bis grau, bioturbat; nach oben unten in Kalkmergelstein übergehend; *Pentacrinus*
- 30,10 m Kalkmergelstein, dunkelgrau
- 30,21 m Kalkstein, grau
- 30,26 m Kalkmergelstein, dunkelgrau, bioturbat
- 30,66 m Tonstein, 30,30 – 30,36 m Tonmergelstein, dunkelgrau, stark bioturbat („Seegrasschiefer“)
- 30,74 m Tonstein, dunkelgrau
- 30,89 m Kalkmergelstein, dunkelgrau
- 31,00 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 31,23 m Kalkstein, tonig, grau
- 31,51 m Tonmergelstein bis Tonstein, dunkelgrau
- 31,89 m Kalkstein, grau
- 31,96 m Kalkmergelstein, dunkelgrau
- 32,16 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 32,31 m Tonstein, dunkelgrau
- 32,42 m Tonmergelstein, dunkelgrau, stark bioturbat („Seegrasschiefer“)
- 32,50 m Kalkmergelstein, dunkelgrau

Bezeichnung/Projekt:**Az.:** 4721.5//00-00000**Profilbeschreibung (Fortsetzung):**

- 32,71 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 32,83 m Tonstein, dunkelgrau
- 33,00 m Mergelstein, dunkelgrau
- 33,06 m Tonstein, dunkelgrau
- 33,33 m Kalkmergelstein, dunkelgrau
- 33,41 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 33,47 m Tonstein, dunkelgrau
- 33,53 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 33,88 m Kalkstein, grau
- 34,00 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 34,16 m Tonstein, dunkelgrau
- 34,39 m Mergelstein, dunkelgrau
- 34,58 m Tonstein, dunkelgrau
- 34,61 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 35,14 m Kalkmergelstein bis Kalkstein, tonig, dunkelgrau bis grau
- 35,19 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 35,50 m Tonstein, dunkelgrau
- 35,70 m Tonmergelstein, dunkelgrau, ab 35,65 m stark bioturbat („Seegrasschiefer“)
- 36,00 m Kalkstein, tonig, dunkelgrau
- 36,19 m Mergelstein, dunkelgrau
- 36,55 m Kalkstein, grau, fossilführend (*Pentacrinus*, Echinodermen)
- 36,64 m Tonstein, dunkelgrau
- 36,68 m Tonmergelstein, dunkelgrau, stark bioturbat („Seegrasschiefer“)
- 37,00 m Tonmergelstein, dunkelgrau
- 37,30 m Kalkstein, grau
- 37,55 m Tonstein, dunkelgrau
- 37,69 m Tonmergelstein, grau
- 37,85 m Tonstein, dunkelgrau, stark bioturbat („Seegrasschiefer“)
- 38,00 m Kalkmergelstein, dunkelgrau

Bezeichnung/Projekt:

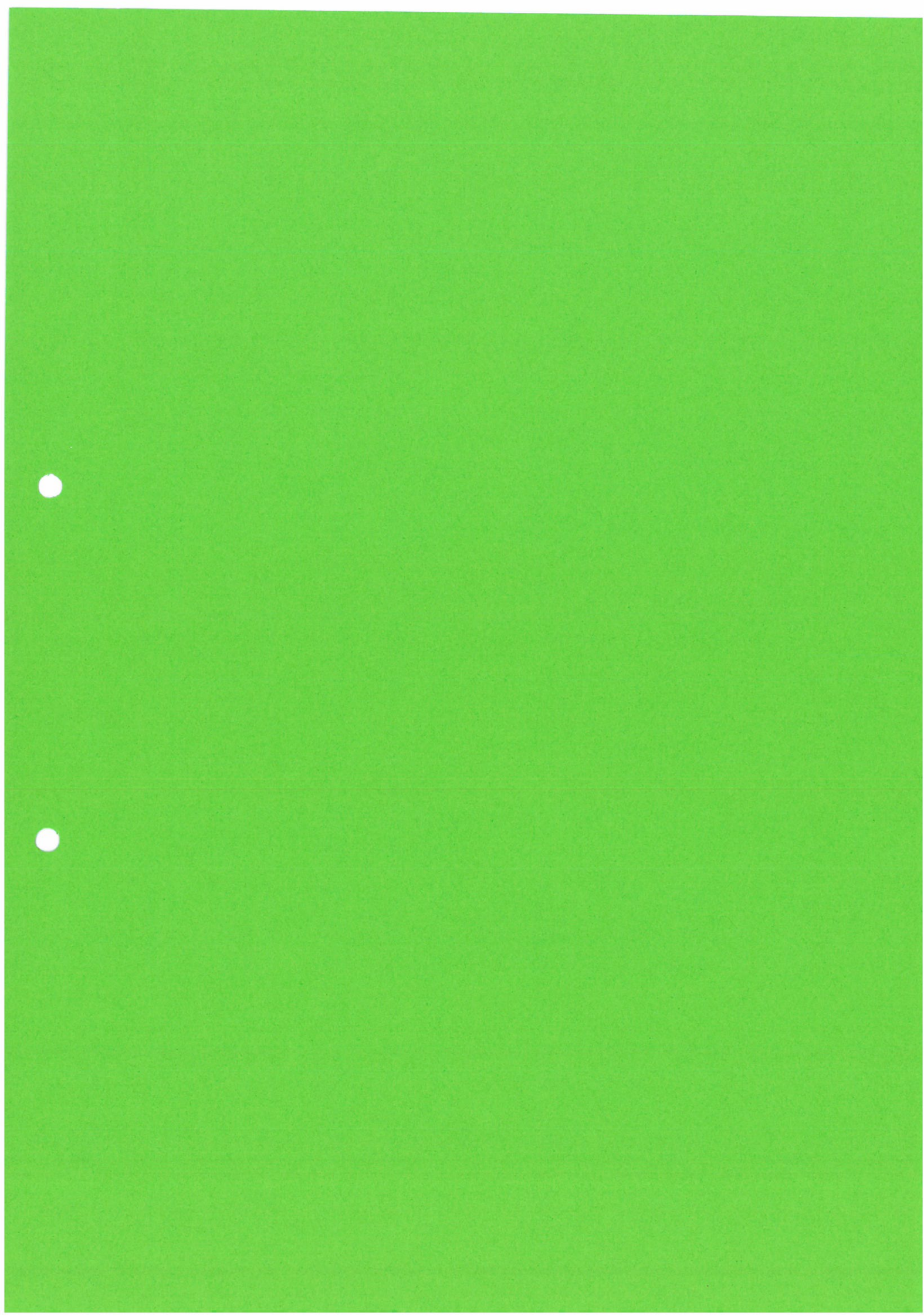
Profilbeschreibung (Fortsetzung):

Az.: 4721.5//00-00000



Anhang 3

Originalanalyseblätter der hydrochemischen Untersuchungen der HYDROISOTOP gmbh



Prüfbericht Nr. 270927 - 272260

Blatt 1 von 16

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
	B1/2015 (05.05.2015)	B2/2015 (05.05.2015)	H1 = Quelle Hengstbach	
PROBENBEZEICHNUNG				
Labornummer	270927	270928	270929	
Probenahmedatum	05.05.2015, 16:20	05.05.2015, 17:20	05.05.2015, 18:15	
PROBENAHRME				
Ausbautiefe	21,5	19,72	-	m
Ausbau Durchmesser	13	13	-	cm
Entnahmetiefe	-	18,5	-	m
Ruhewasserspiegel	2,86	14,52	-	m
Förderdauer	-	15	-	min
Förderstrom	0,4	0,02	-	l/sec
abgesenkter Wasserspiegel	6,5	18,4	-	m
Schüttung	-	-	0,1	l/sec
PHYSIKALISCH-CHEMISCHE PARAMETER				
Färbung	farblos	grau	farblos	
Trübung visuell	klar	stark	klar	
Geruch	neutral	neutral	neutral	
Temperatur	11,8	21,2	15,1	°C
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) vor Ort	2140	2220	1419	µS/cm
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) Labor	2150	2320	1430	µS/cm

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
	B1/2015 (05.05.2015)	B2/2015 (05.05.2015)	H1 = Quelle Hengstbach	
PROBENBEZEICHNUNG				
Labornummer	270927	270928	270929	
Probenahmedatum	05.05.2015, 16:20	05.05.2015, 17:20	05.05.2015, 18:15	
PHYSIKALISCH-CHEMISCHE PARAMETER				
pH-Wert (t_{gem}) vor Ort	7,27	8,23	7,66	
pH Wert Labor	7,41	8,38	7,68	
Temperatur Labor	20,7	20,7	20,7	°C
gelöster Sauerstoffgehalt	1,6	< 0,1	5,5	mg/l
Redoxpotential (berechnet)	306	172	372	mV
Bk-Wert (pH 8,2)	1,62	-	0,61	mmol/l
Sk-Wert (pH 4,3) vor Ort	17,7	-	8,65	mmol/l
Sk-Wert (pH 4,3) Labor	16,6	18,2	8,28	mmol/l
Sk-Wert (pH 8,2) Labor	-	0,56	-	mmol/l
KATIONEN				
Natrium (Na^+)	440	579	68,6	mg/l
Kalium (K^+)	3,9	3,5	2,2	mg/l
Calcium (Ca^{2+})	39,7	12,9	204	mg/l
Magnesium (Mg^{2+})	37,2	3,7	45,0	mg/l
Ammonium (NH_4^+)	1,08	0,08	< 0,05	mg/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
	B1/2015 (05.05.2015)	B2/2015 (05.05.2015)	H1 = Quelle Hengstbach	
PROBENBEZEICHNUNG				
Labornummer	270927	270928	270929	
Probenahmedatum	05.05.2015, 16:20	05.05.2015, 17:20	05.05.2015, 18:15	
ANIONEN				
Hydrogenkarbonat (HCO_3^-)	1010	1110	505	mg/l
Chlorid (Cl^-)	21,6	18,8	20,4	mg/l
Sulfat (SO_4^{2-})	330	358	378	mg/l
Nitrat (NO_3^-)	< 0,2	< 0,2	8,2	mg/l
Nitrit (NO_2^-)	0,10	0,02	< 0,01	mg/l
IONENBILANZ				
Ionenbilanzfehler	0,60	0,28	0,24	%
SPURENSTOFFE				
Bor	1,200	1,300	0,250	mg/l *
Fluorid (F^-)	0,60	2,0	0,35	mg/l
Lithium (Li^+)	0,280	0,160	0,050	mg/l
Silizium	4,10	3,70	5,10	mg/l
Strontium (Sr^{2+})	4,20	0,63	1,00	mg/l
Sulfid ges. (HS^- , S^{2-})	< 0,01	< 0,01	< 0,01	mg/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
PROBENBEZEICHNUNG	B1/2015 (05.05.2015)	B2/2015 (05.05.2015)	H1 = Quelle Hengstbach	
Labornummer	270927	270928	270929	
Probenahmedatum	05.05.2015, 16:20	05.05.2015, 17:20	05.05.2015, 18:15	
METALLE				
Aluminium	0,037	0,460	0,076	mg/l *
Arsen	< 0,001	0,005	< 0,001	mg/l *
Blei	< 0,001	< 0,001	< 0,001	mg/l *
Cadmium	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	mg/l *
Eisen ges.	0,12	1,15	1,69	mg/l
Kupfer	< 0,001	< 0,001	< 0,001	mg/l *
Mangan ges.	0,19	0,10	0,24	mg/l
Quecksilber	< 0,0002	0,0003	< 0,0002	mg/l *
Zink	0,005	0,011	0,003	mg/l *
SUMMEN- UND EINZELPARAMETER				
Gesamthärte berechnet	2,52	0,47	6,94	mmol/l
Gesamthärte berechnet	14,1	2,66	38,9	°dH
ISOTOPE				
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}\text{O}$)	-8,69	-8,86	-8,22	‰
Deuterium ($\delta^2\text{H}$)	-59,1	-60,4	-55,6	‰
Deuterium-Exzess	10,42	10,48	10,16	‰
Tritium (^3H)	6,1 ± 0,7	1,8 ± 0,6	7,3 ± 1,0	TU

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
PROBENBEZEICHNUNG	E1 = Quelle Erlengraben	B1/2015 (06.05.2015)	B2/2015 (06.05.2015)	
Labornummer	270933	270934	270935	
Probenahmedatum	05.05.2015, 20:40	06.05.2015, 08:25	06.05.2015, 09:20	
PROBENAHEME				
Ausbautiefe	-	20,7	19,7	m
Ausbaudurchmesser	-	13	13	cm
Entnahmetiefe	-	18,5	18,5	m
Ruhewasserspiegel	-	2,86	17,14	m
Förderdauer	-	-	-	min
Förderstrom	-	0,02	0,05	l/sec
abgesenkter Wasserspiegel	-	-	17,71	m
Schüttung	0,2	-	-	l/sec
PHYSIKALISCH-CHEMISCHE PARAMETER				
Färbung	farblos	farblos	grau	
Trübung visuell	klar	klar	stark	
Geruch	neutral	neutral	neutral	
Temperatur	15,7	11,9	12,8	°C
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) vor Ort	847	2140	2140	µS/cm
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) Labor	844	2100	2220	µS/cm

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
	E1 = Quelle Erlengraben	B1/2015 (06.05.2015)	B2/2015 (06.05.2015)	
PROBENBEZEICHNUNG				
Labornummer	270933	270934	270935	
Probenahmedatum	05.05.2015, 20:40	06.05.2015, 08:25	06.05.2015, 09:20	

PHYSIKALISCH-CHEMISCHE PARAMETER

pH-Wert (t_{gem}) vor Ort	7,44	7,27	8,41	
pH Wert Labor	7,16	7,34	8,43	
Temperatur Labor	20,9	20,9	21,0	°C
gelöster Sauerstoffgehalt	7,8	0,8	< 0,1	mg/l
Redoxpotential (berechnet)	463	321	75	mV
Bk-Wert (pH 8,2)	1,10	1,47	-	mmol/l
Sk-Wert (pH 4,3) vor Ort	5,65	16,9	-	mmol/l
Sk-Wert (pH 4,3) Labor	5,44	16,0	18,4	mmol/l
Sk-Wert (pH 8,2) Labor	-	-	0,66	mmol/l

KATIONEN

Natrium (Na^+)	10,7	465	566	mg/l
Kalium (K^+)	1,0	4,1	3,7	mg/l
Calcium (Ca^{2+})	142	14,1	6,6	mg/l
Magnesium (Mg^{2+})	13,6	38,8	3,2	mg/l
Ammonium (NH_4^+)	< 0,05	1,33	0,41	mg/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
	E1 = Quelle Erlengraben	B1/2015 (06.05.2015)	B2/2015 (06.05.2015)	
PROBENBEZEICHNUNG				
Labornummer	270933	270934	270935	
Probenahmedatum	05.05.2015, 20:40	06.05.2015, 08:25	06.05.2015, 09:20	
ANIONEN				
Hydrogenkarbonat (HCO_3^-)	332	976	1120	mg/l
Chlorid (Cl^-)	53,7	21,8	17,8	mg/l
Sulfat (SO_4^{2-})	57,0	366	310	mg/l
Nitrat (NO_3^-)	40,2	5,1	< 0,2	mg/l
Nitrit (NO_2^-)	< 0,01	0,05	< 0,01	mg/l
IONENBILANZ				
Ionenbilanzfehler	1,07	0,14	0,26	%
SPURENSTOFFE				
Bor	0,053	1,200	1,300	mg/l *
Fluorid (F^-)	0,16	0,54	2,2	mg/l
Lithium (Li^+)	< 0,01	0,270	0,160	mg/l
Silizium	3,40	4,10	2,50	mg/l
Strontium (Sr^{2+})	0,17	2,90	0,61	mg/l
Sulfid ges. (HS^- , S^{2-})	< 0,01	< 0,01	< 0,01	mg/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
PROBENBEZEICHNUNG	E1 = Quelle Erlengraben	B1/2015 (06.05.2015)	B2/2015 (06.05.2015)	
Labornummer	270933	270934	270935	
Probenahmedatum	05.05.2015, 20:40	06.05.2015, 08:25	06.05.2015, 09:20	
METALLE				
Aluminium	0,110	0,075	0,440	mg/l *
Arsen	< 0,001	< 0,001	0,004	mg/l *
Blei	< 0,001	< 0,001	< 0,001	mg/l *
Cadmium	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	mg/l *
Eisen ges.	0,67	0,04	1,99	mg/l
Kupfer	< 0,001	< 0,001	< 0,001	mg/l *
Mangan ges.	0,34	0,14	0,35	mg/l
Quecksilber	< 0,0002	< 0,0002	0,0003	mg/l *
Zink	0,003	0,015	0,015	mg/l *
SUMMEN- UND EINZELPARAMETER				
Gesamthärte berechnet	4,10	1,95	0,30	mmol/l
Gesamthärte berechnet	23,0	10,9	1,66	°dH
ISOTOPE				
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}\text{O}$)	-8,03	-8,68	-9,02	‰
Deuterium ($\delta^2\text{H}$)	-53,3	-57,6	-61,2	‰
Deuterium-Exzess	10,94	11,84	10,96	‰
Tritium (^3H)	7,5 ± 0,9	4,9 ± 0,7	1,1 ± 0,8	TU

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
	Tagebausee	St. Rochus-brunnen	GWM Rettigheim 2	
PROBENBEZEICHNUNG				
Labornummer	270936	271055	272259	
Probenahmedatum	06.05.2015, 10:10	19.05.2015, 15:40	10.06.2015, 14:25	
PHYSIKALISCH-CHEMISCHE PARAMETER				
Färbung	farblos	farblos	farblos	
Trübung visuell	klar	klar	klar	
Geruch	neutral	H ₂ S	H ₂ S	
Temperatur	18,7	14,5	13,2	°C
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) vor Ort	2270	1440	1192	µS/cm
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) Labor	2250	1383	1179	µS/cm
pH-Wert (t _{gem}) vor Ort	8,12	7,73	9,21	
pH Wert Labor	7,85	7,77	8,93	
Temperatur Labor	21,0	22,9	27,4	°C
gelöster Sauerstoffgehalt	11,3	< 0,1	0,1	mg/l
Redoxpotential (berechnet)	408	-131	-188	mV
Bk-Wert (pH 8,2)	0,08	0,65	-	mmol/l
Sk-Wert (pH 4,3) vor Ort	5,95	13,3	11,2	mmol/l
Sk-Wert (pH 4,3) Labor	5,64	12,6	11,1	mmol/l
Sk-Wert (pH 8,2) Labor	-	-	0,82	mmol/l
KATIONEN				
Natrium (Na ⁺)	344	301	297	mg/l
Kalium (K ⁺)	14,4	2,8	1,9	mg/l
Calcium (Ca ²⁺)	106	17,8	1,2	mg/l
Magnesium (Mg ²⁺)	60,1	14,2	0,6	mg/l
Ammonium (NH ₄ ⁺)	0,15	< 0,1	0,54	mg/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
	Tagebausee	St. Rochus-brunnen	GWM Rettigheim 2	
PROBENBEZEICHNUNG				
Labornummer	270936	271055	272259	
Probenahmedatum	06.05.2015, 10:10	19.05.2015, 15:40	10.06.2015, 14:25	
ANIONEN				
Hydrogenkarbonat (HCO_3^-)	344	769	677	mg/l
Chlorid (Cl^-)	49,6	69,2	3,6	mg/l
Sulfat (SO_4^{2-})	884	7,3	70,5	mg/l
Nitrat (NO_3^-)	4,8	< 0,2	< 0,2	mg/l
Nitrit (NO_2^-)	< 0,01	< 0,01	< 0,01	mg/l
IONENBILANZ				
Ionenbilanzfehler	0,19	0,84	1,13	%
SPURENSTOFFE				
Bor	1,200	0,690	1,200	mg/l *
Fluorid (F^-)	0,60	0,77	0,95	mg/l
Lithium (Li^+)	0,400	0,050	0,500	mg/l
Silizium	3,00	0,06	3,80	mg/l
Strontium (Sr^{2+})	4,40	4,00	< 0,1	mg/l
Sulfid ges. (HS^- , S^{2-})	< 0,01	40,9	7,90	mg/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit	
	Tagebausee	St. Rochus-brunnen	GWM Rettigheim 2		
PROBENBEZEICHNUNG					
Labornummer	270936	271055	272259		
Probenahmedatum	06.05.2015, 10:10	19.05.2015, 15:40	10.06.2015, 14:25		
METALLE					
Aluminium	0,230	< 0,005	< 0,005	mg/l	*
Arsen	< 0,001	0,002	< 0,001	mg/l	*
Blei	< 0,001	< 0,001	< 0,001	mg/l	*
Cadmium	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	mg/l	*
Eisen ges.	0,31	0,12	0,05	mg/l	
Kupfer	0,001	< 0,001	< 0,001	mg/l	*
Mangan ges.	0,16	0,01	0,06	mg/l	
Quecksilber	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	mg/l	*
Zink	0,002	0,002	0,068	mg/l	*
SUMMEN- UND EINZELPARAMETER					
Gesamthärte berechnet	5,11	1,03	0,05	mmol/l	
Gesamthärte berechnet	28,7	5,76	0,30	°dH	
ISOTOPE					
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}\text{O}$)	-6,2	-9,04	-10,45	‰	
Deuterium ($\delta^2\text{H}$)	-48,5	-61	-71,9	‰	
Deuterium-Exzess	1,10	11,32	11,70	‰	
Tritium (^3H)	6,3 ± 1,0	1,9 ± 0,7	< 0,6	TU	

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis	Einheit
PROBENBEZEICHNUNG	GWM	
	Rettigheim 3	
Labornummer	272260	
Probenahmedatum	10.06.2015, 15:00	

PHYSIKALISCH-CHEMISCHE PARAMETER

Färbung	farblos	
Trübung visuell	klar	
Geruch	H ₂ S	
Temperatur	12,7	°C
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) vor Ort	1176	µS/cm
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) Labor	1171	µS/cm
pH-Wert (t _{gem}) vor Ort	9,18	
pH Wert Labor	8,83	
Temperatur Labor	27,6	°C
gelöster Sauerstoffgehalt	1,1	mg/l
Redoxpotential (berechnet)	-137	mV
Bk-Wert (pH 8,2)	-	mmol/l
Sk-Wert (pH 4,3) vor Ort	10,8	mmol/l
Sk-Wert (pH 4,3) Labor	10,7	mmol/l
Sk-Wert (pH 8,2) Labor	0,66	mmol/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis	Einheit
PROBENBEZEICHNUNG	GWM Rettigheim 3	
Labornummer	272260	
Probenahmedatum	10.06.2015, 15:00	
KATIONEN		
Natrium (Na ⁺)	289	mg/l
Kalium (K ⁺)	1,6	mg/l
Calcium (Ca ²⁺)	1,3	mg/l
Magnesium (Mg ²⁺)	0,6	mg/l
Ammonium (NH ₄ ⁺)	0,40	mg/l
ANIONEN		
Hydrogenkarbonat (HCO ₃ ⁻)	653	mg/l
Chlorid (Cl ⁻)	3,0	mg/l
Sulfat (SO ₄ ²⁻)	84,3	mg/l
Nitrat (NO ₃ ⁻)	< 0,2	mg/l
Nitrit (NO ₂ ⁻)	< 0,01	mg/l
IONENBILANZ		
Ionenbilanzfehler	0,48	%
SPURENSTOFFE		
Bor	0,920	mg/l
Fluorid (F ⁻)	0,60	mg/l
Lithium (Li ⁺)	0,530	mg/l
Silizium	3,60	mg/l
Strontium (Sr ²⁺)	< 0,1	mg/l
Sulfid ges. (HS ⁻ , S ²⁻)	3,60	mg/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015 - 12.06.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	30.07.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis	Einheit	
PROBENBEZEICHNUNG	GWM Rettigheim 3		
Labornummer	272260		
Probenahmedatum	10.06.2015, 15:00		
METALLE			
Aluminium	0,007	mg/l	*
Arsen	< 0,001	mg/l	*
Blei	< 0,001	mg/l	*
Cadmium	< 0,0002	mg/l	*
Eisen ges.	< 0,02	mg/l	
Kupfer	< 0,001	mg/l	*
Mangan ges.	0,03	mg/l	
Quecksilber	< 0,0002	mg/l	*
Zink	0,021	mg/l	*
SUMMEN- UND EINZELPARAMETER			
Gesamthärte berechnet	0,06	mmol/l	
Gesamthärte berechnet	0,31	°dH	
ISOTOPE			
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}\text{O}$)	-10,01	‰	(s)
Deuterium ($\delta^2\text{H}$)	-68,1	‰	(s)
Deuterium-Exzess	11,98	‰	
Tritium (^3H)	< 0,6	TU	

Projekt: Tontagebau Rettigheim
Auftraggeber: Wienerberger GmbH

Prüfparameter	Prüfverfahren
Tritium (^3H)	Flüssigkeitsszintillationsspektrometrie (LSC) nach elektrolytischer Anreicherung, gemessen in Tritiumeinheiten (TU) mit zweifacher Standardabweichung (1 TU = 0,119 Bq/L); Ergebnis bezogen auf Messdatum (keine Halbwertszeitkorrektur) DIN ES ISO 10523: 2012-04
pH-Wert (t_{gem}) vor Ort	DIN ES ISO 10523: 2012-04
pH Wert Labor	DIN 38404 Teil 4
Temperatur Labor	EN 27888:1993-11
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) vor Ort	EN 27888:1993-11
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) Labor	DIN 38408-G22
gelöster Sauerstoffgehalt	DIN 38404-C6
Redoxpotential (berechnet)	DIN 38409-7:2004-03
Sk-Wert (pH 4,3) vor Ort	DIN 38409-7:2004-03
Sk-Wert (pH 4,3) Labor	DIN 38409-7:2004-03
Sk-Wert (pH 8,2) Labor	DIN 38409-7:2004-03
Bk-Wert (pH 8,2)	DIN 38409-7:2004-03
Natrium (Na^+)	DIN EN ISO 14911 (E34)
Kalium (K^+)	DIN EN ISO 14911 (E34)
Calcium (Ca^{2+})	DIN EN ISO 14911 (E34)
Magnesium (Mg^{2+})	DIN EN ISO 14911 (E34)
Ammonium (NH_4^+)	photometrische Bestimmung
Hydrogenkarbonat (HCO_3^-)	berechnet über SK-Wert
Chlorid (Cl^-)	DIN EN ISO 10304-1 (D20)
Sulfat (SO_4^{2-})	DIN EN ISO 10304-1 (D20)
Nitrat (NO_3^-)	DIN EN ISO 10304-1 (D20)
Nitrit (NO_2^-)	photometrische Bestimmung
Ionenbilanzfehler	berechnet
Fluorid (F^-)	DIN EN ISO 10304-1 (D20)
Mangan ges.	photometrische Bestimmung nach Ansäuerung
Eisen ges.	photometrische Bestimmung nach Ansäuerung
Sulfid ges. (HS^- , S^{2-})	photometrische Bestimmung
Aluminium	DIN EN ISO 17294-2 (E29), ICP-MS
Bor	DIN EN ISO 17294-2 (E29), ICP-MS
Arsen	DIN EN ISO 17294-2 (E29), ICP-MS
Blei	DIN EN ISO 17294-2 (E29), ICP-MS
Cadmium	DIN EN ISO 17294-2 (E29), ICP-MS
Kupfer	DIN EN ISO 17294-2 (E29), ICP-MS

Projekt: Tontagebau Rettigheim
Auftraggeber: Wienerberger GmbH

Prüfparameter	Prüfverfahren
Quecksilber	DIN EN ISO 17294-2 (E29), ICP-MS
Zink	DIN EN ISO 17294-2 (E29), ICP-MS *
Lithium (Li^+)	DIN EN ISO 14911 (E34) *
Deuterium-Exzess	berechnet
Gesamthärte berechnet	berechnet
Strontium (Sr^{2+})	DIN EN ISO 14911 (E34)
Silizium	photometrische Bestimmung
Temperatur	DIN 38404 Teil 4
Trübung visuell	DIN EN ISO 7027-C ₂
Geruch	DEV B1/2
Färbung	DIN EN ISO 7887-C1
Deuterium ($\delta^2\text{H}$) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: $1\sigma = \pm 1,0 \text{ ‰}$
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}\text{O}$) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: $1\sigma = \pm 0,10 \text{ ‰}$

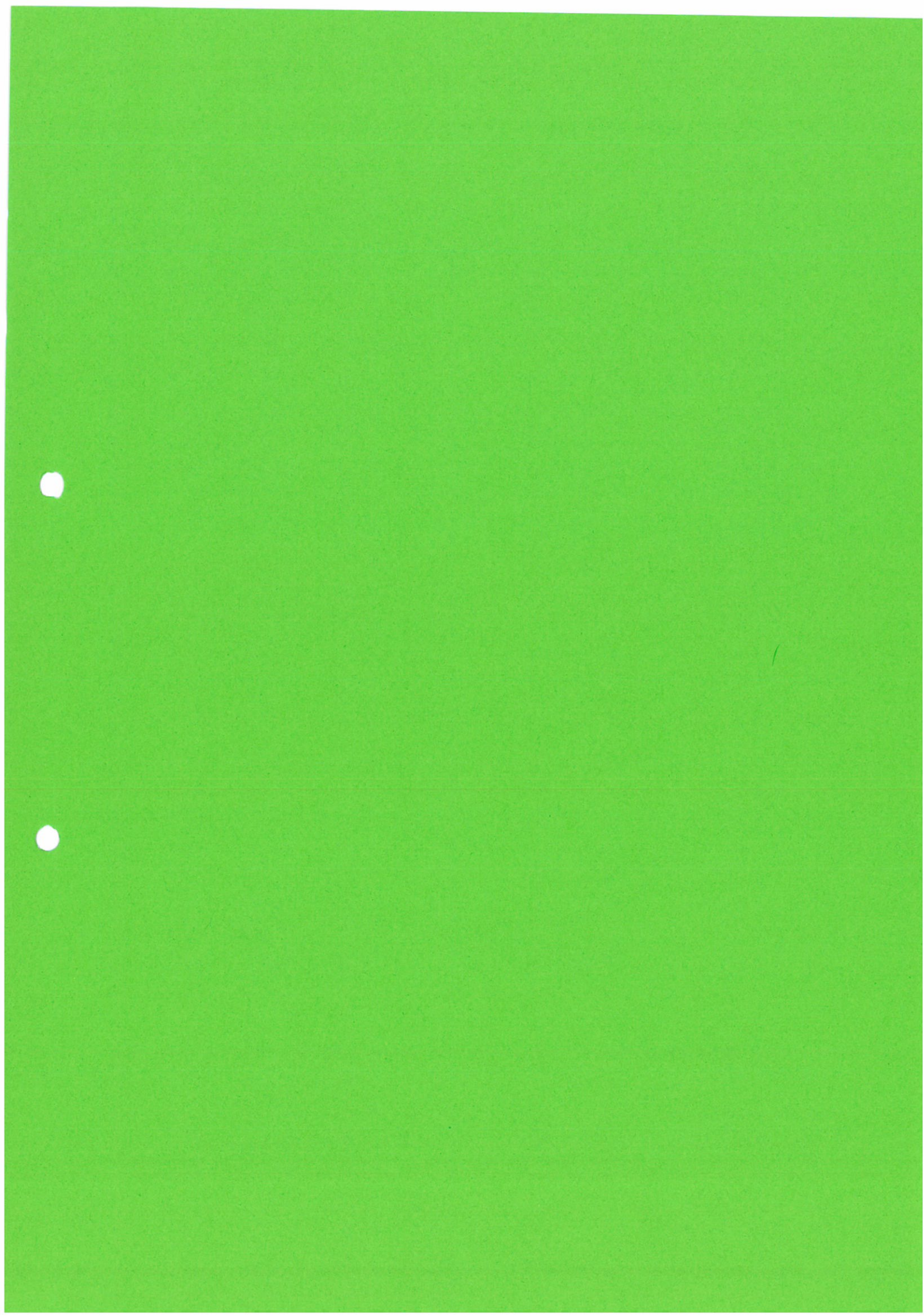
Legende

*	Analytik in Kooperation mit akkreditiertem bzw. qualifiziertem Prüflabor
n.b.	nicht bestimmt, Konzentration zu gering
<	für Messungen radioaktiver Parameter Angabe der Nachweisgrenze, für alle anderen Messungen Angabe der Bestimmungsgrenze
-	nicht beauftragt
x	qualifiziertes Verfahren mit ausstehender Akkreditierung

Anmerkungen

Die Prüfergebnisse beziehen sich nur auf die Prüfgegenstände.
 Auch eine auszugsweise Veröffentlichung von Prüfergebnissen bedarf der ausdrücklichen schriftlichen Genehmigung der Hydroisotop GmbH.
 Es gelten die allgemeinen Geschäftsbedingungen der Hydroisotop GmbH.

Dr. Eichinger
 (Geschäftsführer)
 19.08.2015



Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	16.06.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
PROBENBEZEICHNUNG	Hengstbach H2	Hengstbach H3	Hengstbach H4	
Labornummer	270930	270931	270932	
Probenahmedatum	05.05.2015, 18:50	05.05.2015, 19:00	05.05.2015, 20:00	
PROBENAHEME				
Schüttung	-	0,1	-	l/sec
PHYSIKALISCH-CHEMISCHE PARAMETER				
Färbung	farblos	farblos	farblos	
Trübung visuell	klar	klar	klar	
Geruch	neutral	neutral	neutral	
Temperatur	16,1	15,2	12,3	°C
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) vor Ort	1381	1889	1054	µS/cm
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) Labor	-	1860	1042	µS/cm
pH-Wert (t _{gem}) vor Ort	7,52	7,52	7,76	
pH Wert Labor	-	7,50	7,81	
Temperatur Labor	-	20,9	20,9	°C
gelöster Sauerstoffgehalt	5,0	5,9	9,5	mg/l
Redoxpotential (berechnet)	403	323	480	mV
Bk-Wert (pH 8,2)	0,59	0,80	-	mmol/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	16.06.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
PROBENBEZEICHNUNG	Hengstbach H2	Hengstbach H3	Hengstbach H4	
Labornummer	270930	270931	270932	
Probenahmedatum	05.05.2015, 18:50	05.05.2015, 19:00	05.05.2015, 20:00	
PHYSIKALISCH-CHEMISCHE PARAMETER				
Sk-Wert (pH 4,3) vor Ort	8,20	8,35	-	mmol/l
Sk-Wert (pH 4,3) Labor	-	8,06	7,00	mmol/l
KATIONEN				
Natrium (Na ⁺)	-	55,7	20,3	mg/l
Kalium (K ⁺)	-	1,3	2,1	mg/l
Calcium (Ca ²⁺)	-	309	185	mg/l
Magnesium (Mg ²⁺)	-	70,3	19,4	mg/l
ANIONEN				
Hydrogenkarbonat (HCO ₃ ⁻)		492	427	mg/l
Chlorid (Cl ⁻)	-	26,8	47,2	mg/l
Sulfat (SO ₄ ²⁻)	-	728	164	mg/l
Nitrat (NO ₃ ⁻)	-	0,2	7,2	mg/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	16.06.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
PROBENBEZEICHNUNG	Hengstbach H2	Hengstbach H3	Hengstbach H4	
Labornummer	270930	270931	270932	
Probenahmedatum	05.05.2015, 18:50	05.05.2015, 19:00	05.05.2015, 20:00	
IONENBILANZ				
Ionenbilanzfehler	-	1,33	0,83	%
SPURENSTOFFE				
Lithium (Li ⁺)	-	0,027	0,009	mg/l
Strontium (Sr ²⁺)	-	1,53	0,41	mg/l
SUMMEN- UND EINZELPARAMETER				
Gesamthärte berechnet	-	10,6	5,41	mmol/l
Gesamthärte berechnet	-	59,4	30,4	°dH
ISOTOPE				
Sauerstoff 18 (δ ¹⁸ O)	-8,40	-8,11	-8,47	‰
Deuterium (δ ² H)	-56,4	-54,8	-57,2	‰
Deuterium-Exzess	10,80	10,08	10,56	‰

Projekt: Tontagebau Rettigheim
Auftraggeber: Wienerberger GmbH

Prüfparameter	Prüfverfahren
pH-Wert (t_{25}) vor Ort	DIN EN ISO 10523: 2012-04
pH Wert Labor	DIN EN ISO 10523: 2012-04
Temperatur Labor	DIN 38404 Teil 4
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) vor Ort	EN 27888:1993-11
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) Labor	EN 27888:1993-11
gelöster Sauerstoffgehalt	DIN 38408-G22
Redoxpotential (berechnet)	DIN 38404-C6
Sk-Wert (pH 4,3) vor Ort	DIN 38409-7:2004-03
Sk-Wert (pH 4,3) Labor	DIN 38409-7:2004-03
Bk-Wert (pH 8,2)	DIN 38409-7:2004-03
Natrium (Na^+)	DIN EN ISO 14911 (E34)
Kalium (K^+)	DIN EN ISO 14911 (E34)
Calcium (Ca^{2+})	DIN EN ISO 14911 (E34)
Magnesium (Mg^{2+})	DIN EN ISO 14911 (E34)
Hydrogenkarbonat (HCO_3^-)	berechnet über SK-Wert
Chlorid (Cl^-)	DIN EN ISO 10304-1 (D20)
Sulfat (SO_4^{2-})	DIN EN ISO 10304-1 (D20)
Nitrat (NO_3^-)	DIN EN ISO 10304-1 (D20)
Ionenbilanzfehler	berechnet
Lithium (Li^+)	DIN EN ISO 14911 (E34)
Deuterium-Exzess	berechnet
Gesamthärte berechnet	berechnet
Strontium (Sr^{2+})	DIN EN ISO 14911 (E34)
Temperatur	DIN 38404 Teil 4
Trübung visuell	DIN EN ISO 7027-C ₂
Geruch	DEV B1/2
Färbung	DIN EN ISO 7887-C1
Deuterium ($\delta^2\text{H}$) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: $1\sigma = \pm 1,0 \text{ ‰}$
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}\text{O}$) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: $1\sigma = \pm 0,10 \text{ ‰}$

Projekt: Tontagebau Rettigheim
Auftraggeber: Wienerberger GmbH

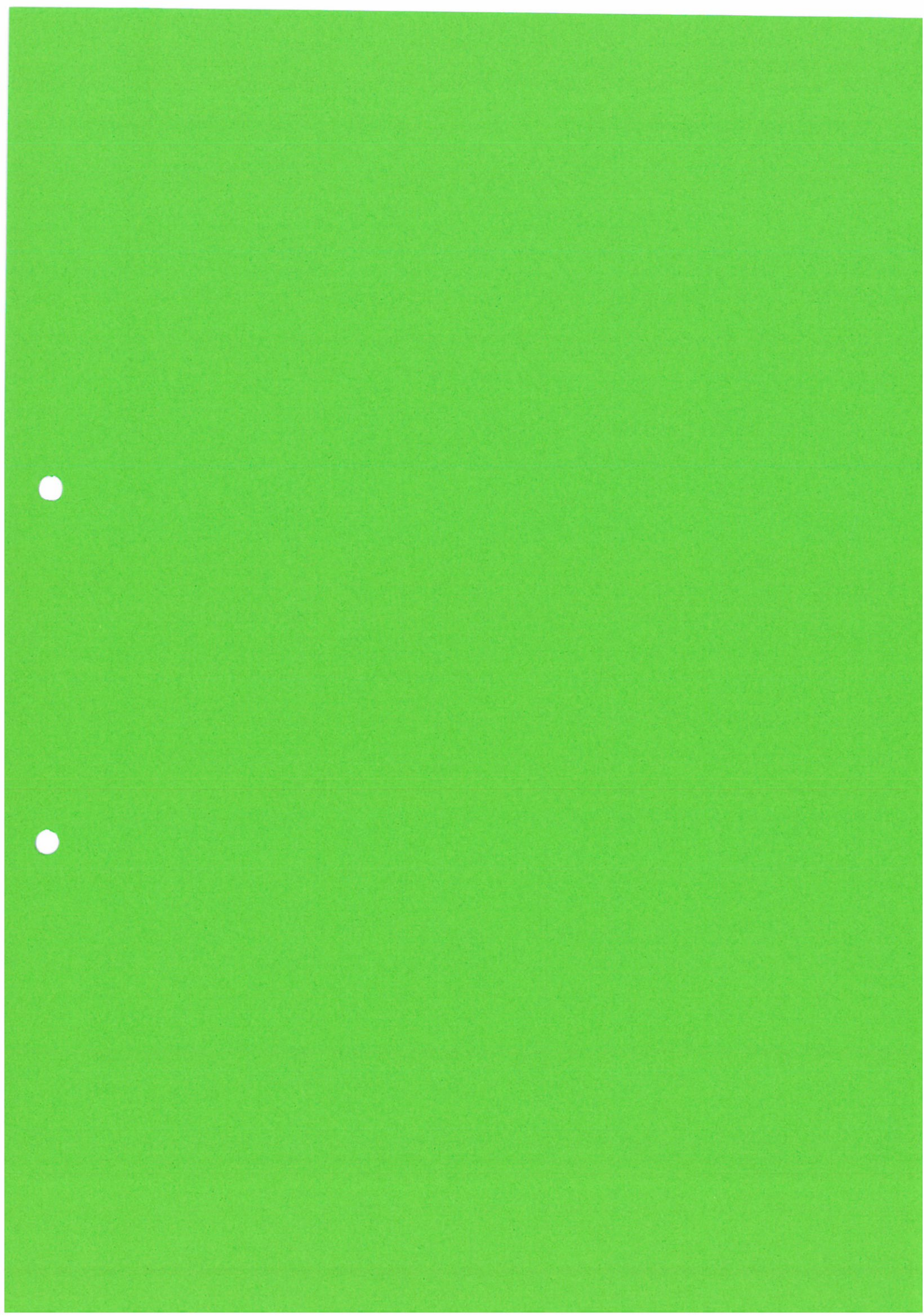
Legende

*	Analytik in Kooperation mit akkreditiertem bzw. qualifiziertem Prüflabor
n.b.	nicht bestimmt, Konzentration zu gering
<	für Messungen radioaktiver Parameter Angabe der Nachweisgrenze, für alle anderen Messungen Angabe der Bestimmungsgrenze
-	nicht beauftragt
x	qualifiziertes Verfahren mit ausstehender Akkreditierung

Anmerkungen

Die Prüfergebnisse beziehen sich nur auf die Prüfgegenstände.
Auch eine auszugsweise Veröffentlichung von Prüfergebnissen bedarf der ausdrücklichen schriftlichen Genehmigung der Hydroisotop GmbH.
Es gelten die allgemeinen Geschäftsbedingungen der Hydroisotop GmbH.

Dr. Eichinger
(Geschäftsführer)
20.08.2015



Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	16.06.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
PROBENBEZEICHNUNG	Erlengraben E2	Erlengraben E3	Erlengraben E4	
Labornummer	270937	270938	270939	
Probenahmedatum	06.05.2015, 10:50	06.05.2015, 11:15	06.05.2015, 11:30	
PROBENAHEME				
Schüttung	0,1	0,1	-	l/sec
PHYSIKALISCH-CHEMISCHE PARAMETER				
Färbung	farblos	farblos	farblos	
Trübung visuell	klar	klar	klar	
Geruch	neutral	neutral	neutral	
Temperatur	14,1	14,3	13,4	°C
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) vor Ort	983	1130	901	µS/cm
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) Labor	-	1127	908	µS/cm
pH-Wert (t _{gem}) vor Ort	7,70	8,00	7,90	
pH Wert Labor	-	7,67	7,88	
Temperatur Labor	-	21,0	21,0	°C
gelöster Sauerstoffgehalt	10,1	-	8,5	mg/l
Redoxpotential (berechnet)	-	-	434	mV
Sk-Wert (pH 4,3) Labor	-	7,28	6,70	mmol/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	16.06.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
	Erlengraben E2	Erlengraben E3	Erlengraben E4	
PROBENBEZEICHNUNG				
Labornummer	270937	270938	270939	
Probenahmedatum	06.05.2015, 10:50	06.05.2015, 11:15	06.05.2015, 11:30	
KATIONEN				
Natrium (Na ⁺)	-	27,6	15,2	mg/l
Kalium (K ⁺)	-	1,9	1,6	mg/l
Calcium (Ca ²⁺)	-	158	145	mg/l
Magnesium (Mg ²⁺)	-	53,0	22,4	mg/l
ANIONEN				
Hydrogenkarbonat (HCO ₃ ⁻)	-	444	409	mg/l
Chlorid (Cl ⁻)	-	13,0	26,5	mg/l
Sulfat (SO ₄ ²⁻)	-	288	118	mg/l
Nitrat (NO ₃ ⁻)	-	0,5	3,9	mg/l
IONENBILANZ				
Ionenbilanzfehler	-	1,15	2,29	%
SPURENSTOFFE				
Lithium (Li ⁺)	-	0,003	0,007	mg/l
Strontium (Sr ²⁺)	-	0,48	0,30	mg/l

Projekt:	Tontagebau Rettigheim		
Auftraggeber:	Wienerberger GmbH		
Probenart:	Wasserprobe	Probenahme:	Hydroisotop
Laboreingang:	13.05.2015	Analytikbeginn:	13.05.2015
		Analytikende:	16.06.2015

Prüfparameter	Prüfergebnis			Einheit
	Erlengraben E2	Erlengraben E3	Erlengraben E4	
PROBENBEZEICHNUNG				
Labornummer	270937	270938	270939	
Probenahmedatum	06.05.2015, 10:50	06.05.2015, 11:15	06.05.2015, 11:30	
SUMMEN- UND EINZELPARAMETER				
Gesamthärte berechnet	-	6,12	4,54	mmol/l
Gesamthärte berechnet	-	34,3	25,5	°dH
ISOTOPE				
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}\text{O}$)	-8,37	-8,45	-8,55	‰
Deuterium ($\delta^2\text{H}$)	-55,6	-56,0	-56,7	‰
Deuterium-Exzess	11,36	11,60	11,70	‰

Projekt: Tontagebau Rettigheim
Auftraggeber: Wienerberger GmbH

Prüfparameter	Prüfverfahren
pH-Wert (t_{gem}) vor Ort	DIN EN ISO 10523: 2012-04
pH Wert Labor	DIN EN ISO 10523: 2012-04
Temperatur Labor	DIN 38404 Teil 4
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) vor Ort	EN 27888:1993-11
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) Labor	EN 27888:1993-11
gelöster Sauerstoffgehalt	DIN 38408-G22
Redoxpotential (berechnet)	DIN 38404-C6
Sk-Wert (pH 4,3) Labor	DIN 38409-7:2004-03
Natrium (Na^+)	DIN EN ISO 14911 (E34)
Kalium (K^+)	DIN EN ISO 14911 (E34)
Calcium (Ca^{2+})	DIN EN ISO 14911 (E34)
Magnesium (Mg^{2+})	DIN EN ISO 14911 (E34)
Hydrogenkarbonat (HCO_3^-)	berechnet über SK-Wert
Chlorid (Cl^-)	DIN EN ISO 10304-1 (D20)
Sulfat (SO_4^{2-})	DIN EN ISO 10304-1 (D20)
Nitrat (NO_3^-)	DIN EN ISO 10304-1 (D20)
Ionenbilanzfehler	berechnet
Lithium (Li^+)	DIN EN ISO 14911 (E34)
Deuterium-Exzess	berechnet
Gesamthärte berechnet	berechnet
Strontium (Sr^{2+})	DIN EN ISO 14911 (E34)
Temperatur	DIN 38404 Teil 4
Trübung visuell	DIN EN ISO 7027-C ₂
Geruch	DEV B1/2
Färbung	DIN EN ISO 7887-C1
Deuterium ($\delta^2\text{H}$) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: $1\sigma = \pm 1,0 \text{ ‰}$
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}\text{O}$) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: $1\sigma = \pm 0,10 \text{ ‰}$

Projekt: Tontagebau Rettigheim
Auftraggeber: Wienerberger GmbH

Legende

*	Analytik in Kooperation mit akkreditiertem bzw. qualifiziertem Prüflabor
n.b.	nicht bestimmt, Konzentration zu gering
<	für Messungen radioaktiver Parameter Angabe der Nachweisgrenze, für alle anderen Messungen Angabe der Bestimmungsgrenze
-	nicht beauftragt
x	qualifiziertes Verfahren mit ausstehender Akkreditierung

Anmerkungen

Die Prüfergebnisse beziehen sich nur auf die Prüfgegenstände.
Auch eine auszugsweise Veröffentlichung von Prüfergebnissen bedarf der ausdrücklichen schriftlichen Genehmigung der Hydroisotop GmbH.
Es gelten die allgemeinen Geschäftsbedingungen der Hydroisotop GmbH.

Dr. Eichinger
(Geschäftsführer)
20.08.2015



Anhang 4

Protokolle der PhreeqC - Modellrechnung

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung
Grundwasserprobe: B1 Rettigheim 2015_05_05

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\B1 2015_05_05.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\B1 2015_05_05.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 B1(2015_05_05)

temp	20.7
pH	7.27
pe	5.18
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	0.005
F	0.6
Cl	21.6
Alkalinity	1010
S(6)	330
Li	0.28
Na	440
K	3.9
Ca	39.7
Mg	37.2
Sr	4.2
B	1.2
Si	4.1
Al	0.037
Fe	0.12
Mn	0.19
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. B1(2015_05_05)

-----Solution composition-----

-

Elements	Molality	Moles
Al	1.371e-006	1.371e-006
Alkalinity	2.018e-002	2.018e-002
B	1.110e-004	1.110e-004
Ca	9.905e-004	9.905e-004
Cl	6.093e-004	6.093e-004
F	3.158e-005	3.158e-005
Fe	2.149e-006	2.149e-006
K	9.974e-005	9.974e-005
Li	4.035e-005	4.035e-005
Mg	1.530e-003	1.530e-003
Mn	3.458e-006	3.458e-006
Na	1.914e-002	1.914e-002
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	3.435e-003	3.435e-003
Si	6.824e-005	6.824e-005
Sr	4.793e-005	4.793e-005

-----Description of solution-----

-

pH = 7.270
 pe = 5.180
 Specific Conductance (uS/cm, 20 oC) = 2031
 Density (g/cm3) = 0.99969
 Activity of water = 0.999
 Ionic strength = 2.973e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 2.227e-002
 Total CO2 (mol/kg) = 2.227e-002
 Temperature (deg C) = 20.700
 Electrical balance (eq) = -3.263e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -6.58
 Iterations = 10
 Total H = 1.110331e+002
 Total O = 5.558525e+001

-----Redox couples-----

-

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-3.3619	-0.1960

-----Distribution of species-----

-

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	1.579e-007	1.335e-007	-6.802	-6.874	-0.073
H+	6.135e-008	5.370e-008	-7.212	-7.270	-0.058
H2O	5.551e+001	9.992e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	1.371e-006				

Al (OH) 4-	1.311e-006	1.117e-006	-5.882	-5.952	-0.070
Al (OH) 3	3.335e-008	3.358e-008	-7.477	-7.474	0.003
Al (OH) 2+	1.993e-008	1.697e-008	-7.701	-7.770	-0.070
AlF2+	4.447e-009	3.786e-009	-8.352	-8.422	-0.070
AlF3	1.198e-009	1.207e-009	-8.921	-8.918	0.003
AlF+2	5.784e-010	3.039e-010	-9.238	-9.517	-0.279
AlOH+2	3.254e-010	1.710e-010	-9.488	-9.767	-0.279
AlF4-	1.433e-011	1.220e-011	-10.844	-10.914	-0.070
AlSO4+	6.774e-012	5.767e-012	-11.169	-11.239	-0.070
Al+3	4.065e-012	1.227e-012	-11.391	-11.911	-0.520
Al (SO4) 2-	3.302e-013	2.811e-013	-12.481	-12.551	-0.070
AlF5-2	9.441e-015	4.961e-015	-14.025	-14.304	-0.279
AlF6-3	5.851e-019	1.376e-019	-18.233	-18.862	-0.629
AlHSO4+2	5.044e-020	2.650e-020	-19.297	-19.577	-0.279
B	1.110e-004				
H3BO3	1.097e-004	1.105e-004	-3.960	-3.957	0.003
H2BO3-	1.284e-006	1.093e-006	-5.891	-5.961	-0.070
BF (OH) 3-	1.255e-009	1.068e-009	-8.901	-8.971	-0.070
BF2 (OH) 2-	1.848e-013	1.573e-013	-12.733	-12.803	-0.070
BF3OH-	2.999e-019	2.554e-019	-18.523	-18.593	-0.070
BF4-	1.679e-024	1.430e-024	-23.775	-23.845	-0.070
C (4)	2.227e-002				
HCO3-	1.968e-002	1.688e-002	-1.706	-1.773	-0.067
CO2	2.147e-003	2.162e-003	-2.668	-2.665	0.003
NaHCO3	1.515e-004	1.525e-004	-3.820	-3.817	0.003
MgHCO3+	1.460e-004	1.243e-004	-3.836	-3.906	-0.070
CaHCO3+	9.631e-005	8.257e-005	-4.016	-4.083	-0.067
CO3-2	2.488e-005	1.345e-005	-4.604	-4.871	-0.267
CaCO3	8.539e-006	8.598e-006	-5.069	-5.066	0.003
MgCO3	7.639e-006	7.691e-006	-5.117	-5.114	0.003
SrHCO3+	5.193e-006	4.452e-006	-5.285	-5.351	-0.067
NaCO3-	3.793e-006	3.230e-006	-5.421	-5.491	-0.070
MnHCO3+	1.245e-006	1.060e-006	-5.905	-5.975	-0.070
MnCO3	7.475e-007	7.526e-007	-6.126	-6.123	0.003
FeHCO3+	1.942e-007	1.654e-007	-6.712	-6.782	-0.070
SrCO3	1.500e-007	1.511e-007	-6.824	-6.821	0.003
FeCO3	3.139e-008	3.161e-008	-7.503	-7.500	0.003
Ca	9.905e-004				
Ca+2	7.622e-004	4.121e-004	-3.118	-3.385	-0.267
CaSO4	1.233e-004	1.242e-004	-3.909	-3.906	0.003
CaHCO3+	9.631e-005	8.257e-005	-4.016	-4.083	-0.067
CaCO3	8.539e-006	8.598e-006	-5.069	-5.066	0.003
CaF+	9.683e-008	8.244e-008	-7.014	-7.084	-0.070
CaOH+	1.495e-009	1.273e-009	-8.825	-8.895	-0.070
CaHSO4+	4.359e-011	3.711e-011	-10.361	-10.431	-0.070
Cl	6.093e-004				
Cl-	6.093e-004	5.158e-004	-3.215	-3.288	-0.072
MnCl+	1.739e-009	1.481e-009	-8.760	-8.830	-0.070
FeCl+	8.195e-011	6.977e-011	-10.086	-10.156	-0.070
MnCl2	3.311e-013	3.333e-013	-12.480	-12.477	0.003
MnCl3-	5.562e-017	4.735e-017	-16.255	-16.325	-0.070
FeCl+2	2.879e-017	1.513e-017	-16.541	-16.820	-0.279
FeCl2+	4.701e-020	4.002e-020	-19.328	-19.398	-0.070
FeCl3	2.050e-024	2.064e-024	-23.688	-23.685	0.003
F	3.158e-005				
F-	3.007e-005	2.543e-005	-4.522	-4.595	-0.073
MgF+	1.168e-006	9.940e-007	-5.933	-6.003	-0.070
NaF	2.336e-007	2.352e-007	-6.632	-6.629	0.003

CaF+	9.683e-008	8.244e-008	-7.014	-7.084	-0.070
AlF2+	4.447e-009	3.786e-009	-8.352	-8.422	-0.070
HF	1.884e-009	1.897e-009	-8.725	-8.722	0.003
BF(OH)3-	1.255e-009	1.068e-009	-8.901	-8.971	-0.070
AlF3	1.198e-009	1.207e-009	-8.921	-8.918	0.003
AlF+2	5.784e-010	3.039e-010	-9.238	-9.517	-0.279
MnF+	1.456e-010	1.240e-010	-9.837	-9.907	-0.070
FeF+	2.927e-011	2.492e-011	-10.534	-10.603	-0.070
AlF4-	1.433e-011	1.220e-011	-10.844	-10.914	-0.070
HF2-	2.097e-013	1.786e-013	-12.678	-12.748	-0.070
BF2(OH)2-	1.848e-013	1.573e-013	-12.733	-12.803	-0.070
FeF+2	8.002e-014	4.205e-014	-13.097	-13.376	-0.279
FeF2+	4.747e-014	4.041e-014	-13.324	-13.393	-0.070
AlF5-2	9.441e-015	4.961e-015	-14.025	-14.304	-0.279
FeF3	1.594e-015	1.605e-015	-14.798	-14.795	0.003
AlF6-3	5.851e-019	1.376e-019	-18.233	-18.862	-0.629
BF3OH-	2.999e-019	2.554e-019	-18.523	-18.593	-0.070
BF4-	1.679e-024	1.430e-024	-23.775	-23.845	-0.070
SiF6-2	6.650e-031	3.494e-031	-30.177	-30.457	-0.279
Fe(2)	4.299e-007				
FeHCO3+	1.942e-007	1.654e-007	-6.712	-6.782	-0.070
Fe+2	1.785e-007	9.801e-008	-6.748	-7.009	-0.260
FeCO3	3.139e-008	3.161e-008	-7.503	-7.500	0.003
FeSO4	2.514e-008	2.531e-008	-7.600	-7.597	0.003
FeOH+	4.888e-010	4.162e-010	-9.311	-9.381	-0.070
FeCl+	8.195e-011	6.977e-011	-10.086	-10.156	-0.070
FeF+	2.927e-011	2.492e-011	-10.534	-10.603	-0.070
Fe(HS)2	7.165e-013	7.214e-013	-12.145	-12.142	0.003
FeHSO4+	1.036e-014	8.825e-015	-13.984	-14.054	-0.070
Fe(HS)3-	8.385e-018	7.139e-018	-17.077	-17.146	-0.070
Fe(3)	1.719e-006				
Fe(OH)3	1.065e-006	1.072e-006	-5.973	-5.970	0.003
Fe(OH)2+	6.356e-007	5.411e-007	-6.197	-6.267	-0.070
Fe(OH)4-	1.794e-008	1.527e-008	-7.746	-7.816	-0.070
FeOH+2	1.972e-010	1.036e-010	-9.705	-9.984	-0.279
FeF+2	8.002e-014	4.205e-014	-13.097	-13.376	-0.279
FeF2+	4.747e-014	4.041e-014	-13.324	-13.393	-0.070
FeSO4+	2.051e-014	1.747e-014	-13.688	-13.758	-0.070
Fe+3	3.695e-015	1.115e-015	-14.432	-14.953	-0.520
FeF3	1.594e-015	1.605e-015	-14.798	-14.795	0.003
Fe(SO4)2-	6.940e-016	5.909e-016	-15.159	-15.229	-0.070
FeCl+2	2.879e-017	1.513e-017	-16.541	-16.820	-0.279
Fe2(OH)2+4	4.541e-018	3.462e-019	-17.343	-18.461	-1.118
FeCl2+	4.701e-020	4.002e-020	-19.328	-19.398	-0.070
FeHSO4+2	4.801e-021	2.523e-021	-20.319	-20.598	-0.279
Fe3(OH)4+5	3.266e-021	5.854e-023	-20.486	-22.233	-1.747
FeCl3	2.050e-024	2.064e-024	-23.688	-23.685	0.003
H(0)	1.849e-028				
H2	9.245e-029	9.308e-029	-28.034	-28.031	0.003
K	9.974e-005				
K+	9.873e-005	8.358e-005	-4.006	-4.078	-0.072
KSO4-	1.005e-006	8.560e-007	-5.998	-6.068	-0.070
KOH	5.355e-012	5.392e-012	-11.271	-11.268	0.003
Li	4.035e-005				
Li+	4.007e-005	3.449e-005	-4.397	-4.462	-0.065
LiSO4-	2.782e-007	2.368e-007	-6.556	-6.626	-0.070
LiOH	1.460e-011	1.470e-011	-10.836	-10.833	0.003
Mg	1.530e-003				

Mg+2	1.166e-003	6.404e-004	-2.933	-3.194	-0.260
MgSO4	2.096e-004	2.110e-004	-3.679	-3.676	0.003
MgHCO3+	1.460e-004	1.243e-004	-3.836	-3.906	-0.070
MgCO3	7.639e-006	7.691e-006	-5.117	-5.114	0.003
MgF+	1.168e-006	9.940e-007	-5.933	-6.003	-0.070
MgOH+	3.426e-008	2.917e-008	-7.465	-7.535	-0.070
Mn (2)	3.458e-006				
Mn+2	1.284e-006	7.047e-007	-5.892	-6.152	-0.260
MnHCO3+	1.245e-006	1.060e-006	-5.905	-5.975	-0.070
MnCO3	7.475e-007	7.526e-007	-6.126	-6.123	0.003
MnSO4	1.801e-007	1.814e-007	-6.744	-6.741	0.003
MnCl+	1.739e-009	1.481e-009	-8.760	-8.830	-0.070
MnOH+	2.774e-010	2.362e-010	-9.557	-9.627	-0.070
MnF+	1.456e-010	1.240e-010	-9.837	-9.907	-0.070
MnCl2	3.311e-013	3.333e-013	-12.480	-12.477	0.003
MnCl3-	5.562e-017	4.735e-017	-16.255	-16.325	-0.070
Mn (3)	7.414e-027				
Mn+3	7.414e-027	1.743e-027	-26.130	-26.759	-0.629
Na	1.914e-002				
Na+	1.884e-002	1.608e-002	-1.725	-1.794	-0.069
NaHCO3	1.515e-004	1.525e-004	-3.820	-3.817	0.003
NaSO4-	1.448e-004	1.233e-004	-3.839	-3.909	-0.070
NaCO3-	3.793e-006	3.230e-006	-5.421	-5.491	-0.070
NaF	2.336e-007	2.352e-007	-6.632	-6.629	0.003
NaOH	1.963e-009	1.976e-009	-8.707	-8.704	0.003
O (0)	3.729e-038				
O2	1.865e-038	1.877e-038	-37.729	-37.726	0.003
S (-2)	1.559e-007				
HS-	1.075e-007	9.088e-008	-6.969	-7.042	-0.073
H2S	4.847e-008	4.881e-008	-7.314	-7.312	0.003
Fe (HS) 2	7.165e-013	7.214e-013	-12.145	-12.142	0.003
S-2	2.836e-013	1.516e-013	-12.547	-12.819	-0.272
Fe (HS) 3-	8.385e-018	7.139e-018	-17.077	-17.146	-0.070
S (6)	3.435e-003				
SO4-2	2.950e-003	1.573e-003	-2.530	-2.803	-0.273
MgSO4	2.096e-004	2.110e-004	-3.679	-3.676	0.003
NaSO4-	1.448e-004	1.233e-004	-3.839	-3.909	-0.070
CaSO4	1.233e-004	1.242e-004	-3.909	-3.906	0.003
SrSO4	5.782e-006	5.822e-006	-5.238	-5.235	0.003
KSO4-	1.005e-006	8.560e-007	-5.998	-6.068	-0.070
LiSO4-	2.782e-007	2.368e-007	-6.556	-6.626	-0.070
MnSO4	1.801e-007	1.814e-007	-6.744	-6.741	0.003
FeSO4	2.514e-008	2.531e-008	-7.600	-7.597	0.003
HSO4-	8.797e-009	7.490e-009	-8.056	-8.126	-0.070
CaHSO4+	4.359e-011	3.711e-011	-10.361	-10.431	-0.070
AlSO4+	6.774e-012	5.767e-012	-11.169	-11.239	-0.070
Al (SO4) 2-	3.302e-013	2.811e-013	-12.481	-12.551	-0.070
FeSO4+	2.051e-014	1.747e-014	-13.688	-13.758	-0.070
FeHSO4+	1.036e-014	8.825e-015	-13.984	-14.054	-0.070
Fe (SO4) 2-	6.940e-016	5.909e-016	-15.159	-15.229	-0.070
AlHSO4+2	5.044e-020	2.650e-020	-19.297	-19.577	-0.279
FeHSO4+2	4.801e-021	2.523e-021	-20.319	-20.598	-0.279
Si	6.824e-005				
H4SiO4	6.805e-005	6.852e-005	-4.167	-4.164	0.003
H3SiO4-	1.894e-007	1.613e-007	-6.723	-6.792	-0.070
H2SiO4-2	2.917e-013	1.533e-013	-12.535	-12.814	-0.279
SiF6-2	6.650e-031	3.494e-031	-30.177	-30.457	-0.279
Sr	4.793e-005				

Sr+2	3.681e-005	1.998e-005	-4.434	-4.699	-0.265
SrSO4	5.782e-006	5.822e-006	-5.238	-5.235	0.003
SrHCO3+	5.193e-006	4.452e-006	-5.285	-5.351	-0.067
SrCO3	1.500e-007	1.511e-007	-6.824	-6.821	0.003
SrOH+	2.230e-011	1.907e-011	-10.652	-10.720	-0.068

-----Saturation indices-----					
Phase	SI	log IAP	log KT		
Al(OH)3(a)	-1.19	9.90	11.08	Al(OH)3	
Albite	-1.96	-20.24	-18.28	NaAlSi3O8	
Alunite	-0.94	-1.80	-0.86	KAl3(SO4)2(OH)6	
Anhydrite	-1.84	-6.19	-4.35	CaSO4	
Anorthite	-3.78	-23.61	-19.84	CaAl2Si2O8	
Aragonite	0.05	-8.26	-8.31	CaCO3	
Ca-Montmorillonite	1.41	-44.25	-45.65	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2	
Calcite	0.20	-8.26	-8.46	CaCO3	
Celestite	-0.88	-7.50	-6.62	SrSO4	
Chalcedony	-0.56	-4.16	-3.60	SiO2	
Chlorite(14A)	-5.97	64.04	70.00	Mg5Al2Si3O10(OH)8	
Chrysotile	-7.03	25.71	32.74	Mg3Si2O5(OH)4	
CO2(g)	-1.25	-2.67	-1.42	CO2	
Dolomite	0.67	-16.32	-16.99	CaMg(CO3)2	
Fe(OH)3(a)	1.97	6.86	4.89	Fe(OH)3	
FeS(ppt)	-2.87	-6.78	-3.92	FeS	
Fluorite	-1.92	-12.57	-10.65	CaF2	
Gibbsite	1.54	9.90	8.35	Al(OH)3	
Goethite	7.70	6.86	-0.84	FeOOH	
Gypsum	-1.61	-6.19	-4.58	CaSO4:2H2O	
H2(g)	-24.90	-28.03	-3.13	H2	
H2O(g)	-1.62	-0.00	1.62	H2O	
H2S(g)	-6.36	-7.31	-0.95	H2S	
Hallite	-6.65	-5.08	1.57	NaCl	
Hausmannite	-12.05	50.06	62.11	Mn3O4	
Hematite	17.39	13.71	-3.68	Fe2O3	
Illite	0.62	-40.23	-40.85	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2	
Jarosite-K	-2.05	-10.92	-8.87	KFe3(SO4)2(OH)6	
K-feldspar	-1.62	-22.52	-20.90	KAlSi3O8	
K-mica	7.06	20.40	13.34	KAl3Si3O10(OH)2	
Kaolinite	3.66	11.47	7.81	Al2Si2O5(OH)4	
Mackinawite	-2.13	-6.78	-4.65	FeS	
Manganite	-4.50	20.84	25.34	MnOOH	
Melanterite	-7.55	-9.81	-2.26	FeSO4:7H2O	
O2(g)	-34.87	-37.73	-2.86	O2	
Pyrite	22.41	3.81	-18.60	FeS2	
Pyrochroite	-6.81	8.39	15.20	Mn(OH)2	
Pyrolusite	-8.79	33.29	42.08	MnO2	
Quartz	-0.12	-4.16	-4.04	SiO2	
Rhodochrosite	0.09	-11.02	-11.11	MnCO3	
Sepiolite	-5.67	10.20	15.87	Mg2Si3O7.5OH:3H2O	
Sepiolite(d)	-8.46	10.20	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O	
Siderite	-1.02	-11.88	-10.86	FeCO3	
SiO2(a)	-1.42	-4.16	-2.75	SiO2	
Strontianite	-0.30	-9.57	-9.27	SrCO3	
Sulfur	12.60	17.59	4.98	S	
Talc	-4.51	17.38	21.90	Mg3Si4O10(OH)2	
-----End of simulation.					

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung
Grundwasserprobe: B1 Rettigheim 2015_05_06

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\B1 2015_05_06.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\B1 2015_05_06.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 B1(2015_05_05)

temp	20.9
pH	7.34
pe	5.44
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	0.005
F	0.54
Cl	21.8
Alkalinity	976
S(6)	366
Li	0.27
Na	465
K	4.1
Ca	14.1
Mg	38.8
Sr	2.9
B	1.2
Si	4.1
Al	0.075
Fe	0.04
Mn	0.14
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. B1(2015_05_06)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	2.780e-006	2.780e-006
Alkalinity	1.950e-002	1.950e-002
B	1.110e-004	1.110e-004
Ca	3.518e-004	3.518e-004
Cl	6.149e-004	6.149e-004
F	2.842e-005	2.842e-005
Fe	7.162e-007	7.162e-007
K	1.049e-004	1.049e-004
Li	3.891e-005	3.891e-005
Mg	1.596e-003	1.596e-003
Mn	2.548e-006	2.548e-006
Na	2.023e-002	2.023e-002
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	3.810e-003	3.810e-003
Si	6.824e-005	6.824e-005
Sr	3.310e-005	3.310e-005

-----Description of solution-----

pH = 7.340
 pe = 5.440
 Specific Conductance (uS/cm, 20 oC) = 2064
 Density (g/cm3) = 0.99964
 Activity of water = 0.999
 Ionic strength = 2.976e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 2.121e-002
 Total CO2 (mol/kg) = 2.121e-002
 Temperature (deg C) = 20.900
 Electrical balance (eq) = -3.420e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -6.86
 Iterations = 10
 Total H = 1.110324e+002
 Total O = 5.558393e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-3.4405	-0.2007

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	1.885e-007	1.594e-007	-6.725	-6.798	-0.073
H+	5.222e-008	4.571e-008	-7.282	-7.340	-0.058
H2O	5.551e+001	9.992e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	2.780e-006				
Al(OH)4-	2.687e-006	2.288e-006	-5.571	-5.641	-0.070
Al(OH)3	5.803e-008	5.843e-008	-7.236	-7.233	0.003
Al(OH)2+	2.905e-008	2.473e-008	-7.537	-7.607	-0.070
AlF2+	3.698e-009	3.148e-009	-8.432	-8.502	-0.070
AlF3	8.973e-010	9.035e-010	-9.047	-9.044	0.003

AlF+2	5.338e-010	2.804e-010	-9.273	-9.552	-0.280
AlOH+2	3.966e-010	2.083e-010	-9.402	-9.681	-0.280
AlF4-	9.663e-012	8.227e-012	-11.015	-11.085	-0.070
AlSO4+	7.860e-012	6.691e-012	-11.105	-11.174	-0.070
Al+3	4.163e-012	1.256e-012	-11.381	-11.901	-0.521
Al(SO4)2-	4.336e-013	3.692e-013	-12.363	-12.433	-0.070
AlF5-2	5.731e-015	3.010e-015	-14.242	-14.521	-0.280
AlF6-3	3.187e-019	7.485e-020	-18.497	-19.126	-0.629
AlHSO4+2	4.990e-020	2.621e-020	-19.302	-19.581	-0.280
B	1.110e-004				
H3BO3	1.095e-004	1.102e-004	-3.961	-3.958	0.003
H2BO3-	1.511e-006	1.287e-006	-5.821	-5.891	-0.070
BF(OH)3-	1.130e-009	9.620e-010	-8.947	-9.017	-0.070
BF2(OH)2-	1.275e-013	1.085e-013	-12.894	-12.964	-0.070
BF3OH-	1.580e-019	1.345e-019	-18.801	-18.871	-0.070
BF4-	6.777e-025	5.770e-025	-24.169	-24.239	-0.070
C(4)	2.121e-002				
HCO3-	1.906e-002	1.634e-002	-1.720	-1.787	-0.067
CO2	1.764e-003	1.777e-003	-2.753	-2.750	0.003
NaHCO3	1.549e-004	1.560e-004	-3.810	-3.807	0.003
MgHCO3+	1.451e-004	1.235e-004	-3.838	-3.908	-0.070
CaHCO3+	3.274e-005	2.807e-005	-4.485	-4.552	-0.067
CO3-2	2.844e-005	1.536e-005	-4.546	-4.813	-0.267
MgCO3	8.982e-006	9.044e-006	-5.047	-5.044	0.003
NaCO3-	4.625e-006	3.938e-006	-5.335	-5.405	-0.070
SrHCO3+	3.447e-006	2.955e-006	-5.463	-5.529	-0.067
CaCO3	3.425e-006	3.448e-006	-5.465	-5.462	0.003
MnHCO3+	8.652e-007	7.365e-007	-6.063	-6.133	-0.070
MnCO3	6.131e-007	6.173e-007	-6.212	-6.210	0.003
SrCO3	1.174e-007	1.182e-007	-6.930	-6.927	0.003
FeHCO3+	2.487e-008	2.117e-008	-7.604	-7.674	-0.070
FeCO3	4.744e-009	4.776e-009	-8.324	-8.321	0.003
Ca	3.518e-004				
Ca+2	2.667e-004	1.442e-004	-3.574	-3.841	-0.267
CaSO4	4.887e-005	4.921e-005	-4.311	-4.308	0.003
CaHCO3+	3.274e-005	2.807e-005	-4.485	-4.552	-0.067
CaCO3	3.425e-006	3.448e-006	-5.465	-5.462	0.003
CaF+	3.064e-008	2.609e-008	-7.514	-7.584	-0.070
CaOH+	6.143e-010	5.230e-010	-9.212	-9.282	-0.070
CaHSO4+	1.474e-011	1.255e-011	-10.832	-10.902	-0.070
Cl	6.149e-004				
Cl-	6.149e-004	5.205e-004	-3.211	-3.284	-0.072
MnCl+	1.260e-009	1.072e-009	-8.900	-8.970	-0.070
FeCl+	1.094e-011	9.310e-012	-10.961	-11.031	-0.070
MnCl2	2.420e-013	2.436e-013	-12.616	-12.613	0.003
MnCl3-	4.102e-017	3.493e-017	-16.387	-16.457	-0.070
FeCl+2	7.119e-018	3.739e-018	-17.148	-17.427	-0.280
FeCl2+	1.165e-020	9.918e-021	-19.934	-20.004	-0.070
FeCl3	5.127e-025	5.162e-025	-24.290	-24.287	0.003
F	2.842e-005				
F-	2.707e-005	2.289e-005	-4.567	-4.640	-0.073
MgF+	1.083e-006	9.216e-007	-5.966	-6.035	-0.070
NaF	2.221e-007	2.236e-007	-6.653	-6.651	0.003
CaF+	3.064e-008	2.609e-008	-7.514	-7.584	-0.070
AlF2+	3.698e-009	3.148e-009	-8.432	-8.502	-0.070
HF	1.449e-009	1.459e-009	-8.839	-8.836	0.003
BF(OH)3-	1.130e-009	9.620e-010	-8.947	-9.017	-0.070
AlF3	8.973e-010	9.035e-010	-9.047	-9.044	0.003

AlF+2	5.338e-010	2.804e-010	-9.273	-9.552	-0.280
MnF+	9.410e-011	8.011e-011	-10.026	-10.096	-0.070
AlF4-	9.663e-012	8.227e-012	-11.015	-11.085	-0.070
FeF+	3.485e-012	2.967e-012	-11.458	-11.528	-0.070
HF2-	1.455e-013	1.239e-013	-12.837	-12.907	-0.070
BF2(OH)2-	1.275e-013	1.085e-013	-12.894	-12.964	-0.070
FeF+2	1.759e-014	9.242e-015	-13.755	-14.034	-0.280
FeF2+	9.417e-015	8.017e-015	-14.026	-14.096	-0.070
AlF5-2	5.731e-015	3.010e-015	-14.242	-14.521	-0.280
FeF3	2.848e-016	2.868e-016	-15.545	-15.542	0.003
AlF6-3	3.187e-019	7.485e-020	-18.497	-19.126	-0.629
BF3OH-	1.580e-019	1.345e-019	-18.801	-18.871	-0.070
BF4-	6.777e-025	5.770e-025	-24.169	-24.239	-0.070
SiF6-2	1.824e-031	9.582e-032	-30.739	-31.019	-0.280
Fe(2)	5.710e-008				
FeHCO3+	2.487e-008	2.117e-008	-7.604	-7.674	-0.070
Fe+2	2.362e-008	1.296e-008	-7.627	-7.887	-0.261
FeCO3	4.744e-009	4.776e-009	-8.324	-8.321	0.003
FeSO4	3.773e-009	3.799e-009	-8.423	-8.420	0.003
FeOH+	7.713e-011	6.566e-011	-10.113	-10.183	-0.070
FeCl+	1.094e-011	9.310e-012	-10.961	-11.031	-0.070
FeF+	3.485e-012	2.967e-012	-11.458	-11.528	-0.070
Fe(HS)2	1.045e-013	1.052e-013	-12.981	-12.978	0.003
FeHSO4+	1.325e-015	1.128e-015	-14.878	-14.948	-0.070
Fe(HS)3-	1.285e-018	1.094e-018	-17.891	-17.961	-0.070
Fe(3)	6.591e-007				
Fe(OH)3	4.327e-007	4.356e-007	-6.364	-6.361	0.003
Fe(OH)2+	2.178e-007	1.854e-007	-6.662	-6.732	-0.070
Fe(OH)4-	8.632e-009	7.349e-009	-8.064	-8.134	-0.070
FeOH+2	5.710e-011	2.999e-011	-10.243	-10.523	-0.280
FeF+2	1.759e-014	9.242e-015	-13.755	-14.034	-0.280
FeF2+	9.417e-015	8.017e-015	-14.026	-14.096	-0.070
FeSO4+	5.671e-015	4.828e-015	-14.246	-14.316	-0.070
Fe+3	8.999e-016	2.714e-016	-15.046	-15.566	-0.521
FeF3	2.848e-016	2.868e-016	-15.545	-15.542	0.003
Fe(SO4)2-	2.171e-016	1.848e-016	-15.663	-15.733	-0.070
FeCl+2	7.119e-018	3.739e-018	-17.148	-17.427	-0.280
Fe2(OH)2+4	3.777e-019	2.875e-020	-18.423	-19.541	-1.119
FeCl2+	1.165e-020	9.918e-021	-19.934	-20.004	-0.070
FeHSO4+2	1.130e-021	5.933e-022	-20.947	-21.227	-0.280
Fe3(OH)4+5	9.143e-023	1.634e-024	-22.039	-23.787	-1.748
FeCl3	5.127e-025	5.162e-025	-24.290	-24.287	0.003
H(0)	4.037e-029				
H2	2.018e-029	2.032e-029	-28.695	-28.692	0.003
K	1.049e-004				
K+	1.037e-004	8.774e-005	-3.984	-4.057	-0.072
KSO4-	1.198e-006	1.020e-006	-5.922	-5.991	-0.070
KOH	6.605e-012	6.650e-012	-11.180	-11.177	0.003
Li	3.891e-005				
Li+	3.861e-005	3.323e-005	-4.413	-4.478	-0.065
LiSO4-	3.030e-007	2.580e-007	-6.519	-6.588	-0.070
LiOH	1.653e-011	1.664e-011	-10.782	-10.779	0.003
Mg	1.596e-003				
Mg+2	1.196e-003	6.569e-004	-2.922	-3.182	-0.260
MgSO4	2.444e-004	2.461e-004	-3.612	-3.609	0.003
MgHCO3+	1.451e-004	1.235e-004	-3.838	-3.908	-0.070
MgCO3	8.982e-006	9.044e-006	-5.047	-5.044	0.003
MgF+	1.083e-006	9.216e-007	-5.966	-6.035	-0.070

MgOH+	4.208e-008	3.582e-008	-7.376	-7.446	-0.070
Mn (2)	2.548e-006				
Mn+2	9.217e-007	5.058e-007	-6.035	-6.296	-0.261
MnHCO3+	8.652e-007	7.365e-007	-6.063	-6.133	-0.070
MnCO3	6.131e-007	6.173e-007	-6.212	-6.210	0.003
MnSO4	1.468e-007	1.478e-007	-6.833	-6.830	0.003
MnCl+	1.260e-009	1.072e-009	-8.900	-8.970	-0.070
MnOH+	2.379e-010	2.025e-010	-9.624	-9.694	-0.070
MnF+	9.410e-011	8.011e-011	-10.026	-10.096	-0.070
MnCl2	2.420e-013	2.436e-013	-12.616	-12.613	0.003
MnCl3-	4.102e-017	3.493e-017	-16.387	-16.457	-0.070
Mn (3)	9.987e-027				
Mn+3	9.987e-027	2.346e-027	-26.001	-26.630	-0.629
Na	2.023e-002				
Na+	1.989e-002	1.697e-002	-1.701	-1.770	-0.069
NaSO4-	1.731e-004	1.474e-004	-3.762	-3.832	-0.070
NaHCO3	1.549e-004	1.560e-004	-3.810	-3.807	0.003
NaCO3-	4.625e-006	3.938e-006	-5.335	-5.405	-0.070
NaF	2.221e-007	2.236e-007	-6.653	-6.651	0.003
NaOH	2.435e-009	2.451e-009	-8.614	-8.611	0.003
O (0)	9.115e-037				
O2	4.558e-037	4.589e-037	-36.341	-36.338	0.003
S (-2)	1.559e-007				
HS-	1.129e-007	9.545e-008	-6.947	-7.020	-0.073
H2S	4.305e-008	4.335e-008	-7.366	-7.363	0.003
S-2	3.550e-013	1.897e-013	-12.450	-12.722	-0.272
Fe (HS) 2	1.045e-013	1.052e-013	-12.981	-12.978	0.003
Fe (HS) 3-	1.285e-018	1.094e-018	-17.891	-17.961	-0.070
S (6)	3.810e-003				
SO4-2	3.337e-003	1.779e-003	-2.477	-2.750	-0.273
MgSO4	2.444e-004	2.461e-004	-3.612	-3.609	0.003
NaSO4-	1.731e-004	1.474e-004	-3.762	-3.832	-0.070
CaSO4	4.887e-005	4.921e-005	-4.311	-4.308	0.003
SrSO4	4.462e-006	4.493e-006	-5.350	-5.347	0.003
KSO4-	1.198e-006	1.020e-006	-5.922	-5.991	-0.070
LiSO4-	3.030e-007	2.580e-007	-6.519	-6.588	-0.070
MnSO4	1.468e-007	1.478e-007	-6.833	-6.830	0.003
HSO4-	8.503e-009	7.239e-009	-8.070	-8.140	-0.070
FeSO4	3.773e-009	3.799e-009	-8.423	-8.420	0.003
CaHSO4+	1.474e-011	1.255e-011	-10.832	-10.902	-0.070
AlSO4+	7.860e-012	6.691e-012	-11.105	-11.174	-0.070
Al (SO4) 2-	4.336e-013	3.692e-013	-12.363	-12.433	-0.070
FeSO4+	5.671e-015	4.828e-015	-14.246	-14.316	-0.070
FeHSO4+	1.325e-015	1.128e-015	-14.878	-14.948	-0.070
Fe (SO4) 2-	2.171e-016	1.848e-016	-15.663	-15.733	-0.070
AlHSO4+2	4.990e-020	2.621e-020	-19.302	-19.581	-0.280
FeHSO4+2	1.130e-021	5.933e-022	-20.947	-21.227	-0.280
Si	6.824e-005				
H4SiO4	6.801e-005	6.848e-005	-4.167	-4.164	0.003
H3SiO4-	2.241e-007	1.908e-007	-6.649	-6.719	-0.070
H2SiO4-2	4.112e-013	2.160e-013	-12.386	-12.666	-0.280
SiF6-2	1.824e-031	9.582e-032	-30.739	-31.019	-0.280
Sr	3.310e-005				
Sr+2	2.507e-005	1.361e-005	-4.601	-4.866	-0.265
SrSO4	4.462e-006	4.493e-006	-5.350	-5.347	0.003
SrHCO3+	3.447e-006	2.955e-006	-5.463	-5.529	-0.067
SrCO3	1.174e-007	1.182e-007	-6.930	-6.927	0.003
SrOH+	1.784e-011	1.525e-011	-10.749	-10.817	-0.068

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-0.95	10.12	11.07	Al(OH)3
Albite	-1.63	-19.90	-18.27	NaAlSi3O8
Alunite	-0.34	-1.22	-0.89	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-2.24	-6.59	-4.35	CaSO4
Anorthite	-3.62	-23.45	-19.83	CaAl2Si2O8
Aragonite	-0.34	-8.65	-8.31	CaCO3
Ca-Montmorillonite	1.89	-43.74	-45.62	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	-0.20	-8.65	-8.46	CaCO3
Celestite	-0.99	-7.62	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-0.56	-4.16	-3.60	SiO2
Chlorite(14A)	-4.70	65.23	69.93	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-6.55	26.16	32.72	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-1.33	-2.75	-1.42	CO2
Dolomite	0.34	-16.65	-16.99	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	1.56	6.45	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-3.65	-7.57	-3.92	FeS
Fluorite	-2.47	-13.12	-10.65	CaF2
Gibbsite	1.77	10.12	8.34	Al(OH)3
Goethite	7.30	6.45	-0.85	FeOOH
Gypsum	-2.01	-6.59	-4.58	CaSO4·2H2O
H2(g)	-25.56	-28.69	-3.13	H2
H2O(g)	-1.62	-0.00	1.62	H2O
H2S(g)	-6.41	-7.36	-0.95	H2S
Halite	-6.63	-5.05	1.57	NaCl
Hausmannite	-11.35	50.71	62.06	Mn3O4
Hematite	16.60	12.91	-3.69	Fe2O3
Illite	1.24	-39.58	-40.83	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-3.33	-12.22	-8.89	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-1.30	-22.19	-20.89	KAlSi3O8
K-mica	7.84	21.15	13.31	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	4.11	11.91	7.80	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	-2.92	-7.57	-4.65	FeS
Manganite	-4.18	21.16	25.34	MnOOH
Melanterite	-8.38	-10.64	-2.26	FeSO4·7H2O
O2(g)	-33.48	-36.34	-2.86	O2
Pyrite	22.23	3.63	-18.59	FeS2
Pyrochroite	-6.82	8.38	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-8.10	33.94	42.05	MnO2
Quartz	-0.12	-4.16	-4.04	SiO2
Rhodochrosite	0.01	-11.11	-11.12	MnCO3
Sepiolite	-5.37	10.50	15.87	Mg2Si3O7.5OH·3H2O
Sepiolite(d)	-8.16	10.50	18.66	Mg2Si3O7.5OH·3H2O
Siderite	-1.84	-12.70	-10.86	FeCO3
SiO2(a)	-1.42	-4.16	-2.75	SiO2
Strontianite	-0.41	-9.68	-9.27	SrCO3
Sulfur	13.22	18.20	4.98	S
Talc	-4.04	17.84	21.87	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung
Grundwasserprobe: B2 Rettigheim 2015_05_05

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\B2 2015_05_05.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\B2 2015_05_05.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 B2(2015_05_05)

temp	20.7
pH	8.38
pe	2.91
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	0.005
F	2.0
Cl	18.8
Alkalinity	1110
S(6)	358
Li	0.16
Na	579
K	3.5
Ca	12.9
Mg	3.7
Sr	0.63
B	1.3
Si	2.5
Al	0.46
Fe	1.15
Mn	0.1
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. B2(2015_05_05)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	1.705e-005	1.705e-005
Alkalinity	2.218e-002	2.218e-002
B	1.203e-004	1.203e-004
Ca	3.219e-004	3.219e-004
Cl	5.303e-004	5.303e-004
F	1.053e-004	1.053e-004
Fe	2.059e-005	2.059e-005
K	8.951e-005	8.951e-005
Li	2.306e-005	2.306e-005
Mg	1.522e-004	1.522e-004
Mn	1.820e-006	1.820e-006
Na	2.519e-002	2.519e-002
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	3.727e-003	3.727e-003
Si	4.161e-005	4.161e-005
Sr	7.190e-006	7.190e-006

-----Description of solution-----

pH = 8.380
 pe = 2.910
 Specific Conductance (uS/cm, 20 oC) = 2270
 Density (g/cm3) = 0.99982
 Activity of water = 0.999
 Ionic strength = 3.160e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 2.179e-002
 Total CO2 (mol/kg) = 2.179e-002
 Temperature (deg C) = 20.700
 Electrical balance (eq) = -3.932e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -7.16
 Iterations = 9
 Total H = 1.110342e+002
 Total O = 5.558697e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-4.6212	-0.2694

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	2.043e-006	1.720e-006	-5.690	-5.764	-0.075
H+	4.775e-009	4.169e-009	-8.321	-8.380	-0.059
H2O	5.551e+001	9.991e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	1.705e-005				
Al(OH)4-	1.701e-005	1.443e-005	-4.769	-4.841	-0.072
Al(OH)3	3.345e-008	3.369e-008	-7.476	-7.472	0.003
Al(OH)2+	1.558e-009	1.321e-009	-8.807	-8.879	-0.072
AlF2+	2.474e-011	2.098e-011	-10.607	-10.678	-0.072

AlF3	2.281e-011	2.298e-011	-10.642	-10.639	0.003
AlOH+2	1.998e-012	1.034e-012	-11.699	-11.986	-0.286
AlF+2	9.472e-013	4.902e-013	-12.024	-12.310	-0.286
AlF4-	9.413e-013	7.984e-013	-12.026	-12.098	-0.072
AlSO4+	3.670e-015	3.113e-015	-14.435	-14.507	-0.072
AlF5-2	2.155e-015	1.115e-015	-14.666	-14.953	-0.286
Al+3	1.955e-015	5.759e-016	-14.709	-15.240	-0.531
Al(SO4)2-	2.057e-016	1.745e-016	-15.687	-15.758	-0.072
AlF6-3	4.679e-019	1.063e-019	-18.330	-18.974	-0.644
AlHSO4+2	2.146e-024	1.110e-024	-23.668	-23.955	-0.286
B	1.203e-004				
H3BO3	1.044e-004	1.052e-004	-3.981	-3.978	0.003
H2BO3-	1.581e-005	1.341e-005	-4.801	-4.873	-0.072
BF(OH)3-	4.122e-009	3.496e-009	-8.385	-8.456	-0.072
BF2(OH)2-	1.619e-013	1.373e-013	-12.791	-12.862	-0.072
BF3OH-	7.010e-020	5.946e-020	-19.154	-19.226	-0.072
BF4-	1.047e-025	8.881e-026	-24.980	-25.052	-0.072
C(4)	2.179e-002				
HCO3-	2.090e-002	1.786e-002	-1.680	-1.748	-0.068
CO3-2	3.441e-004	1.833e-004	-3.463	-3.737	-0.274
NaHCO3	2.092e-004	2.108e-004	-3.679	-3.676	0.003
CO2	1.763e-004	1.776e-004	-3.754	-3.751	0.003
NaCO3-	6.778e-005	5.749e-005	-4.169	-4.240	-0.072
CaCO3	3.303e-005	3.327e-005	-4.481	-4.478	0.003
CaHCO3+	2.903e-005	2.480e-005	-4.537	-4.605	-0.068
MgHCO3+	1.400e-005	1.187e-005	-4.854	-4.925	-0.072
MgCO3	9.396e-006	9.464e-006	-5.027	-5.024	0.003
MnCO3	1.424e-006	1.434e-006	-5.847	-5.843	0.003
SrHCO3+	7.694e-007	6.573e-007	-6.114	-6.182	-0.068
FeCO3	5.404e-007	5.443e-007	-6.267	-6.264	0.003
SrCO3	2.852e-007	2.873e-007	-6.545	-6.542	0.003
FeHCO3+	2.606e-007	2.211e-007	-6.584	-6.655	-0.072
MnHCO3+	1.848e-007	1.568e-007	-6.733	-6.805	-0.072
Ca	3.219e-004				
Ca+2	2.195e-004	1.170e-004	-3.659	-3.932	-0.273
CaSO4	4.024e-005	4.053e-005	-4.395	-4.392	0.003
CaCO3	3.303e-005	3.327e-005	-4.481	-4.478	0.003
CaHCO3+	2.903e-005	2.480e-005	-4.537	-4.605	-0.068
CaF+	9.480e-008	8.041e-008	-7.023	-7.095	-0.072
CaOH+	5.486e-009	4.653e-009	-8.261	-8.332	-0.072
CaHSO4+	1.109e-012	9.402e-013	-11.955	-12.027	-0.072
Cl	5.303e-004				
Cl-	5.303e-004	4.470e-004	-3.275	-3.350	-0.074
MnCl+	2.115e-010	1.794e-010	-9.675	-9.746	-0.072
FeCl+	9.006e-011	7.638e-011	-10.045	-10.117	-0.072
MnCl2	3.475e-014	3.500e-014	-13.459	-13.456	0.003
MnCl3-	5.080e-018	4.309e-018	-17.294	-17.366	-0.072
FeCl+2	1.719e-019	8.894e-020	-18.765	-19.051	-0.286
FeCl2+	2.404e-022	2.039e-022	-21.619	-21.691	-0.072
FeCl3	9.050e-027	9.116e-027	-26.043	-26.040	0.003
F	1.053e-004				
F-	1.038e-004	8.737e-005	-3.984	-4.059	-0.075
NaF	1.048e-006	1.055e-006	-5.980	-5.977	0.003
MgF+	3.635e-007	3.083e-007	-6.439	-6.511	-0.072
CaF+	9.480e-008	8.041e-008	-7.023	-7.095	-0.072
BF(OH)3-	4.122e-009	3.496e-009	-8.385	-8.456	-0.072
HF	5.022e-010	5.059e-010	-9.299	-9.296	0.003
FeF+	1.275e-010	1.082e-010	-9.894	-9.966	-0.072

MnF+	7.020e-011	5.954e-011	-10.154	-10.225	-0.072
AlF2+	2.474e-011	2.098e-011	-10.607	-10.678	-0.072
AlF3	2.281e-011	2.298e-011	-10.642	-10.639	0.003
AlF+2	9.472e-013	4.902e-013	-12.024	-12.310	-0.286
AlF4-	9.413e-013	7.984e-013	-12.026	-12.098	-0.072
HF2-	1.930e-013	1.637e-013	-12.715	-12.786	-0.072
BF2(OH)2-	1.619e-013	1.373e-013	-12.791	-12.862	-0.072
FeF2+	3.816e-015	3.237e-015	-14.418	-14.490	-0.072
AlF5~2	2.155e-015	1.115e-015	-14.666	-14.953	-0.286
FeF+2	1.894e-015	9.801e-016	-14.723	-15.009	-0.286
FeF3	4.384e-016	4.416e-016	-15.358	-15.355	0.003
AlF6~3	4.679e-019	1.063e-019	-18.330	-18.974	-0.644
BF3OH-	7.010e-020	5.946e-020	-19.154	-19.226	-0.072
BF4-	1.047e-025	8.881e-026	-24.980	-25.052	-0.072
SiF6~2	2.384e-032	1.233e-032	-31.623	-31.909	-0.286
Fe(2)	1.074e-006				
FeCO3	5.404e-007	5.443e-007	-6.267	-6.264	0.003
FeHCO3+	2.606e-007	2.211e-007	-6.584	-6.655	-0.072
Fe+2	2.286e-007	1.238e-007	-6.641	-6.907	-0.266
FeSO4	3.650e-008	3.676e-008	-7.438	-7.435	0.003
FeOH+	7.984e-009	6.772e-009	-8.098	-8.169	-0.072
FeF+	1.275e-010	1.082e-010	-9.894	-9.966	-0.072
FeCl+	9.006e-011	7.638e-011	-10.045	-10.117	-0.072
Fe(HS)2	1.763e-012	1.776e-012	-11.754	-11.751	0.003
FeHSO4+	1.173e-015	9.950e-016	-14.931	-15.002	-0.072
Fe(HS)3-	2.893e-017	2.454e-017	-16.539	-16.610	-0.072
Fe(3)	1.952e-005				
Fe(OH)3	1.544e-005	1.555e-005	-4.811	-4.808	0.003
Fe(OH)4-	3.363e-006	2.852e-006	-5.473	-5.545	-0.072
Fe(OH)2+	7.181e-007	6.091e-007	-6.144	-6.215	-0.072
FeOH+2	1.750e-011	9.056e-012	-10.757	-11.043	-0.286
FeF2+	3.816e-015	3.237e-015	-14.418	-14.490	-0.072
FeF+2	1.894e-015	9.801e-016	-14.723	-15.009	-0.286
FeF3	4.384e-016	4.416e-016	-15.358	-15.355	0.003
FeSO4+	1.606e-016	1.362e-016	-15.794	-15.866	-0.072
Fe+3	2.568e-017	7.566e-018	-16.590	-17.121	-0.531
Fe(SO4)2~	6.249e-018	5.300e-018	-17.204	-17.276	-0.072
FeCl+2	1.719e-019	8.894e-020	-18.765	-19.051	-0.286
Fe2(OH)2+4	3.686e-020	2.643e-021	-19.433	-20.578	-1.144
FeCl2+	2.404e-022	2.039e-022	-21.619	-21.691	-0.072
Fe3(OH)4+5	3.089e-023	5.031e-025	-22.510	-24.298	-1.788
FeHSO4+2	2.952e-024	1.528e-024	-23.530	-23.816	-0.286
FeCl3	9.050e-027	9.116e-027	-26.043	-26.040	0.003
H(0)	3.861e-026				
H2	1.931e-026	1.945e-026	-25.714	-25.711	0.003
K	8.951e-005				
K+	8.847e-005	7.458e-005	-4.053	-4.127	-0.074
KSO4-	1.036e-006	8.784e-007	-5.985	-6.056	-0.072
KOH	6.153e-011	6.198e-011	-10.211	-10.208	0.003
Li	2.306e-005				
Li+	2.288e-005	1.962e-005	-4.641	-4.707	-0.067
LiSO4-	1.827e-007	1.549e-007	-6.738	-6.810	-0.072
LiOH	1.070e-010	1.077e-010	-9.971	-9.968	0.003
Mg	1.522e-004				
Mg+2	1.066e-004	5.780e-005	-3.972	-4.238	-0.266
MgSO4	2.175e-005	2.190e-005	-4.663	-4.659	0.003
MgHCO3+	1.400e-005	1.187e-005	-4.854	-4.925	-0.072
MgCO3	9.396e-006	9.464e-006	-5.027	-5.024	0.003

MgF+	3.635e-007	3.083e-007	-6.439	-6.511	-0.072
MgOH+	3.999e-008	3.392e-008	-7.398	-7.470	-0.072
Mn (2)	1.820e-006				
MnCO3	1.424e-006	1.434e-006	-5.847	-5.843	0.003
MnHCO3+	1.848e-007	1.568e-007	-6.733	-6.805	-0.072
Mn+2	1.819e-007	9.850e-008	-6.740	-7.007	-0.266
MnSO4	2.894e-008	2.915e-008	-7.538	-7.535	0.003
MnOH+	5.013e-010	4.252e-010	-9.300	-9.371	-0.072
MnCl+	2.115e-010	1.794e-010	-9.675	-9.746	-0.072
MnF+	7.020e-011	5.954e-011	-10.154	-10.225	-0.072
MnCl2	3.475e-014	3.500e-014	-13.459	-13.456	0.003
MnCl3-	5.080e-018	4.309e-018	-17.294	-17.366	-0.072
Mn (3)	5.760e-030				
Mn+3	5.760e-030	1.308e-030	-29.240	-29.883	-0.644
Na	2.519e-002				
Na+	2.469e-002	2.099e-002	-1.608	-1.678	-0.071
NaSO4-	2.182e-004	1.851e-004	-3.661	-3.733	-0.072
NaHCO3	2.092e-004	2.108e-004	-3.679	-3.676	0.003
NaCO3-	6.778e-005	5.749e-005	-4.169	-4.240	-0.072
NaF	1.048e-006	1.055e-006	-5.980	-5.977	0.003
NaOH	3.299e-008	3.323e-008	-7.482	-7.478	0.003
O (0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-42.370	-42.367	0.003
S (-2)	1.559e-007				
HS-	1.507e-007	1.269e-007	-6.822	-6.897	-0.075
H2S	5.251e-009	5.289e-009	-8.280	-8.277	0.003
S-2	5.177e-012	2.726e-012	-11.286	-11.564	-0.278
Fe (HS) 2	1.763e-012	1.776e-012	-11.754	-11.751	0.003
Fe (HS) 3-	2.893e-017	2.454e-017	-16.539	-16.610	-0.072
S (6)	3.727e-003				
SO4-2	3.444e-003	1.809e-003	-2.463	-2.743	-0.280
NaSO4-	2.182e-004	1.851e-004	-3.661	-3.733	-0.072
CaSO4	4.024e-005	4.053e-005	-4.395	-4.392	0.003
MgSO4	2.175e-005	2.190e-005	-4.663	-4.659	0.003
KSO4-	1.036e-006	8.784e-007	-5.985	-6.056	-0.072
SrSO4	9.272e-007	9.340e-007	-6.033	-6.030	0.003
LiSO4-	1.827e-007	1.549e-007	-6.738	-6.810	-0.072
FeSO4	3.650e-008	3.676e-008	-7.438	-7.435	0.003
MnSO4	2.894e-008	2.915e-008	-7.538	-7.535	0.003
HSO4-	7.882e-010	6.685e-010	-9.103	-9.175	-0.072
CaHSO4+	1.109e-012	9.402e-013	-11.955	-12.027	-0.072
AlSO4+	3.670e-015	3.113e-015	-14.435	-14.507	-0.072
FeHSO4+	1.173e-015	9.950e-016	-14.931	-15.002	-0.072
Al (SO4) 2-	2.057e-016	1.745e-016	-15.687	-15.758	-0.072
FeSO4+	1.606e-016	1.362e-016	-15.794	-15.866	-0.072
Fe (SO4) 2-	6.249e-018	5.300e-018	-17.204	-17.276	-0.072
FeHSO4+2	2.952e-024	1.528e-024	-23.530	-23.816	-0.286
AlHSO4+2	2.146e-024	1.110e-024	-23.668	-23.955	-0.286
Si	4.161e-005				
H4SiO4	4.016e-005	4.045e-005	-4.396	-4.393	0.003
H3SiO4-	1.447e-006	1.227e-006	-5.840	-5.911	-0.072
H2SiO4-2	2.903e-011	1.502e-011	-10.537	-10.823	-0.286
SiF6-2	2.384e-032	1.233e-032	-31.623	-31.909	-0.286
Sr	7.190e-006				
Sr+2	5.208e-006	2.788e-006	-5.283	-5.555	-0.271
SrSO4	9.272e-007	9.340e-007	-6.033	-6.030	0.003
SrHCO3+	7.694e-007	6.573e-007	-6.114	-6.182	-0.068
SrCO3	2.852e-007	2.873e-007	-6.545	-6.542	0.003

SrOH+ 4.023e-011 3.427e-011 -10.395 -10.465 -0.070

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-1.19	9.90	11.08	Al(OH)3
Albite	-1.42	-19.69	-18.28	NaAlSi3O8
Alunite	-4.19	-5.05	-0.86	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-2.33	-6.67	-4.35	CaSO4
Anorthite	-2.56	-22.40	-19.84	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.64	-7.67	-8.31	CaCO3
Ca-Montmorillonite	0.85	-44.81	-45.65	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	0.79	-7.67	-8.46	CaCO3
Celestite	-1.67	-8.30	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-0.79	-4.39	-3.60	SiO2
Chlorite(14A)	-0.78	69.23	70.00	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-3.96	28.78	32.74	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-2.33	-3.75	-1.42	CO2
Dolomite	1.35	-15.64	-16.99	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	3.13	8.02	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-1.51	-5.42	-3.92	FeS
Fluorite	-1.40	-12.05	-10.65	CaF2
Gibbsite	1.54	9.90	8.35	Al(OH)3
Goethite	8.86	8.02	-0.84	FeOOH
Gypsum	-2.09	-6.68	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-22.58	-25.71	-3.13	H2
H2O(g)	-1.62	-0.00	1.62	H2O
H2S(g)	-7.33	-8.28	-0.95	H2S
Halite	-6.60	-5.03	1.57	NaCl
Hausmannite	-10.27	51.84	62.11	Mn3O4
Hematite	19.71	16.04	-3.68	Fe2O3
Illite	0.76	-40.10	-40.85	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-1.82	-10.70	-8.87	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-1.24	-22.14	-20.90	KAlSi3O8
K-mica	7.43	20.77	13.34	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	3.20	11.01	7.81	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	-0.78	-5.42	-4.65	FeS
Manganite	-4.30	21.04	25.34	MnOOH
Melanterite	-7.39	-9.65	-2.26	FeSO4:7H2O
O2(g)	-39.51	-42.37	-2.86	O2
Pyrite	20.48	1.88	-18.60	FeS2
Pyrochroite	-5.45	9.75	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-9.75	32.33	42.08	MnO2
Quartz	-0.35	-4.39	-4.04	SiO2
Rhodochrosite	0.37	-10.74	-11.11	MnCO3
Sepiolite	-4.01	11.87	15.87	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-6.79	11.87	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	0.22	-10.64	-10.86	FeCO3
SiO2(a)	-1.64	-4.39	-2.75	SiO2
Strontianite	-0.02	-9.29	-9.27	SrCO3
Sulfur	9.32	14.30	4.98	S
Talc	-1.90	20.00	21.90	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung
Grundwasserprobe: B2 Rettigheim 2015_05_06

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\B2 2015_05_06.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\B2 2015_05_06.pqo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 B2(2015_05_06)

temp 21.0
pH 8.4
pe 1.27
redox pe
units mg/kgw
density 1
S(-2) 0.005
F 2.2
Cl 18.0
Alkalinity 1120
S(6) 310
Li 0.16
Na 566
K 4.0
Ca 7.0
Mg 3.0
Sr 0.61
B 1.3
Si 2.5
Al 0.44
Fe 1.99
Mn 0.35
water 1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. B2(2015_05_06)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
----------	----------	-------

Al	1.631e-005	1.631e-005
Alkalinity	2.238e-002	2.238e-002
B	1.203e-004	1.203e-004
Ca	1.747e-004	1.747e-004
Cl	5.077e-004	5.077e-004
F	1.158e-004	1.158e-004
Fe	3.563e-005	3.563e-005
K	1.023e-004	1.023e-004
Li	2.306e-005	2.306e-005
Mg	1.234e-004	1.234e-004
Mn	6.371e-006	6.371e-006
Na	2.462e-002	2.462e-002
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	3.227e-003	3.227e-003
Si	4.161e-005	4.161e-005
Sr	6.962e-006	6.962e-006

-----Description of solution-----

pH	=	8.400
pe	=	1.270
Specific Conductance (uS/cm, 21 oC)	=	2216
Density (g/cm3)	=	0.99970
Activity of water	=	0.999
Ionic strength	=	3.032e-002
Mass of water (kg)	=	1.000e+000
Total carbon (mol/kg)	=	2.197e-002
Total CO2 (mol/kg)	=	2.197e-002
Temperature (deg C)	=	21.000
Electrical balance (eq)	=	-3.981e-003
Percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	-7.45
Iterations	=	9
Total H	=	1.110344e+002
Total O	=	5.558550e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-4.6565	-0.2718

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	2.184e-006	1.845e-006	-5.661	-5.734	-0.073
H+	4.552e-009	3.981e-009	-8.342	-8.400	-0.058
H2O	5.551e+001	9.991e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	1.631e-005				
Al(OH)4-	1.628e-005	1.384e-005	-4.788	-4.859	-0.070
Al(OH)3	3.054e-008	3.075e-008	-7.515	-7.512	0.003
Al(OH)2+	1.323e-009	1.125e-009	-8.878	-8.949	-0.070
AlF3	2.285e-011	2.301e-011	-10.641	-10.638	0.003
AlF2+	2.237e-011	1.902e-011	-10.650	-10.721	-0.070
AlOH+2	1.565e-012	8.179e-013	-11.806	-12.087	-0.282
AlF4-	1.039e-012	8.831e-013	-11.984	-12.054	-0.070
AlF+2	7.684e-013	4.017e-013	-12.114	-12.396	-0.282

AlF5-2	2.605e-015	1.362e-015	-14.584	-14.866	-0.282
AlSO4+	2.396e-015	2.037e-015	-14.621	-14.691	-0.070
Al+3	1.425e-015	4.265e-016	-14.846	-15.370	-0.524
Al(SO4)2-	1.183e-016	1.006e-016	-15.927	-15.997	-0.070
AlF6-3	6.129e-019	1.424e-019	-18.213	-18.846	-0.634
AlHSO4+2	1.330e-024	6.955e-025	-23.876	-24.158	-0.282
B	1.203e-004				
H3BO3	1.038e-004	1.045e-004	-3.984	-3.981	0.003
H2BO3-	1.649e-005	1.403e-005	-4.783	-4.853	-0.070
BF(OH)3-	4.524e-009	3.847e-009	-8.344	-8.415	-0.070
BF2(OH)2-	1.874e-013	1.593e-013	-12.727	-12.798	-0.070
BF3OH-	8.507e-020	7.234e-020	-19.070	-19.141	-0.070
BF4-	1.340e-025	1.139e-025	-24.873	-24.943	-0.070
C(4)	2.197e-002				
HCO3-	2.108e-002	1.805e-002	-1.676	-1.744	-0.067
CO3-2	3.632e-004	1.953e-004	-3.440	-3.709	-0.269
NaHCO3	2.075e-004	2.089e-004	-3.683	-3.680	0.003
CO2	1.695e-004	1.707e-004	-3.771	-3.768	0.003
NaCO3-	7.175e-005	6.101e-005	-4.144	-4.215	-0.070
CaCO3	1.944e-005	1.958e-005	-4.711	-4.708	0.003
CaHCO3+	1.617e-005	1.385e-005	-4.791	-4.859	-0.067
FeCO3	1.239e-005	1.248e-005	-4.907	-4.904	0.003
MgHCO3+	1.165e-005	9.906e-006	-4.934	-5.004	-0.070
MgCO3	8.297e-006	8.355e-006	-5.081	-5.078	0.003
FeHCO3+	5.654e-006	4.808e-006	-5.248	-5.318	-0.070
MnCO3	5.060e-006	5.096e-006	-5.296	-5.293	0.003
SrHCO3+	7.719e-007	6.610e-007	-6.112	-6.180	-0.067
MnHCO3+	6.214e-007	5.284e-007	-6.207	-6.277	-0.070
SrCO3	3.020e-007	3.042e-007	-6.520	-6.517	0.003
Ca	1.747e-004				
Ca+2	1.195e-004	6.428e-005	-3.923	-4.192	-0.269
CaSO4	1.952e-005	1.965e-005	-4.710	-4.707	0.003
CaCO3	1.944e-005	1.958e-005	-4.711	-4.708	0.003
CaHCO3+	1.617e-005	1.385e-005	-4.791	-4.859	-0.067
CaF+	5.780e-008	4.915e-008	-7.238	-7.309	-0.070
CaOH+	3.149e-009	2.677e-009	-8.502	-8.572	-0.070
CaHSO4+	5.138e-013	4.369e-013	-12.289	-12.360	-0.070
Cl	5.077e-004				
Cl-	5.077e-004	4.292e-004	-3.294	-3.367	-0.073
FeCl+	1.856e-009	1.578e-009	-8.731	-8.802	-0.070
MnCl+	6.754e-010	5.743e-010	-9.170	-9.241	-0.070
MnCl2	1.068e-013	1.076e-013	-12.971	-12.968	0.003
MnCl3-	1.496e-017	1.272e-017	-16.825	-16.896	-0.070
FeCl+2	8.271e-020	4.324e-020	-19.082	-19.364	-0.282
FeCl2+	1.108e-022	9.425e-023	-21.955	-22.026	-0.070
FeCl3	4.017e-027	4.045e-027	-26.396	-26.393	0.003
F	1.158e-004				
F-	1.143e-004	9.649e-005	-3.942	-4.016	-0.073
NaF	1.135e-006	1.143e-006	-5.945	-5.942	0.003
MgF+	3.321e-007	2.824e-007	-6.479	-6.549	-0.070
CaF+	5.780e-008	4.915e-008	-7.238	-7.309	-0.070
BF(OH)3-	4.524e-009	3.847e-009	-8.344	-8.415	-0.070
FeF+	3.023e-009	2.570e-009	-8.520	-8.590	-0.070
HF	5.327e-010	5.364e-010	-9.274	-9.271	0.003
MnF+	2.579e-010	2.193e-010	-9.589	-9.659	-0.070
AlF3	2.285e-011	2.301e-011	-10.641	-10.638	0.003
AlF2+	2.237e-011	1.902e-011	-10.650	-10.721	-0.070
AlF4-	1.039e-012	8.831e-013	-11.984	-12.054	-0.070

AlF+2	7.684e-013	4.017e-013	-12.114	-12.396	-0.282
HF2-	2.260e-013	1.921e-013	-12.646	-12.716	-0.070
BF2(OH)2-	1.874e-013	1.593e-013	-12.727	-12.798	-0.070
AlF5-2	2.605e-015	1.362e-015	-14.584	-14.866	-0.282
FeF2+	2.347e-015	1.996e-015	-14.629	-14.700	-0.070
FeF+2	1.043e-015	5.452e-016	-14.982	-15.263	-0.282
FeF3	2.990e-016	3.011e-016	-15.524	-15.521	0.003
AlF6-3	6.129e-019	1.424e-019	-18.213	-18.846	-0.634
BF3OH-	8.507e-020	7.234e-020	-19.070	-19.141	-0.070
BF4-	1.340e-025	1.139e-025	-24.873	-24.943	-0.070
SiF6-2	3.453e-032	1.805e-032	-31.462	-31.743	-0.282
Fe(2)	2.381e-005				
FeCO3	1.239e-005	1.248e-005	-4.907	-4.904	0.003
FeHCO3+	5.654e-006	4.808e-006	-5.248	-5.318	-0.070
Fe+2	4.875e-006	2.664e-006	-5.312	-5.575	-0.262
FeSO4	6.952e-007	7.001e-007	-6.158	-6.155	0.003
FeOH+	1.836e-007	1.562e-007	-6.736	-6.806	-0.070
FeF+	3.023e-009	2.570e-009	-8.520	-8.590	-0.070
FeCl+	1.856e-009	1.578e-009	-8.731	-8.802	-0.070
Fe(HS)2	3.827e-011	3.853e-011	-10.417	-10.414	0.003
FeHSO4+	2.129e-014	1.811e-014	-13.672	-13.742	-0.070
Fe(HS)3-	6.287e-016	5.346e-016	-15.202	-15.272	-0.070
Fe(3)	1.183e-005				
Fe(OH)3	9.283e-006	9.348e-006	-5.032	-5.029	0.003
Fe(OH)4-	2.138e-006	1.818e-006	-5.670	-5.740	-0.070
Fe(OH)2+	4.057e-007	3.450e-007	-6.392	-6.462	-0.070
FeOH+2	9.261e-012	4.841e-012	-11.033	-11.315	-0.282
FeF2+	2.347e-015	1.996e-015	-14.629	-14.700	-0.070
FeF+2	1.043e-015	5.452e-016	-14.982	-15.263	-0.282
FeF3	2.990e-016	3.011e-016	-15.524	-15.521	0.003
FeSO4+	7.117e-017	6.052e-017	-16.148	-16.218	-0.070
Fe+3	1.267e-017	3.793e-018	-16.897	-17.421	-0.524
Fe(SO4)2-	2.439e-018	2.074e-018	-17.613	-17.683	-0.070
FeCl+2	8.271e-020	4.324e-020	-19.082	-19.364	-0.282
Fe2(OH)2+4	9.989e-021	7.460e-022	-20.000	-21.127	-1.127
FeCl2+	1.108e-022	9.425e-023	-21.955	-22.026	-0.070
Fe3(OH)4+5	4.504e-024	7.816e-026	-23.346	-25.107	-1.761
FeHSO4+2	1.239e-024	6.477e-025	-23.907	-24.189	-0.282
FeCl3	4.017e-027	4.045e-027	-26.396	-26.393	0.003
H(0)	6.692e-023				
H2	3.346e-023	3.369e-023	-22.475	-22.472	0.003
K	1.023e-004				
K+	1.012e-004	8.559e-005	-3.995	-4.068	-0.073
KSO4-	1.049e-006	8.918e-007	-5.979	-6.050	-0.070
KOH	7.396e-011	7.448e-011	-10.131	-10.128	0.003
Li	2.306e-005				
Li+	2.290e-005	1.969e-005	-4.640	-4.706	-0.066
LiSO4-	1.609e-007	1.368e-007	-6.794	-6.864	-0.070
LiOH	1.124e-010	1.132e-010	-9.949	-9.946	0.003
Mg	1.234e-004				
Mg+2	8.717e-005	4.767e-005	-4.060	-4.322	-0.262
MgSO4	1.591e-005	1.602e-005	-4.798	-4.795	0.003
MgHCO3+	1.165e-005	9.906e-006	-4.934	-5.004	-0.070
MgCO3	8.297e-006	8.355e-006	-5.081	-5.078	0.003
MgF+	3.321e-007	2.824e-007	-6.479	-6.549	-0.070
MgOH+	3.542e-008	3.012e-008	-7.451	-7.521	-0.070
Mn(2)	6.371e-006				
MnCO3	5.060e-006	5.096e-006	-5.296	-5.293	0.003

MnHCO3+	6.214e-007	5.284e-007	-6.207	-6.277	-0.070
Mn+2	6.011e-007	3.285e-007	-6.221	-6.484	-0.262
MnSO4	8.545e-008	8.604e-008	-7.068	-7.065	0.003
MnOH+	1.791e-009	1.523e-009	-8.747	-8.817	-0.070
MnCl+	6.754e-010	5.743e-010	-9.170	-9.241	-0.070
MnF+	2.579e-010	2.193e-010	-9.589	-9.659	-0.070
MnCl2	1.068e-013	1.076e-013	-12.971	-12.968	0.003
MnCl3-	1.496e-017	1.272e-017	-16.825	-16.896	-0.070
Mn (3)	4.499e-031				
Mn+3	4.499e-031	1.045e-031	-30.347	-30.981	-0.634
Na	2.462e-002				
Na+	2.415e-002	2.058e-002	-1.617	-1.687	-0.069
NaHCO3	2.075e-004	2.089e-004	-3.683	-3.680	0.003
NaSO4-	1.882e-004	1.600e-004	-3.725	-3.796	-0.070
NaCO3-	7.175e-005	6.101e-005	-4.144	-4.215	-0.070
NaF	1.135e-006	1.143e-006	-5.945	-5.942	0.003
NaOH	3.389e-008	3.413e-008	-7.470	-7.467	0.003
O (0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-48.747	-48.744	0.003
S (-2)	1.559e-007				
HS-	1.509e-007	1.274e-007	-6.821	-6.895	-0.073
H2S	4.988e-009	5.023e-009	-8.302	-8.299	0.003
Fe (HS) 2	3.827e-011	3.853e-011	-10.417	-10.414	0.003
S-2	5.504e-012	2.928e-012	-11.259	-11.533	-0.274
Fe (HS) 3-	6.287e-016	5.346e-016	-15.202	-15.272	-0.070
S (6)	3.227e-003				
SO4-2	3.001e-003	1.592e-003	-2.523	-2.798	-0.275
NaSO4-	1.882e-004	1.600e-004	-3.725	-3.796	-0.070
CaSO4	1.952e-005	1.965e-005	-4.710	-4.707	0.003
MgSO4	1.591e-005	1.602e-005	-4.798	-4.795	0.003
KSO4-	1.049e-006	8.918e-007	-5.979	-6.050	-0.070
SrSO4	8.067e-007	8.123e-007	-6.093	-6.090	0.003
FeSO4	6.952e-007	7.001e-007	-6.158	-6.155	0.003
LiSO4-	1.609e-007	1.368e-007	-6.794	-6.864	-0.070
MnSO4	8.545e-008	8.604e-008	-7.068	-7.065	0.003
HSO4-	6.649e-010	5.654e-010	-9.177	-9.248	-0.070
CaHSO4+	5.138e-013	4.369e-013	-12.289	-12.360	-0.070
FeHSO4+	2.129e-014	1.811e-014	-13.672	-13.742	-0.070
AlSO4+	2.396e-015	2.037e-015	-14.621	-14.691	-0.070
Al (SO4) 2-	1.183e-016	1.006e-016	-15.927	-15.997	-0.070
FeSO4+	7.117e-017	6.052e-017	-16.148	-16.218	-0.070
Fe (SO4) 2-	2.439e-018	2.074e-018	-17.613	-17.683	-0.070
AlHSO4+2	1.330e-024	6.955e-025	-23.876	-24.158	-0.282
FeHSO4+2	1.239e-024	6.477e-025	-23.907	-24.189	-0.282
Si	4.161e-005				
H4SiO4	4.008e-005	4.036e-005	-4.397	-4.394	0.003
H3SiO4-	1.524e-006	1.296e-006	-5.817	-5.887	-0.070
H2SiO4-2	3.244e-011	1.696e-011	-10.489	-10.771	-0.282
SiF6-2	3.453e-032	1.805e-032	-31.462	-31.743	-0.282
Sr	6.962e-006				
Sr+2	5.081e-006	2.745e-006	-5.294	-5.561	-0.267
SrSO4	8.067e-007	8.123e-007	-6.093	-6.090	0.003
SrHCO3+	7.719e-007	6.610e-007	-6.112	-6.180	-0.067
SrCO3	3.020e-007	3.042e-007	-6.520	-6.517	0.003
SrOH+	4.138e-011	3.534e-011	-10.383	-10.452	-0.069

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-1.24	9.83	11.06	Al(OH)3
Albite	-1.46	-19.72	-18.26	NaAlSi3O8
Alunite	-4.48	-5.38	-0.90	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-2.64	-6.99	-4.35	CaSO4
Anorthite	-2.87	-22.69	-19.83	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.41	-7.90	-8.31	CaCO3
Ca-Montmorillonite	0.67	-44.93	-45.61	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	0.56	-7.90	-8.46	CaCO3
Celestite	-1.74	-8.36	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-0.79	-4.39	-3.60	SiO2
Chlorite(14A)	-1.02	68.87	69.89	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-4.06	28.65	32.70	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-2.35	-3.77	-1.42	CO2
Dolomite	1.06	-15.93	-17.00	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	2.89	7.78	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-0.15	-4.07	-3.92	FeS
Fluorite	-1.58	-12.22	-10.65	CaF2
Gibbsite	1.49	9.83	8.34	Al(OH)3
Goethite	8.63	7.78	-0.86	FeOOH
Gypsum	-2.41	-6.99	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-19.34	-22.47	-3.13	H2
H2O(g)	-1.62	-0.00	1.61	H2O
H2S(g)	-7.35	-8.30	-0.95	H2S
Halite	-6.63	-5.05	1.57	NaCl
Hausmannite	-11.75	50.29	62.03	Mn3O4
Hematite	19.26	15.56	-3.70	Fe2O3
Illite	0.66	-40.15	-40.81	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-2.63	-11.53	-8.90	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-1.23	-22.11	-20.88	KAlSi3O8
K-mica	7.35	20.64	13.29	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	3.08	10.87	7.79	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	0.58	-4.07	-4.65	FeS
Manganite	-5.35	19.99	25.34	MnOOH
Melanterite	-6.12	-8.38	-2.26	FeSO4:7H2O
O2(g)	-45.88	-48.74	-2.86	O2
Pyrite	18.57	-0.02	-18.59	FeS2
Pyrochroite	-4.88	10.32	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-12.37	29.66	42.03	MnO2
Quartz	-0.35	-4.39	-4.04	SiO2
Rhodochrosite	0.92	-10.19	-11.12	MnCO3
Sepiolite	-4.09	11.77	15.87	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-6.89	11.77	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	1.58	-9.28	-10.87	FeCO3
SiO2(a)	-1.65	-4.39	-2.75	SiO2
Strontianite	-0.00	-9.27	-9.27	SrCO3
Sulfur	6.06	11.04	4.98	S
Talc	-2.00	19.86	21.86	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung
Grundwasserprobe: GWM Rettigheim 2 (2015_06_10)

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\GWM Rettigheim 2 2015_06_10.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\GWM Rettigheim 2 2015_06_10.pqo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 GWM Rettigheim 2 (2015_06_10)

temp	27.4
pH	9.21
pe	-3.15
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	7.9
F	0.95
Cl	3.6
Alkalinity	677
S(6)	71
Li	0.5
Na	297
K	1.9
Ca	1.2
Mg	0.6
Sr	0.005
B	1.2
Si	3.8
Al	0.0025
Fe	0.05
Mn	0.06
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. GWM Rettigheim 2 (2015_06_10)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	9.266e-008	9.266e-008
Alkalinity	1.353e-002	1.353e-002
B	1.110e-004	1.110e-004
Ca	2.994e-005	2.994e-005
Cl	1.015e-004	1.015e-004
F	5.000e-005	5.000e-005
Fe	8.953e-007	8.953e-007
K	4.859e-005	4.859e-005
Li	7.206e-005	7.206e-005
Mg	2.468e-005	2.468e-005
Mn	1.092e-006	1.092e-006
Na	1.292e-002	1.292e-002
S(-2)	2.464e-004	2.464e-004
S(6)	7.391e-004	7.391e-004
Si	6.324e-005	6.324e-005
Sr	5.706e-008	5.706e-008

-----Description of solution-----

pH = 9.210
 pe = -3.150
 Specific Conductance (uS/cm, 27 oC) = 1360
 Density (g/cm3) = 0.99725
 Activity of water = 1.000
 Ionic strength = 1.575e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 1.180e-002
 Total CO2 (mol/kg) = 1.180e-002
 Temperature (deg C) = 27.400
 Electrical balance (eq) = -2.004e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -7.25
 Iterations = 9
 Total H = 1.110236e+002
 Total O = 5.554517e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-6.1607	-0.3674

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	2.209e-005	1.941e-005	-4.656	-4.712	-0.056
H+	6.868e-010	6.166e-010	-9.163	-9.210	-0.047
H2O	5.551e+001	9.996e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	9.266e-008				
Al(OH)4-	9.263e-008	8.169e-008	-7.033	-7.088	-0.055
Al(OH)3	2.574e-011	2.583e-011	-10.589	-10.588	0.002
Al(OH)2+	1.031e-013	9.092e-014	-12.987	-13.041	-0.055
AlOH+2	9.627e-018	5.822e-018	-17.017	-17.235	-0.218
AlF2+	3.445e-018	3.038e-018	-17.463	-17.517	-0.055
AlF3	1.668e-018	1.674e-018	-17.778	-17.776	0.002

	AlF+2	2.267e-019	1.371e-019	-18.645	-18.863	-0.218
	AlF4-	3.302e-020	2.912e-020	-19.481	-19.536	-0.055
	Al+3	8.164e-022	3.095e-022	-21.088	-21.509	-0.421
	AlSO4+	4.964e-022	4.378e-022	-21.304	-21.359	-0.055
	AlF5-2	3.316e-023	2.005e-023	-22.479	-22.698	-0.218
	Al(SO4)2-	6.884e-024	6.071e-024	-23.162	-23.217	-0.055
	AlF6-3	2.590e-027	8.353e-028	-26.587	-27.078	-0.491
	AlHSO4+2	4.046e-032	2.447e-032	-31.393	-31.611	-0.218
B		1.110e-004				
	H2BO3-	5.838e-005	5.148e-005	-4.234	-4.288	-0.055
	H3BO3	5.263e-005	5.282e-005	-4.279	-4.277	0.002
	BF(OH)3-	1.068e-009	9.414e-010	-8.972	-9.026	-0.055
	BF2(OH)2-	3.072e-015	2.709e-015	-14.513	-14.567	-0.055
	BF3OH-	8.685e-023	7.659e-023	-22.061	-22.116	-0.055
	BF4-	9.501e-030	8.379e-030	-29.022	-29.077	-0.055
C(4)		1.180e-002				
	HCO3-	1.033e-002	9.155e-003	-1.986	-2.038	-0.052
	CO3-2	1.183e-003	7.297e-004	-2.927	-3.137	-0.210
	NaCO3-	1.940e-004	1.711e-004	-3.712	-3.767	-0.055
	NaHCO3	5.727e-005	5.747e-005	-4.242	-4.241	0.002
	CO2	1.230e-005	1.235e-005	-4.910	-4.908	0.002
	CaCO3	1.228e-005	1.232e-005	-4.911	-4.909	0.002
	MgCO3	6.914e-006	6.940e-006	-5.160	-5.159	0.002
	CaHCO3+	1.304e-006	1.156e-006	-5.885	-5.937	-0.052
	MgHCO3+	1.180e-006	1.041e-006	-5.928	-5.983	-0.055
	MnCO3	1.044e-006	1.048e-006	-5.981	-5.980	0.002
	FeCO3	2.473e-007	2.482e-007	-6.607	-6.605	0.002
	MnHCO3+	1.672e-008	1.475e-008	-7.777	-7.831	-0.055
	FeHCO3+	1.472e-008	1.298e-008	-7.832	-7.887	-0.055
	SrCO3	1.197e-008	1.202e-008	-7.922	-7.920	0.002
	SrHCO3+	4.123e-009	3.653e-009	-8.385	-8.437	-0.052
Ca		2.994e-005				
	Ca+2	1.551e-005	9.558e-006	-4.809	-5.020	-0.210
	CaCO3	1.228e-005	1.232e-005	-4.911	-4.909	0.002
	CaHCO3+	1.304e-006	1.156e-006	-5.885	-5.937	-0.052
	CaSO4	8.426e-007	8.457e-007	-6.074	-6.073	0.002
	CaF+	4.358e-009	3.843e-009	-8.361	-8.415	-0.055
	CaOH+	2.916e-009	2.572e-009	-8.535	-8.590	-0.055
	CaHSO4+	3.572e-015	3.150e-015	-14.447	-14.502	-0.055
Cl		1.015e-004				
	Cl-	1.015e-004	8.929e-005	-3.993	-4.049	-0.056
	MnCl+	7.455e-012	6.574e-012	-11.128	-11.182	-0.055
	FeCl+	1.982e-012	1.747e-012	-11.703	-11.758	-0.055
	MnCl2	2.553e-016	2.562e-016	-15.593	-15.591	0.002
	MnCl3-	7.146e-021	6.302e-021	-20.146	-20.201	-0.055
	FeCl+2	5.251e-027	3.176e-027	-26.280	-26.498	-0.218
	FeCl2+	1.332e-030	1.175e-030	-29.876	-29.930	-0.055
	FeCl3	1.045e-035	1.049e-035	-34.981	-34.979	0.002
F		5.000e-005				
	F-	4.969e-005	4.367e-005	-4.304	-4.360	-0.056
	NaF	2.795e-007	2.805e-007	-6.554	-6.552	0.002
	MgF+	3.281e-008	2.893e-008	-7.484	-7.539	-0.055
	CaF+	4.358e-009	3.843e-009	-8.361	-8.415	-0.055
	BF(OH)3-	1.068e-009	9.414e-010	-8.972	-9.026	-0.055
	HF	4.202e-011	4.217e-011	-10.377	-10.375	0.002
	FeF+	7.020e-012	6.191e-012	-11.154	-11.208	-0.055
	MnF+	6.192e-012	5.460e-012	-11.208	-11.263	-0.055
	HF2-	8.157e-015	7.193e-015	-14.088	-14.143	-0.055

BF2(OH)2-	3.072e-015	2.709e-015	-14.513	-14.567	-0.055
AlF2+	3.445e-018	3.038e-018	-17.463	-17.517	-0.055
AlF3	1.668e-018	1.674e-018	-17.778	-17.776	0.002
AlF+2	2.267e-019	1.371e-019	-18.645	-18.863	-0.218
AlF4-	3.302e-020	2.912e-020	-19.481	-19.536	-0.055
FeF2+	1.590e-022	1.402e-022	-21.799	-21.853	-0.055
FeF+2	1.296e-022	7.838e-023	-21.887	-22.106	-0.218
BF3OH-	8.685e-023	7.659e-023	-22.061	-22.116	-0.055
AlF5-2	3.316e-023	2.005e-023	-22.479	-22.698	-0.218
FeF3	9.744e-024	9.780e-024	-23.011	-23.010	0.002
AlF6-3	2.590e-027	8.353e-028	-26.587	-27.078	-0.491
BF4-	9.501e-030	8.379e-030	-29.022	-29.077	-0.055
SiF6-2	9.888e-038	5.979e-038	-37.005	-37.223	-0.218
Fe (2)	8.902e-007				
Fe (HS) 2	5.791e-007	5.812e-007	-6.237	-6.236	0.002
FeCO3	2.473e-007	2.482e-007	-6.607	-6.605	0.002
Fe+2	2.277e-008	1.418e-008	-7.643	-7.848	-0.206
Fe (HS) 3-	1.539e-008	1.357e-008	-7.813	-7.867	-0.055
FeHCO3+	1.472e-008	1.298e-008	-7.832	-7.887	-0.055
FeOH+	9.846e-009	8.683e-009	-8.007	-8.061	-0.055
FeSO4	1.138e-009	1.142e-009	-8.944	-8.942	0.002
FeF+	7.020e-012	6.191e-012	-11.154	-11.208	-0.055
FeCl+	1.982e-012	1.747e-012	-11.703	-11.758	-0.055
FeHSO4+	5.298e-018	4.672e-018	-17.276	-17.330	-0.055
Fe (3)	5.095e-009				
Fe (OH) 4-	3.302e-009	2.912e-009	-8.481	-8.536	-0.055
Fe (OH) 3	1.783e-009	1.790e-009	-8.749	-8.747	0.002
Fe (OH) 2+	8.761e-012	7.726e-012	-11.057	-11.112	-0.055
FeOH+2	2.175e-017	1.315e-017	-16.663	-16.881	-0.218
FeF2+	1.590e-022	1.402e-022	-21.799	-21.853	-0.055
FeF+2	1.296e-022	7.838e-023	-21.887	-22.106	-0.218
FeF3	9.744e-024	9.780e-024	-23.011	-23.010	0.002
FeSO4+	6.208e-024	5.474e-024	-23.207	-23.262	-0.055
Fe+3	2.881e-024	1.092e-024	-23.540	-23.962	-0.421
Fe (SO4) 2-	5.945e-026	5.242e-026	-25.226	-25.280	-0.055
FeCl+2	5.251e-027	3.176e-027	-26.280	-26.498	-0.218
FeCl2+	1.332e-030	1.175e-030	-29.876	-29.930	-0.055
Fe2 (OH) 2+4	3.154e-032	4.218e-033	-31.501	-32.375	-0.874
FeHSO4+2	1.495e-032	9.040e-033	-31.825	-32.044	-0.218
FeCl3	1.045e-035	1.049e-035	-34.981	-34.979	0.002
Fe3 (OH) 4+5	1.267e-040	0.000e+000	-39.897	-41.262	-1.365
H (0)	1.045e-015				
H2	5.226e-016	5.245e-016	-15.282	-15.280	0.002
K	4.859e-005				
K+	4.844e-005	4.259e-005	-4.315	-4.371	-0.056
KSO4-	1.534e-007	1.353e-007	-6.814	-6.869	-0.055
KOH	2.385e-010	2.394e-010	-9.622	-9.621	0.002
Li	7.206e-005				
Li+	7.192e-005	6.388e-005	-4.143	-4.195	-0.051
LiSO4-	1.371e-007	1.209e-007	-6.863	-6.917	-0.055
LiOH	2.364e-009	2.372e-009	-8.626	-8.625	0.002
Mg	2.468e-005				
Mg+2	1.544e-005	9.605e-006	-4.811	-5.018	-0.206
MgCO3	6.914e-006	6.940e-006	-5.160	-5.159	0.002
MgHCO3+	1.180e-006	1.041e-006	-5.928	-5.983	-0.055
MgSO4	1.034e-006	1.038e-006	-5.985	-5.984	0.002
MgOH+	7.948e-008	7.009e-008	-7.100	-7.154	-0.055
MgF+	3.281e-008	2.893e-008	-7.484	-7.539	-0.055

Mn (2)	1.092e-006					
MnCO3	1.044e-006	1.048e-006	-5.981	-5.980	0.002	
Mn+2	2.903e-008	1.807e-008	-7.537	-7.743	-0.206	
MnHCO3+	1.672e-008	1.475e-008	-7.777	-7.831	-0.055	
MnSO4	1.453e-009	1.459e-009	-8.838	-8.836	0.002	
MnOH+	1.037e-009	9.144e-010	-8.984	-9.039	-0.055	
MnCl+	7.455e-012	6.574e-012	-11.128	-11.182	-0.055	
MnF+	6.192e-012	5.460e-012	-11.208	-11.263	-0.055	
MnCl2	2.553e-016	2.562e-016	-15.593	-15.591	0.002	
MnCl3-	7.146e-021	6.302e-021	-20.146	-20.201	-0.055	
Mn (3)	1.736e-036					
Mn+3	1.736e-036	5.598e-037	-35.760	-36.252	-0.491	
Na	1.292e-002					
Na+	1.264e-002	1.116e-002	-1.898	-1.952	-0.054	
NaCO3-	1.940e-004	1.711e-004	-3.712	-3.767	-0.055	
NaHCO3	5.727e-005	5.747e-005	-4.242	-4.241	0.002	
NaSO4-	2.793e-005	2.463e-005	-4.554	-4.608	-0.055	
NaF	2.795e-007	2.805e-007	-6.554	-6.552	0.002	
NaOH	1.191e-007	1.196e-007	-6.924	-6.922	0.002	
O (0)	0.000e+000					
O2	0.000e+000	0.000e+000	-61.053	-61.051	0.002	
S (-2)	2.464e-004					
HS-	2.440e-004	2.145e-004	-3.613	-3.669	-0.056	
H2S	1.074e-006	1.078e-006	-5.969	-5.968	0.002	
Fe (HS) 2	5.791e-007	5.812e-007	-6.237	-6.236	0.002	
S-2	8.072e-008	4.945e-008	-7.093	-7.306	-0.213	
Fe (HS) 3-	1.539e-008	1.357e-008	-7.813	-7.867	-0.055	
S (6)	7.391e-004					
SO4-2	7.090e-004	4.337e-004	-3.149	-3.363	-0.213	
NaSO4-	2.793e-005	2.463e-005	-4.554	-4.608	-0.055	
MgSO4	1.034e-006	1.038e-006	-5.985	-5.984	0.002	
CaSO4	8.426e-007	8.457e-007	-6.074	-6.073	0.002	
KSO4-	1.534e-007	1.353e-007	-6.814	-6.869	-0.055	
LiSO4-	1.371e-007	1.209e-007	-6.863	-6.917	-0.055	
SrSO4	2.082e-009	2.090e-009	-8.681	-8.680	0.002	
MnSO4	1.453e-009	1.459e-009	-8.838	-8.836	0.002	
FeSO4	1.138e-009	1.142e-009	-8.944	-8.942	0.002	
HSO4-	3.108e-011	2.741e-011	-10.507	-10.562	-0.055	
CaHSO4+	3.572e-015	3.150e-015	-14.447	-14.502	-0.055	
FeHSO4+	5.298e-018	4.672e-018	-17.276	-17.330	-0.055	
AlSO4+	4.964e-022	4.378e-022	-21.304	-21.359	-0.055	
Al (SO4) 2-	6.884e-024	6.071e-024	-23.162	-23.217	-0.055	
FeSO4+	6.208e-024	5.474e-024	-23.207	-23.262	-0.055	
Fe (SO4) 2-	5.945e-026	5.242e-026	-25.226	-25.280	-0.055	
AlHSO4+2	4.046e-032	2.447e-032	-31.393	-31.611	-0.218	
FeHSO4+2	1.495e-032	9.040e-033	-31.825	-32.044	-0.218	
Si	6.324e-005					
H4SiO4	4.882e-005	4.899e-005	-4.311	-4.310	0.002	
H3SiO4-	1.442e-005	1.272e-005	-4.841	-4.896	-0.055	
H2SiO4-2	2.707e-009	1.637e-009	-8.568	-8.786	-0.218	
SiF6-2	9.888e-038	5.979e-038	-37.005	-37.223	-0.218	
Sr	5.706e-008					
Sr+2	3.889e-008	2.403e-008	-7.410	-7.619	-0.209	
SrCO3	1.197e-008	1.202e-008	-7.922	-7.920	0.002	
SrHCO3+	4.123e-009	3.653e-009	-8.385	-8.437	-0.052	
SrSO4	2.082e-009	2.090e-009	-8.681	-8.680	0.002	
SrOH+	2.258e-012	1.998e-012	-11.646	-11.699	-0.053	

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-4.52	6.12	10.64	Al(OH)3
Albite	-4.12	-21.97	-17.85	NaAlSi3O8
Alunite	-18.67	-20.37	-1.69	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-4.01	-8.38	-4.37	CaSO4
Anorthite	-8.17	-27.81	-19.65	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.20	-8.16	-8.35	CaCO3
Ca-Montmorillonite	-6.89	-51.58	-44.69	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	0.34	-8.16	-8.49	CaCO3
Celestite	-4.34	-10.98	-6.64	SrSO4
Chalcedony	-0.79	-4.31	-3.52	SiO2
Chlorite(14A)	-1.17	66.32	67.49	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-0.32	31.59	31.91	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-3.41	-4.91	-1.50	CO2
Dolomite	0.83	-16.31	-17.15	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	-1.22	3.67	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	1.61	-2.31	-3.92	FeS
Fluorite	-3.17	-13.74	-10.57	CaF2
Gibbsite	-1.86	6.12	7.98	Al(OH)3
Goethite	4.75	3.67	-1.08	FeOOH
Gypsum	-3.80	-8.38	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-12.12	-15.28	-3.16	H2
H2O(g)	-1.45	-0.00	1.45	H2O
H2S(g)	-4.94	-5.97	-1.02	H2S
Halite	-7.59	-6.00	1.59	NaCl
Hausmannite	-16.29	44.15	60.44	Mn3O4
Hematite	11.52	7.34	-4.19	Fe2O3
Illite	-6.37	-46.31	-39.95	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-18.33	-27.72	-9.39	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-3.99	-24.39	-20.39	KAlSi3O8
K-mica	-2.08	10.27	12.36	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	-3.61	3.62	7.23	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	2.34	-2.31	-4.65	FeS
Manganite	-8.60	16.74	25.34	MnOOH
Melanterite	-9.03	-11.21	-2.18	FeSO4:7H2O
O2(g)	-58.14	-61.05	-2.91	O2
Pyrite	15.35	-3.07	-18.41	FeS2
Pyrochroite	-4.52	10.68	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-18.20	22.80	41.00	MnO2
Quartz	-0.36	-4.31	-3.95	SiO2
Rhodochrosite	0.26	-10.88	-11.14	MnCO3
Sepiolite	-1.82	13.88	15.70	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-4.78	13.88	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	-0.08	-10.99	-10.90	FeCO3
SiO2(a)	-1.62	-4.31	-2.69	SiO2
Strontianite	-1.48	-10.76	-9.27	SrCO3
Sulfur	1.33	6.15	4.83	S
Talc	1.84	22.97	21.13	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Grundwasserprobe: GWM Rettigheim 3 (2015_06_10)

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\GWM Rettigheim 3 2015_06_10.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\GWM Rettigheim 3 2015_06_10.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat
SOLUTION 3-4 GWM Rettigheim 3 (2015_06_10)

temp	27.6
pH	9.18
pe	-2.3
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	3.6
F	0.6
Cl	3.0
Alkalinity	653
S(6)	84
Li	0.53
Na	289
K	1.6
Ca	1.3
Mg	0.6
Sr	0.005
B	0.92
Si	3.6
Al	0.007
Fe	0.01
Mn	0.03
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. GWM Rettigheim 3 (2015_06_10)

-----Solution composition-----
Elements Molality Moles

Al	2.594e-007	2.594e-007
Alkalinity	1.305e-002	1.305e-002
B	8.511e-005	8.511e-005
Ca	3.244e-005	3.244e-005
Cl	8.462e-005	8.462e-005
F	3.158e-005	3.158e-005
Fe	1.791e-007	1.791e-007
K	4.092e-005	4.092e-005
Li	7.638e-005	7.638e-005
Mg	2.468e-005	2.468e-005
Mn	5.461e-007	5.461e-007
Na	1.257e-002	1.257e-002
S(-2)	1.123e-004	1.123e-004
S(6)	8.744e-004	8.744e-004
Si	5.992e-005	5.992e-005
Sr	5.706e-008	5.706e-008

-----Description of solution-----

pH	=	9.180
pe	=	-2.300
Specific Conductance (uS/cm, 27 oC)	=	1341
Density (g/cm3)	=	0.99718
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	1.551e-002
Mass of water (kg)	=	1.000e+000
Total carbon (mol/kg)	=	1.158e-002
Total CO2 (mol/kg)	=	1.158e-002
Temperature (deg C)	=	27.600
Electrical balance (eq)	=	-2.108e-003
Percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	-7.78
Iterations	=	8
Total H	=	1.110233e+002
Total O	=	5.554496e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-6.0788	-0.3627

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	2.091e-005	1.839e-005	-4.680	-4.735	-0.056
H+	7.355e-010	6.607e-010	-9.133	-9.180	-0.047
H2O	5.551e+001	9.996e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	2.594e-007				
Al(OH)4-	2.594e-007	2.289e-007	-6.586	-6.640	-0.054
Al(OH)3	7.705e-011	7.733e-011	-10.113	-10.112	0.002
Al(OH)2+	3.258e-013	2.875e-013	-12.487	-12.541	-0.054
AlOH+2	3.197e-017	1.939e-017	-16.495	-16.712	-0.217
AlF2+	4.859e-018	4.288e-018	-17.313	-17.368	-0.054
AlF3	1.489e-018	1.494e-018	-17.827	-17.826	0.002
AlF+2	5.041e-019	3.058e-019	-18.297	-18.515	-0.217
AlF4-	1.862e-020	1.643e-020	-19.730	-19.784	-0.054
Al+3	2.863e-021	1.091e-021	-20.543	-20.962	-0.419

AlSO4+	2.081e-021	1.837e-021	-20.682	-20.736	-0.054
Al(SO4)2-	3.430e-023	3.027e-023	-22.465	-22.519	-0.054
AlF5-2	1.179e-023	7.150e-024	-22.929	-23.146	-0.217
AlF6-3	5.775e-028	1.875e-028	-27.238	-27.727	-0.489
AlHSO4+2	1.817e-031	1.102e-031	-30.741	-30.958	-0.217
B	8.511e-005				
H2BO3-	4.335e-005	3.826e-005	-4.363	-4.417	-0.054
H3BO3	4.176e-005	4.191e-005	-4.379	-4.378	0.002
BF(OH)3-	5.361e-010	4.731e-010	-9.271	-9.325	-0.054
BF2(OH)2-	1.045e-015	9.219e-016	-14.981	-15.035	-0.054
BF3OH-	1.994e-023	1.759e-023	-22.700	-22.755	-0.054
BF4-	1.477e-030	1.303e-030	-29.831	-29.885	-0.054
C(4)	1.158e-002				
HCO3-	1.022e-002	9.061e-003	-1.991	-2.043	-0.052
CO3-2	1.094e-003	6.766e-004	-2.961	-3.170	-0.209
NaCO3-	1.769e-004	1.561e-004	-3.752	-3.807	-0.054
NaHCO3	5.523e-005	5.543e-005	-4.258	-4.256	0.002
CO2	1.302e-005	1.307e-005	-4.885	-4.884	0.002
CaCO3	1.270e-005	1.274e-005	-4.896	-4.895	0.002
MgCO3	6.524e-006	6.548e-006	-5.185	-5.184	0.002
CaHCO3+	1.437e-006	1.274e-006	-5.843	-5.895	-0.052
MgHCO3+	1.185e-006	1.046e-006	-5.926	-5.981	-0.054
MnCO3	5.202e-007	5.220e-007	-6.284	-6.282	0.002
FeCO3	9.563e-008	9.597e-008	-7.019	-7.018	0.002
SrCO3	1.127e-008	1.131e-008	-7.948	-7.946	0.002
MnHCO3+	8.888e-009	7.844e-009	-8.051	-8.105	-0.054
FeHCO3+	6.071e-009	5.358e-009	-8.217	-8.271	-0.054
SrHCO3+	4.144e-009	3.675e-009	-8.383	-8.435	-0.052
Ca	3.244e-005				
Ca+2	1.718e-005	1.062e-005	-4.765	-4.974	-0.209
CaCO3	1.270e-005	1.274e-005	-4.896	-4.895	0.002
CaHCO3+	1.437e-006	1.274e-006	-5.843	-5.895	-0.052
CaSO4	1.114e-006	1.117e-006	-5.953	-5.952	0.002
CaF+	3.072e-009	2.711e-009	-8.513	-8.567	-0.054
CaOH+	3.021e-009	2.666e-009	-8.520	-8.574	-0.054
CaHSO4+	5.067e-015	4.472e-015	-14.295	-14.350	-0.054
Cl	8.462e-005				
Cl-	8.462e-005	7.447e-005	-4.073	-4.128	-0.055
MnCl+	3.339e-012	2.947e-012	-11.476	-11.531	-0.054
FeCl+	6.887e-013	6.078e-013	-12.162	-12.216	-0.054
MnCl2	9.544e-017	9.578e-017	-16.020	-16.019	0.002
MnCl3-	2.226e-021	1.965e-021	-20.652	-20.707	-0.054
FeCl+2	1.311e-026	7.954e-027	-25.882	-26.099	-0.217
FeCl2+	2.763e-030	2.438e-030	-29.559	-29.613	-0.054
FeCl3	1.809e-035	1.816e-035	-34.743	-34.741	0.002
F	3.158e-005				
F-	3.138e-005	2.760e-005	-4.503	-4.559	-0.056
NaF	1.722e-007	1.728e-007	-6.764	-6.762	0.002
MgF+	2.110e-008	1.862e-008	-7.676	-7.730	-0.054
CaF+	3.072e-009	2.711e-009	-8.513	-8.567	-0.054
BF(OH)3-	5.361e-010	4.731e-010	-9.271	-9.325	-0.054
HF	2.857e-011	2.867e-011	-10.544	-10.543	0.002
MnF+	2.102e-012	1.855e-012	-11.677	-11.732	-0.054
FeF+	1.850e-012	1.632e-012	-11.733	-11.787	-0.054
HF2-	3.508e-015	3.096e-015	-14.455	-14.509	-0.054
BF2(OH)2-	1.045e-015	9.219e-016	-14.981	-15.035	-0.054
AlF2+	4.859e-018	4.288e-018	-17.313	-17.368	-0.054
AlF3	1.489e-018	1.494e-018	-17.827	-17.826	0.002

AlF+2	5.041e-019	3.058e-019	-18.297	-18.515	-0.217
AlF4-	1.862e-020	1.643e-020	-19.730	-19.784	-0.054
FeF+2	2.445e-022	1.483e-022	-21.612	-21.829	-0.217
FeF2+	1.905e-022	1.681e-022	-21.720	-21.774	-0.054
BF3OH-	1.994e-023	1.759e-023	-22.700	-22.755	-0.054
AlF5-2	1.179e-023	7.150e-024	-22.929	-23.146	-0.217
FeF3	7.392e-024	7.418e-024	-23.131	-23.130	0.002
AlF6-3	5.775e-028	1.875e-028	-27.238	-27.727	-0.489
BF4-	1.477e-030	1.303e-030	-29.831	-29.885	-0.054
SiF6-2	7.825e-039	4.747e-039	-38.106	-38.324	-0.217
Fe (2)	1.668e-007				
FeCO3	9.563e-008	9.597e-008	-7.019	-7.018	0.002
Fe (HS) 2	5.061e-008	5.079e-008	-7.296	-7.294	0.002
Fe+2	9.471e-009	5.913e-009	-8.024	-8.228	-0.205
FeHCO3+	6.071e-009	5.358e-009	-8.217	-8.271	-0.054
FeOH+	3.886e-009	3.430e-009	-8.410	-8.465	-0.054
Fe (HS) 3-	6.152e-010	5.429e-010	-9.211	-9.265	-0.054
FeSO4	5.656e-010	5.676e-010	-9.248	-9.246	0.002
FeF+	1.850e-012	1.632e-012	-11.733	-11.787	-0.054
FeCl+	6.887e-013	6.078e-013	-12.162	-12.216	-0.054
FeHSO4+	2.822e-018	2.490e-018	-17.549	-17.604	-0.054
Fe (3)	1.221e-008				
Fe (OH) 4-	7.741e-009	6.832e-009	-8.111	-8.165	-0.054
Fe (OH) 3	4.448e-009	4.464e-009	-8.352	-8.350	0.002
Fe (OH) 2+	2.320e-011	2.047e-011	-10.635	-10.689	-0.054
FeOH+2	6.109e-017	3.706e-017	-16.214	-16.431	-0.217
FeF+2	2.445e-022	1.483e-022	-21.612	-21.829	-0.217
FeF2+	1.905e-022	1.681e-022	-21.720	-21.774	-0.054
FeSO4+	2.208e-023	1.948e-023	-22.656	-22.710	-0.054
Fe+3	8.554e-024	3.259e-024	-23.068	-23.487	-0.419
FeF3	7.392e-024	7.418e-024	-23.131	-23.130	0.002
Fe (SO4) 2-	2.513e-025	2.217e-025	-24.600	-24.654	-0.054
FeCl+2	1.311e-026	7.954e-027	-25.882	-26.099	-0.217
FeCl2+	2.763e-030	2.438e-030	-29.559	-29.613	-0.054
Fe2 (OH) 2+4	2.454e-031	3.322e-032	-30.610	-31.479	-0.868
FeHSO4+2	5.685e-032	3.448e-032	-31.245	-31.462	-0.217
FeCl3	1.809e-035	1.816e-035	-34.743	-34.741	0.002
Fe3 (OH) 4+5	2.548e-039	1.120e-040	-38.594	-39.951	-1.357
H (0)	2.390e-017				
H2	1.195e-017	1.199e-017	-16.923	-16.921	0.002
K	4.092e-005				
K+	4.076e-005	3.587e-005	-4.390	-4.445	-0.055
KSO4-	1.539e-007	1.358e-007	-6.813	-6.867	-0.054
KOH	1.875e-010	1.882e-010	-9.727	-9.725	0.002
Li	7.638e-005				
Li+	7.621e-005	6.774e-005	-4.118	-4.169	-0.051
LiSO4-	1.725e-007	1.523e-007	-6.763	-6.817	-0.054
LiOH	2.339e-009	2.348e-009	-8.631	-8.629	0.002
Mg	2.468e-005				
Mg+2	1.562e-005	9.744e-006	-4.806	-5.011	-0.205
MgCO3	6.524e-006	6.548e-006	-5.185	-5.184	0.002
MgSO4	1.253e-006	1.257e-006	-5.902	-5.901	0.002
MgHCO3+	1.185e-006	1.046e-006	-5.926	-5.981	-0.054
MgOH+	7.655e-008	6.755e-008	-7.116	-7.170	-0.054
MgF+	2.110e-008	1.862e-008	-7.676	-7.730	-0.054
Mn (2)	5.461e-007				
MnCO3	5.202e-007	5.220e-007	-6.284	-6.282	0.002
Mn+2	1.556e-008	9.713e-009	-7.808	-8.013	-0.205

MnHCO3+	8.888e-009	7.844e-009	-8.051	-8.105	-0.054
MnSO4	9.310e-010	9.343e-010	-9.031	-9.030	0.002
MnOH+	5.281e-010	4.660e-010	-9.277	-9.332	-0.054
MnCl+	3.339e-012	2.947e-012	-11.476	-11.531	-0.054
MnF+	2.102e-012	1.855e-012	-11.677	-11.732	-0.054
MnCl2	9.544e-017	9.578e-017	-16.020	-16.019	0.002
MnCl3-	2.226e-021	1.965e-021	-20.652	-20.707	-0.054
Mn(3)	6.751e-036				
Mn+3	6.751e-036	2.192e-036	-35.171	-35.659	-0.489
Na	1.257e-002				
Na+	1.231e-002	1.088e-002	-1.910	-1.963	-0.054
NaCO3-	1.769e-004	1.561e-004	-3.752	-3.807	-0.054
NaHCO3	5.523e-005	5.543e-005	-4.258	-4.256	0.002
NaSO4-	3.234e-005	2.854e-005	-4.490	-4.545	-0.054
NaF	1.722e-007	1.728e-007	-6.764	-6.762	0.002
NaOH	1.083e-007	1.087e-007	-6.965	-6.964	0.002
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-57.708	-57.706	0.002
S(-2)	1.123e-004				
HS-	1.116e-004	9.817e-005	-3.952	-4.008	-0.056
H2S	5.237e-007	5.256e-007	-6.281	-6.279	0.002
Fe(HS)2	5.061e-008	5.079e-008	-7.296	-7.294	0.002
S-2	3.485e-008	2.141e-008	-7.458	-7.669	-0.212
Fe(HS)3-	6.152e-010	5.429e-010	-9.211	-9.265	-0.054
S(6)	8.744e-004				
SO4-2	8.394e-004	5.150e-004	-3.076	-3.288	-0.212
NaSO4-	3.234e-005	2.854e-005	-4.490	-4.545	-0.054
MgSO4	1.253e-006	1.257e-006	-5.902	-5.901	0.002
CaSO4	1.114e-006	1.117e-006	-5.953	-5.952	0.002
LiSO4-	1.725e-007	1.523e-007	-6.763	-6.817	-0.054
KSO4-	1.539e-007	1.358e-007	-6.813	-6.867	-0.054
SrSO4	2.502e-009	2.511e-009	-8.602	-8.600	0.002
MnSO4	9.310e-010	9.343e-010	-9.031	-9.030	0.002
FeSO4	5.656e-010	5.676e-010	-9.248	-9.246	0.002
HSO4-	3.969e-011	3.503e-011	-10.401	-10.456	-0.054
CaHSO4+	5.067e-015	4.472e-015	-14.295	-14.350	-0.054
FeHSO4+	2.822e-018	2.490e-018	-17.549	-17.604	-0.054
AlSO4+	2.081e-021	1.837e-021	-20.682	-20.736	-0.054
Al(SO4)2-	3.430e-023	3.027e-023	-22.465	-22.519	-0.054
FeSO4+	2.208e-023	1.948e-023	-22.656	-22.710	-0.054
Fe(SO4)2-	2.513e-025	2.217e-025	-24.600	-24.654	-0.054
AlHSO4+2	1.817e-031	1.102e-031	-30.741	-30.958	-0.217
FeHSO4+2	5.685e-032	3.448e-032	-31.245	-31.462	-0.217
Si	5.992e-005				
H4SiO4	4.690e-005	4.707e-005	-4.329	-4.327	0.002
H3SiO4-	1.301e-005	1.148e-005	-4.886	-4.940	-0.054
H2SiO4-2	2.302e-009	1.397e-009	-8.638	-8.855	-0.217
SiF6-2	7.825e-039	4.747e-039	-38.106	-38.324	-0.217
Sr	5.706e-008				
Sr+2	3.914e-008	2.426e-008	-7.407	-7.615	-0.208
SrCO3	1.127e-008	1.131e-008	-7.948	-7.946	0.002
SrHCO3+	4.144e-009	3.675e-009	-8.383	-8.435	-0.052
SrSO4	2.502e-009	2.511e-009	-8.602	-8.600	0.002
SrOH+	2.126e-012	1.882e-012	-11.672	-11.725	-0.053

-----Saturation indices-----

Phase SI log IAP log KT

Al(OH)3(a)	-4.05	6.58	10.63	Al(OH)3
Albite	-3.75	-21.58	-17.84	NaAlSi3O8
Alunite	-17.11	-18.83	-1.72	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-3.89	-8.26	-4.37	CaSO4
Anorthite	-7.27	-26.91	-19.64	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.21	-8.14	-8.35	CaCO3
Ca-Montmorillonite	-5.87	-50.53	-44.66	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	0.35	-8.14	-8.49	CaCO3
Celestite	-4.26	-10.90	-6.64	SrSO4
Chalcedony	-0.81	-4.33	-3.52	SiO2
Chlorite(14A)	-0.50	66.92	67.42	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-0.49	31.39	31.88	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-3.39	-4.88	-1.50	CO2
Dolomite	0.83	-16.32	-17.15	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	-0.84	4.05	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	0.86	-3.06	-3.92	FeS
Fluorite	-3.52	-14.09	-10.57	CaF2
Gibbsite	-1.39	6.58	7.97	Al(OH)3
Goethite	5.14	4.05	-1.09	FeOOH
Gypsum	-3.68	-8.26	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-13.76	-16.92	-3.16	H2
H2O(g)	-1.44	-0.00	1.44	H2O
H2S(g)	-5.25	-6.28	-1.03	H2S
Halite	-7.68	-6.09	1.59	NaCl
Hausmannite	-15.59	44.80	60.39	Mn3O4
Hematite	12.31	8.11	-4.20	Fe2O3
Illite	-5.43	-45.35	-39.92	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-17.00	-26.40	-9.41	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-3.69	-24.07	-20.38	KAlSi3O8
K-mica	-0.84	11.49	12.33	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	-2.71	4.50	7.21	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	1.59	-3.06	-4.65	FeS
Manganite	-8.11	17.23	25.34	MnOOH
Melanterite	-9.34	-11.52	-2.18	FeSO4:7H2O
O2(g)	-54.80	-57.71	-2.91	O2
Pyrite	15.92	-2.48	-18.41	FeS2
Pyrochroite	-4.85	10.35	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-16.86	24.11	40.97	MnO2
Quartz	-0.38	-4.33	-3.94	SiO2
Rhodochrosite	-0.04	-11.18	-11.14	MnCO3
Sepiolite	-1.98	13.72	15.69	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-4.94	13.72	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	-0.49	-11.40	-10.91	FeCO3
SiO2(a)	-1.64	-4.33	-2.69	SiO2
Strontianite	-1.51	-10.78	-9.27	SrCO3
Sulfur	2.66	7.48	4.82	S
Talc	1.63	22.74	21.11	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Wasserprobe: Karl-Siegel-Quelle

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\Karl-Siegel-Quelle (Vers2).pgi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\Karl-Siegel-Quelle (Vers2).pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 1-2 Karl-Siegel-Quelle 2002_06_03

temp 48.5
pH 6.2
pe -7
redox pe
units mg/kgw
density 1
O(0) 1.1
Alkalinity 500
F 2.3
Cl 21130
S(6) 1850
N(5) 9
N(3) 0
Li 38
Na 12240
K 482
Ca 1660
Mg 200
water 1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 1. Karl-Siegel-Quelle 2002_06_03

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Alkalinity	9.991e-003	9.991e-003
Ca	4.142e-002	4.142e-002
Cl	5.960e-001	5.960e-001

F	1.211e-004	1.211e-004
K	1.233e-002	1.233e-002
Li	5.476e-003	5.476e-003
Mg	8.226e-003	8.226e-003
N(5)	6.425e-004	6.425e-004
Na	5.324e-001	5.324e-001
O(0)	6.875e-005	6.875e-005
S(6)	1.926e-002	1.926e-002

-----Description of solution-----

pH	=	6.200
pe	=	-7.000
Specific Conductance (uS/cm, 48 oC)	=	86498
Density (g/cm3)	=	1.01477
Activity of water	=	0.979
Ionic strength	=	6.858e-001
Mass of water (kg)	=	1.000e+000
Total carbon (mol/kg)	=	1.545e-002
Total CO2 (mol/kg)	=	1.545e-002
Temperature (deg C)	=	48.500
Electrical balance (eq)	=	4.229e-003
Percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	0.33
Iterations	=	7
Total H	=	1.110611e+002
Total O	=	5.562611e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
O(-2)/O(0)	12.4212	0.7927

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	8.450e-007	6.310e-007	-6.073	-6.200	-0.127
OH-	1.264e-007	7.536e-008	-6.898	-7.123	-0.225
H2O	5.551e+001	9.789e-001	1.744	-0.009	0.000
C(4)	1.545e-002				
HCO3-	7.760e-003	5.158e-003	-2.110	-2.288	-0.177
CO2	5.490e-003	6.429e-003	-2.260	-2.192	0.069
CaHCO3+	1.084e-003	7.205e-004	-2.965	-3.142	-0.177
NaHCO3	9.056e-004	1.060e-003	-3.043	-2.975	0.069
MgHCO3+	1.798e-004	1.328e-004	-3.745	-3.877	-0.132
NaCO3-	1.493e-005	1.102e-005	-4.826	-4.958	-0.132
CaCO3	1.254e-005	1.468e-005	-4.902	-4.833	0.069
CO3-2	2.765e-006	5.396e-007	-5.558	-6.268	-0.710
MgCO3	1.188e-006	1.391e-006	-5.925	-5.857	0.069
Ca	4.142e-002				
Ca+2	3.721e-002	8.739e-003	-1.429	-2.059	-0.629
CaSO4	3.097e-003	3.627e-003	-2.509	-2.440	0.069
CaHCO3+	1.084e-003	7.205e-004	-2.965	-3.142	-0.177
CaCO3	1.254e-005	1.468e-005	-4.902	-4.833	0.069
CaF+	9.097e-006	6.718e-006	-5.041	-5.173	-0.132

	CaHSO4+	2.585e-008	1.909e-008	-7.588	-7.719	-0.132
	CaOH+	3.047e-009	2.250e-009	-8.516	-8.648	-0.132
Cl		5.960e-001				
	Cl-	5.960e-001	3.638e-001	-0.225	-0.439	-0.214
F		1.211e-004				
	F-	8.908e-005	5.311e-005	-4.050	-4.275	-0.225
	MgF+	1.328e-005	9.804e-006	-4.877	-5.009	-0.132
	NaF	9.541e-006	1.117e-005	-5.020	-4.952	0.069
	CaF+	9.097e-006	6.718e-006	-5.041	-5.173	-0.132
	HF	6.678e-008	7.820e-008	-7.175	-7.107	0.069
	HF2-	2.430e-011	1.795e-011	-10.614	-10.746	-0.132
H(0)		3.875e-002				
	H2	1.937e-002	2.269e-002	-1.713	-1.644	0.069
K		1.233e-002				
	K+	1.215e-002	7.418e-003	-1.915	-2.130	-0.214
	KSO4-	1.752e-004	1.294e-004	-3.756	-3.888	-0.132
	KOH	3.408e-011	3.991e-011	-10.468	-10.399	0.069
Li		5.476e-003				
	Li+	5.439e-003	3.708e-003	-2.264	-2.431	-0.166
	LiSO4-	3.721e-005	2.748e-005	-4.429	-4.561	-0.132
	LiOH	1.126e-010	1.318e-010	-9.949	-9.880	0.069
Mg		8.226e-003				
	Mg+2	6.911e-003	1.883e-003	-2.160	-2.725	-0.565
	MgSO4	1.121e-003	1.313e-003	-2.950	-2.882	0.069
	MgHCO3+	1.798e-004	1.328e-004	-3.745	-3.877	-0.132
	MgF+	1.328e-005	9.804e-006	-4.877	-5.009	-0.132
	MgCO3	1.188e-006	1.391e-006	-5.925	-5.857	0.069
	MgOH+	1.027e-007	7.584e-008	-6.988	-7.120	-0.132
N(5)		6.425e-004				
	NO3-	6.425e-004	3.684e-004	-3.192	-3.434	-0.242
Na		5.324e-001				
	Na+	5.266e-001	3.656e-001	-0.278	-0.437	-0.158
	NaSO4-	4.836e-003	3.571e-003	-2.316	-2.447	-0.132
	NaHCO3	9.056e-004	1.060e-003	-3.043	-2.975	0.069
	NaCO3-	1.493e-005	1.102e-005	-4.826	-4.958	-0.132
	NaF	9.541e-006	1.117e-005	-5.020	-4.952	0.069
	NaOH	3.200e-009	3.748e-009	-8.495	-8.426	0.069
O(0)		6.875e-005				
	O2	3.438e-005	4.026e-005	-4.464	-4.395	0.069
S(6)		1.926e-002				
	SO4-2	9.991e-003	1.697e-003	-2.000	-2.770	-0.770
	NaSO4-	4.836e-003	3.571e-003	-2.316	-2.447	-0.132
	CaSO4	3.097e-003	3.627e-003	-2.509	-2.440	0.069
	MgSO4	1.121e-003	1.313e-003	-2.950	-2.882	0.069
	KSO4-	1.752e-004	1.294e-004	-3.756	-3.888	-0.132
	LiSO4-	3.721e-005	2.748e-005	-4.429	-4.561	-0.132
	HSO4-	2.460e-007	1.817e-007	-6.609	-6.741	-0.132
	CaHSO4+	2.585e-008	1.909e-008	-7.588	-7.719	-0.132

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-0.29	-4.83	-4.54	CaSO4
Aragonite	0.19	-8.33	-8.52	CaCO3
Calcite	0.32	-8.33	-8.65	CaCO3
CO2(g)	-0.49	-2.19	-1.70	CO2
Dolomite	0.28	-17.32	-17.60	CaMg(CO3)2

Fluorite	-0.23	-10.61	-10.38	CaF2
Gypsum	-0.23	-4.85	-4.62	CaSO4:2H2O
H2(g)	1.60	-1.64	-3.24	H2
H2O(g)	-0.96	-0.01	0.95	H2O
Halite	-2.51	-0.88	1.63	NaCl
O2(g)	-1.37	-4.40	-3.02	O2

 End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Wasserprobe: Lambertusquelle

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\Lambertusquelle.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\Lambertusquelle.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 2-3 Lambertusquelle 2003_03_14

temp	43
pH	6
pe	4
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
F	2.9
Cl	15600
C(4)	562
S(6)	1881
N(5)	0.3
Li	35
Na	9310
K	404
Ca	1160
Mg	123
Sr	39
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 2. Lambertusquelle 2003_03_14

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
C(4)	9.210e-003	9.210e-003
Ca	2.894e-002	2.894e-002

Cl	4.400e-001	4.400e-001
F	1.526e-004	1.526e-004
K	1.033e-002	1.033e-002
Li	5.044e-003	5.044e-003
Mg	5.059e-003	5.059e-003
N(5)	2.142e-005	2.142e-005
Na	4.050e-001	4.050e-001
S(6)	1.958e-002	1.958e-002
Sr	4.451e-004	4.451e-004

-----Description of solution-----

pH = 6.000
 pe = 4.000
 Specific Conductance (uS/cm, 43 oC) = 62738
 Density (g/cm3) = 1.01108
 Activity of water = 0.984
 Ionic strength = 5.149e-001
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total alkalinity (eq/kg) = 4.619e-003
 Total CO2 (mol/kg) = 9.210e-003
 Temperature (deg C) = 43.000
 Electrical balance (eq) = 5.257e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = 0.56
 Iterations = 10
 Total H = 1.110170e+002
 Total O = 5.560764e+001

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	1.319e-006	1.000e-006	-5.880	-6.000	-0.120
OH-	5.490e-008	3.415e-008	-7.260	-7.467	-0.206
H2O	5.551e+001	9.845e-001	1.744	-0.007	0.000
C(4)	9.210e-003				
CO2	4.596e-003	5.174e-003	-2.338	-2.286	0.051
HCO3-	3.805e-003	2.600e-003	-2.420	-2.585	-0.165
CaHCO3+	3.745e-004	2.559e-004	-3.427	-3.592	-0.165
NaHCO3	3.634e-004	4.092e-004	-3.440	-3.388	0.051
MgHCO3+	5.486e-005	3.986e-005	-4.261	-4.399	-0.139
SrHCO3+	1.036e-005	7.081e-006	-4.984	-5.150	-0.165
NaCO3~	2.734e-006	1.987e-006	-5.563	-5.702	-0.139
CaCO3	2.423e-006	2.728e-006	-5.616	-5.564	0.051
CO3-2	7.432e-007	1.619e-007	-6.129	-6.791	-0.662
MgCO3	2.123e-007	2.390e-007	-6.673	-6.622	0.051
SrCO3	1.502e-008	1.691e-008	-7.823	-7.772	0.051
Ca	2.894e-002				
Ca+2	2.571e-002	6.376e-003	-1.590	-2.195	-0.606
CaSO4	2.843e-003	3.201e-003	-2.546	-2.495	0.051
CaHCO3+	3.745e-004	2.559e-004	-3.427	-3.592	-0.165
CaF+	8.617e-006	6.262e-006	-5.065	-5.203	-0.139
CaCO3	2.423e-006	2.728e-006	-5.616	-5.564	0.051
CaHSO4+	3.349e-008	2.434e-008	-7.475	-7.614	-0.139
CaOH+	1.434e-009	1.042e-009	-8.844	-8.982	-0.139
Cl	4.400e-001				
Cl-	4.400e-001	2.786e-001	-0.357	-0.555	-0.199

F	1.526e-004					
F-	1.220e-004	7.589e-005	-3.914	-4.120	-0.206	
MgF+	1.101e-005	7.999e-006	-4.958	-5.097	-0.139	
NaF	1.086e-005	1.222e-005	-4.964	-4.913	0.051	
CaF+	8.617e-006	6.262e-006	-5.065	-5.203	-0.139	
HF	1.414e-007	1.592e-007	-6.850	-6.798	0.051	
HF2-	7.062e-011	5.132e-011	-10.151	-10.290	-0.139	
H(0)	1.062e-023					
H2	5.310e-024	5.979e-024	-23.275	-23.223	0.051	
K	1.033e-002					
K+	1.015e-002	6.428e-003	-1.993	-2.192	-0.199	
KSO4-	1.795e-004	1.304e-004	-3.746	-3.885	-0.139	
KOH	1.949e-011	2.194e-011	-10.710	-10.659	0.051	
Li	5.044e-003					
Li+	4.999e-003	3.493e-003	-2.301	-2.457	-0.156	
LiSO4-	4.505e-005	3.274e-005	-4.346	-4.485	-0.139	
LiOH	6.996e-011	7.877e-011	-10.155	-10.104	0.051	
Mg	5.059e-003					
Mg+2	4.181e-003	1.173e-003	-2.379	-2.931	-0.552	
MgSO4	8.120e-004	9.142e-004	-3.090	-3.039	0.051	
MgHCO3+	5.486e-005	3.986e-005	-4.261	-4.399	-0.139	
MgF+	1.101e-005	7.999e-006	-4.958	-5.097	-0.139	
MgCO3	2.123e-007	2.390e-007	-6.673	-6.622	0.051	
MgOH+	2.672e-008	1.942e-008	-7.573	-7.712	-0.139	
N(5)	2.142e-005					
NO3-	2.142e-005	1.289e-005	-4.669	-4.890	-0.221	
Na	4.050e-001					
Na+	4.000e-001	2.799e-001	-0.398	-0.553	-0.155	
NaSO4-	4.616e-003	3.354e-003	-2.336	-2.474	-0.139	
NaHCO3	3.634e-004	4.092e-004	-3.440	-3.388	0.051	
NaF	1.086e-005	1.222e-005	-4.964	-4.913	0.051	
NaCO3-	2.734e-006	1.987e-006	-5.563	-5.702	-0.139	
NaOH	1.617e-009	1.820e-009	-8.791	-8.740	0.051	
O(0)	0.000e+000					
O2	0.000e+000	0.000e+000	-40.520	-40.468	0.051	
S(6)	1.958e-002					
SO4-2	1.104e-002	2.147e-003	-1.957	-2.668	-0.711	
NaSO4-	4.616e-003	3.354e-003	-2.336	-2.474	-0.139	
CaSO4	2.843e-003	3.201e-003	-2.546	-2.495	0.051	
MgSO4	8.120e-004	9.142e-004	-3.090	-3.039	0.051	
KSO4-	1.795e-004	1.304e-004	-3.746	-3.885	-0.139	
LiSO4-	4.505e-005	3.274e-005	-4.346	-4.485	-0.139	
SrSO4	4.367e-005	4.916e-005	-4.360	-4.308	0.051	
HSO4-	4.369e-007	3.175e-007	-6.360	-6.498	-0.139	
CaHSO4+	3.349e-008	2.434e-008	-7.475	-7.614	-0.139	
Sr	4.451e-004					
Sr+2	3.911e-004	9.615e-005	-3.408	-4.017	-0.609	
SrSO4	4.367e-005	4.916e-005	-4.360	-4.308	0.051	
SrHCO3+	1.036e-005	7.081e-006	-4.984	-5.150	-0.165	
SrCO3	1.502e-008	1.691e-008	-7.823	-7.772	0.051	
SrOH+	7.224e-012	4.855e-012	-11.141	-11.314	-0.173	

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-0.38	-4.86	-4.48	CaSO4
Aragonite	-0.51	-8.99	-8.47	CaCO3

Calcite	-0.38	-8.99	-8.60	CaCO3
Celestite	0.02	-6.69	-6.70	SrSO4
CO2(g)	-0.63	-2.29	-1.65	CO2
Dolomite	-1.22	-18.71	-17.48	CaMg(CO3)2
Fluorite	-0.01	-10.44	-10.42	CaF2
Gypsum	-0.27	-4.88	-4.60	CaSO4:2H2O
H2(g)	-20.00	-23.22	-3.22	H2
H2O(g)	-1.08	-0.01	1.07	H2O
Halite	-2.73	-1.11	1.62	NaCl
O2(g)	-37.47	-40.47	-3.00	O2
Strontianite	-1.48	-10.81	-9.33	SrCO3

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Wasserprobe: St. Ludwigsbrunnen

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\St. Ludwigsbrunnen.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\St. Ludwigsbrunnen.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 St.Ludwigsbrunnen 1993_03_18

temp	22.4
pH	7.6
pe	4
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
Al	0.001
B	0.001
S(-2)	17.9
F	1.4
Fe	0.001
Cl	75
Alkalinity	891
S(6)	64
N(3)	0.02
Li	0.1
Na	400
K	4.3
Ca	8.8
Mg	6.8
Mn	0.001
Sr	1.4
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. St.Ludwigsbrunnen 1993_03_18

-----Solution composition-----

-

Elements	Molality	Moles
Al	3.706e-008	3.706e-008
Alkalinity	1.780e-002	1.780e-002
B	9.251e-008	9.251e-008
Ca	2.196e-004	2.196e-004
Cl	2.115e-003	2.115e-003
F	7.369e-005	7.369e-005
Fe	1.791e-008	1.791e-008
K	1.100e-004	1.100e-004
Li	1.441e-005	1.441e-005
Mg	2.797e-004	2.797e-004
Mn	1.820e-008	1.820e-008
N(3)	1.428e-006	1.428e-006
Na	1.740e-002	1.740e-002
S(-2)	5.583e-004	5.583e-004
S(6)	6.662e-004	6.662e-004
Sr	1.598e-005	1.598e-005

-----Description of solution-----

-

pH = 7.600
 pe = 4.000
 Specific Conductance (uS/cm, 22 oC) = 1696
 Density (g/cm3) = 0.99888
 Activity of water = 0.999
 Ionic strength = 2.077e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 1.815e-002
 Total CO2 (mol/kg) = 1.815e-002
 Temperature (deg C) = 22.400
 Electrical balance (eq) = -2.773e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -7.05
 Iterations = 8
 Total H = 1.110303e+002
 Total O = 5.556246e+001

-----Redox couples-----

-

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-4.3014	-0.2522

-----Distribution of species-----

-

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	3.770e-007	3.263e-007	-6.424	-6.486	-0.063
H+	2.827e-008	2.512e-008	-7.549	-7.600	-0.051
H2O	5.551e+001	9.993e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	3.706e-008				

Al(OH)4-	3.648e-008	3.172e-008	-7.438	-7.499	-0.061
Al(OH)3	4.354e-010	4.374e-010	-9.361	-9.359	0.002
Al(OH)2+	1.043e-010	9.066e-011	-9.982	-10.043	-0.061
AlF2+	2.417e-011	2.102e-011	-10.617	-10.677	-0.061
AlF3	1.647e-011	1.655e-011	-10.783	-10.781	0.002
AlF+2	1.186e-012	6.779e-013	-11.926	-12.169	-0.243
AlOH+2	6.404e-013	3.661e-013	-12.194	-12.436	-0.243
AlF4-	4.748e-013	4.128e-013	-12.324	-12.384	-0.061
Al+3	3.178e-015	1.098e-015	-14.498	-14.959	-0.461
AlSO4+	1.378e-015	1.198e-015	-14.861	-14.921	-0.061
AlF5-2	7.215e-016	4.125e-016	-15.142	-15.385	-0.243
Al(SO4)2-	1.537e-017	1.337e-017	-16.813	-16.874	-0.061
AlF6-3	9.589e-020	2.725e-020	-19.018	-19.565	-0.546
AlHSO4+2	4.567e-024	2.611e-024	-23.340	-23.583	-0.243
B	9.251e-008				
H3BO3	9.023e-008	9.066e-008	-7.045	-7.043	0.002
H2BO3-	2.277e-009	1.980e-009	-8.643	-8.703	-0.061
BF(OH)3-	2.532e-012	2.202e-012	-11.596	-11.657	-0.061
BF2(OH)2-	4.292e-016	3.732e-016	-15.367	-15.428	-0.061
BF3OH-	7.782e-022	6.767e-022	-21.109	-21.170	-0.061
BF4-	5.014e-027	4.360e-027	-26.300	-26.361	-0.061
C(4)	1.815e-002				
HCO3-	1.704e-002	1.490e-002	-1.768	-1.827	-0.058
CO2	8.673e-004	8.714e-004	-3.062	-3.060	0.002
NaHCO3	1.252e-004	1.258e-004	-3.902	-3.900	0.002
CO3-2	4.506e-005	2.636e-005	-4.346	-4.579	-0.233
MgHCO3+	2.782e-005	2.419e-005	-4.556	-4.616	-0.061
CaHCO3+	2.255e-005	1.972e-005	-4.647	-4.705	-0.058
NaCO3-	7.424e-006	6.456e-006	-5.129	-5.190	-0.061
CaCO3	4.534e-006	4.556e-006	-5.344	-5.341	0.002
MgCO3	3.372e-006	3.388e-006	-5.472	-5.470	0.002
SrHCO3+	1.881e-006	1.645e-006	-5.726	-5.784	-0.058
SrCO3	1.223e-007	1.229e-007	-6.913	-6.910	0.002
MnCO3	7.062e-009	7.095e-009	-8.151	-8.149	0.002
MnHCO3+	5.177e-009	4.502e-009	-8.286	-8.347	-0.061
FeHCO3+	1.841e-010	1.601e-010	-9.735	-9.796	-0.061
FeCO3	6.760e-011	6.792e-011	-10.170	-10.168	0.002
Ca	2.196e-004				
Ca+2	1.849e-004	1.081e-004	-3.733	-3.966	-0.233
CaHCO3+	2.255e-005	1.972e-005	-4.647	-4.705	-0.058
CaSO4	7.482e-006	7.518e-006	-5.126	-5.124	0.002
CaCO3	4.534e-006	4.556e-006	-5.344	-5.341	0.002
CaF+	6.390e-008	5.556e-008	-7.195	-7.255	-0.061
CaOH+	8.212e-010	7.140e-010	-9.086	-9.146	-0.061
CaHSO4+	1.233e-012	1.072e-012	-11.909	-11.970	-0.061
Cl	2.115e-003				
Cl-	2.115e-003	1.832e-003	-2.675	-2.737	-0.062
MnCl+	2.910e-011	2.530e-011	-10.536	-10.597	-0.061
FeCl+	3.125e-013	2.717e-013	-12.505	-12.566	-0.061
MnCl2	2.014e-014	2.024e-014	-13.696	-13.694	0.002
MnCl3-	1.175e-017	1.021e-017	-16.930	-16.991	-0.061
FeCl+2	7.915e-021	4.525e-021	-20.102	-20.344	-0.243
FeCl2+	4.628e-023	4.025e-023	-22.335	-22.395	-0.061
FeCl3	7.339e-027	7.375e-027	-26.134	-26.132	0.002
F	7.369e-005				
F-	7.245e-005	6.271e-005	-4.140	-4.203	-0.063
MgF+	6.371e-007	5.540e-007	-6.196	-6.257	-0.061
NaF	5.392e-007	5.418e-007	-6.268	-6.266	0.002

CaF+	6.390e-008	5.556e-008	-7.195	-7.255	-0.061
HF	2.244e-009	2.255e-009	-8.649	-8.647	0.002
AlF2+	2.417e-011	2.102e-011	-10.617	-10.677	-0.061
AlF3	1.647e-011	1.655e-011	-10.783	-10.781	0.002
BF(OH)3-	2.532e-012	2.202e-012	-11.596	-11.657	-0.061
MnF+	1.691e-012	1.470e-012	-11.772	-11.833	-0.061
AlF+2	1.186e-012	6.779e-013	-11.926	-12.169	-0.243
HF2-	6.110e-013	5.313e-013	-12.214	-12.275	-0.061
AlF4-	4.748e-013	4.128e-013	-12.324	-12.384	-0.061
FeF+	7.747e-014	6.736e-014	-13.111	-13.172	-0.061
AlF5-2	7.215e-016	4.125e-016	-15.142	-15.385	-0.243
BF2(OH)2-	4.292e-016	3.732e-016	-15.367	-15.428	-0.061
FeF2+	2.361e-017	2.053e-017	-16.627	-16.688	-0.061
FeF+2	1.484e-017	8.484e-018	-16.829	-17.071	-0.243
FeF3	2.013e-018	2.022e-018	-17.696	-17.694	0.002
AlF6-3	9.589e-020	2.725e-020	-19.018	-19.565	-0.546
BF3OH-	7.782e-022	6.767e-022	-21.109	-21.170	-0.061
BF4-	5.014e-027	4.360e-027	-26.300	-26.361	-0.061
Fe(2)	1.654e-008				
Fe(HS)2	1.532e-008	1.540e-008	-7.815	-7.813	0.002
Fe(HS)3-	7.731e-010	6.723e-010	-9.112	-9.172	-0.061
FeHCO3+	1.841e-010	1.601e-010	-9.735	-9.796	-0.061
Fe+2	1.815e-010	1.074e-010	-9.741	-9.969	-0.228
FeCO3	6.760e-011	6.792e-011	-10.170	-10.168	0.002
FeSO4	6.471e-012	6.502e-012	-11.189	-11.187	0.002
FeOH+	1.278e-012	1.111e-012	-11.894	-11.954	-0.061
FeCl+	3.125e-013	2.717e-013	-12.505	-12.566	-0.061
FeF+	7.747e-014	6.736e-014	-13.111	-13.172	-0.061
FeHSO4+	1.225e-018	1.065e-018	-17.912	-17.973	-0.061
Fe(3)	1.370e-009				
Fe(OH)3	1.061e-009	1.066e-009	-8.974	-8.972	0.002
Fe(OH)2+	2.683e-010	2.333e-010	-9.571	-9.632	-0.061
Fe(OH)4-	4.004e-011	3.482e-011	-10.397	-10.458	-0.061
FeOH+2	3.421e-014	1.956e-014	-13.466	-13.709	-0.243
FeF2+	2.361e-017	2.053e-017	-16.627	-16.688	-0.061
FeF+2	1.484e-017	8.484e-018	-16.829	-17.071	-0.243
FeF3	2.013e-018	2.022e-018	-17.696	-17.694	0.002
FeSO4+	3.775e-019	3.283e-019	-18.423	-18.484	-0.061
Fe+3	2.571e-019	8.886e-020	-18.590	-19.051	-0.461
FeCl+2	7.915e-021	4.525e-021	-20.102	-20.344	-0.243
Fe(SO4)2-	2.919e-021	2.538e-021	-20.535	-20.595	-0.061
FeCl2+	4.628e-023	4.025e-023	-22.335	-22.395	-0.061
Fe2(OH)2+4	1.074e-025	1.147e-026	-24.969	-25.940	-0.971
FeHSO4+2	3.870e-026	2.212e-026	-25.412	-25.655	-0.243
FeCl3	7.339e-027	7.375e-027	-26.134	-26.132	0.002
Fe3(OH)4+5	2.347e-032	7.124e-034	-31.630	-33.147	-1.518
H(0)	9.126e-027				
H2	4.563e-027	4.585e-027	-26.341	-26.339	0.002
K	1.100e-004				
K+	1.097e-004	9.503e-005	-3.960	-4.022	-0.062
KSO4-	2.619e-007	2.277e-007	-6.582	-6.643	-0.061
KOH	1.305e-011	1.311e-011	-10.885	-10.882	0.002
Li	1.441e-005				
Li+	1.439e-005	1.262e-005	-4.842	-4.899	-0.057
LiSO4-	2.262e-008	1.967e-008	-7.645	-7.706	-0.061
LiOH	1.145e-011	1.150e-011	-10.941	-10.939	0.002
Mg	2.797e-004				
Mg+2	2.369e-004	1.402e-004	-3.625	-3.853	-0.228

MgHCO3+	2.782e-005	2.419e-005	-4.556	-4.616	-0.061
MgSO4	1.092e-005	1.097e-005	-4.962	-4.960	0.002
MgCO3	3.372e-006	3.388e-006	-5.472	-5.470	0.002
MgF+	6.371e-007	5.540e-007	-6.196	-6.257	-0.061
MgOH+	1.838e-008	1.598e-008	-7.736	-7.796	-0.061
Mn(2)	1.820e-008				
MnCO3	7.062e-009	7.095e-009	-8.151	-8.149	0.002
Mn+2	5.726e-009	3.389e-009	-8.242	-8.470	-0.228
MnHCO3+	5.177e-009	4.502e-009	-8.286	-8.347	-0.061
MnSO4	2.037e-010	2.047e-010	-9.691	-9.689	0.002
MnCl+	2.910e-011	2.530e-011	-10.536	-10.597	-0.061
MnOH+	3.219e-012	2.799e-012	-11.492	-11.553	-0.061
MnF+	1.691e-012	1.470e-012	-11.772	-11.833	-0.061
MnCl2	2.014e-014	2.024e-014	-13.696	-13.694	0.002
MnCl3-	1.175e-017	1.021e-017	-16.930	-16.991	-0.061
Mn(3)	2.513e-030				
Mn+3	2.513e-030	7.141e-031	-29.600	-30.146	-0.546
N(3)	1.428e-006				
NO2-	1.428e-006	1.232e-006	-5.845	-5.909	-0.064
Na	1.740e-002				
Na+	1.724e-002	1.501e-002	-1.764	-1.823	-0.060
NaHCO3	1.252e-004	1.258e-004	-3.902	-3.900	0.002
NaSO4-	3.039e-005	2.643e-005	-4.517	-4.578	-0.061
NaCO3-	7.424e-006	6.456e-006	-5.129	-5.190	-0.061
NaF	5.392e-007	5.418e-007	-6.268	-6.266	0.002
NaOH	3.928e-009	3.947e-009	-8.406	-8.404	0.002
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-40.552	-40.550	0.002
S(-2)	5.583e-004				
HS-	4.633e-004	4.010e-004	-3.334	-3.397	-0.063
H2S	9.494e-005	9.540e-005	-4.023	-4.020	0.002
Fe(HS)2	1.532e-008	1.540e-008	-7.815	-7.813	0.002
S-2	2.777e-009	1.611e-009	-8.556	-8.793	-0.236
Fe(HS)3-	7.731e-010	6.723e-010	-9.112	-9.172	-0.061
S(6)	6.662e-004				
SO4-2	6.166e-004	3.571e-004	-3.210	-3.447	-0.237
NaSO4-	3.039e-005	2.643e-005	-4.517	-4.578	-0.061
MgSO4	1.092e-005	1.097e-005	-4.962	-4.960	0.002
CaSO4	7.482e-006	7.518e-006	-5.126	-5.124	0.002
SrSO4	5.299e-007	5.325e-007	-6.276	-6.274	0.002
KSO4-	2.619e-007	2.277e-007	-6.582	-6.643	-0.061
LiSO4-	2.262e-008	1.967e-008	-7.645	-7.706	-0.061
HSO4-	9.481e-010	8.244e-010	-9.023	-9.084	-0.061
MnSO4	2.037e-010	2.047e-010	-9.691	-9.689	0.002
FeSO4	6.471e-012	6.502e-012	-11.189	-11.187	0.002
CaHSO4+	1.233e-012	1.072e-012	-11.909	-11.970	-0.061
AlSO4+	1.378e-015	1.198e-015	-14.861	-14.921	-0.061
Al(SO4)2-	1.537e-017	1.337e-017	-16.813	-16.874	-0.061
FeHSO4+	1.225e-018	1.065e-018	-17.912	-17.973	-0.061
FeSO4+	3.775e-019	3.283e-019	-18.423	-18.484	-0.061
Fe(SO4)2-	2.919e-021	2.538e-021	-20.535	-20.595	-0.061
AlHSO4+2	4.567e-024	2.611e-024	-23.340	-23.583	-0.243
FeHSO4+2	3.870e-026	2.212e-026	-25.412	-25.655	-0.243
Sr	1.598e-005				
Sr+2	1.344e-005	7.888e-006	-4.871	-5.103	-0.232
SrHCO3+	1.881e-006	1.645e-006	-5.726	-5.784	-0.058
SrSO4	5.299e-007	5.325e-007	-6.276	-6.274	0.002
SrCO3	1.223e-007	1.229e-007	-6.913	-6.910	0.002

SrOH+ 1.844e-011 1.609e-011 -10.734 -10.793 -0.059

-----Saturation indices-----

-

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-3.13	7.84	10.97	Al(OH)3
Alunite	-9.12	-10.20	-1.08	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-3.06	-7.41	-4.35	CaSO4
Aragonite	-0.23	-8.55	-8.32	CaCO3
Calcite	-0.08	-8.55	-8.47	CaCO3
Celestite	-1.92	-8.55	-6.63	SrSO4
CO2(g)	-1.62	-3.06	-1.44	CO2
Dolomite	0.05	-16.98	-17.03	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	-1.14	3.75	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-1.85	-5.77	-3.92	FeS
Fluorite	-1.74	-12.37	-10.63	CaF2
Gibbsite	-0.42	7.84	8.26	Al(OH)3
Goethite	4.65	3.75	-0.91	FeOOH
Gypsum	-2.83	-7.41	-4.58	CaSO4·2H2O
H2(g)	-23.20	-26.34	-3.14	H2
H2O(g)	-1.58	-0.00	1.58	H2O
H2S(g)	-3.05	-4.02	-0.97	H2S
Halite	-6.14	-4.56	1.58	NaCl
Hausmannite	-18.29	43.39	61.68	Mn3O4
Hematite	11.31	7.50	-3.81	Fe2O3
Jarosite-K	-13.46	-22.47	-9.01	KFe3(SO4)2(OH)6
Mackinawite	-1.12	-5.77	-4.65	FeS
Manganite	-7.01	18.33	25.34	MnOOH
Melanterite	-11.18	-13.42	-2.24	FeSO4·7H2O
O2(g)	-37.68	-40.55	-2.87	O2
Pyrite	24.99	6.44	-18.55	FeS2
Pyrochroite	-8.47	6.73	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-11.87	29.93	41.80	MnO2
Rhodochrosite	-1.93	-13.05	-11.12	MnCO3
Siderite	-3.67	-14.55	-10.87	FeCO3
Strontianite	-0.41	-9.68	-9.27	SrCO3
Sulfur	14.24	19.18	4.94	S

End of simulation.

Reading input data for simulation 2.

End of run.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung
Wasserprobe: St.Rochusbrunnen

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\St.Rochusbrunnen 2015_05_19.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\St.Rochusbrunnen 2015_05_19.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 4-5 St. Rochusbrunnen 2015_05_19

temp	14.5
pH	7.77
pe	-2.17
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	40.9
F	0.77
Fe	0.12
Mn	0.01
Cl	69.2
Al	0.0025
Alkalinity	769
S(6)	7
Li	0.05
Na	301
K	2.8
Ca	17.8
Mg	14.2
Sr	4
Si	0.06
B	0.69
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 4. St. Rochusbrunnen 2015_05_19

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	9.266e-008	9.266e-008
Alkalinity	1.537e-002	1.537e-002
B	6.383e-005	6.383e-005
Ca	4.441e-004	4.441e-004
Cl	1.952e-003	1.952e-003
F	4.053e-005	4.053e-005
Fe	2.149e-006	2.149e-006
K	7.161e-005	7.161e-005
Li	7.206e-006	7.206e-006
Mg	5.841e-004	5.841e-004
Mn	1.820e-007	1.820e-007
Na	1.309e-002	1.309e-002
S(-2)	1.276e-003	1.276e-003
S(6)	7.287e-005	7.287e-005
Si	9.986e-007	9.986e-007
Sr	4.565e-005	4.565e-005

-----Description of solution-----

pH = 7.770
 pe = -2.170
 Specific Conductance (uS/cm, 14 oC) = 1151
 Density (g/cm3) = 1.00018
 Activity of water = 0.999
 Ionic strength = 1.726e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 1.477e-002
 Total CO2 (mol/kg) = 1.477e-002
 Temperature (deg C) = 14.500
 Electrical balance (eq) = -2.180e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -6.73
 Iterations = 8
 Total H = 1.110283e+002
 Total O = 5.555047e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-4.5050	-0.2571

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	2.901e-007	2.543e-007	-6.537	-6.595	-0.057
H+	1.894e-008	1.698e-008	-7.723	-7.770	-0.047
H2O	5.551e+001	9.995e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	9.266e-008				
Al(OH)4-	9.156e-008	8.057e-008	-7.038	-7.094	-0.056
Al(OH)3	8.077e-010	8.109e-010	-9.093	-9.091	0.002
Al(OH)2+	2.438e-010	2.145e-010	-9.613	-9.669	-0.056
AlF2+	2.574e-011	2.265e-011	-10.589	-10.645	-0.056
AlF3	9.736e-012	9.775e-012	-11.012	-11.010	0.002

	AlF+2	2.302e-012	1.380e-012	-11.638	-11.860	-0.222
	AlOH+2	2.060e-012	1.235e-012	-11.686	-11.908	-0.222
	AlF4-	1.529e-013	1.346e-013	-12.815	-12.871	-0.056
	Al+3	1.136e-014	4.248e-015	-13.945	-14.372	-0.427
	AlSO4+	5.321e-016	4.682e-016	-15.274	-15.330	-0.056
	AlF5-2	1.261e-016	7.559e-017	-15.899	-16.122	-0.222
	Al(SO4)2-	6.419e-019	5.648e-019	-18.193	-18.248	-0.056
	AlF6-3	1.029e-020	3.253e-021	-19.988	-20.488	-0.500
	AlHSO4+2	1.088e-024	6.522e-025	-23.963	-24.186	-0.222
B		6.383e-005				
	H3BO3	6.187e-005	6.211e-005	-4.209	-4.207	0.002
	H2BO3-	1.961e-006	1.726e-006	-5.708	-5.763	-0.056
	BF(OH)3-	8.693e-010	7.649e-010	-9.061	-9.116	-0.056
	BF2(OH)2-	5.565e-014	4.897e-014	-13.255	-13.310	-0.056
	BF3OH-	4.386e-020	3.860e-020	-19.358	-19.413	-0.056
	BF4-	1.068e-025	9.395e-026	-24.972	-25.027	-0.056
C(4)		1.477e-002				
	HCO3-	1.399e-002	1.237e-002	-1.854	-1.908	-0.053
	CO2	5.542e-004	5.564e-004	-3.256	-3.255	0.002
	NaHCO3	7.941e-005	7.973e-005	-4.100	-4.098	0.002
	MgHCO3+	5.126e-005	4.511e-005	-4.290	-4.346	-0.056
	CO3-2	4.384e-005	2.681e-005	-4.358	-4.572	-0.214
	CaHCO3+	3.546e-005	3.136e-005	-4.450	-4.504	-0.053
	CaCO3	9.225e-006	9.262e-006	-5.035	-5.033	0.002
	MgCO3	6.998e-006	7.026e-006	-5.155	-5.153	0.002
	SrHCO3+	3.787e-006	3.349e-006	-5.422	-5.475	-0.053
	NaCO3-	3.756e-006	3.305e-006	-5.425	-5.481	-0.056
	SrCO3	3.170e-007	3.182e-007	-6.499	-6.497	0.002
	MnCO3	7.709e-008	7.740e-008	-7.113	-7.111	0.002
	MnHCO3+	4.554e-008	4.007e-008	-7.342	-7.397	-0.056
	FeHCO3+	3.422e-009	3.011e-009	-8.466	-8.521	-0.056
	FeCO3	1.559e-009	1.566e-009	-8.807	-8.805	0.002
Ca		4.441e-004				
	Ca+2	3.976e-004	2.430e-004	-3.401	-3.614	-0.214
	CaHCO3+	3.546e-005	3.136e-005	-4.450	-4.504	-0.053
	CaCO3	9.225e-006	9.262e-006	-5.035	-5.033	0.002
	CaSO4	1.751e-006	1.758e-006	-5.757	-5.755	0.002
	CaF+	6.469e-008	5.692e-008	-7.189	-7.245	-0.056
	CaOH+	2.697e-009	2.373e-009	-8.569	-8.625	-0.056
	CaHSO4+	1.767e-013	1.555e-013	-12.753	-12.808	-0.056
Cl		1.952e-003				
	Cl-	1.952e-003	1.712e-003	-2.710	-2.766	-0.057
	MnCl+	2.881e-010	2.535e-010	-9.540	-9.596	-0.056
	FeCl+	6.539e-012	5.754e-012	-11.184	-11.240	-0.056
	MnCl2	1.887e-013	1.895e-013	-12.724	-12.722	0.002
	MnCl3-	1.015e-016	8.934e-017	-15.993	-16.049	-0.056
	FeCl+2	5.289e-026	3.171e-026	-25.277	-25.499	-0.222
	FeCl2+	3.891e-028	3.424e-028	-27.410	-27.466	-0.056
	FeCl3	5.838e-032	5.861e-032	-31.234	-31.232	0.002
F		4.053e-005				
	F-	3.955e-005	3.467e-005	-4.403	-4.460	-0.057
	MgF+	6.898e-007	6.069e-007	-6.161	-6.217	-0.056
	NaF	2.278e-007	2.287e-007	-6.643	-6.641	0.002
	CaF+	6.469e-008	5.692e-008	-7.189	-7.245	-0.056
	BF(OH)3-	8.693e-010	7.649e-010	-9.061	-9.116	-0.056
	HF	7.310e-010	7.339e-010	-9.136	-9.134	0.002
	AlF2+	2.574e-011	2.265e-011	-10.589	-10.645	-0.056
	MnF+	9.908e-012	8.718e-012	-11.004	-11.060	-0.056

AlF3	9.736e-012	9.775e-012	-11.012	-11.010	0.002
AlF+2	2.302e-012	1.380e-012	-11.638	-11.860	-0.222
FeF+	9.592e-013	8.440e-013	-12.018	-12.074	-0.056
AlF4-	1.529e-013	1.346e-013	-12.815	-12.871	-0.056
HF2-	1.008e-013	8.873e-014	-12.996	-13.052	-0.056
BF2(OH)2-	5.565e-014	4.897e-014	-13.255	-13.310	-0.056
AlF5-2	1.261e-016	7.559e-017	-15.899	-16.122	-0.222
BF3OH-	4.386e-020	3.860e-020	-19.358	-19.413	-0.056
AlF6-3	1.029e-020	3.253e-021	-19.988	-20.488	-0.500
FeF+2	6.720e-023	4.028e-023	-22.173	-22.395	-0.222
FeF2+	5.551e-023	4.885e-023	-22.256	-22.311	-0.056
FeF3	2.576e-024	2.586e-024	-23.589	-23.587	0.002
BF4-	1.068e-025	9.395e-026	-24.972	-25.027	-0.056
SiF6-2	9.905e-034	5.937e-034	-33.004	-33.226	-0.222
Fe(2)	2.149e-006				
Fe(HS)2	1.916e-006	1.923e-006	-5.718	-5.716	0.002
Fe(HS)3-	2.241e-007	1.972e-007	-6.650	-6.705	-0.056
Fe+2	3.942e-009	2.435e-009	-8.404	-8.614	-0.209
FeHCO3+	3.422e-009	3.011e-009	-8.466	-8.521	-0.056
FeCO3	1.559e-009	1.566e-009	-8.807	-8.805	0.002
FeOH+	2.284e-011	2.009e-011	-10.641	-10.697	-0.056
FeSO4	1.418e-011	1.424e-011	-10.848	-10.847	0.002
FeCl+	6.539e-012	5.754e-012	-11.184	-11.240	-0.056
FeF+	9.592e-013	8.440e-013	-12.018	-12.074	-0.056
FeHSO4+	1.771e-018	1.558e-018	-17.752	-17.807	-0.056
Fe(3)	1.346e-014				
Fe(OH)3	1.051e-014	1.055e-014	-13.979	-13.977	0.002
Fe(OH)2+	2.541e-015	2.236e-015	-14.595	-14.651	-0.056
Fe(OH)4-	4.155e-016	3.656e-016	-15.381	-15.437	-0.056
FeOH+2	2.892e-019	1.734e-019	-18.539	-18.761	-0.222
FeF+2	6.720e-023	4.028e-023	-22.173	-22.395	-0.222
FeF2+	5.551e-023	4.885e-023	-22.256	-22.311	-0.056
FeF3	2.576e-024	2.586e-024	-23.589	-23.587	0.002
Fe+3	2.315e-024	8.659e-025	-23.635	-24.063	-0.427
FeSO4+	3.403e-025	2.994e-025	-24.468	-24.524	-0.056
FeCl+2	5.289e-026	3.171e-026	-25.277	-25.499	-0.222
FeCl2+	3.891e-028	3.424e-028	-27.410	-27.466	-0.056
Fe(SO4)2-	2.863e-028	2.519e-028	-27.543	-27.599	-0.056
FeCl3	5.838e-032	5.861e-032	-31.234	-31.232	0.002
FeHSO4+2	2.322e-032	1.392e-032	-31.634	-31.856	-0.222
Fe2(OH)2+4	9.824e-036	1.268e-036	-35.008	-35.897	-0.889
Fe3(OH)4+5	0.000e+000	0.000e+000	-46.402	-47.791	-1.389
H(0)	9.917e-015				
H2	4.958e-015	4.978e-015	-14.305	-14.303	0.002
K	7.161e-005				
K+	7.159e-005	6.279e-005	-4.145	-4.202	-0.057
KSO4-	1.664e-008	1.464e-008	-7.779	-7.834	-0.056
KOH	1.276e-011	1.281e-011	-10.894	-10.892	0.002
Li	7.206e-006				
Li+	7.204e-006	6.387e-006	-5.142	-5.195	-0.052
LiSO4-	1.271e-009	1.119e-009	-8.896	-8.951	-0.056
LiOH	8.576e-012	8.611e-012	-11.067	-11.065	0.002
Mg	5.841e-004				
Mg+2	5.228e-004	3.227e-004	-3.282	-3.491	-0.209
MgHCO3+	5.126e-005	4.511e-005	-4.290	-4.346	-0.056
MgCO3	6.998e-006	7.026e-006	-5.155	-5.153	0.002
MgSO4	2.285e-006	2.294e-006	-5.641	-5.639	0.002
MgF+	6.898e-007	6.069e-007	-6.161	-6.217	-0.056

MgOH+	2.933e-008	2.581e-008	-7.533	-7.588	-0.056
Mn(2)	1.820e-007				
MnCO3	7.709e-008	7.740e-008	-7.113	-7.111	0.002
Mn+2	5.886e-008	3.635e-008	-7.230	-7.439	-0.209
MnHCO3+	4.554e-008	4.007e-008	-7.342	-7.397	-0.056
MnCl+	2.881e-010	2.535e-010	-9.540	-9.596	-0.056
MnSO4	2.099e-010	2.108e-010	-9.678	-9.676	0.002
MnOH+	2.574e-011	2.265e-011	-10.589	-10.645	-0.056
MnF+	9.908e-012	8.718e-012	-11.004	-11.060	-0.056
MnCl2	1.887e-013	1.895e-013	-12.724	-12.722	0.002
MnCl3-	1.015e-016	8.934e-017	-15.993	-16.049	-0.056
Mn(3)	4.901e-036				
Mn+3	4.901e-036	1.550e-036	-35.310	-35.810	-0.500
Na	1.309e-002				
Na+	1.301e-002	1.146e-002	-1.886	-1.941	-0.055
NaHCO3	7.941e-005	7.973e-005	-4.100	-4.098	0.002
NaCO3-	3.756e-006	3.305e-006	-5.425	-5.481	-0.056
NaSO4-	2.445e-006	2.152e-006	-5.612	-5.667	-0.056
NaF	2.278e-007	2.287e-007	-6.643	-6.641	0.002
NaOH	4.440e-009	4.457e-009	-8.353	-8.351	0.002
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-67.289	-67.287	0.002
S(-2)	1.276e-003				
HS-	1.074e-003	9.414e-004	-2.969	-3.026	-0.057
H2S	1.971e-004	1.979e-004	-3.705	-3.704	0.002
Fe(HS)2	1.916e-006	1.923e-006	-5.718	-5.716	0.002
Fe(HS)3-	2.241e-007	1.972e-007	-6.650	-6.705	-0.056
S-2	5.233e-009	3.177e-009	-8.281	-8.498	-0.217
S(6)	7.287e-005				
SO4-2	6.620e-005	4.013e-005	-4.179	-4.397	-0.217
NaSO4-	2.445e-006	2.152e-006	-5.612	-5.667	-0.056
MgSO4	2.285e-006	2.294e-006	-5.641	-5.639	0.002
CaSO4	1.751e-006	1.758e-006	-5.757	-5.755	0.002
SrSO4	1.738e-007	1.745e-007	-6.760	-6.758	0.002
KSO4-	1.664e-008	1.464e-008	-7.779	-7.834	-0.056
LiSO4-	1.271e-009	1.119e-009	-8.896	-8.951	-0.056
MnSO4	2.099e-010	2.108e-010	-9.678	-9.676	0.002
HSO4-	6.050e-011	5.323e-011	-10.218	-10.274	-0.056
FeSO4	1.418e-011	1.424e-011	-10.848	-10.847	0.002
CaHSO4+	1.767e-013	1.555e-013	-12.753	-12.808	-0.056
AlSO4+	5.321e-016	4.682e-016	-15.274	-15.330	-0.056
FeHSO4+	1.771e-018	1.558e-018	-17.752	-17.807	-0.056
Al(SO4)2-	6.419e-019	5.648e-019	-18.193	-18.248	-0.056
AlHSO4+2	1.088e-024	6.522e-025	-23.963	-24.186	-0.222
FeSO4+	3.403e-025	2.994e-025	-24.468	-24.524	-0.056
Fe(SO4)2-	2.863e-028	2.519e-028	-27.543	-27.599	-0.056
FeHSO4+2	2.322e-032	1.392e-032	-31.634	-31.856	-0.222
Si	9.986e-007				
H4SiO4	9.920e-007	9.959e-007	-6.004	-6.002	0.002
H3SiO4-	6.643e-009	5.846e-009	-8.178	-8.233	-0.056
H2SiO4-2	1.886e-014	1.131e-014	-13.724	-13.947	-0.222
SiF6-2	9.905e-034	5.937e-034	-33.004	-33.226	-0.222
Sr	4.565e-005				
Sr+2	4.137e-005	2.536e-005	-4.383	-4.596	-0.213
SrHCO3+	3.787e-006	3.349e-006	-5.422	-5.475	-0.053
SrCO3	3.170e-007	3.182e-007	-6.499	-6.497	0.002
SrSO4	1.738e-007	1.745e-007	-6.760	-6.758	0.002
SrOH+	8.670e-011	7.653e-011	-10.062	-10.116	-0.054

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-2.57	8.94	11.51	Al(OH)3
Albite	-8.34	-27.04	-18.69	NaAlSi3O8
Alunite	-9.44	-9.49	-0.06	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-3.68	-8.01	-4.33	CaSO4
Anorthite	-9.78	-29.80	-20.02	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.09	-8.19	-8.28	CaCO3
Ca-Montmorillonite	-8.10	-54.69	-46.59	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	0.24	-8.19	-8.43	CaCO3
Celestite	-2.37	-8.99	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-2.32	-6.00	-3.68	SiO2
Chlorite(14A)	-12.32	60.11	72.43	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-9.41	24.14	33.55	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-1.92	-3.25	-1.33	CO2
Dolomite	0.59	-16.25	-16.84	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	-5.64	-0.75	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	0.05	-3.87	-3.92	FeS
Fluorite	-1.80	-12.53	-10.73	CaF2
Gibbsite	0.22	8.94	8.72	Al(OH)3
Goethite	-0.14	-0.75	-0.61	FeOOH
Gypsum	-3.43	-8.01	-4.59	CaSO4·2H2O
H2(g)	-11.20	-14.30	-3.10	H2
H2O(g)	-1.79	-0.00	1.79	H2O
H2S(g)	-2.83	-3.70	-0.87	H2S
Halite	-6.26	-4.71	1.56	NaCl
Hausmannite	-28.22	35.50	63.72	Mn3O4
Hematite	1.68	-1.51	-3.18	Fe2O3
Illite	-8.31	-50.04	-41.73	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-30.19	-38.56	-8.37	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-7.90	-29.30	-21.40	KAlSi3O8
K-mica	-1.91	12.38	14.29	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	-2.51	5.87	8.38	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	0.78	-3.87	-4.65	FeS
Manganite	-11.64	13.70	25.34	MnOOH
Melanterite	-10.67	-13.01	-2.35	FeSO4·7H2O
O2(g)	-64.48	-67.29	-2.81	O2
Pyrite	15.32	-3.47	-18.78	FeS2
Pyrochroite	-7.10	8.10	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-23.82	19.30	43.12	MnO2
Quartz	-1.86	-6.00	-4.14	SiO2
Rhodochrosite	-0.92	-12.01	-11.09	MnCO3
Sepiolite	-9.95	6.09	16.05	Mg2Si3O7·5OH·3H2O
Sepiolite(d)	-12.57	6.09	18.66	Mg2Si3O7·5OH·3H2O
Siderite	-2.36	-13.19	-10.82	FeCO3
SiO2(a)	-3.20	-6.00	-2.80	SiO2
Strontianite	0.11	-9.17	-9.28	SrCO3
Sulfur	2.36	7.50	5.14	S
Talc	-10.50	12.14	22.64	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Wasserprobe: E1 Quelle Erlengraben

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\E1 Quelle Erlengraben
2015_05_05.pqi

Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\E1 Quelle Erlengraben
2015_05_05.pgo

Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 E1 Quelle Erlengraben(2015_05_06)

temp	20.9
pH	7.44
pe	7.84
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	0.005
F	0.16
Cl	53.7
Alkalinity	332
S(6)	57
Li	0.005
Na	10.7
K	1
Ca	142
Mg	13.6
Sr	0.17
B	0.05
Si	3.4
Al	0.11
Fe	0.67
Mn	0.34
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. E1 Quelle Erlengraben(2015_05_06)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	4.077e-006	4.077e-006
Alkalinity	6.634e-003	6.634e-003
B	4.625e-006	4.625e-006
Ca	3.543e-003	3.543e-003
Cl	1.515e-003	1.515e-003
F	8.422e-006	8.422e-006
Fe	1.200e-005	1.200e-005
K	2.557e-005	2.557e-005
Li	7.206e-007	7.206e-007
Mg	5.594e-004	5.594e-004
Mn	6.189e-006	6.189e-006
Na	4.654e-004	4.654e-004
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	5.934e-004	5.934e-004
Si	5.659e-005	5.659e-005
Sr	1.940e-006	1.940e-006

-----Description of solution-----

pH = 7.440
 pe = 7.840
 Specific Conductance (uS/cm, 20 oC) = 753
 Density (g/cm3) = 0.99858
 Activity of water = 1.000
 Ionic strength = 1.274e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 7.062e-003
 Total CO2 (mol/kg) = 7.062e-003
 Temperature (deg C) = 20.900
 Electrical balance (eq) = -6.069e-004
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -3.57
 Iterations = 8
 Total H = 1.110193e+002
 Total O = 5.552958e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-3.6565	-0.2133

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	2.256e-007	2.008e-007	-6.647	-6.697	-0.051
H+	4.007e-008	3.631e-008	-7.397	-7.440	-0.043
H2O	5.551e+001	9.998e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	4.077e-006				
Al(OH)4-	3.977e-006	3.550e-006	-5.400	-5.450	-0.049
Al(OH)3	7.177e-008	7.198e-008	-7.144	-7.143	0.001
Al(OH)2+	2.710e-008	2.419e-008	-7.567	-7.616	-0.049

AlOH+2	2.549e-010	1.618e-010	-9.594	-9.791	-0.197
AlF2+	2.167e-010	1.934e-010	-9.664	-9.714	-0.049
AlF+2	8.597e-011	5.456e-011	-10.066	-10.263	-0.197
AlF3	1.747e-011	1.752e-011	-10.758	-10.756	0.001
Al+3	1.880e-012	7.739e-013	-11.726	-12.111	-0.385
AlSO4+	7.580e-013	6.766e-013	-12.120	-12.170	-0.049
AlF4-	5.644e-014	5.038e-014	-13.248	-13.298	-0.049
Al(SO4)2-	6.860e-015	6.123e-015	-14.164	-14.213	-0.049
AlF5-2	9.170e-018	5.820e-018	-17.038	-17.235	-0.197
AlHSO4+2	3.317e-021	2.105e-021	-20.479	-20.677	-0.197
AlF6-3	1.271e-022	4.569e-023	-21.896	-22.340	-0.444
B	4.625e-006				
H3BO3	4.550e-006	4.564e-006	-5.342	-5.341	0.001
H2BO3-	7.511e-008	6.704e-008	-7.124	-7.174	-0.049
BF(OH)3-	1.409e-011	1.257e-011	-10.851	-10.901	-0.049
BF2(OH)2-	3.983e-016	3.555e-016	-15.400	-15.449	-0.049
BF3OH-	1.237e-022	1.104e-022	-21.908	-21.957	-0.049
BF4-	1.330e-028	1.187e-028	-27.876	-27.926	-0.049
C(4)	7.062e-003				
HCO3-	6.351e-003	5.692e-003	-2.197	-2.245	-0.048
CO2	4.899e-004	4.913e-004	-3.310	-3.309	0.001
CaHCO3+	1.584e-004	1.419e-004	-3.800	-3.848	-0.048
MgHCO3+	2.444e-005	2.181e-005	-4.612	-4.661	-0.049
CaCO3	2.189e-005	2.195e-005	-4.660	-4.659	0.001
CO3-2	1.044e-005	6.739e-006	-4.981	-5.171	-0.190
MgCO3	2.004e-006	2.010e-006	-5.698	-5.697	0.001
NaHCO3	1.322e-006	1.326e-006	-5.879	-5.878	0.001
MnHCO3+	1.306e-006	1.165e-006	-5.884	-5.934	-0.049
MnCO3	1.226e-006	1.229e-006	-5.912	-5.910	0.001
SrHCO3+	9.695e-008	8.689e-008	-7.013	-7.061	-0.048
NaCO3-	4.721e-008	4.214e-008	-7.326	-7.375	-0.049
SrCO3	4.363e-009	4.376e-009	-8.360	-8.359	0.001
FeHCO3+	3.239e-010	2.891e-010	-9.490	-9.539	-0.049
FeCO3	8.185e-011	8.209e-011	-10.087	-10.086	0.001
Ca	3.543e-003				
Ca+2	3.246e-003	2.093e-003	-2.489	-2.679	-0.191
CaHCO3+	1.584e-004	1.419e-004	-3.800	-3.848	-0.048
CaSO4	1.168e-004	1.172e-004	-3.932	-3.931	0.001
CaCO3	2.189e-005	2.195e-005	-4.660	-4.659	0.001
CaF+	1.340e-007	1.196e-007	-6.873	-6.922	-0.049
CaOH+	1.071e-008	9.563e-009	-7.970	-8.019	-0.049
CaHSO4+	2.659e-011	2.373e-011	-10.575	-10.625	-0.049
Cl	1.515e-003				
Cl-	1.515e-003	1.349e-003	-2.820	-2.870	-0.050
MnCl+	1.414e-008	1.262e-008	-7.850	-7.899	-0.049
MnCl2	7.410e-012	7.431e-012	-11.130	-11.129	0.001
FeCl+	1.059e-012	9.456e-013	-11.975	-12.024	-0.049
MnCl3-	3.093e-015	2.761e-015	-14.510	-14.559	-0.049
FeCl+2	1.503e-016	9.540e-017	-15.823	-16.020	-0.197
FeCl2+	7.347e-019	6.557e-019	-18.134	-18.183	-0.049
FeCl3	8.819e-023	8.845e-023	-22.055	-22.053	0.001
F	8.422e-006				
F-	8.120e-006	7.228e-006	-5.090	-5.141	-0.051
MgF+	1.652e-007	1.475e-007	-6.782	-6.831	-0.049
CaF+	1.340e-007	1.196e-007	-6.873	-6.922	-0.049
NaF	1.718e-009	1.723e-009	-8.765	-8.764	0.001
HF	3.647e-010	3.658e-010	-9.438	-9.437	0.001
AlF2+	2.167e-010	1.934e-010	-9.664	-9.714	-0.049

MnF+	1.287e-010	1.149e-010	-9.890	-9.940	-0.049
AlF+2	8.597e-011	5.456e-011	-10.066	-10.263	-0.197
AlF3	1.747e-011	1.752e-011	-10.758	-10.756	0.001
BF(OH)3-	1.409e-011	1.257e-011	-10.851	-10.901	-0.049
AlF4-	5.644e-014	5.038e-014	-13.248	-13.298	-0.049
FeF+2	4.526e-014	2.872e-014	-13.344	-13.542	-0.197
FeF+	4.112e-014	3.671e-014	-13.386	-13.435	-0.049
HF2-	1.099e-014	9.806e-015	-13.959	-14.009	-0.049
FeF2+	8.813e-015	7.866e-015	-14.055	-14.104	-0.049
BF2(OH)2-	3.983e-016	3.555e-016	-15.400	-15.449	-0.049
FeF3	8.858e-017	8.884e-017	-16.053	-16.051	0.001
AlF5-2	9.170e-018	5.820e-018	-17.038	-17.235	-0.197
AlF6-3	1.271e-022	4.569e-023	-21.896	-22.340	-0.444
BF3OH-	1.237e-022	1.104e-022	-21.908	-21.957	-0.049
BF4-	1.330e-028	1.187e-028	-27.876	-27.926	-0.049
SiF6-2	4.901e-035	3.111e-035	-34.310	-34.507	-0.197
Fe(2)	1.216e-009				
Fe+2	7.810e-010	5.079e-010	-9.107	-9.294	-0.187
FeHCO3+	3.239e-010	2.891e-010	-9.490	-9.539	-0.049
FeCO3	8.185e-011	8.209e-011	-10.087	-10.086	0.001
FeSO4	2.435e-011	2.442e-011	-10.614	-10.612	0.001
FeOH+	3.632e-012	3.241e-012	-11.440	-11.489	-0.049
FeCl+	1.059e-012	9.456e-013	-11.975	-12.024	-0.049
FeF+	4.112e-014	3.671e-014	-13.386	-13.435	-0.049
Fe(HS)2	4.989e-015	5.004e-015	-14.302	-14.301	0.001
FeHSO4+	6.452e-018	5.759e-018	-17.190	-17.240	-0.049
Fe(HS)3-	6.418e-020	5.729e-020	-19.193	-19.242	-0.049
Fe(3)	1.200e-005				
Fe(OH)3	8.546e-006	8.571e-006	-5.068	-5.067	0.001
Fe(OH)2+	3.245e-006	2.896e-006	-5.489	-5.538	-0.049
Fe(OH)4-	2.041e-007	1.821e-007	-6.690	-6.740	-0.049
FeOH+2	5.860e-010	3.719e-010	-9.232	-9.430	-0.197
FeF+2	4.526e-014	2.872e-014	-13.344	-13.542	-0.197
FeF2+	8.813e-015	7.866e-015	-14.055	-14.104	-0.049
FeSO4+	8.734e-015	7.796e-015	-14.059	-14.108	-0.049
Fe+3	6.491e-015	2.672e-015	-14.188	-14.573	-0.385
FeCl+2	1.503e-016	9.540e-017	-15.823	-16.020	-0.197
FeF3	8.858e-017	8.884e-017	-16.053	-16.051	0.001
Fe(SO4)2-	5.485e-017	4.896e-017	-16.261	-16.310	-0.049
Fe2(OH)2+4	2.725e-017	4.420e-018	-16.565	-17.355	-0.790
FeCl2+	7.347e-019	6.557e-019	-18.134	-18.183	-0.049
Fe3(OH)4+5	6.730e-020	3.925e-021	-19.172	-20.406	-1.234
FeHSO4+2	1.199e-021	7.610e-022	-20.921	-21.119	-0.197
FeCl3	8.819e-023	8.845e-023	-22.055	-22.053	0.001
H(0)	4.053e-034				
H2	2.026e-034	2.032e-034	-33.693	-33.692	0.001
K	2.557e-005				
K+	2.553e-005	2.273e-005	-4.593	-4.643	-0.050
KSO4-	4.855e-008	4.334e-008	-7.314	-7.363	-0.049
KOH	2.164e-012	2.170e-012	-11.665	-11.663	0.001
Li	7.206e-007				
Li+	7.196e-007	6.462e-007	-6.143	-6.190	-0.047
LiSO4-	9.221e-010	8.230e-010	-9.035	-9.085	-0.049
LiOH	4.065e-013	4.077e-013	-12.391	-12.390	0.001
Mg	5.594e-004				
Mg+2	5.124e-004	3.329e-004	-3.290	-3.478	-0.187
MgHCO3+	2.444e-005	2.181e-005	-4.612	-4.661	-0.049
MgSO4	2.040e-005	2.046e-005	-4.690	-4.689	0.001

MgCO3	2.004e-006	2.010e-006	-5.698	-5.697	0.001
MgF+	1.652e-007	1.475e-007	-6.782	-6.831	-0.049
MgOH+	2.562e-008	2.287e-008	-7.591	-7.641	-0.049
Mn(2)	6.189e-006				
Mn+2	3.532e-006	2.297e-006	-5.452	-5.639	-0.187
MnHCO3+	1.306e-006	1.165e-006	-5.884	-5.934	-0.049
MnCO3	1.226e-006	1.229e-006	-5.912	-5.910	0.001
MnSO4	1.098e-007	1.101e-007	-6.960	-6.958	0.001
MnCl+	1.414e-008	1.262e-008	-7.850	-7.899	-0.049
MnOH+	1.298e-009	1.158e-009	-8.887	-8.936	-0.049
MnF+	1.287e-010	1.149e-010	-9.890	-9.940	-0.049
MnCl2	7.410e-012	7.431e-012	-11.130	-11.129	0.001
MnCl3-	3.093e-015	2.761e-015	-14.510	-14.559	-0.049
Mn(3)	7.443e-024				
Mn+3	7.443e-024	2.676e-024	-23.128	-23.573	-0.444
Na	4.654e-004				
Na+	4.634e-004	4.142e-004	-3.334	-3.383	-0.049
NaHCO3	1.322e-006	1.326e-006	-5.879	-5.878	0.001
NaSO4-	6.609e-007	5.898e-007	-6.180	-6.229	-0.049
NaCO3-	4.721e-008	4.214e-008	-7.326	-7.375	-0.049
NaF	1.718e-009	1.723e-009	-8.765	-8.764	0.001
NaOH	7.513e-011	7.535e-011	-10.124	-10.123	0.001
O(0)	9.162e-027				
O2	4.581e-027	4.594e-027	-26.339	-26.338	0.001
S(-2)	1.559e-007				
HS-	1.181e-007	1.051e-007	-6.928	-6.978	-0.051
H2S	3.782e-008	3.793e-008	-7.422	-7.421	0.001
S-2	4.100e-013	2.631e-013	-12.387	-12.580	-0.193
Fe(HS)2	4.989e-015	5.004e-015	-14.302	-14.301	0.001
Fe(HS)3-	6.418e-020	5.729e-020	-19.193	-19.242	-0.049
S(6)	5.934e-004				
SO4-2	4.552e-004	2.918e-004	-3.342	-3.535	-0.193
CaSO4	1.168e-004	1.172e-004	-3.932	-3.931	0.001
MgSO4	2.040e-005	2.046e-005	-4.690	-4.689	0.001
NaSO4-	6.609e-007	5.898e-007	-6.180	-6.229	-0.049
MnSO4	1.098e-007	1.101e-007	-6.960	-6.958	0.001
SrSO4	6.202e-008	6.220e-008	-7.207	-7.206	0.001
KSO4-	4.855e-008	4.334e-008	-7.314	-7.363	-0.049
HSO4-	1.057e-009	9.432e-010	-8.976	-9.025	-0.049
LiSO4-	9.221e-010	8.230e-010	-9.035	-9.085	-0.049
CaHSO4+	2.659e-011	2.373e-011	-10.575	-10.625	-0.049
FeSO4	2.435e-011	2.442e-011	-10.614	-10.612	0.001
AlSO4+	7.580e-013	6.766e-013	-12.120	-12.170	-0.049
FeSO4+	8.734e-015	7.796e-015	-14.059	-14.108	-0.049
Al(SO4)2-	6.860e-015	6.123e-015	-14.164	-14.213	-0.049
Fe(SO4)2-	5.485e-017	4.896e-017	-16.261	-16.310	-0.049
FeHSO4+	6.452e-018	5.759e-018	-17.190	-17.240	-0.049
AlHSO4+2	3.317e-021	2.105e-021	-20.479	-20.677	-0.197
FeHSO4+2	1.199e-021	7.610e-022	-20.921	-21.119	-0.197
Si	5.659e-005				
H4SiO4	5.636e-005	5.653e-005	-4.249	-4.248	0.001
H3SiO4-	2.222e-007	1.983e-007	-6.653	-6.703	-0.049
H2SiO4-2	4.453e-013	2.826e-013	-12.351	-12.549	-0.197
SiF6-2	4.901e-035	3.111e-035	-34.310	-34.507	-0.197
Sr	1.940e-006				
Sr+2	1.777e-006	1.148e-006	-5.750	-5.940	-0.190
SrHCO3+	9.695e-008	8.689e-008	-7.013	-7.061	-0.048
SrSO4	6.202e-008	6.220e-008	-7.207	-7.206	0.001

SrCO3	4.363e-009	4.376e-009	-8.360	-8.359	0.001
SrOH+	1.812e-012	1.622e-012	-11.742	-11.790	-0.048

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-0.86	10.21	11.07	Al(OH)3
Albite	-3.31	-21.57	-18.27	NaAlSi3O8
Alunite	-2.52	-3.41	-0.89	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-1.87	-6.21	-4.35	CaSO4
Anorthite	-2.24	-22.07	-19.83	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.46	-7.85	-8.31	CaCO3
Ca-Montmorillonite	2.02	-43.61	-45.62	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	0.61	-7.85	-8.46	CaCO3
Celestite	-2.85	-9.47	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-0.65	-4.25	-3.60	SiO2
Chlorite(14A)	-5.24	64.69	69.93	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-7.00	25.71	32.72	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-1.89	-3.31	-1.42	CO2
Dolomite	0.49	-16.50	-16.99	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	2.86	7.75	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-4.92	-8.83	-3.92	FeS
Fluorite	-2.31	-12.96	-10.65	CaF2
Gibbsite	1.87	10.21	8.34	Al(OH)3
Goethite	8.60	7.75	-0.85	FeOOH
Gypsum	-1.63	-6.21	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-30.56	-33.69	-3.13	H2
H2O(g)	-1.62	-0.00	1.62	H2O
H2S(g)	-6.47	-7.42	-0.95	H2S
Halite	-7.83	-6.25	1.57	NaCl
Hausmannite	-3.78	58.28	62.06	Mn3O4
Hematite	19.19	15.49	-3.69	Fe2O3
Illite	0.84	-39.98	-40.83	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-1.90	-10.79	-8.89	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-1.95	-22.84	-20.89	KAlSi3O8
K-mica	7.37	20.68	13.31	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	4.13	11.92	7.80	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	-4.18	-8.83	-4.65	FeS
Manganite	-0.82	24.52	25.34	MnOOH
Melanterite	-10.57	-12.83	-2.26	FeSO4:7H2O
O2(g)	-23.48	-26.34	-2.86	O2
Pyrite	25.90	7.31	-18.59	FeS2
Pyrochroite	-5.96	9.24	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-2.24	39.80	42.05	MnO2
Quartz	-0.21	-4.25	-4.04	SiO2
Rhodochrosite	0.31	-10.81	-11.12	MnCO3
Sepiolite	-5.81	10.06	15.87	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-8.60	10.06	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	-3.60	-14.47	-10.86	FeCO3
SiO2(a)	-1.50	-4.25	-2.75	SiO2
Strontianite	-1.84	-11.11	-9.27	SrCO3
Sulfur	18.16	23.14	4.98	S
Talc	-4.66	17.22	21.87	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Wasserprobe: E3 Erlengraben

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\E3 Erlengraben 2015_05_05.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\E3 Erlengraben 2015_05_05.pqo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 E3 Erlengraben(2015_05_06)

temp	14.3
pH	7.67
pe	7.84
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	0.005
F	0.16
Cl	13
Alkalinity	444
S(6)	288
Li	0.003
Na	28
K	1.9
Ca	158
Mg	53.0
Sr	0.48
B	0.05
Si	3.4
Al	0.11
Fe	0.67
Mn	0.34
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. E3 Erlengraben(2015_05_06)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	4.077e-006	4.077e-006
Alkalinity	8.872e-003	8.872e-003
B	4.625e-006	4.625e-006
Ca	3.942e-003	3.942e-003
Cl	3.667e-004	3.667e-004
F	8.422e-006	8.422e-006
Fe	1.200e-005	1.200e-005
K	4.859e-005	4.859e-005
Li	4.323e-007	4.323e-007
Mg	2.180e-003	2.180e-003
Mn	6.189e-006	6.189e-006
Na	1.218e-003	1.218e-003
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	2.998e-003	2.998e-003
Si	5.659e-005	5.659e-005
Sr	5.478e-006	5.478e-006

-----Description of solution-----

pH = 7.670
 pe = 7.840
 Specific Conductance (uS/cm, 14 oC) = 920
 Density (g/cm3) = 1.00015
 Activity of water = 1.000
 Ionic strength = 1.994e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 9.195e-003
 Total CO2 (mol/kg) = 9.195e-003
 Temperature (deg C) = 14.300
 Electrical balance (eq) = -1.684e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -6.71
 Iterations = 8
 Total H = 1.110214e+002
 Total O = 5.554566e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-3.7069	-0.2114

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	2.286e-007	1.987e-007	-6.641	-6.702	-0.061
H+	2.399e-008	2.138e-008	-7.620	-7.670	-0.050
H2O	5.551e+001	9.997e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	4.077e-006				
Al(OH)4-	4.015e-006	3.505e-006	-5.396	-5.455	-0.059
Al(OH)3	4.426e-008	4.447e-008	-7.354	-7.352	0.002
Al(OH)2+	1.725e-008	1.506e-008	-7.763	-7.822	-0.059
AlOH+2	1.916e-010	1.113e-010	-9.718	-9.953	-0.236
AlF2+	1.155e-010	1.008e-010	-9.938	-9.996	-0.059

	AlF+2	5.372e-011	3.121e-011	-10.270	-10.506	-0.236
	AlF3	8.530e-012	8.569e-012	-11.069	-11.067	0.002
	AlSO4+	2.046e-012	1.786e-012	-11.689	-11.748	-0.059
	Al+3	1.376e-012	4.886e-013	-11.861	-12.311	-0.450
	Al(SO4)2-	8.204e-014	7.163e-014	-13.086	-13.145	-0.059
	AlF4-	2.661e-014	2.324e-014	-13.575	-13.634	-0.059
	AlF5-2	4.427e-018	2.572e-018	-17.354	-17.590	-0.236
	AlHSO4+2	5.386e-021	3.129e-021	-20.269	-20.505	-0.236
	AlF6-3	7.429e-023	2.190e-023	-22.129	-22.660	-0.531
B		4.625e-006				
	H3BO3	4.511e-006	4.532e-006	-5.346	-5.344	0.002
	H2BO3-	1.141e-007	9.961e-008	-6.943	-7.002	-0.059
	BF(OH)3-	1.256e-011	1.097e-011	-10.901	-10.960	-0.059
	BF2(OH)2-	1.995e-016	1.741e-016	-15.700	-15.759	-0.059
	BF3OH-	3.913e-023	3.416e-023	-22.408	-22.466	-0.059
	BF4-	2.362e-029	2.062e-029	-28.627	-28.686	-0.059
C(4)		9.195e-003				
	HCO3-	8.427e-003	7.398e-003	-2.074	-2.131	-0.057
	CO2	4.186e-004	4.205e-004	-3.378	-3.376	0.002
	CaHCO3+	1.700e-004	1.493e-004	-3.769	-3.826	-0.057
	MgHCO3+	1.040e-004	9.081e-005	-3.983	-4.042	-0.059
	CaCO3	3.476e-005	3.492e-005	-4.459	-4.457	0.002
	CO3-2	2.134e-005	1.267e-005	-4.671	-4.897	-0.226
	MgCO3	1.110e-005	1.115e-005	-4.955	-4.953	0.002
	NaHCO3	4.367e-006	4.387e-006	-5.360	-5.358	0.002
	MnCO3	1.715e-006	1.723e-006	-5.766	-5.764	0.002
	MnHCO3+	1.293e-006	1.129e-006	-5.889	-5.947	-0.059
	SrHCO3+	2.446e-007	2.147e-007	-6.612	-6.668	-0.057
	NaCO3~	1.628e-007	1.422e-007	-6.788	-6.847	-0.059
	SrCO3	1.606e-008	1.613e-008	-7.794	-7.792	0.002
	FeHCO3+	3.570e-010	3.117e-010	-9.447	-9.506	-0.059
	FeCO3	1.275e-010	1.281e-010	-9.895	-9.893	0.002
Ca		3.942e-003				
	Ca+2	3.273e-003	1.943e-003	-2.485	-2.712	-0.226
	CaSO4	4.644e-004	4.666e-004	-3.333	-3.331	0.002
	CaHCO3+	1.700e-004	1.493e-004	-3.769	-3.826	-0.057
	CaCO3	3.476e-005	3.492e-005	-4.459	-4.457	0.002
	CaF+	1.022e-007	8.919e-008	-6.991	-7.050	-0.059
	CaOH+	1.727e-008	1.508e-008	-7.763	-7.822	-0.059
	CaHSO4+	5.942e-011	5.187e-011	-10.226	-10.285	-0.059
Cl		3.667e-004				
	Cl-	3.667e-004	3.189e-004	-3.436	-3.496	-0.061
	MnCl+	2.547e-009	2.224e-009	-8.594	-8.653	-0.059
	MnCl2	3.082e-013	3.097e-013	-12.511	-12.509	0.002
	FeCl+	2.125e-013	1.855e-013	-12.673	-12.732	-0.059
	MnCl3-	3.116e-017	2.720e-017	-16.506	-16.565	-0.059
	FeCl+2	1.767e-017	1.027e-017	-16.753	-16.989	-0.236
	FeCl2+	2.382e-020	2.080e-020	-19.623	-19.682	-0.059
	FeCl3	6.603e-025	6.633e-025	-24.180	-24.178	0.002
F		8.422e-006				
	F-	7.856e-006	6.828e-006	-5.105	-5.166	-0.061
	MgF+	4.593e-007	4.010e-007	-6.338	-6.397	-0.059
	CaF+	1.022e-007	8.919e-008	-6.991	-7.050	-0.059
	NaF	4.125e-009	4.144e-009	-8.385	-8.383	0.002
	HF	1.805e-010	1.814e-010	-9.743	-9.741	0.002
	AlF2+	1.155e-010	1.008e-010	-9.938	-9.996	-0.059
	MnF+	9.262e-011	8.086e-011	-10.033	-10.092	-0.059
	AlF+2	5.372e-011	3.121e-011	-10.270	-10.506	-0.236

BF(OH)3-	1.256e-011	1.097e-011	-10.901	-10.960	-0.059
AlF3	8.530e-012	8.569e-012	-11.069	-11.067	0.002
FeF+	3.296e-014	2.877e-014	-13.482	-13.541	-0.059
AlF4-	2.661e-014	2.324e-014	-13.575	-13.634	-0.059
FeF+2	2.382e-014	1.384e-014	-13.623	-13.859	-0.236
HF2-	4.937e-015	4.310e-015	-14.307	-14.366	-0.059
FeF2+	3.777e-015	3.298e-015	-14.423	-14.482	-0.059
BF2(OH)2-	1.995e-016	1.741e-016	-15.700	-15.759	-0.059
FeF3	3.421e-017	3.437e-017	-16.466	-16.464	0.002
AlF5-2	4.427e-018	2.572e-018	-17.354	-17.590	-0.236
AlF6-3	7.429e-023	2.190e-023	-22.129	-22.660	-0.531
BF3OH-	3.913e-023	3.416e-023	-22.408	-22.466	-0.059
BF4-	2.362e-029	2.062e-029	-28.627	-28.686	-0.059
SiF6-2	8.676e-036	5.041e-036	-35.062	-35.298	-0.236
Fe(2)	1.271e-009				
Fe+2	7.017e-010	4.214e-010	-9.154	-9.375	-0.221
FeHCO3+	3.570e-010	3.117e-010	-9.447	-9.506	-0.059
FeCO3	1.275e-010	1.281e-010	-9.895	-9.893	0.002
FeSO4	8.130e-011	8.167e-011	-10.090	-10.088	0.002
FeOH+	3.114e-012	2.719e-012	-11.507	-11.566	-0.059
FeCl+	2.125e-013	1.855e-013	-12.673	-12.732	-0.059
FeF+	3.296e-014	2.877e-014	-13.482	-13.541	-0.059
Fe(HS)2	4.535e-015	4.556e-015	-14.343	-14.341	0.002
FeHSO4+	1.289e-017	1.125e-017	-16.890	-16.949	-0.059
Fe(HS)3-	6.259e-020	5.465e-020	-19.203	-19.262	-0.059
Fe(3)	1.200e-005				
Fe(OH)3	8.943e-006	8.984e-006	-5.049	-5.047	0.002
Fe(OH)2+	2.771e-006	2.419e-006	-5.557	-5.616	-0.059
Fe(OH)4-	2.809e-007	2.453e-007	-6.551	-6.610	-0.059
FeOH+2	4.097e-010	2.380e-010	-9.388	-9.623	-0.236
FeF+2	2.382e-014	1.384e-014	-13.623	-13.859	-0.236
FeSO4+	1.988e-014	1.735e-014	-13.702	-13.761	-0.059
Fe+3	4.267e-015	1.516e-015	-14.370	-14.819	-0.450
FeF2+	3.777e-015	3.298e-015	-14.423	-14.482	-0.059
Fe(SO4)2-	5.559e-016	4.854e-016	-15.255	-15.314	-0.059
FeF3	3.421e-017	3.437e-017	-16.466	-16.464	0.002
Fe2(OH)2+4	2.117e-017	2.413e-018	-16.674	-17.617	-0.943
FeCl+2	1.767e-017	1.027e-017	-16.753	-16.989	-0.236
Fe3(OH)4+5	1.011e-019	3.396e-021	-18.995	-20.469	-1.474
FeCl2+	2.382e-020	2.080e-020	-19.623	-19.682	-0.059
FeHSO4+2	1.749e-021	1.016e-021	-20.757	-20.993	-0.236
FeCl3	6.603e-025	6.633e-025	-24.180	-24.178	0.002
H(0)	1.503e-034				
H2	7.516e-035	7.551e-035	-34.124	-34.122	0.002
K	4.859e-005				
K+	4.822e-005	4.194e-005	-4.317	-4.377	-0.061
KSO4-	3.713e-007	3.242e-007	-6.430	-6.489	-0.059
KOH	6.769e-012	6.800e-012	-11.169	-11.167	0.002
Li	4.323e-007				
Li+	4.298e-007	3.784e-007	-6.367	-6.422	-0.055
LiSO4-	2.526e-009	2.205e-009	-8.598	-8.657	-0.059
LiOH	4.034e-013	4.053e-013	-12.394	-12.392	0.002
Mg	2.180e-003				
Mg+2	1.810e-003	1.087e-003	-2.742	-2.964	-0.222
MgSO4	2.544e-004	2.556e-004	-3.595	-3.593	0.002
MgHCO3+	1.040e-004	9.081e-005	-3.983	-4.042	-0.059
MgCO3	1.110e-005	1.115e-005	-4.955	-4.953	0.002
MgF+	4.593e-007	4.010e-007	-6.338	-6.397	-0.059

MgOH+	7.757e-008	6.772e-008	-7.110	-7.169	-0.059
Mn (2)	6.189e-006				
Mn+2	2.850e-006	1.712e-006	-5.545	-5.767	-0.221
MnCO3	1.715e-006	1.723e-006	-5.766	-5.764	0.002
MnHCO3+	1.293e-006	1.129e-006	-5.889	-5.947	-0.059
MnSO4	3.273e-007	3.289e-007	-6.485	-6.483	0.002
MnCl+	2.547e-009	2.224e-009	-8.594	-8.653	-0.059
MnOH+	9.536e-010	8.325e-010	-9.021	-9.080	-0.059
MnF+	9.262e-011	8.086e-011	-10.033	-10.092	-0.059
MnCl2	3.082e-013	3.097e-013	-12.511	-12.509	0.002
MnCl3-	3.116e-017	2.720e-017	-16.506	-16.565	-0.059
Mn (3)	2.455e-024				
Mn+3	2.455e-024	7.236e-025	-23.610	-24.140	-0.531
Na	1.218e-003				
Na+	1.206e-003	1.055e-003	-2.919	-2.977	-0.058
NaSO4-	7.534e-006	6.578e-006	-5.123	-5.182	-0.059
NaHCO3	4.367e-006	4.387e-006	-5.360	-5.358	0.002
NaCO3-	1.628e-007	1.422e-007	-6.788	-6.847	-0.059
NaF	4.125e-009	4.144e-009	-8.385	-8.383	0.002
NaOH	3.243e-010	3.258e-010	-9.489	-9.487	0.002
O (0)	3.811e-028				
O2	1.906e-028	1.914e-028	-27.720	-27.718	0.002
S (-2)	1.559e-007				
HS-	1.267e-007	1.101e-007	-6.897	-6.958	-0.061
H2S	2.922e-008	2.936e-008	-7.534	-7.532	0.002
S-2	4.939e-013	2.909e-013	-12.306	-12.536	-0.230
Fe (HS) 2	4.535e-015	4.556e-015	-14.343	-14.341	0.002
Fe (HS) 3-	6.259e-020	5.465e-020	-19.203	-19.262	-0.059
S (6)	2.998e-003				
SO4-2	2.270e-003	1.335e-003	-2.644	-2.874	-0.231
CaSO4	4.644e-004	4.666e-004	-3.333	-3.331	0.002
MgSO4	2.544e-004	2.556e-004	-3.595	-3.593	0.002
NaSO4-	7.534e-006	6.578e-006	-5.123	-5.182	-0.059
SrSO4	6.222e-007	6.251e-007	-6.206	-6.204	0.002
KSO4-	3.713e-007	3.242e-007	-6.430	-6.489	-0.059
MnSO4	3.273e-007	3.289e-007	-6.485	-6.483	0.002
HSO4-	2.544e-009	2.221e-009	-8.595	-8.653	-0.059
LiSO4-	2.526e-009	2.205e-009	-8.598	-8.657	-0.059
FeSO4	8.130e-011	8.167e-011	-10.090	-10.088	0.002
CaHSO4+	5.942e-011	5.187e-011	-10.226	-10.285	-0.059
AlSO4+	2.046e-012	1.786e-012	-11.689	-11.748	-0.059
Al (SO4) 2-	8.204e-014	7.163e-014	-13.086	-13.145	-0.059
FeSO4+	1.988e-014	1.735e-014	-13.702	-13.761	-0.059
Fe (SO4) 2-	5.559e-016	4.854e-016	-15.255	-15.314	-0.059
FeHSO4+	1.289e-017	1.125e-017	-16.890	-16.949	-0.059
AlHSO4+2	5.386e-021	3.129e-021	-20.269	-20.505	-0.236
FeHSO4+2	1.749e-021	1.016e-021	-20.757	-20.993	-0.236
Si	5.659e-005				
H4SiO4	5.629e-005	5.655e-005	-4.250	-4.248	0.002
H3SiO4-	2.996e-007	2.615e-007	-6.524	-6.582	-0.059
H2SiO4-2	6.814e-013	3.959e-013	-12.167	-12.402	-0.236
SiF6-2	8.676e-036	5.041e-036	-35.062	-35.298	-0.236
Sr	5.478e-006				
Sr+2	4.595e-006	2.736e-006	-5.338	-5.563	-0.225
SrSO4	6.222e-007	6.251e-007	-6.206	-6.204	0.002
SrHCO3+	2.446e-007	2.147e-007	-6.612	-6.668	-0.057
SrCO3	1.606e-008	1.613e-008	-7.794	-7.792	0.002
SrOH+	7.490e-012	6.562e-012	-11.126	-11.183	-0.057

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-0.82	10.70	11.52	Al(OH)3
Albite	-2.47	-21.17	-18.71	NaAlSi3O8
Alunite	-1.01	-1.04	-0.03	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-1.25	-5.59	-4.33	CaSO4
Anorthite	-2.09	-22.12	-20.03	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.67	-7.61	-8.28	CaCO3
Ca-Montmorillonite	2.53	-44.09	-46.62	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	0.82	-7.61	-8.43	CaCO3
Celestite	-1.82	-8.44	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-0.57	-4.25	-3.68	SiO2
Chlorite(14A)	-1.98	70.53	72.51	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-4.94	28.63	33.57	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-2.05	-3.38	-1.33	CO2
Dolomite	1.36	-15.47	-16.83	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	3.30	8.19	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-4.75	-8.66	-3.92	FeS
Fluorite	-2.31	-13.04	-10.74	CaF2
Gibbsite	1.97	10.70	8.73	Al(OH)3
Goethite	8.80	8.19	-0.60	FeOOH
Gypsum	-1.00	-5.59	-4.59	CaSO4:2H2O
H2(g)	-31.02	-34.12	-3.10	H2
H2O(g)	-1.80	-0.00	1.80	H2O
H2S(g)	-6.66	-7.53	-0.87	H2S
Halite	-8.03	-6.47	1.56	NaCl
Hausmannite	-4.04	59.74	63.78	Mn3O4
Hematite	19.55	16.38	-3.17	Fe2O3
Illite	1.78	-39.98	-41.76	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-0.21	-8.57	-8.36	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-1.16	-22.57	-21.41	KAlSi3O8
K-mica	8.32	22.65	14.32	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	4.50	12.90	8.40	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	-4.02	-8.66	-4.65	FeS
Manganite	-0.26	25.08	25.34	MnOOH
Melanterite	-9.90	-12.25	-2.35	FeSO4:7H2O
O2(g)	-24.91	-27.72	-2.81	O2
Pyrite	26.52	7.73	-18.79	FeS2
Pyrochroite	-5.63	9.57	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-2.56	40.59	43.16	MnO2
Quartz	-0.10	-4.25	-4.14	SiO2
Rhodochrosite	0.43	-10.66	-11.09	MnCO3
Sepiolite	-4.04	12.01	16.05	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-6.65	12.01	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	-3.45	-14.27	-10.82	FeCO3
SiO2(a)	-1.44	-4.25	-2.80	SiO2
Strontianite	-1.18	-10.46	-9.28	SrCO3
Sulfur	18.35	23.49	5.14	S
Talc	-2.53	20.14	22.66	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Wasserprobe: E4 Erlengraben

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\E4 Erlengraben 2015_05_06.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\E4 Erlengraben 2015_05_06.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 E4 Erlengraben(2015_05_06)

temp	14.3
pH	7.9
pe	7.35
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	0.005
F	0.16
Cl	27
Alkalinity	409
S(6)	118
Li	0.007
Na	15
K	1.6
Ca	145
Mg	22.0
Sr	0.30
B	0.005
Si	3.4
Al	0.11
Fe	0.67
Mn	0.34
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. E4 Erlengraben(2015_05_06)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	4.077e-006	4.077e-006
Alkalinity	8.173e-003	8.173e-003
B	4.625e-007	4.625e-007
Ca	3.618e-003	3.618e-003
Cl	7.616e-004	7.616e-004
F	8.422e-006	8.422e-006
Fe	1.200e-005	1.200e-005
K	4.092e-005	4.092e-005
Li	1.009e-006	1.009e-006
Mg	9.049e-004	9.049e-004
Mn	6.189e-006	6.189e-006
Na	6.525e-004	6.525e-004
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	1.228e-003	1.228e-003
Si	5.659e-005	5.659e-005
Sr	3.424e-006	3.424e-006

-----Description of solution-----

pH = 7.900
 pe = 7.350
 Specific Conductance (uS/cm, 14 oC) = 711
 Density (g/cm3) = 0.99990
 Activity of water = 1.000
 Ionic strength = 1.466e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 8.275e-003
 Total CO2 (mol/kg) = 8.275e-003
 Temperature (deg C) = 14.300
 Electrical balance (eq) = -1.616e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -8.35
 Iterations = 8
 Total H = 1.110207e+002
 Total O = 5.553600e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-4.0143	-0.2289

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	3.814e-007	3.374e-007	-6.419	-6.472	-0.053
H+	1.395e-008	1.259e-008	-7.855	-7.900	-0.045
H2O	5.551e+001	9.997e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	4.077e-006				
Al(OH)4-	4.044e-006	3.589e-006	-5.393	-5.445	-0.052
Al(OH)3	2.672e-008	2.681e-008	-7.573	-7.572	0.001
Al(OH)2+	6.024e-009	5.346e-009	-8.220	-8.272	-0.052
AlOH+2	3.751e-011	2.326e-011	-10.426	-10.633	-0.207
AlF2+	1.535e-011	1.362e-011	-10.814	-10.866	-0.052

	AlF+2	6.490e-012	4.025e-012	-11.188	-11.395	-0.207
	AlF3	1.209e-012	1.213e-012	-11.917	-11.916	0.001
	Al+3	1.518e-013	6.012e-014	-12.819	-13.221	-0.402
	AlSO4+	1.112e-013	9.870e-014	-12.954	-13.006	-0.052
	AlF4-	3.886e-015	3.448e-015	-14.411	-14.462	-0.052
	Al(SO4)2-	2.003e-015	1.777e-015	-14.698	-14.750	-0.052
	AlF5-2	6.449e-019	4.000e-019	-18.190	-18.398	-0.207
	AlHSO4+2	1.642e-022	1.018e-022	-21.785	-21.992	-0.207
	AlF6-3	1.045e-023	3.568e-024	-22.981	-23.448	-0.467
B		4.625e-007				
	H3BO3	4.438e-007	4.453e-007	-6.353	-6.351	0.001
	H2BO3-	1.873e-008	1.662e-008	-7.727	-7.779	-0.052
	BF(OH)3-	1.273e-012	1.129e-012	-11.895	-11.947	-0.052
	BF2(OH)2-	1.247e-017	1.106e-017	-16.904	-16.956	-0.052
	BF3OH-	1.509e-024	1.339e-024	-23.821	-23.873	-0.052
	BF4-	5.621e-031	4.988e-031	-30.250	-30.302	-0.052
C(4)		8.275e-003				
	HCO3-	7.736e-003	6.895e-003	-2.111	-2.161	-0.050
	CO2	2.300e-004	2.308e-004	-3.638	-3.637	0.001
	CaHCO3+	1.614e-004	1.438e-004	-3.792	-3.842	-0.050
	CaCO3	5.696e-005	5.715e-005	-4.244	-4.243	0.001
	MgHCO3+	4.460e-005	3.958e-005	-4.351	-4.403	-0.052
	CO3-2	3.177e-005	2.005e-005	-4.498	-4.698	-0.200
	MgCO3	8.223e-006	8.251e-006	-5.085	-5.084	0.001
	MnCO3	2.494e-006	2.502e-006	-5.603	-5.602	0.001
	NaHCO3	2.226e-006	2.234e-006	-5.652	-5.651	0.001
	MnHCO3+	1.088e-006	9.652e-007	-5.964	-6.015	-0.052
	SrHCO3+	1.583e-007	1.411e-007	-6.801	-6.850	-0.050
	NaCO3-	1.385e-007	1.229e-007	-6.858	-6.910	-0.052
	SrCO3	1.795e-008	1.801e-008	-7.746	-7.745	0.001
	FeHCO3+	2.247e-010	1.994e-010	-9.648	-9.700	-0.052
	FeCO3	1.386e-010	1.391e-010	-9.858	-9.857	0.001
Ca		3.618e-003				
	Ca+2	3.183e-003	2.009e-003	-2.497	-2.697	-0.200
	CaSO4	2.159e-004	2.166e-004	-3.666	-3.664	0.001
	CaHCO3+	1.614e-004	1.438e-004	-3.792	-3.842	-0.050
	CaCO3	5.696e-005	5.715e-005	-4.244	-4.243	0.001
	CaF+	1.089e-007	9.663e-008	-6.963	-7.015	-0.052
	CaOH+	2.983e-008	2.647e-008	-7.525	-7.577	-0.052
	CaHSO4+	1.598e-011	1.418e-011	-10.796	-10.848	-0.052
Cl		7.616e-004				
	Cl-	7.616e-004	6.740e-004	-3.118	-3.171	-0.053
	MnCl+	4.860e-009	4.313e-009	-8.313	-8.365	-0.052
	MnCl2	1.265e-012	1.269e-012	-11.898	-11.897	0.001
	FeCl+	3.031e-013	2.690e-013	-12.518	-12.570	-0.052
	MnCl3-	2.655e-016	2.356e-016	-15.576	-15.628	-0.052
	FeCl+2	7.769e-018	4.818e-018	-17.110	-17.317	-0.207
	FeCl2+	2.324e-020	2.062e-020	-19.634	-19.686	-0.052
	FeCl3	1.385e-024	1.390e-024	-23.858	-23.857	0.001
F		8.422e-006				
	F-	8.089e-006	7.156e-006	-5.092	-5.145	-0.053
	MgF+	2.214e-007	1.965e-007	-6.655	-6.707	-0.052
	CaF+	1.089e-007	9.663e-008	-6.963	-7.015	-0.052
	NaF	2.364e-009	2.372e-009	-8.626	-8.625	0.001
	HF	1.115e-010	1.119e-010	-9.953	-9.951	0.001
	MnF+	8.761e-011	7.775e-011	-10.057	-10.109	-0.052
	AlF2+	1.535e-011	1.362e-011	-10.814	-10.866	-0.052
	AlF+2	6.490e-012	4.025e-012	-11.188	-11.395	-0.207

BF(OH)3-	1.273e-012	1.129e-012	-11.895	-11.947	-0.052
AlF3	1.209e-012	1.213e-012	-11.917	-11.916	0.001
FeF+	2.331e-014	2.069e-014	-13.632	-13.684	-0.052
FeF+2	5.193e-015	3.221e-015	-14.285	-14.492	-0.207
AlF4-	3.886e-015	3.448e-015	-14.411	-14.462	-0.052
HF2-	3.141e-015	2.787e-015	-14.503	-14.555	-0.052
FeF2+	9.061e-016	8.041e-016	-15.043	-15.095	-0.052
BF2(OH)2-	1.247e-017	1.106e-017	-16.904	-16.956	-0.052
FeF3	8.752e-018	8.782e-018	-17.058	-17.056	0.001
AlF5-2	6.449e-019	4.000e-019	-18.190	-18.398	-0.207
AlF6-3	1.045e-023	3.568e-024	-22.981	-23.448	-0.467
BF3OH-	1.509e-024	1.339e-024	-23.821	-23.873	-0.052
BF4-	5.621e-031	4.988e-031	-30.250	-30.302	-0.052
SiF6-2	1.288e-036	7.985e-037	-35.890	-36.098	-0.207
Fe(2)	8.463e-010				
Fe+2	4.540e-010	2.891e-010	-9.343	-9.539	-0.196
FeHCO3+	2.247e-010	1.994e-010	-9.648	-9.700	-0.052
FeCO3	1.386e-010	1.391e-010	-9.858	-9.857	0.001
FeSO4	2.508e-011	2.516e-011	-10.601	-10.599	0.001
FeOH+	3.570e-012	3.168e-012	-11.447	-11.499	-0.052
FeCl+	3.031e-013	2.690e-013	-12.518	-12.570	-0.052
FeF+	2.331e-014	2.069e-014	-13.632	-13.684	-0.052
Fe(HS)2	3.771e-015	3.784e-015	-14.424	-14.422	0.001
FeHSO4+	2.300e-018	2.041e-018	-17.638	-17.690	-0.052
Fe(HS)3-	5.626e-020	4.993e-020	-19.250	-19.302	-0.052
Fe(3)	1.200e-005				
Fe(OH)3	9.739e-006	9.772e-006	-5.011	-5.010	0.001
Fe(OH)2+	1.746e-006	1.550e-006	-5.758	-5.810	-0.052
Fe(OH)4-	5.105e-007	4.531e-007	-6.292	-6.344	-0.052
FeOH+2	1.447e-010	8.977e-011	-9.839	-10.047	-0.207
FeF+2	5.193e-015	3.221e-015	-14.285	-14.492	-0.207
FeSO4+	1.950e-015	1.730e-015	-14.710	-14.762	-0.052
FeF2+	9.061e-016	8.041e-016	-15.043	-15.095	-0.052
Fe+3	8.498e-016	3.365e-016	-15.071	-15.473	-0.402
Fe(SO4)2-	2.448e-017	2.173e-017	-16.611	-16.663	-0.052
FeF3	8.752e-018	8.782e-018	-17.058	-17.056	0.001
FeCl+2	7.769e-018	4.818e-018	-17.110	-17.317	-0.207
Fe2(OH)2+4	2.319e-018	3.431e-019	-17.635	-18.465	-0.830
FeCl2+	2.324e-020	2.062e-020	-19.634	-19.686	-0.052
Fe3(OH)4+5	6.124e-021	3.093e-022	-20.213	-21.510	-1.297
FeHSO4+2	9.621e-023	5.967e-023	-22.017	-22.224	-0.207
FeCl3	1.385e-024	1.390e-024	-23.858	-23.857	0.001
H(0)	4.984e-034				
H2	2.492e-034	2.500e-034	-33.603	-33.602	0.001
K	4.092e-005				
K+	4.078e-005	3.609e-005	-4.390	-4.443	-0.053
KSO4-	1.411e-007	1.253e-007	-6.850	-6.902	-0.052
KOH	9.904e-012	9.938e-012	-11.004	-11.003	0.001
Li	1.009e-006				
Li+	1.006e-006	8.988e-007	-5.997	-6.046	-0.049
LiSO4-	2.650e-009	2.352e-009	-8.577	-8.629	-0.052
LiOH	1.630e-012	1.635e-012	-11.788	-11.786	0.001
Mg	9.049e-004				
Mg+2	7.983e-004	5.081e-004	-3.098	-3.294	-0.196
MgSO4	5.347e-005	5.365e-005	-4.272	-4.270	0.001
MgHCO3+	4.460e-005	3.958e-005	-4.351	-4.403	-0.052
MgCO3	8.223e-006	8.251e-006	-5.085	-5.084	0.001
MgF+	2.214e-007	1.965e-007	-6.655	-6.707	-0.052

MgOH+	6.060e-008	5.378e-008	-7.218	-7.269	-0.052
Mn(2)	6.189e-006				
MnCO3	2.494e-006	2.502e-006	-5.603	-5.602	0.001
Mn+2	2.466e-006	1.571e-006	-5.608	-5.804	-0.196
MnHCO3+	1.088e-006	9.652e-007	-5.964	-6.015	-0.052
MnSO4	1.350e-007	1.355e-007	-6.870	-6.868	0.001
MnCl+	4.860e-009	4.313e-009	-8.313	-8.365	-0.052
MnOH+	1.462e-009	1.297e-009	-8.835	-8.887	-0.052
MnF+	8.761e-011	7.775e-011	-10.057	-10.109	-0.052
MnCl2	1.265e-012	1.269e-012	-11.898	-11.897	0.001
MnCl3-	2.655e-016	2.356e-016	-15.576	-15.628	-0.052
Mn(3)	6.294e-025				
Mn+3	6.294e-025	2.148e-025	-24.201	-24.668	-0.467
Na	6.525e-004				
Na+	6.483e-004	5.761e-004	-3.188	-3.239	-0.051
NaHCO3	2.226e-006	2.234e-006	-5.652	-5.651	0.001
NaSO4-	1.818e-006	1.613e-006	-5.740	-5.792	-0.052
NaCO3-	1.385e-007	1.229e-007	-6.858	-6.910	-0.052
NaF	2.364e-009	2.372e-009	-8.626	-8.625	0.001
NaOH	3.013e-010	3.023e-010	-9.521	-9.520	0.001
O(0)	3.481e-029				
O2	1.740e-029	1.746e-029	-28.759	-28.758	0.001
S(-2)	1.559e-007				
HS-	1.370e-007	1.212e-007	-6.863	-6.917	-0.053
H2S	1.895e-008	1.902e-008	-7.722	-7.721	0.001
S-2	8.664e-013	5.436e-013	-12.062	-12.265	-0.202
Fe(HS)2	3.771e-015	3.784e-015	-14.424	-14.422	0.001
Fe(HS)3-	5.626e-020	4.993e-020	-19.250	-19.302	-0.052
S(6)	1.228e-003				
SO4-2	9.567e-004	5.995e-004	-3.019	-3.222	-0.203
CaSO4	2.159e-004	2.166e-004	-3.666	-3.664	0.001
MgSO4	5.347e-005	5.365e-005	-4.272	-4.270	0.001
NaSO4-	1.818e-006	1.613e-006	-5.740	-5.792	-0.052
SrSO4	1.972e-007	1.979e-007	-6.705	-6.704	0.001
KSO4-	1.411e-007	1.253e-007	-6.850	-6.902	-0.052
MnSO4	1.350e-007	1.355e-007	-6.870	-6.868	0.001
LiSO4-	2.650e-009	2.352e-009	-8.577	-8.629	-0.052
HSO4-	6.617e-010	5.872e-010	-9.179	-9.231	-0.052
FeSO4	2.508e-011	2.516e-011	-10.601	-10.599	0.001
CaHSO4+	1.598e-011	1.418e-011	-10.796	-10.848	-0.052
AlSO4+	1.112e-013	9.870e-014	-12.954	-13.006	-0.052
Al(SO4)2-	2.003e-015	1.777e-015	-14.698	-14.750	-0.052
FeSO4+	1.950e-015	1.730e-015	-14.710	-14.762	-0.052
Fe(SO4)2-	2.448e-017	2.173e-017	-16.611	-16.663	-0.052
FeHSO4+	2.300e-018	2.041e-018	-17.638	-17.690	-0.052
AlHSO4+2	1.642e-022	1.018e-022	-21.785	-21.992	-0.207
FeHSO4+2	9.621e-023	5.967e-023	-22.017	-22.224	-0.207
Si	5.659e-005				
H4SiO4	5.609e-005	5.628e-005	-4.251	-4.250	0.001
H3SiO4-	4.981e-007	4.421e-007	-6.303	-6.355	-0.052
H2SiO4-2	1.832e-012	1.136e-012	-11.737	-11.944	-0.207
SiF6-2	1.288e-036	7.985e-037	-35.890	-36.098	-0.207
Sr	3.424e-006				
Sr+2	3.050e-006	1.929e-006	-5.516	-5.715	-0.199
SrSO4	1.972e-007	1.979e-007	-6.705	-6.704	0.001
SrHCO3+	1.583e-007	1.411e-007	-6.801	-6.850	-0.050
SrCO3	1.795e-008	1.801e-008	-7.746	-7.745	0.001
SrOH+	8.829e-012	7.858e-012	-11.054	-11.105	-0.051

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-1.04	10.48	11.52	Al(OH)3
Albite	-2.72	-21.43	-18.71	NaAlSi3O8
Alunite	-3.12	-3.15	-0.03	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-1.58	-5.92	-4.33	CaSO4
Anorthite	-2.06	-22.09	-20.03	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.88	-7.39	-8.28	CaCO3
Ca-Montmorillonite	2.09	-44.53	-46.62	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	1.03	-7.39	-8.43	CaCO3
Celestite	-2.31	-8.94	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-0.57	-4.25	-3.68	SiO2
Chlorite(14A)	-1.78	70.74	72.51	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-4.56	29.02	33.57	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-2.31	-3.64	-1.33	CO2
Dolomite	1.45	-15.39	-16.83	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	3.34	8.23	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-4.64	-8.56	-3.92	FeS
Fluorite	-2.25	-12.99	-10.74	CaF2
Gibbsite	1.75	10.48	8.73	Al(OH)3
Goethite	8.83	8.23	-0.60	FeOOH
Gypsum	-1.33	-5.92	-4.59	CaSO4:2H2O
H2(g)	-30.50	-33.60	-3.10	H2
H2O(g)	-1.80	-0.00	1.80	H2O
H2S(g)	-6.85	-7.72	-0.87	H2S
Halite	-7.97	-6.41	1.56	NaCl
Hausmannite	-3.29	60.49	63.78	Mn3O4
Hematite	19.62	16.45	-3.17	Fe2O3
Illite	1.39	-40.37	-41.76	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-1.55	-9.91	-8.36	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-1.22	-22.64	-21.41	KAlSi3O8
K-mica	7.82	22.15	14.32	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	4.06	12.46	8.40	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	-3.91	-8.56	-4.65	FeS
Manganite	-0.09	25.25	25.34	MnOOH
Melanterite	-10.41	-12.76	-2.35	FeSO4:7H2O
O2(g)	-25.95	-28.76	-2.81	O2
Pyrite	25.92	7.13	-18.79	FeS2
Pyrochroite	-5.20	10.00	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-2.66	40.50	43.16	MnO2
Quartz	-0.11	-4.25	-4.14	SiO2
Rhodochrosite	0.59	-10.50	-11.09	MnCO3
Sepiolite	-3.79	12.26	16.05	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-6.40	12.26	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	-3.41	-14.24	-10.82	FeCO3
SiO2(a)	-1.45	-4.25	-2.80	SiO2
Strontianite	-1.14	-10.41	-9.28	SrCO3
Sulfur	17.64	22.78	5.14	S
Talc	-2.14	20.52	22.66	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Wasserprobe: H1 Hengstbach Quelle

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\H1 Hengstbach Quelle
2015_05_05.pqi

Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\H1 Hengstbach Quelle
2015_05_05.pgo

Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 H1 Hengstbach Quelle (2015_05_06)

temp	20.7
pH	7.68
pe	6.3
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	0.005
F	0.35
Cl	20.4
Alkalinity	505
S(6)	378
Li	0.05
Na	68.6
K	2.2
Ca	204
Mg	45
Sr	1
B	0.25
Si	5.1
Al	0.076
Fe	1.69
Mn	0.24
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. H1 Hengstbach Quelle (2015_05_06)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	2.817e-006	2.817e-006
Alkalinity	1.009e-002	1.009e-002
B	2.313e-005	2.313e-005
Ca	5.090e-003	5.090e-003
Cl	5.754e-004	5.754e-004
F	1.842e-005	1.842e-005
Fe	3.026e-005	3.026e-005
K	5.626e-005	5.626e-005
Li	7.206e-006	7.206e-006
Mg	1.851e-003	1.851e-003
Mn	4.369e-006	4.369e-006
Na	2.984e-003	2.984e-003
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	3.935e-003	3.935e-003
Si	8.488e-005	8.488e-005
Sr	1.141e-005	1.141e-005

-----Description of solution-----

pH	=	7.680
pe	=	6.300
Specific Conductance (uS/cm, 20 oC)	=	1309
Density (g/cm3)	=	0.99921
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	2.364e-002
Mass of water (kg)	=	1.000e+000
Total carbon (mol/kg)	=	1.036e-002
Total CO2 (mol/kg)	=	1.036e-002
Temperature (deg C)	=	20.700
Electrical balance (eq)	=	-1.555e-003
Percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	-5.12
Iterations	=	8
Total H	=	1.110228e+002
Total O	=	5.555312e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-3.8333	-0.2235

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	3.998e-007	3.434e-007	-6.398	-6.464	-0.066
H+	2.363e-008	2.089e-008	-7.627	-7.680	-0.053
H2O	5.551e+001	9.996e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	2.817e-006				
Al(OH)4-	2.782e-006	2.402e-006	-5.556	-5.619	-0.064
Al(OH)3	2.794e-008	2.809e-008	-7.554	-7.551	0.002
Al(OH)2+	6.393e-009	5.520e-009	-8.194	-8.258	-0.064

AlF2+	7.290e-011	6.294e-011	-10.137	-10.201	-0.064
AlOH+2	3.894e-011	2.163e-011	-10.410	-10.665	-0.255
AlF+2	1.564e-011	8.692e-012	-10.806	-11.061	-0.255
AlF3	1.160e-011	1.166e-011	-10.936	-10.933	0.002
AlSO4+	3.417e-013	2.950e-013	-12.466	-12.530	-0.064
Al+3	1.829e-013	6.037e-014	-12.738	-13.219	-0.481
AlF4-	7.939e-014	6.854e-014	-13.100	-13.164	-0.064
Al(SO4)2-	1.731e-014	1.495e-014	-13.762	-13.825	-0.064
AlF5-2	2.916e-017	1.620e-017	-16.535	-16.791	-0.255
AlF6-3	9.796e-022	2.611e-022	-21.009	-21.583	-0.574
AlHSO4+2	9.491e-022	5.274e-022	-21.023	-21.278	-0.255
B	2.313e-005				
H3BO3	2.246e-005	2.258e-005	-4.649	-4.646	0.002
H2BO3-	6.653e-007	5.744e-007	-6.177	-6.241	-0.064
BF(OH)3-	1.470e-010	1.270e-010	-9.833	-9.896	-0.064
BF2(OH)2-	4.895e-015	4.226e-015	-14.310	-14.374	-0.064
BF3OH-	1.796e-021	1.551e-021	-20.746	-20.809	-0.064
BF4-	2.273e-027	1.963e-027	-26.643	-26.707	-0.064
C(4)	1.036e-002				
HCO3-	9.478e-003	8.233e-003	-2.023	-2.084	-0.061
CO2	4.080e-004	4.102e-004	-3.389	-3.387	0.002
CaHCO3+	2.596e-004	2.255e-004	-3.586	-3.647	-0.061
MgHCO3+	9.230e-005	7.969e-005	-4.035	-4.099	-0.064
CaCO3	6.003e-005	6.036e-005	-4.222	-4.219	0.002
CO3-2	2.961e-005	1.686e-005	-4.529	-4.773	-0.245
MgCO3	1.261e-005	1.267e-005	-4.899	-4.897	0.002
NaHCO3	1.174e-005	1.181e-005	-4.930	-4.928	0.002
MnCO3	1.391e-006	1.398e-006	-5.857	-5.854	0.002
MnHCO3+	8.873e-007	7.660e-007	-6.052	-6.116	-0.064
NaCO3-	7.443e-007	6.426e-007	-6.128	-6.192	-0.064
SrHCO3+	6.534e-007	5.676e-007	-6.185	-6.246	-0.061
SrCO3	4.924e-008	4.951e-008	-7.308	-7.305	0.002
FeHCO3+	9.296e-009	8.026e-009	-8.032	-8.095	-0.064
FeCO3	3.922e-009	3.943e-009	-8.407	-8.404	0.002
Ca	5.090e-003				
Ca+2	4.051e-003	2.307e-003	-2.392	-2.637	-0.245
CaSO4	7.187e-004	7.226e-004	-3.143	-3.141	0.002
CaHCO3+	2.596e-004	2.255e-004	-3.586	-3.647	-0.061
CaCO3	6.003e-005	6.036e-005	-4.222	-4.219	0.002
CaF+	3.107e-007	2.682e-007	-6.508	-6.571	-0.064
CaOH+	2.122e-008	1.832e-008	-7.673	-7.737	-0.064
CaHSO4+	9.731e-011	8.401e-011	-10.012	-10.076	-0.064
Cl	5.754e-004				
Cl-	5.754e-004	4.946e-004	-3.240	-3.306	-0.066
MnCl+	2.436e-009	2.103e-009	-8.613	-8.677	-0.064
FeCl+	7.708e-012	6.655e-012	-11.113	-11.177	-0.064
MnCl2	4.516e-013	4.541e-013	-12.345	-12.343	0.002
MnCl3-	7.164e-017	6.185e-017	-16.145	-16.209	-0.064
FeCl+2	3.424e-017	1.902e-017	-16.466	-16.721	-0.255
FeCl2+	5.589e-020	4.826e-020	-19.253	-19.316	-0.064
FeCl3	2.374e-024	2.387e-024	-23.625	-23.622	0.002
F	1.842e-005				
F-	1.721e-005	1.478e-005	-4.764	-4.830	-0.066
MgF+	8.795e-007	7.593e-007	-6.056	-6.120	-0.064
CaF+	3.107e-007	2.682e-007	-6.508	-6.571	-0.064
NaF	2.157e-008	2.169e-008	-7.666	-7.664	0.002
HF	4.266e-010	4.289e-010	-9.370	-9.368	0.002
BF(OH)3-	1.470e-010	1.270e-010	-9.833	-9.896	-0.064

MnF+	1.236e-010	1.067e-010	-9.908	-9.972	-0.064
AlF2+	7.290e-011	6.294e-011	-10.137	-10.201	-0.064
AlF+2	1.564e-011	8.692e-012	-10.806	-11.061	-0.255
AlF3	1.160e-011	1.166e-011	-10.936	-10.933	0.002
FeF+	1.669e-012	1.441e-012	-11.778	-11.841	-0.064
AlF4-	7.939e-014	6.854e-014	-13.100	-13.164	-0.064
FeF+2	5.768e-014	3.205e-014	-13.239	-13.494	-0.255
HF2-	2.719e-014	2.347e-014	-13.566	-13.629	-0.064
FeF2+	2.074e-014	1.790e-014	-13.683	-13.747	-0.064
BF2 (OH) 2-	4.895e-015	4.226e-015	-14.310	-14.374	-0.064
FeF3	4.110e-016	4.133e-016	-15.386	-15.384	0.002
AlF5-2	2.916e-017	1.620e-017	-16.535	-16.791	-0.255
BF3OH-	1.796e-021	1.551e-021	-20.746	-20.809	-0.064
AlF6-3	9.796e-022	2.611e-022	-21.009	-21.583	-0.574
BF4-	2.273e-027	1.963e-027	-26.643	-26.707	-0.064
SiF6-2	6.863e-034	3.813e-034	-33.163	-33.419	-0.255
Fe (2)	3.285e-008				
Fe+2	1.689e-008	9.748e-009	-7.772	-8.011	-0.239
FeHCO3+	9.296e-009	8.026e-009	-8.032	-8.095	-0.064
FeCO3	3.922e-009	3.943e-009	-8.407	-8.404	0.002
FeSO4	2.603e-009	2.617e-009	-8.585	-8.582	0.002
FeOH+	1.233e-010	1.065e-010	-9.909	-9.973	-0.064
FeCl+	7.708e-012	6.655e-012	-11.113	-11.177	-0.064
FeF+	1.669e-012	1.441e-012	-11.778	-11.841	-0.064
Fe (HS) 2	1.116e-013	1.122e-013	-12.952	-12.950	0.002
FeHSO4+	4.112e-016	3.550e-016	-15.386	-15.450	-0.064
Fe (HS) 3-	1.608e-018	1.388e-018	-17.794	-17.857	-0.064
Fe (3)	3.023e-005				
Fe (OH) 3	2.378e-005	2.391e-005	-4.624	-4.621	0.002
Fe (OH) 2+	5.434e-006	4.692e-006	-5.265	-5.329	-0.064
Fe (OH) 4-	1.014e-006	8.755e-007	-5.994	-6.058	-0.064
FeOH+2	6.289e-010	3.494e-010	-9.201	-9.457	-0.255
FeF+2	5.768e-014	3.205e-014	-13.239	-13.494	-0.255
FeSO4+	2.757e-014	2.381e-014	-13.560	-13.623	-0.064
FeF2+	2.074e-014	1.790e-014	-13.683	-13.747	-0.064
Fe+3	4.432e-015	1.462e-015	-14.353	-14.835	-0.481
Fe (SO4) 2-	9.697e-016	8.372e-016	-15.013	-15.077	-0.064
FeF3	4.110e-016	4.133e-016	-15.386	-15.384	0.002
Fe2 (OH) 2+4	4.130e-017	3.936e-018	-16.384	-17.405	-1.021
FeCl+2	3.424e-017	1.902e-017	-16.466	-16.721	-0.255
Fe3 (OH) 4+5	2.272e-019	5.770e-021	-18.644	-20.239	-1.595
FeCl2+	5.589e-020	4.826e-020	-19.253	-19.316	-0.064
FeHSO4+2	2.408e-021	1.338e-021	-20.618	-20.874	-0.255
FeCl3	2.374e-024	2.387e-024	-23.625	-23.622	0.002
H (0)	1.613e-031				
H2	8.063e-032	8.107e-032	-31.093	-31.091	0.002
K	5.626e-005				
K+	5.567e-005	4.785e-005	-4.254	-4.320	-0.066
KSO4-	5.901e-007	5.095e-007	-6.229	-6.293	-0.064
KOH	7.895e-012	7.938e-012	-11.103	-11.100	0.002
Li	7.206e-006				
Li+	7.154e-006	6.235e-006	-5.145	-5.205	-0.060
LiSO4-	5.155e-008	4.450e-008	-7.288	-7.352	-0.064
LiOH	6.797e-012	6.834e-012	-11.168	-11.165	0.002
Mg	1.851e-003				
Mg+2	1.458e-003	8.415e-004	-2.836	-3.075	-0.239
MgSO4	2.867e-004	2.883e-004	-3.543	-3.540	0.002
MgHCO3+	9.230e-005	7.969e-005	-4.035	-4.099	-0.064

MgCO3	1.261e-005	1.267e-005	-4.899	-4.897	0.002
MgF+	8.795e-007	7.593e-007	-6.056	-6.120	-0.064
MgOH+	1.142e-007	9.858e-008	-6.942	-7.006	-0.064
Mn(2)	4.369e-006				
Mn+2	1.809e-006	1.044e-006	-5.743	-5.981	-0.239
MnCO3	1.391e-006	1.398e-006	-5.857	-5.854	0.002
MnHCO3+	8.873e-007	7.660e-007	-6.052	-6.116	-0.064
MnSO4	2.778e-007	2.793e-007	-6.556	-6.554	0.002
MnCl+	2.436e-009	2.103e-009	-8.613	-8.677	-0.064
MnOH+	1.042e-009	8.996e-010	-8.982	-9.046	-0.064
MnF+	1.236e-010	1.067e-010	-9.908	-9.972	-0.064
MnCl2	4.516e-013	4.541e-013	-12.345	-12.343	0.002
MnCl3-	7.164e-017	6.185e-017	-16.145	-16.209	-0.064
Mn(3)	1.277e-025				
Mn+3	1.277e-025	3.404e-026	-24.894	-25.468	-0.574
Na	2.984e-003				
Na+	2.948e-003	2.550e-003	-2.530	-2.593	-0.063
NaSO4-	2.354e-005	2.033e-005	-4.628	-4.692	-0.064
NaHCO3	1.174e-005	1.181e-005	-4.930	-4.928	0.002
NaCO3-	7.443e-007	6.426e-007	-6.128	-6.192	-0.064
NaF	2.157e-008	2.169e-008	-7.666	-7.664	0.002
NaOH	8.017e-010	8.061e-010	-9.096	-9.094	0.002
O(0)	4.927e-032				
O2	2.463e-032	2.477e-032	-31.608	-31.606	0.002
S(-2)	1.559e-007				
HS-	1.323e-007	1.136e-007	-6.878	-6.944	-0.066
H2S	2.361e-008	2.374e-008	-7.627	-7.624	0.002
S-2	8.634e-013	4.872e-013	-12.064	-12.312	-0.248
Fe(HS)2	1.116e-013	1.122e-013	-12.952	-12.950	0.002
Fe(HS)3-	1.608e-018	1.388e-018	-17.794	-17.857	-0.064
S(6)	3.935e-003				
SO4-2	2.903e-003	1.635e-003	-2.537	-2.786	-0.249
CaSO4	7.187e-004	7.226e-004	-3.143	-3.141	0.002
MgSO4	2.867e-004	2.883e-004	-3.543	-3.540	0.002
NaSO4-	2.354e-005	2.033e-005	-4.628	-4.692	-0.064
SrSO4	1.573e-006	1.581e-006	-5.803	-5.801	0.002
KSO4-	5.901e-007	5.095e-007	-6.229	-6.293	-0.064
MnSO4	2.778e-007	2.793e-007	-6.556	-6.554	0.002
LiSO4-	5.155e-008	4.450e-008	-7.288	-7.352	-0.064
HSO4-	3.508e-009	3.029e-009	-8.455	-8.519	-0.064
FeSO4	2.603e-009	2.617e-009	-8.585	-8.582	0.002
CaHSO4+	9.731e-011	8.401e-011	-10.012	-10.076	-0.064
AlSO4+	3.417e-013	2.950e-013	-12.466	-12.530	-0.064
FeSO4+	2.757e-014	2.381e-014	-13.560	-13.623	-0.064
Al(SO4)2-	1.731e-014	1.495e-014	-13.762	-13.825	-0.064
Fe(SO4)2-	9.697e-016	8.372e-016	-15.013	-15.077	-0.064
FeHSO4+	4.112e-016	3.550e-016	-15.386	-15.450	-0.064
FeHSO4+2	2.408e-021	1.338e-021	-20.618	-20.874	-0.255
AlHSO4+2	9.491e-022	5.274e-022	-21.023	-21.278	-0.255
Si	8.488e-005				
H4SiO4	8.429e-005	8.475e-005	-4.074	-4.072	0.002
H3SiO4-	5.940e-007	5.128e-007	-6.226	-6.290	-0.064
H2SiO4-2	2.255e-012	1.253e-012	-11.647	-11.902	-0.255
SiF6-2	6.863e-034	3.813e-034	-33.163	-33.419	-0.255
Sr	1.141e-005				
Sr+2	9.137e-006	5.222e-006	-5.039	-5.282	-0.243
SrSO4	1.573e-006	1.581e-006	-5.803	-5.801	0.002
SrHCO3+	6.534e-007	5.676e-007	-6.185	-6.246	-0.061

SrCO3	4.924e-008	4.951e-008	-7.308	-7.305	0.002
SrOH+	1.478e-011	1.281e-011	-10.830	-10.892	-0.062

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-1.26	9.82	11.08	Al(OH)3
Albite	-2.15	-20.43	-18.28	NaAlSi3O8
Alunite	-2.61	-3.47	-0.86	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-1.08	-5.42	-4.35	CaSO4
Anorthite	-2.18	-22.02	-19.84	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.90	-7.41	-8.31	CaCO3
Ca-Montmorillonite	1.82	-43.83	-45.65	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	1.05	-7.41	-8.46	CaCO3
Celestite	-1.45	-8.07	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-0.47	-4.07	-3.60	SiO2
Chlorite(14A)	-1.15	68.85	70.00	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-4.03	28.71	32.74	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-1.97	-3.39	-1.42	CO2
Dolomite	1.73	-15.26	-16.99	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	3.31	8.20	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-3.36	-7.28	-3.92	FeS
Fluorite	-1.65	-12.30	-10.65	CaF2
Gibbsite	1.47	9.82	8.35	Al(OH)3
Goethite	9.05	8.20	-0.84	FeOOH
Gypsum	-0.84	-5.42	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-27.96	-31.09	-3.13	H2
H2O(g)	-1.62	-0.00	1.62	H2O
H2S(g)	-6.68	-7.62	-0.95	H2S
Halite	-7.47	-5.90	1.57	NaCl
Hausmannite	-6.01	56.10	62.11	Mn3O4
Hematite	20.09	16.41	-3.68	Fe2O3
Illite	1.10	-39.75	-40.85	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	0.56	-8.32	-8.87	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-1.25	-22.15	-20.90	KAlSi3O8
K-mica	7.27	20.61	-13.34	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	3.68	11.50	7.81	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	-2.63	-7.28	-4.65	FeS
Manganite	-1.98	23.36	25.34	MnOOH
Melanterite	-8.54	-10.80	-2.26	FeSO4:7H2O
O2(g)	-28.75	-31.61	-2.86	O2
Pyrite	24.66	6.06	-18.60	FeS2
Pyrochroite	-5.82	9.38	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-4.74	37.34	42.08	MnO2
Quartz	-0.03	-4.07	-4.04	SiO2
Rhodochrosite	0.36	-10.75	-11.11	MnCO3
Sepiolite	-3.52	12.35	15.87	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-6.31	12.35	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	-1.92	-12.78	-10.86	FeCO3
SiO2(a)	-1.32	-4.07	-2.75	SiO2
Strontianite	-0.79	-10.06	-9.27	SrCO3
Sulfur	15.35	20.34	4.98	S
Talc	-1.33	20.57	21.90	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Wasserprobe: H3 Hengstbach

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\H3 Hengstbach 2015_05_05.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\H3 Hengstbach 2015_05_05.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 H1 Hengstbach Quelle (2015_05_06)

temp	20.9
pH	7.5
pe	5.47
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	0.005
F	0.001
Cl	26.8
Alkalinity	492
S(6)	728
Li	0.01
Na	55.7
K	1.3
Ca	309
Mg	70.3
Sr	1.53
B	0.001
Si	0.027
Al	0.001
Fe	0.001
Mn	0.001
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. H1 Hengstbach Quelle (2015_05_06)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	3.706e-008	3.706e-008
Alkalinity	9.831e-003	9.831e-003
B	9.251e-008	9.251e-008
Ca	7.710e-003	7.710e-003
Cl	7.559e-004	7.559e-004
F	5.264e-008	5.264e-008
Fe	1.791e-008	1.791e-008
K	3.325e-005	3.325e-005
Li	1.441e-006	1.441e-006
Mg	2.892e-003	2.892e-003
Mn	1.820e-008	1.820e-008
Na	2.423e-003	2.423e-003
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	7.578e-003	7.578e-003
Si	4.494e-007	4.494e-007
Sr	1.746e-005	1.746e-005

-----Description of solution-----

pH = 7.500
 pe = 5.470
 Specific Conductance (uS/cm, 20 oC) = 1714
 Density (g/cm3) = 0.99964
 Activity of water = 1.000
 Ionic strength = 3.278e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 1.033e-002
 Total CO2 (mol/kg) = 1.033e-002
 Temperature (deg C) = 20.900
 Electrical balance (eq) = -2.049e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -5.22
 Iterations = 8
 Total H = 1.110221e+002
 Total O = 5.556695e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-3.6013	-0.2101

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	2.744e-007	2.305e-007	-6.562	-6.637	-0.076
H+	3.628e-008	3.162e-008	-7.440	-7.500	-0.060
H2O	5.551e+001	9.995e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	3.706e-008				
Al(OH)4-	3.633e-008	3.074e-008	-7.440	-7.512	-0.073
Al(OH)3	5.390e-010	5.431e-010	-9.268	-9.265	0.003
Al(OH)2+	1.879e-010	1.590e-010	-9.726	-9.799	-0.073
AlOH+2	1.807e-012	9.262e-013	-11.743	-12.033	-0.290
AlSO4+	3.768e-014	3.188e-014	-13.424	-13.496	-0.073

Al+3	1.331e-014	3.861e-015	-13.876	-14.413	-0.537
Al(SO4)2-	3.222e-015	2.726e-015	-14.492	-14.565	-0.073
AlF+2	2.970e-015	1.522e-015	-14.527	-14.818	-0.290
AlF2+	3.566e-017	3.017e-017	-16.448	-16.520	-0.073
AlF3	1.517e-020	1.529e-020	-19.819	-19.816	0.003
AlHSO4+2	1.686e-022	8.641e-023	-21.773	-22.063	-0.290
AlF4-	2.904e-025	2.457e-025	-24.537	-24.610	-0.073
AlF5-2	3.097e-031	1.587e-031	-30.509	-30.799	-0.290
AlF6-3	3.135e-038	6.968e-039	-37.504	-38.157	-0.653
B	9.251e-008				
H3BO3	9.069e-008	9.137e-008	-7.042	-7.039	0.003
H2BO3-	1.822e-009	1.541e-009	-8.740	-8.812	-0.073
BF(OH)3-	1.664e-015	1.408e-015	-14.779	-14.852	-0.073
BF2(OH)2-	2.292e-022	1.939e-022	-21.640	-21.712	-0.073
BF3OH-	3.467e-031	2.934e-031	-30.460	-30.533	-0.073
BF4-	1.816e-039	1.537e-039	-38.741	-38.813	-0.073
C(4)	1.033e-002				
HCO3-	9.205e-003	7.846e-003	-2.036	-2.105	-0.069
CO2	5.855e-004	5.900e-004	-3.232	-3.229	0.003
CaHCO3+	3.324e-004	2.833e-004	-3.478	-3.548	-0.069
MgHCO3+	1.209e-004	1.023e-004	-3.918	-3.990	-0.073
CaCO3	4.993e-005	5.031e-005	-4.302	-4.298	0.003
CO3-2	2.020e-005	1.066e-005	-4.695	-4.972	-0.277
MgCO3	1.074e-005	1.082e-005	-4.969	-4.966	0.003
NaHCO3	8.844e-006	8.911e-006	-5.053	-5.050	0.003
SrHCO3+	8.476e-007	7.225e-007	-6.072	-6.141	-0.069
NaCO3-	3.843e-007	3.252e-007	-6.415	-6.488	-0.073
SrCO3	4.146e-008	4.178e-008	-7.382	-7.379	0.003
MnCO3	3.842e-009	3.871e-009	-8.415	-8.412	0.003
MnHCO3+	3.777e-009	3.196e-009	-8.423	-8.495	-0.073
FeHCO3+	1.088e-010	9.207e-011	-9.963	-10.036	-0.073
FeCO3	2.979e-011	3.002e-011	-10.526	-10.523	0.003
Ca	7.710e-003				
Ca+2	5.736e-003	3.030e-003	-2.241	-2.519	-0.277
CaSO4	1.591e-003	1.603e-003	-2.798	-2.795	0.003
CaHCO3+	3.324e-004	2.833e-004	-3.478	-3.548	-0.069
CaCO3	4.993e-005	5.031e-005	-4.302	-4.298	0.003
CaOH+	1.879e-008	1.590e-008	-7.726	-7.799	-0.073
CaF+	1.144e-009	9.682e-010	-8.941	-9.014	-0.073
CaHSO4+	3.342e-010	2.827e-010	-9.476	-9.549	-0.073
Cl	7.559e-004				
Cl-	7.559e-004	6.355e-004	-3.122	-3.197	-0.075
MnCl+	1.398e-011	1.183e-011	-10.854	-10.927	-0.073
FeCl+	1.217e-013	1.029e-013	-12.915	-12.987	-0.073
MnCl2	3.258e-015	3.282e-015	-14.487	-14.484	0.003
MnCl3-	6.790e-019	5.745e-019	-18.168	-18.241	-0.073
FeCl+2	8.644e-020	4.430e-020	-19.063	-19.354	-0.290
FeCl2+	1.696e-022	1.435e-022	-21.771	-21.843	-0.073
FeCl3	9.050e-027	9.118e-027	-26.043	-26.040	0.003
F	5.264e-008				
F-	4.813e-008	4.042e-008	-7.318	-7.393	-0.076
MgF+	3.315e-009	2.805e-009	-8.480	-8.552	-0.073
CaF+	1.144e-009	9.682e-010	-8.941	-9.014	-0.073
NaF	4.662e-011	4.697e-011	-10.331	-10.328	0.003
HF	1.768e-012	1.782e-012	-11.752	-11.749	0.003
AlF+2	2.970e-015	1.522e-015	-14.527	-14.818	-0.290
BF(OH)3-	1.664e-015	1.408e-015	-14.779	-14.852	-0.073
MnF+	1.510e-015	1.278e-015	-14.821	-14.894	-0.073

FeF+	5.605e-017	4.742e-017	-16.251	-16.324	-0.073
AlF2+	3.566e-017	3.017e-017	-16.448	-16.520	-0.073
HF2-	3.156e-019	2.671e-019	-18.501	-18.573	-0.073
FeF+2	3.089e-019	1.583e-019	-18.510	-18.801	-0.290
AlF3	1.517e-020	1.529e-020	-19.819	-19.816	0.003
FeF2+	2.865e-022	2.424e-022	-21.543	-21.615	-0.073
BF2(OH)2-	2.292e-022	1.939e-022	-21.640	-21.712	-0.073
AlF4-	2.904e-025	2.457e-025	-24.537	-24.610	-0.073
FeF3	1.520e-026	1.531e-026	-25.818	-25.815	0.003
BF3OH-	3.467e-031	2.934e-031	-30.460	-30.533	-0.073
AlF5-2	3.097e-031	1.587e-031	-30.509	-30.799	-0.290
AlF6-3	3.135e-038	6.968e-039	-37.504	-38.157	-0.653
BF4-	1.816e-039	1.537e-039	-38.741	-38.813	-0.073
SiF6-2	0.000e+000	0.000e+000	-50.070	-50.360	-0.290
Fe(2)	4.112e-010				
Fe+2	2.186e-010	1.173e-010	-9.660	-9.931	-0.270
FeHCO3+	1.088e-010	9.207e-011	-9.963	-10.036	-0.073
FeSO4	5.290e-011	5.330e-011	-10.277	-10.273	0.003
FeCO3	2.979e-011	3.002e-011	-10.526	-10.523	0.003
FeOH+	1.016e-012	8.597e-013	-11.993	-12.066	-0.073
FeCl+	1.217e-013	1.029e-013	-12.915	-12.987	-0.073
Fe(HS)2	1.118e-015	1.126e-015	-14.952	-14.948	0.003
FeF+	5.605e-017	4.742e-017	-16.251	-16.324	-0.073
FeHSO4+	1.294e-017	1.095e-017	-16.888	-16.961	-0.073
Fe(HS)3-	1.504e-020	1.273e-020	-19.823	-19.895	-0.073
Fe(3)	1.749e-008				
Fe(OH)3	1.268e-008	1.278e-008	-7.897	-7.894	0.003
Fe(OH)2+	4.445e-009	3.761e-009	-8.352	-8.425	-0.073
Fe(OH)4-	3.683e-010	3.116e-010	-9.434	-9.506	-0.073
FeOH+2	8.209e-013	4.207e-013	-12.086	-12.376	-0.290
FeSO4+	8.579e-017	7.259e-017	-16.067	-16.139	-0.073
Fe+3	9.076e-018	2.633e-018	-17.042	-17.579	-0.537
Fe(SO4)2-	5.090e-018	4.306e-018	-17.293	-17.366	-0.073
FeF+2	3.089e-019	1.583e-019	-18.510	-18.801	-0.290
FeCl+2	8.644e-020	4.430e-020	-19.063	-19.354	-0.290
FeF2+	2.865e-022	2.424e-022	-21.543	-21.615	-0.073
FeCl2+	1.696e-022	1.435e-022	-21.771	-21.843	-0.073
Fe2(OH)2+4	8.199e-023	5.658e-024	-22.086	-23.247	-1.161
FeHSO4+2	1.204e-023	6.172e-024	-22.919	-23.210	-0.290
FeF3	1.520e-026	1.531e-026	-25.818	-25.815	0.003
FeCl3	9.050e-027	9.118e-027	-26.043	-26.040	0.003
Fe3(OH)4+5	4.254e-028	6.524e-030	-27.371	-29.185	-1.814
H(0)	1.682e-029				
H2	8.408e-030	8.472e-030	-29.075	-29.072	0.003
K	3.325e-005				
K+	3.266e-005	2.746e-005	-4.486	-4.561	-0.075
KSO4-	5.845e-007	4.946e-007	-6.233	-6.306	-0.073
KOH	2.987e-012	3.009e-012	-11.525	-11.522	0.003
Li	1.441e-006				
Li+	1.424e-006	1.219e-006	-5.847	-5.914	-0.068
LiSO4-	1.733e-008	1.466e-008	-7.761	-7.834	-0.073
LiOH	8.758e-013	8.825e-013	-12.058	-12.054	0.003
Mg	2.892e-003				
Mg+2	2.107e-003	1.133e-003	-2.676	-2.946	-0.270
MgSO4	6.525e-004	6.575e-004	-3.185	-3.182	0.003
MgHCO3+	1.209e-004	1.023e-004	-3.918	-3.990	-0.073
MgCO3	1.074e-005	1.082e-005	-4.969	-4.966	0.003
MgOH+	1.055e-007	8.929e-008	-6.977	-7.049	-0.073

MgF+	3.315e-009	2.805e-009	-8.480	-8.552	-0.073
Mn(2)	1.820e-008				
Mn+2	8.513e-009	4.570e-009	-8.070	-8.340	-0.270
MnCO3	3.842e-009	3.871e-009	-8.415	-8.412	0.003
MnHCO3+	3.777e-009	3.196e-009	-8.423	-8.495	-0.073
MnSO4	2.053e-009	2.069e-009	-8.688	-8.684	0.003
MnCl+	1.398e-011	1.183e-011	-10.854	-10.927	-0.073
MnOH+	3.127e-012	2.646e-012	-11.505	-11.577	-0.073
MnCl2	3.258e-015	3.282e-015	-14.487	-14.484	0.003
MnF+	1.510e-015	1.278e-015	-14.821	-14.894	-0.073
MnCl3-	6.790e-019	5.745e-019	-18.168	-18.241	-0.073
Mn(3)	1.022e-028				
Mn+3	1.022e-028	2.271e-029	-27.991	-28.644	-0.653
Na	2.423e-003				
Na+	2.381e-003	2.020e-003	-2.623	-2.695	-0.072
NaSO4-	3.212e-005	2.717e-005	-4.493	-4.566	-0.073
NaHCO3	8.844e-006	8.911e-006	-5.053	-5.050	0.003
NaCO3-	3.843e-007	3.252e-007	-6.415	-6.488	-0.073
NaOH	4.186e-010	4.218e-010	-9.378	-9.375	0.003
NaF	4.662e-011	4.697e-011	-10.331	-10.328	0.003
O(0)	5.245e-036				
O2	2.623e-036	2.642e-036	-35.581	-35.578	0.003
S(-2)	1.559e-007				
HS-	1.236e-007	1.038e-007	-6.908	-6.984	-0.076
H2S	3.236e-008	3.261e-008	-7.490	-7.487	0.003
S-2	5.714e-013	2.981e-013	-12.243	-12.526	-0.283
Fe(HS)2	1.118e-015	1.126e-015	-14.952	-14.948	0.003
Fe(HS)3-	1.504e-020	1.273e-020	-19.823	-19.895	-0.073
S(6)	7.578e-003				
SO4-2	5.299e-003	2.756e-003	-2.276	-2.560	-0.284
CaSO4	1.591e-003	1.603e-003	-2.798	-2.795	0.003
MgSO4	6.525e-004	6.575e-004	-3.185	-3.182	0.003
NaSO4-	3.212e-005	2.717e-005	-4.493	-4.566	-0.073
SrSO4	3.518e-006	3.545e-006	-5.454	-5.450	0.003
KSO4-	5.845e-007	4.946e-007	-6.233	-6.306	-0.073
LiSO4-	1.733e-008	1.466e-008	-7.761	-7.834	-0.073
HSO4-	9.172e-009	7.760e-009	-8.038	-8.110	-0.073
MnSO4	2.053e-009	2.069e-009	-8.688	-8.684	0.003
CaHSO4+	3.342e-010	2.827e-010	-9.476	-9.549	-0.073
FeSO4	5.290e-011	5.330e-011	-10.277	-10.273	0.003
AlSO4+	3.768e-014	3.188e-014	-13.424	-13.496	-0.073
Al(SO4)2-	3.222e-015	2.726e-015	-14.492	-14.565	-0.073
FeSO4+	8.579e-017	7.259e-017	-16.067	-16.139	-0.073
FeHSO4+	1.294e-017	1.095e-017	-16.888	-16.961	-0.073
Fe(SO4)2-	5.090e-018	4.306e-018	-17.293	-17.366	-0.073
AlHSO4+2	1.686e-022	8.641e-023	-21.773	-22.063	-0.290
FeHSO4+2	1.204e-023	6.172e-024	-22.919	-23.210	-0.290
Si	4.494e-007				
H4SiO4	4.472e-007	4.506e-007	-6.349	-6.346	0.003
H3SiO4-	2.145e-009	1.815e-009	-8.669	-8.741	-0.073
H2SiO4-2	5.794e-015	2.969e-015	-14.237	-14.527	-0.290
SiF6-2	0.000e+000	0.000e+000	-50.070	-50.360	-0.290
Sr	1.746e-005				
Sr+2	1.305e-005	6.927e-006	-4.884	-5.159	-0.275
SrSO4	3.518e-006	3.545e-006	-5.454	-5.450	0.003
SrHCO3+	8.476e-007	7.225e-007	-6.072	-6.141	-0.069
SrCO3	4.146e-008	4.178e-008	-7.382	-7.379	0.003
SrOH+	1.321e-011	1.123e-011	-10.879	-10.950	-0.071

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-2.98	8.09	11.07	Al(OH)3
Albite	-10.98	-29.24	-18.27	NaAlSi3O8
Alunite	-7.04	-7.92	-0.89	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-0.73	-5.08	-4.35	CaSO4
Anorthite	-10.40	-30.23	-19.83	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.82	-7.49	-8.31	CaCO3
Ca-Montmorillonite	-10.58	-56.21	-45.62	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	0.97	-7.49	-8.46	CaCO3
Celestite	-1.10	-7.72	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-2.75	-6.35	-3.60	SiO2
Chlorite(14A)	-12.52	57.40	69.93	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-9.25	23.47	32.72	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-1.81	-3.23	-1.42	CO2
Dolomite	1.58	-15.41	-16.99	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	0.03	4.92	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-5.50	-9.41	-3.92	FeS
Fluorite	-6.66	-17.31	-10.65	CaF2
Gibbsite	-0.26	8.09	8.34	Al(OH)3
Goethite	5.77	4.92	-0.85	FeOOH
Gypsum	-0.50	-5.08	-4.58	CaSO4·2H2O
H2(g)	-25.94	-29.07	-3.13	H2
H2O(g)	-1.62	-0.00	1.62	H2O
H2S(g)	-6.54	-7.49	-0.95	H2S
Halite	-7.46	-5.89	1.57	NaCl
Hausmannite	-16.14	45.92	62.06	Mn3O4
Hematite	13.53	9.84	-3.69	Fe2O3
Illite	-11.13	-51.96	-40.83	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-8.53	-17.42	-8.89	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-10.22	-31.11	-20.89	KAlSi3O8
K-mica	-5.15	8.16	13.31	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	-4.32	3.48	7.80	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	-4.77	-9.41	-4.65	FeS
Manganite	-5.71	19.63	25.34	MnOOH
Melanterite	-10.23	-12.49	-2.26	FeSO4·7H2O
O2(g)	-32.72	-35.58	-2.86	O2
Pyrite	20.64	2.04	-18.59	FeS2
Pyrochroite	-8.54	6.66	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-9.45	32.60	42.05	MnO2
Quartz	-2.30	-6.35	-4.04	SiO2
Rhodochrosite	-2.20	-13.31	-11.12	MnCO3
Sepiolite	-10.80	5.07	15.87	Mg2Si3O7.5OH·3H2O
Sepiolite(d)	-13.59	5.07	18.66	Mg2Si3O7.5OH·3H2O
Siderite	-4.04	-14.90	-10.86	FeCO3
SiO2(a)	-3.60	-6.35	-2.75	SiO2
Strontianite	-0.86	-10.13	-9.27	SrCO3
Sulfur	13.47	18.45	4.98	S
Talc	-11.09	10.78	21.87	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Wasserprobe: H4 Hengstbach

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\H4 Hengstbach 2015_05_05.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\H4 Hengstbach 2015_05_05.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 H4 Hengstbach (2015_05_06)

temp	20.9
pH	7.8
pe	8.13
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	0.005
F	0.001
Cl	47.0
Alkalinity	427
S(6)	164
Li	0.009
Na	20.0
K	2.1
Ca	185
Mg	19
Sr	0.41
B	0.001
Si	5.1
Al	0.001
Fe	0.001
Mn	0.001
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. H4 Hengstbach (2015_05_06)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	3.706e-008	3.706e-008
Alkalinity	8.532e-003	8.532e-003
B	9.251e-008	9.251e-008
Ca	4.616e-003	4.616e-003
Cl	1.326e-003	1.326e-003
F	5.264e-008	5.264e-008
Fe	1.791e-008	1.791e-008
K	5.371e-005	5.371e-005
Li	1.297e-006	1.297e-006
Mg	7.815e-004	7.815e-004
Mn	1.820e-008	1.820e-008
Na	8.700e-004	8.700e-004
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	1.707e-003	1.707e-003
Si	8.488e-005	8.488e-005
Sr	4.679e-006	4.679e-006

-----Description of solution-----

pH = 7.800
 pe = 8.130
 Specific Conductance (uS/cm, 20 oC) = 986
 Density (g/cm3) = 0.99882
 Activity of water = 1.000
 Ionic strength = 1.716e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 8.686e-003
 Total CO2 (mol/kg) = 8.686e-003
 Temperature (deg C) = 20.900
 Electrical balance (eq) = -1.543e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -6.88
 Iterations = 8
 Total H = 1.110211e+002
 Total O = 5.553918e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-4.0157	-0.2343

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	5.252e-007	4.599e-007	-6.280	-6.337	-0.058
H+	1.769e-008	1.585e-008	-7.752	-7.800	-0.048
H2O	5.551e+001	9.997e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	3.706e-008				
Al(OH)4-	3.673e-008	3.229e-008	-7.435	-7.491	-0.056
Al(OH)3	2.847e-010	2.858e-010	-9.546	-9.544	0.002
Al(OH)2+	4.770e-011	4.193e-011	-10.321	-10.377	-0.056
AlOH+2	2.050e-013	1.224e-013	-12.688	-12.912	-0.224
Al+3	6.884e-016	2.556e-016	-15.162	-15.592	-0.430

	AlSO4+	6.739e-016	5.924e-016	-15.171	-15.227	-0.056
	AlF+2	1.843e-016	1.100e-016	-15.735	-15.958	-0.224
	Al(SO4)2-	1.617e-017	1.421e-017	-16.791	-16.847	-0.056
	AlF2+	2.710e-018	2.382e-018	-17.567	-17.623	-0.056
	AlF3	1.313e-021	1.318e-021	-20.882	-20.880	0.002
	AlHSO4+2	1.348e-024	8.046e-025	-23.870	-24.094	-0.224
	AlF4-	2.631e-026	2.313e-026	-25.580	-25.636	-0.056
	AlF5-2	2.732e-032	1.632e-032	-31.563	-31.787	-0.224
	AlF6-3	2.495e-039	7.821e-040	-38.603	-39.107	-0.504
B		9.251e-008				
	H3BO3	8.908e-008	8.944e-008	-7.050	-7.048	0.002
	H2BO3~	3.424e-009	3.010e-009	-8.465	-8.521	-0.056
	BF(OH)3-	1.711e-015	1.504e-015	-14.767	-14.823	-0.056
	BF2(OH)2-	1.290e-022	1.134e-022	-21.889	-21.945	-0.056
	BF3OH-	1.068e-031	9.387e-032	-30.971	-31.027	-0.056
	BF4-	3.060e-040	2.690e-040	-39.514	-39.570	-0.056
C(4)		8.686e-003				
	HCO3-	8.036e-003	7.100e-003	-2.095	-2.149	-0.054
	CO2	2.665e-004	2.675e-004	-3.574	-3.573	0.002
	CaHCO3+	2.308e-004	2.039e-004	-3.637	-3.691	-0.054
	CaCO3	7.195e-005	7.223e-005	-4.143	-4.141	0.002
	MgHCO3+	3.827e-005	3.365e-005	-4.417	-4.473	-0.056
	CO3-2	3.160e-005	1.926e-005	-4.500	-4.715	-0.215
	MgCO3	7.075e-006	7.103e-006	-5.150	-5.149	0.002
	NaHCO3	3.023e-006	3.035e-006	-5.520	-5.518	0.002
	SrHCO3+	2.634e-007	2.327e-007	-6.579	-6.633	-0.054
	NaCO3-	2.514e-007	2.210e-007	-6.600	-6.656	-0.056
	SrCO3	2.674e-008	2.685e-008	-7.573	-7.571	0.002
	MnCO3	6.930e-009	6.958e-009	-8.159	-8.158	0.002
	MnHCO3+	3.275e-009	2.879e-009	-8.485	-8.541	-0.056
	FeHCO3+	2.999e-014	2.636e-014	-13.523	-13.579	-0.056
	FeCO3	1.708e-014	1.715e-014	-13.767	-13.766	0.002
Ca		4.616e-003				
	Ca+2	3.957e-003	2.410e-003	-2.403	-2.618	-0.215
	CaSO4	3.562e-004	3.577e-004	-3.448	-3.447	0.002
	CaHCO3+	2.308e-004	2.039e-004	-3.637	-3.691	-0.054
	CaCO3	7.195e-005	7.223e-005	-4.143	-4.141	0.002
	CaOH+	2.869e-008	2.522e-008	-7.542	-7.598	-0.056
	CaF+	9.563e-010	8.406e-010	-9.019	-9.075	-0.056
	CaHSO4+	3.597e-011	3.162e-011	-10.444	-10.500	-0.056
Cl		1.326e-003				
	Cl-	1.326e-003	1.162e-003	-2.878	-2.935	-0.057
	MnCl+	2.449e-011	2.153e-011	-10.611	-10.667	-0.056
	MnCl2	1.087e-014	1.092e-014	-13.964	-13.962	0.002
	FeCl+	6.773e-017	5.953e-017	-16.169	-16.225	-0.056
	MnCl3-	3.974e-018	3.493e-018	-17.401	-17.457	-0.056
	FeCl+2	1.961e-020	1.171e-020	-19.707	-19.931	-0.224
	FeCl2+	7.887e-023	6.933e-023	-22.103	-22.159	-0.056
	FeCl3	8.022e-027	8.054e-027	-26.096	-26.094	0.002
F		5.264e-008				
	F-	5.039e-008	4.413e-008	-7.298	-7.355	-0.058
	MgF+	1.267e-009	1.113e-009	-8.897	-8.953	-0.056
	CaF+	9.563e-010	8.406e-010	-9.019	-9.075	-0.056
	NaF	1.923e-011	1.931e-011	-10.716	-10.714	0.002
	HF	9.711e-013	9.750e-013	-12.013	-12.011	0.002
	BF(OH)3-	1.711e-015	1.504e-015	-14.767	-14.823	-0.056
	MnF+	1.580e-015	1.389e-015	-14.801	-14.857	-0.056
	AlF+2	1.843e-016	1.100e-016	-15.735	-15.958	-0.224

AlF2+	2.710e-018	2.382e-018	-17.567	-17.623	-0.056
HF2-	1.816e-019	1.596e-019	-18.741	-18.797	-0.056
FeF+2	4.187e-020	2.500e-020	-19.378	-19.602	-0.224
FeF+	1.864e-020	1.638e-020	-19.730	-19.786	-0.056
AlF3	1.313e-021	1.318e-021	-20.882	-20.880	0.002
BF2(OH) 2-	1.290e-022	1.134e-022	-21.889	-21.945	-0.056
FeF2+	4.755e-023	4.180e-023	-22.323	-22.379	-0.056
AlF4-	2.631e-026	2.313e-026	-25.580	-25.636	-0.056
FeF3	2.872e-027	2.883e-027	-26.542	-26.540	0.002
BF3OH-	1.068e-031	9.387e-032	-30.971	-31.027	-0.056
AlF5-2	2.732e-032	1.632e-032	-31.563	-31.787	-0.224
AlF6-3	2.495e-039	7.821e-040	-38.603	-39.107	-0.504
BF4-	3.060e-040	2.690e-040	-39.514	-39.570	-0.056
SiF6-2	0.000e+000	0.000e+000	-48.834	-49.058	-0.224
Fe(2)	1.128e-013				
Fe+2	6.032e-014	3.713e-014	-13.220	-13.430	-0.211
FeHCO3+	2.999e-014	2.636e-014	-13.523	-13.579	-0.056
FeCO3	1.708e-014	1.715e-014	-13.767	-13.766	0.002
FeSO4	4.713e-015	4.732e-015	-14.327	-14.325	0.002
FeOH+	6.175e-016	5.428e-016	-15.209	-15.265	-0.056
FeCl+	6.773e-017	5.953e-017	-16.169	-16.225	-0.056
Fe(HS) 2	4.752e-019	4.770e-019	-18.323	-18.321	0.002
FeF+	1.864e-020	1.638e-020	-19.730	-19.786	-0.056
FeHSO4+	5.542e-022	4.871e-022	-21.256	-21.312	-0.056
Fe(HS) 3-	7.096e-024	6.237e-024	-23.149	-23.205	-0.056
Fe(3)	1.791e-008				
Fe(OH) 3	1.463e-008	1.469e-008	-7.835	-7.833	0.002
Fe(OH) 2+	2.464e-009	2.166e-009	-8.608	-8.664	-0.056
Fe(OH) 4-	8.132e-010	7.148e-010	-9.090	-9.146	-0.056
FeOH+2	2.034e-013	1.214e-013	-12.692	-12.916	-0.224
FeSO4+	3.351e-018	2.946e-018	-17.475	-17.531	-0.056
Fe+3	1.026e-018	3.808e-019	-17.989	-18.419	-0.430
Fe(SO4) 2-	5.578e-020	4.903e-020	-19.254	-19.309	-0.056
FeF+2	4.187e-020	2.500e-020	-19.378	-19.602	-0.224
FeCl+2	1.961e-020	1.171e-020	-19.707	-19.931	-0.224
FeCl2+	7.887e-023	6.933e-023	-22.103	-22.159	-0.056
FeF2+	4.755e-023	4.180e-023	-22.323	-22.379	-0.056
Fe2(OH) 2+4	3.707e-024	4.713e-025	-23.431	-24.327	-0.896
FeHSO4+2	2.102e-025	1.255e-025	-24.677	-24.901	-0.224
FeCl3	8.022e-027	8.054e-027	-26.096	-26.094	0.002
FeF3	2.872e-027	2.883e-027	-26.542	-26.540	0.002
Fe3(OH) 4+5	7.857e-030	3.130e-031	-29.105	-30.504	-1.400
H(0)	2.029e-035				
H2	1.015e-035	1.019e-035	-34.994	-34.992	0.002
K	5.371e-005				
K+	5.344e-005	4.683e-005	-4.272	-4.330	-0.057
KSO4-	2.692e-007	2.366e-007	-6.570	-6.626	-0.056
KOH	1.020e-011	1.024e-011	-10.991	-10.990	0.002
Li	1.297e-006				
Li+	1.293e-006	1.145e-006	-5.889	-5.941	-0.053
LiSO4-	4.397e-009	3.865e-009	-8.357	-8.413	-0.056
LiOH	1.648e-012	1.654e-012	-11.783	-11.781	0.002
Mg	7.815e-004				
Mg+2	6.693e-004	4.117e-004	-3.174	-3.385	-0.211
MgSO4	6.680e-005	6.706e-005	-4.175	-4.174	0.002
MgHCO3+	3.827e-005	3.365e-005	-4.417	-4.473	-0.056
MgCO3	7.075e-006	7.103e-006	-5.150	-5.149	0.002
MgOH+	7.369e-008	6.478e-008	-7.133	-7.189	-0.056

MgF+	1.267e-009	1.113e-009	-8.897	-8.953	-0.056
Mn(2)	1.820e-008				
Mn+2	7.391e-009	4.549e-009	-8.131	-8.342	-0.211
MnCO3	6.930e-009	6.958e-009	-8.159	-8.158	0.002
MnHCO3+	3.275e-009	2.879e-009	-8.485	-8.541	-0.056
MnSO4	5.756e-010	5.779e-010	-9.240	-9.238	0.002
MnCl+	2.449e-011	2.153e-011	-10.611	-10.667	-0.056
MnOH+	5.979e-012	5.256e-012	-11.223	-11.279	-0.056
MnCl2	1.087e-014	1.092e-014	-13.964	-13.962	0.002
MnF+	1.580e-015	1.389e-015	-14.801	-14.857	-0.056
MnCl3-	3.974e-018	3.493e-018	-17.401	-17.457	-0.056
Mn(3)	3.297e-026				
Mn+3	3.297e-026	1.033e-026	-25.482	-25.986	-0.504
Na	8.700e-004				
Na+	8.634e-004	7.602e-004	-3.064	-3.119	-0.055
NaSO4-	3.265e-006	2.870e-006	-5.486	-5.542	-0.056
NaHCO3	3.023e-006	3.035e-006	-5.520	-5.518	0.002
NaCO3-	2.514e-007	2.210e-007	-6.600	-6.656	-0.056
NaOH	3.156e-010	3.168e-010	-9.501	-9.499	0.002
NaF	1.923e-011	1.931e-011	-10.716	-10.714	0.002
O(0)	3.643e-024				
O2	1.822e-024	1.829e-024	-23.740	-23.738	0.002
S(-2)	1.559e-007				
HS-	1.371e-007	1.201e-007	-6.863	-6.921	-0.058
H2S	1.883e-008	1.891e-008	-7.725	-7.723	0.002
S-2	1.138e-012	6.883e-013	-11.944	-12.162	-0.218
Fe(HS)2	4.752e-019	4.770e-019	-18.323	-18.321	0.002
Fe(HS)3-	7.096e-024	6.237e-024	-23.149	-23.205	-0.056
S(6)	1.707e-003				
SO4-2	1.280e-003	7.734e-004	-2.893	-3.112	-0.219
CaSO4	3.562e-004	3.577e-004	-3.448	-3.447	0.002
MgSO4	6.680e-005	6.706e-005	-4.175	-4.174	0.002
NaSO4-	3.265e-006	2.870e-006	-5.486	-5.542	-0.056
SrSO4	3.526e-007	3.540e-007	-6.453	-6.451	0.002
KSO4-	2.692e-007	2.366e-007	-6.570	-6.626	-0.056
LiSO4-	4.397e-009	3.865e-009	-8.357	-8.413	-0.056
HSO4-	1.242e-009	1.091e-009	-8.906	-8.962	-0.056
MnSO4	5.756e-010	5.779e-010	-9.240	-9.238	0.002
CaHSO4+	3.597e-011	3.162e-011	-10.444	-10.500	-0.056
FeSO4	4.713e-015	4.732e-015	-14.327	-14.325	0.002
AlSO4+	6.739e-016	5.924e-016	-15.171	-15.227	-0.056
Al(SO4)2-	1.617e-017	1.421e-017	-16.791	-16.847	-0.056
FeSO4+	3.351e-018	2.946e-018	-17.475	-17.531	-0.056
Fe(SO4)2-	5.578e-020	4.903e-020	-19.254	-19.309	-0.056
FeHSO4+	5.542e-022	4.871e-022	-21.256	-21.312	-0.056
AlHSO4+2	1.348e-024	8.046e-025	-23.870	-24.094	-0.224
FeHSO4+2	2.102e-025	1.255e-025	-24.677	-24.901	-0.224
Si	8.488e-005				
H4SiO4	8.411e-005	8.444e-005	-4.075	-4.073	0.002
H3SiO4-	7.719e-007	6.786e-007	-6.112	-6.168	-0.056
H2SiO4-2	3.710e-012	2.215e-012	-11.431	-11.655	-0.224
SiF6-2	0.000e+000	0.000e+000	-48.834	-49.058	-0.224
Sr	4.679e-006				
Sr+2	4.037e-006	2.465e-006	-5.394	-5.608	-0.214
SrSO4	3.526e-007	3.540e-007	-6.453	-6.451	0.002
SrHCO3+	2.634e-007	2.327e-007	-6.579	-6.633	-0.054
SrCO3	2.674e-008	2.685e-008	-7.573	-7.571	0.002
SrOH+	9.042e-012	7.975e-012	-11.044	-11.098	-0.055

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-3.26	7.81	11.07	Al(OH)3
Albite	-4.56	-22.83	-18.27	NaAlSi3O8
Alunite	-9.64	-10.53	-0.89	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-1.38	-5.73	-4.35	CaSO4
Anorthite	-5.91	-25.75	-19.83	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.98	-7.33	-8.31	CaCO3
Ca-Montmorillonite	-2.81	-48.43	-45.62	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	1.12	-7.33	-8.46	CaCO3
Celestite	-2.10	-8.72	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-0.47	-4.07	-3.60	SiO2
Chlorite(14A)	-5.46	64.47	69.93	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-4.22	28.50	32.72	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-2.15	-3.57	-1.42	CO2
Dolomite	1.56	-15.43	-16.99	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	0.09	4.98	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-8.64	-12.55	-3.92	FeS
Fluorite	-6.68	-17.33	-10.65	CaF2
Gibbsite	-0.54	7.81	8.34	Al(OH)3
Goethite	5.83	4.98	-0.85	FeOOH
Gypsum	-1.15	-5.73	-4.58	CaSO4·2H2O
H2(g)	-31.86	-34.99	-3.13	H2
H2O(g)	-1.62	-0.00	1.62	H2O
H2S(g)	-6.77	-7.72	-0.95	H2S
Halite	-7.63	-6.05	1.57	NaCl
Hausmannite	-8.43	53.63	62.06	Mn3O4
Hematite	13.65	9.96	-3.69	Fe2O3
Illite	-3.46	-44.29	-40.83	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-10.12	-19.01	-8.89	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-3.15	-24.04	-20.89	KAlSi3O8
K-mica	1.36	14.67	13.31	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	-0.33	7.47	7.80	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	-7.90	-12.55	-4.65	FeS
Manganite	-2.15	23.19	25.34	MnOOH
Melanterite	-14.28	-16.54	-2.26	FeSO4·7H2O
O2(g)	-20.88	-23.74	-2.86	O2
Pyrite	23.18	4.59	-18.59	FeS2
Pyrochroite	-7.94	7.26	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-2.93	39.12	42.05	MnO2
Quartz	-0.03	-4.07	-4.04	SiO2
Rhodochrosite	-1.94	-13.06	-11.12	MnCO3
Sepiolite	-3.66	12.21	15.87	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-6.45	12.21	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	-7.28	-18.15	-10.86	FeCO3
SiO2(a)	-1.33	-4.07	-2.75	SiO2
Strontianite	-1.05	-10.32	-9.27	SrCO3
Sulfur	19.16	24.14	4.98	S
Talc	-1.52	20.35	21.87	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.

PHREEQC Protokoll der Modellrechnung

Wasserprobe: Tagebausee

Input file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\Tagebausee 2015_05_06.pqi
Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\Tagebausee 2015_05_06.pgo
Database file: C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

Reading data base.

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

Reading input data for simulation 1.

DATABASE C:\Program Files (x86)\USGS\Phreeqc Interactive
2.17.4799\database\phreeqc.dat

SOLUTION 3-4 Tagebausee(2015_05_05)

temp	21
pH	8.12
pe	6.9
redox	pe
units	mg/kgw
density	1
S(-2)	0.005
F	0.6
Cl	49.6
Alkalinity	344
S(6)	884
Li	0.4
Na	344
K	14.4
Ca	106
Mg	60.1
Sr	4.4
B	1.2
Si	3
Al	0.23
Fe	0.31
Mn	0.16
water	1 # kg

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 3. Tagebausee(2015_05_05)

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Al	8.524e-006	8.524e-006
Alkalinity	6.874e-003	6.874e-003
B	1.110e-004	1.110e-004
Ca	2.645e-003	2.645e-003
Cl	1.399e-003	1.399e-003
F	3.158e-005	3.158e-005
Fe	5.551e-006	5.551e-006
K	3.683e-004	3.683e-004
Li	5.765e-005	5.765e-005
Mg	2.472e-003	2.472e-003
Mn	2.912e-006	2.912e-006
Na	1.496e-002	1.496e-002
S(-2)	1.559e-007	1.559e-007
S(6)	9.202e-003	9.202e-003
Si	4.993e-005	4.993e-005
Sr	5.022e-005	5.022e-005

-----Description of solution-----

pH = 8.120
 pe = 6.900
 Specific Conductance (uS/cm, 21 oC) = 2070
 Density (g/cm3) = 0.99966
 Activity of water = 0.999
 Ionic strength = 3.378e-002
 Mass of water (kg) = 1.000e+000
 Total carbon (mol/kg) = 6.783e-003
 Total CO2 (mol/kg) = 6.783e-003
 Temperature (deg C) = 21.000
 Electrical balance (eq) = -9.488e-004
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -2.09
 Iterations = 10
 Total H = 1.110196e+002
 Total O = 5.556386e+001

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
S(-2)/S(6)	-4.2916	-0.2505

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	1.156e-006	9.683e-007	-5.937	-6.014	-0.077
H+	8.716e-009	7.586e-009	-8.060	-8.120	-0.060
H2O	5.551e+001	9.994e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	8.524e-006				
Al(OH)4-	8.492e-006	7.171e-006	-5.071	-5.144	-0.073
Al(OH)3	3.012e-008	3.036e-008	-7.521	-7.518	0.003
Al(OH)2+	2.506e-009	2.116e-009	-8.601	-8.675	-0.073
AlF2+	1.014e-011	8.566e-012	-10.994	-11.067	-0.073
AlOH2+	5.761e-012	2.930e-012	-11.239	-11.533	-0.294

AlF3	2.642e-012	2.662e-012	-11.578	-11.575	0.003
AlF+2	1.385e-012	7.042e-013	-11.859	-12.152	-0.294
AlSO4+	3.993e-014	3.372e-014	-13.399	-13.472	-0.073
AlF4-	3.108e-014	2.625e-014	-13.507	-13.581	-0.073
Al+3	1.016e-014	2.911e-015	-13.993	-14.536	-0.543
Al(SO4)2-	4.785e-015	4.041e-015	-14.320	-14.394	-0.073
AlF5-2	2.045e-017	1.040e-017	-16.689	-16.983	-0.294
AlF6-3	1.279e-021	2.794e-022	-20.893	-21.554	-0.661
AlHSO4+2	4.314e-023	2.194e-023	-22.365	-22.659	-0.294
B	1.110e-004				
H3BO3	1.024e-004	1.032e-004	-3.990	-3.986	0.003
H2BO3-	8.609e-006	7.270e-006	-5.065	-5.138	-0.073
BF(OH)3-	1.156e-009	9.761e-010	-8.937	-9.011	-0.073
BF2(OH)2-	2.343e-014	1.978e-014	-13.630	-13.704	-0.073
BF3OH-	5.206e-021	4.396e-021	-20.284	-20.357	-0.073
BF4-	4.011e-027	3.387e-027	-26.397	-26.470	-0.073
C(4)	6.783e-003				
HCO3-	6.371e-003	5.421e-003	-2.196	-2.266	-0.070
CO2	9.689e-005	9.764e-005	-4.014	-4.010	0.003
CaHCO3+	7.270e-005	6.186e-005	-4.138	-4.209	-0.070
MgHCO3+	6.558e-005	5.538e-005	-4.183	-4.257	-0.073
CO3-2	5.874e-005	3.078e-005	-4.231	-4.512	-0.281
CaCO3	4.553e-005	4.589e-005	-4.342	-4.338	0.003
NaHCO3	3.749e-005	3.778e-005	-4.426	-4.423	0.003
MgCO3	2.432e-005	2.451e-005	-4.614	-4.611	0.003
NaCO3-	6.856e-006	5.790e-006	-5.164	-5.237	-0.073
SrHCO3+	1.573e-006	1.338e-006	-5.803	-5.873	-0.070
MnCO3	1.282e-006	1.292e-006	-5.892	-5.889	0.003
SrCO3	3.207e-007	3.232e-007	-6.494	-6.491	0.003
MnHCO3+	3.022e-007	2.552e-007	-6.520	-6.593	-0.073
FeCO3	1.570e-011	1.582e-011	-10.804	-10.801	0.003
FeHCO3+	1.375e-011	1.161e-011	-10.862	-10.935	-0.073
Ca	2.645e-003				
Ca+2	1.823e-003	9.559e-004	-2.739	-3.020	-0.280
CaSO4	7.036e-004	7.091e-004	-3.153	-3.149	0.003
CaHCO3+	7.270e-005	6.186e-005	-4.138	-4.209	-0.070
CaCO3	4.553e-005	4.589e-005	-4.342	-4.338	0.003
CaF+	2.223e-007	1.878e-007	-6.653	-6.726	-0.073
CaOH+	2.475e-008	2.090e-008	-7.606	-7.680	-0.073
CaHSO4+	3.557e-011	3.004e-011	-10.449	-10.522	-0.073
Cl	1.399e-003				
Cl-	1.399e-003	1.174e-003	-2.854	-2.930	-0.076
MnCl+	2.991e-009	2.526e-009	-8.524	-8.598	-0.073
MnCl2	1.284e-012	1.294e-012	-11.891	-11.888	0.003
FeCl+	4.111e-014	3.471e-014	-13.386	-13.460	-0.073
MnCl3-	4.953e-016	4.183e-016	-15.305	-15.379	-0.073
FeCl+2	7.978e-019	4.057e-019	-18.098	-18.392	-0.294
FeCl2+	2.864e-021	2.419e-021	-20.543	-20.616	-0.073
FeCl3	2.817e-025	2.839e-025	-24.550	-24.547	0.003
F	3.158e-005				
F-	2.958e-005	2.479e-005	-4.529	-4.606	-0.077
MgF+	1.599e-006	1.350e-006	-5.796	-5.870	-0.073
CaF+	2.223e-007	1.878e-007	-6.653	-6.726	-0.073
NaF	1.754e-007	1.768e-007	-6.756	-6.753	0.003
BF(OH)3-	1.156e-009	9.761e-010	-8.937	-9.011	-0.073
HF	2.605e-010	2.626e-010	-9.584	-9.581	0.003
MnF+	1.073e-010	9.059e-011	-9.970	-10.043	-0.073
AlF2+	1.014e-011	8.566e-012	-10.994	-11.067	-0.073

AlF3	2.642e-012	2.662e-012	-11.578	-11.575	0.003
AlF+2	1.385e-012	7.042e-013	-11.859	-12.152	-0.294
AlF4-	3.108e-014	2.625e-014	-13.507	-13.581	-0.073
HF2-	2.861e-014	2.416e-014	-13.543	-13.617	-0.073
BF2(OH)2-	2.343e-014	1.978e-014	-13.630	-13.704	-0.073
FeF+	6.290e-015	5.311e-015	-14.201	-14.275	-0.073
FeF+2	9.451e-016	4.806e-016	-15.025	-15.318	-0.294
FeF2+	5.352e-016	4.520e-016	-15.271	-15.345	-0.073
AlF5-2	2.045e-017	1.040e-017	-16.689	-16.983	-0.294
FeF3	1.738e-017	1.751e-017	-16.760	-16.757	0.003
BF3OH-	5.206e-021	4.396e-021	-20.284	-20.357	-0.073
AlF6-3	1.279e-021	2.794e-022	-20.893	-21.554	-0.661
BF4-	4.011e-027	3.387e-027	-26.397	-26.470	-0.073
SiF6-2	1.642e-034	8.351e-035	-33.785	-34.078	-0.294
Fe(2)	8.403e-011				
Fe+2	4.019e-011	2.143e-011	-10.396	-10.669	-0.273
FeCO3	1.570e-011	1.582e-011	-10.804	-10.801	0.003
FeHCO3+	1.375e-011	1.161e-011	-10.862	-10.935	-0.073
FeSO4	1.356e-011	1.366e-011	-10.868	-10.865	0.003
FeOH+	7.808e-013	6.594e-013	-12.107	-12.181	-0.073
FeCl+	4.111e-014	3.471e-014	-13.386	-13.460	-0.073
FeF+	6.290e-015	5.311e-015	-14.201	-14.275	-0.073
Fe(HS)2	2.866e-016	2.888e-016	-15.543	-15.539	0.003
FeHSO4+	7.973e-019	6.732e-019	-18.098	-18.172	-0.073
Fe(HS)3-	4.580e-021	3.868e-021	-20.339	-20.413	-0.073
Fe(3)	5.551e-006				
Fe(OH)3	4.604e-006	4.640e-006	-5.337	-5.334	0.003
Fe(OH)4-	5.609e-007	4.736e-007	-6.251	-6.325	-0.073
Fe(OH)2+	3.863e-007	3.262e-007	-6.413	-6.487	-0.073
FeOH+2	1.715e-011	8.721e-012	-10.766	-11.059	-0.294
FeF+2	9.451e-016	4.806e-016	-15.025	-15.318	-0.294
FeSO4+	5.965e-016	5.038e-016	-15.224	-15.298	-0.073
FeF2+	5.352e-016	4.520e-016	-15.271	-15.345	-0.073
Fe(SO4)2-	4.960e-017	4.189e-017	-16.305	-16.378	-0.073
Fe+3	4.541e-017	1.302e-017	-16.343	-16.886	-0.543
FeF3	1.738e-017	1.751e-017	-16.760	-16.757	0.003
FeCl+2	7.978e-019	4.057e-019	-18.098	-18.392	-0.294
Fe2(OH)2+4	3.619e-020	2.420e-021	-19.441	-20.616	-1.175
FeCl2+	2.864e-021	2.419e-021	-20.543	-20.616	-0.073
FeHSO4+2	2.020e-023	1.027e-023	-22.695	-22.988	-0.294
Fe3(OH)4+5	1.642e-023	2.398e-025	-22.785	-24.620	-1.835
FeCl3	2.817e-025	2.839e-025	-24.550	-24.547	0.003
H(0)	1.334e-033				
H2	6.670e-034	6.723e-034	-33.176	-33.172	0.003
K	3.683e-004				
K+	3.592e-004	3.014e-004	-3.445	-3.521	-0.076
KSO4-	9.021e-006	7.618e-006	-5.045	-5.118	-0.073
KOH	1.366e-010	1.377e-010	-9.865	-9.861	0.003
Li	5.765e-005				
Li+	5.668e-005	4.843e-005	-4.247	-4.315	-0.068
LiSO4-	9.666e-007	8.163e-007	-6.015	-6.088	-0.073
LiOH	1.450e-010	1.462e-010	-9.839	-9.835	0.003
Mg	2.472e-003				
Mg+2	1.662e-003	8.873e-004	-2.779	-3.052	-0.273
MgSO4	7.179e-004	7.235e-004	-3.144	-3.141	0.003
MgHCO3+	6.558e-005	5.538e-005	-4.183	-4.257	-0.073
MgCO3	2.432e-005	2.451e-005	-4.614	-4.611	0.003
MgF+	1.599e-006	1.350e-006	-5.796	-5.870	-0.073

MgOH+	3.485e-007	2.943e-007	-6.458	-6.531	-0.073
Mn (2)	2.912e-006				
MnCO3	1.282e-006	1.292e-006	-5.892	-5.889	0.003
Mn+2	9.909e-007	5.282e-007	-6.004	-6.277	-0.273
MnSO4	3.331e-007	3.357e-007	-6.477	-6.474	0.003
MnHCO3+	3.022e-007	2.552e-007	-6.520	-6.593	-0.073
MnCl+	2.991e-009	2.526e-009	-8.524	-8.598	-0.073
MnOH+	1.522e-009	1.285e-009	-8.818	-8.891	-0.073
MnF+	1.073e-010	9.059e-011	-9.970	-10.043	-0.073
MnCl2	1.284e-012	1.294e-012	-11.891	-11.888	0.003
MnCl3-	4.953e-016	4.183e-016	-15.305	-15.379	-0.073
Mn (3)	3.284e-025				
Mn+3	3.284e-025	7.172e-026	-24.484	-25.144	-0.661
Na	1.496e-002				
Na+	1.464e-002	1.239e-002	-1.834	-1.907	-0.072
NaSO4-	2.768e-004	2.338e-004	-3.558	-3.631	-0.073
NaHCO3	3.749e-005	3.778e-005	-4.426	-4.423	0.003
NaCO3-	6.856e-006	5.790e-006	-5.164	-5.237	-0.073
NaF	1.754e-007	1.768e-007	-6.756	-6.753	0.003
NaOH	1.070e-008	1.079e-008	-7.970	-7.967	0.003
O (0)	8.987e-028				
O2	4.493e-028	4.528e-028	-27.347	-27.344	0.003
S (-2)	1.559e-007				
HS-	1.468e-007	1.230e-007	-6.833	-6.910	-0.077
H2S	9.168e-009	9.239e-009	-8.038	-8.034	0.003
S-2	2.865e-012	1.483e-012	-11.543	-11.829	-0.286
Fe (HS) 2	2.866e-016	2.888e-016	-15.543	-15.539	0.003
Fe (HS) 3-	4.580e-021	3.868e-021	-20.339	-20.413	-0.073
S (6)	9.202e-003				
SO4-2	7.480e-003	3.861e-003	-2.126	-2.413	-0.287
MgSO4	7.179e-004	7.235e-004	-3.144	-3.141	0.003
CaSO4	7.036e-004	7.091e-004	-3.153	-3.149	0.003
NaSO4-	2.768e-004	2.338e-004	-3.558	-3.631	-0.073
SrSO4	1.318e-005	1.329e-005	-4.880	-4.877	0.003
KSO4-	9.021e-006	7.618e-006	-5.045	-5.118	-0.073
LiSO4-	9.666e-007	8.163e-007	-6.015	-6.088	-0.073
MnSO4	3.331e-007	3.357e-007	-6.477	-6.474	0.003
HSO4-	3.095e-009	2.613e-009	-8.509	-8.583	-0.073
CaHSO4+	3.557e-011	3.004e-011	-10.449	-10.522	-0.073
FeSO4	1.356e-011	1.366e-011	-10.868	-10.865	0.003
AlSO4+	3.993e-014	3.372e-014	-13.399	-13.472	-0.073
Al (SO4) 2-	4.785e-015	4.041e-015	-14.320	-14.394	-0.073
FeSO4+	5.965e-016	5.038e-016	-15.224	-15.298	-0.073
Fe (SO4) 2-	4.960e-017	4.189e-017	-16.305	-16.378	-0.073
FeHSO4+	7.973e-019	6.732e-019	-18.098	-18.172	-0.073
AlHSO4+2	4.314e-023	2.194e-023	-22.365	-22.659	-0.294
FeHSO4+2	2.020e-023	1.027e-023	-22.695	-22.988	-0.294
Si	4.993e-005				
H4SiO4	4.895e-005	4.933e-005	-4.310	-4.307	0.003
H3SiO4-	9.843e-007	8.312e-007	-6.007	-6.080	-0.073
H2SiO4-2	1.123e-011	5.709e-012	-10.950	-11.243	-0.294
SiF6-2	1.642e-034	8.351e-035	-33.785	-34.078	-0.294
Sr	5.022e-005				
Sr+2	3.514e-005	1.851e-005	-4.454	-4.733	-0.278
SrSO4	1.318e-005	1.329e-005	-4.880	-4.877	0.003
SrHCO3+	1.573e-006	1.338e-006	-5.803	-5.873	-0.070
SrCO3	3.207e-007	3.232e-007	-6.494	-6.491	0.003
SrOH+	1.474e-010	1.251e-010	-9.831	-9.903	-0.071

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Al(OH)3(a)	-1.24	9.82	11.06	Al(OH)3
Albite	-1.71	-19.97	-18.26	NaAlSi3O8
Alunite	-2.34	-3.24	-0.90	KAl3(SO4)2(OH)6
Anhydrite	-1.09	-5.43	-4.35	CaSO4
Anorthite	-2.09	-21.92	-19.83	CaAl2Si2O8
Aragonite	0.78	-7.53	-8.31	CaCO3
Ca-Montmorillonite	1.08	-44.53	-45.61	Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
Calcite	0.93	-7.53	-8.46	CaCO3
Celestite	-0.52	-7.15	-6.62	SrSO4
Chalcedony	-0.71	-4.31	-3.60	SiO2
Chlorite(14A)	2.78	72.67	69.89	Mg5Al2Si3O10(OH)8
Chrysotile	-1.75	30.95	32.70	Mg3Si2O5(OH)4
CO2(g)	-2.59	-4.01	-1.42	CO2
Dolomite	1.90	-15.09	-17.00	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	2.58	7.47	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-5.54	-9.46	-3.92	FeS
Fluorite	-1.58	-12.23	-10.65	CaF2
Gibbsite	1.49	9.82	8.34	Al(OH)3
Goethite	8.33	7.47	-0.86	FeOOH
Gypsum	-0.85	-5.43	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-30.04	-33.17	-3.13	H2
H2O(g)	-1.62	-0.00	1.61	H2O
H2S(g)	-7.08	-8.03	-0.95	H2S
Halite	-6.41	-4.84	1.57	NaCl
Hausmannite	-2.11	59.93	62.03	Mn3O4
Hematite	18.65	14.95	-3.70	Fe2O3
Illite	1.29	-39.52	-40.81	K0.6Mg0.25Al2.3Si3.5O10(OH)2
Jarosite-K	-1.39	-10.29	-8.90	KFe3(SO4)2(OH)6
K-feldspar	-0.70	-21.58	-20.88	KAlSi3O8
K-mica	7.86	21.15	13.29	KAl3Si3O10(OH)2
Kaolinite	3.25	11.03	7.79	Al2Si2O5(OH)4
Mackinawite	-4.81	-9.46	-4.65	FeS
Manganite	-0.36	24.98	25.34	MnOOH
Melanterite	-10.83	-13.08	-2.26	FeSO4:7H2O
O2(g)	-24.48	-27.34	-2.86	O2
Pyrite	24.14	5.55	-18.59	FeS2
Pyrochroite	-5.24	9.96	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-2.03	40.00	42.03	MnO2
Quartz	-0.27	-4.31	-4.04	SiO2
Rhodochrosite	0.33	-10.79	-11.12	MnCO3
Sepiolite	-2.41	13.46	15.87	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Sepiolite(d)	-5.20	13.46	18.66	Mg2Si3O7.5OH:3H2O
Siderite	-4.32	-15.18	-10.87	FeCO3
SiO2(a)	-1.56	-4.31	-2.75	SiO2
Strontianite	0.02	-9.24	-9.27	SrCO3
Sulfur	17.03	22.01	4.98	S
Talc	0.48	22.34	21.86	Mg3Si4O10(OH)2

End of simulation.
