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

Projekt-Nr.	Ausfertigungs-Nr.	Datum
2061178		**18.01.2016**

Anlage 2

**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 Abbaufläche

Auftraggeber

**Wienerberger GmbH
Oldenburger Allee 26
30659 Hannover**

Bearbeiter: Dr. Carsten Munk, Prof. Dr. Bernd Voland, 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 Geologisches 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-δ18O / 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 *„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!) 24

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!) 25

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!) 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 *Kartenviewer* 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 Abbaufläche 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

- 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 Abbaufläche 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 ß (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 **Abbaufläche** selbst 114.020 m² (11,4 ha) beträgt.

In dieser genehmigten Abbaufläche des Tontagebaus Rettigheim sind die Vorräte an Tonsteinen des Lias ß 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 ß (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 beigefügt) 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 Abbaufläche 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 (l 3-4) bzw. Unteren Lias (l 1-2), wobei sich im westlichen Teil jenseits einer NNW-SSE streichenden Störung zudem Unterer Dogger (dg1. u. dg2) und Oberer Lias (l 5 u. l 6) erhalten haben.

Im Bereich der derzeitigen Tonabbaufläche, die sich auf einem leicht nach SW abfallenden und SW-NE-streichenden Bergrücken befindet, steht die obere Abteilung des Unteren Lias (l 2 oder Lias ß) 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, beigefügt 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 ß, 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 Numismalismergel-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 Bohrergebnissen 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 ß erbohrt werden, dessen Mächtigkeit mit insgesamt ca. 30 m angegeben wird. Im Liegenden des Lias ß wurde mit dieser Bohrung Lias alpha (l1) mit 6,97 m erbohrt. Hieraus ergibt sich, dass die Basis des Lias ß dort bei ca. 125 m ü. NN anzusetzen ist.

Die hydrogeologischen Verhältnisse wurden insbesondere unter Berücksichtigung der in der Nähe zum Abbaugebiet 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 (l 5) entstammen, wohingegen die **schwefelhaltigen Mineralthermen** im Schwarzjura 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 Geologisches 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 Schwarzjura alpha (Lias 1) und dem darunter folgenden Rhät.

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

Die beantragte Abbauerweiterung bezieht sich auf Schichten des Schwarzjura ß (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 Schwarzjura epsilon sind jünger als die des Schwarzjura ß, für die die Abbauerweiterung 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/Schwarzjura 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/Schwarzjura 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 ß 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 Arieten-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 Arieten-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 Arieten-Kalke mehr als 12 m unter der Abbaufläche 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 ß) hindurch bis in den Rhät-Sandstein am Top der Triasgesteine abgeteuft. Dabei wurden Durchlässigkeitsuntersuchungen (WD-Tests, Pumpversuche), hydrochemische und isotopenphysikalische 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 ß 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.

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 Rettigheitm (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 Posidonienschiefer, 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 Datenlage 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 durchwurzeltem Löss mit knolligen Kalkkonkretionen.

Als Abbau-/Aufbereitungs- und Verwertungserschwernis 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 Rhätsandsein-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 beigefügt, 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

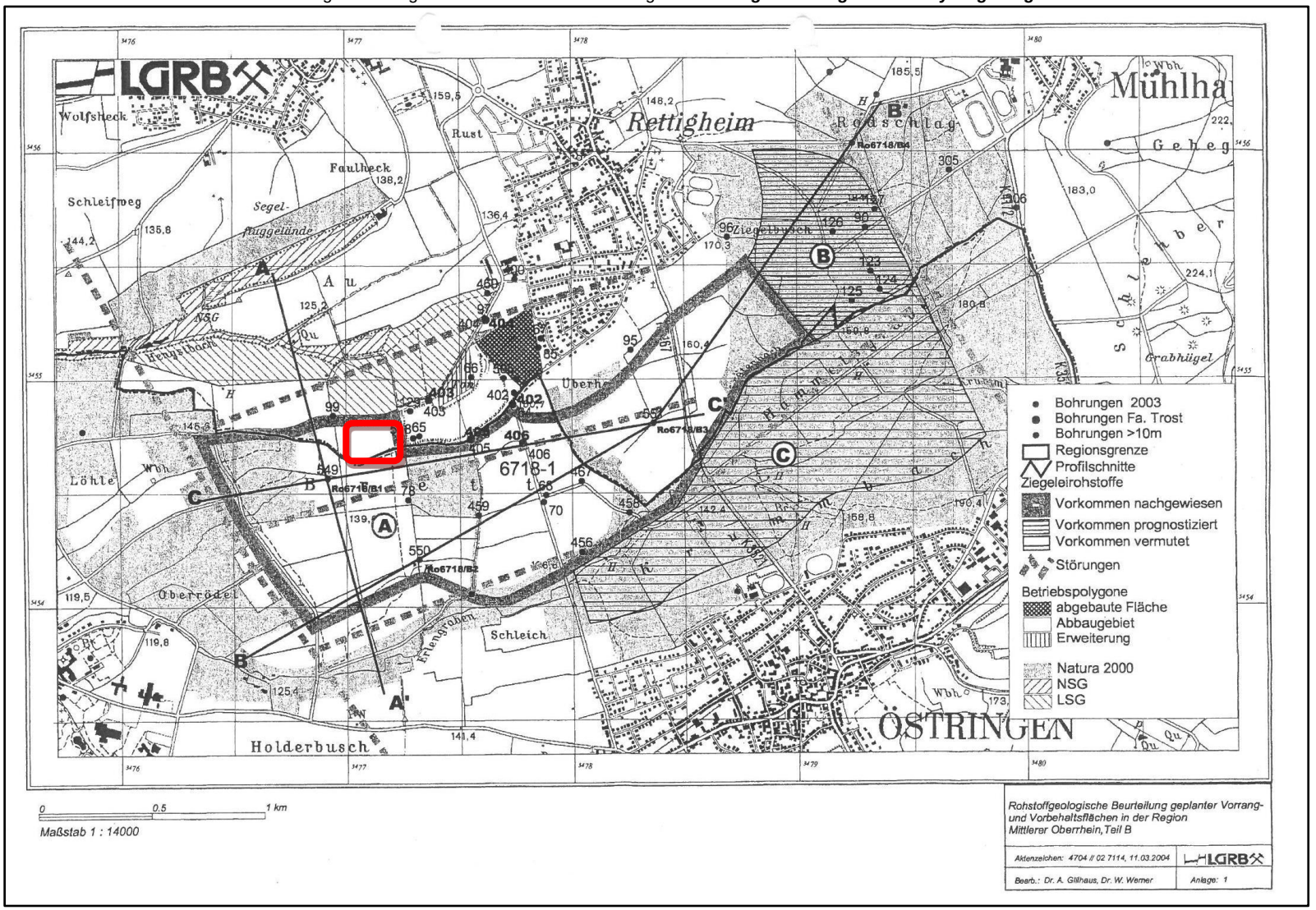


Abb. 1: Übersichtskarte aus *„Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein“* /10/ mit Darstellung des Verlaufs der geologischen Profilschnitte (ohne Maßstab!)

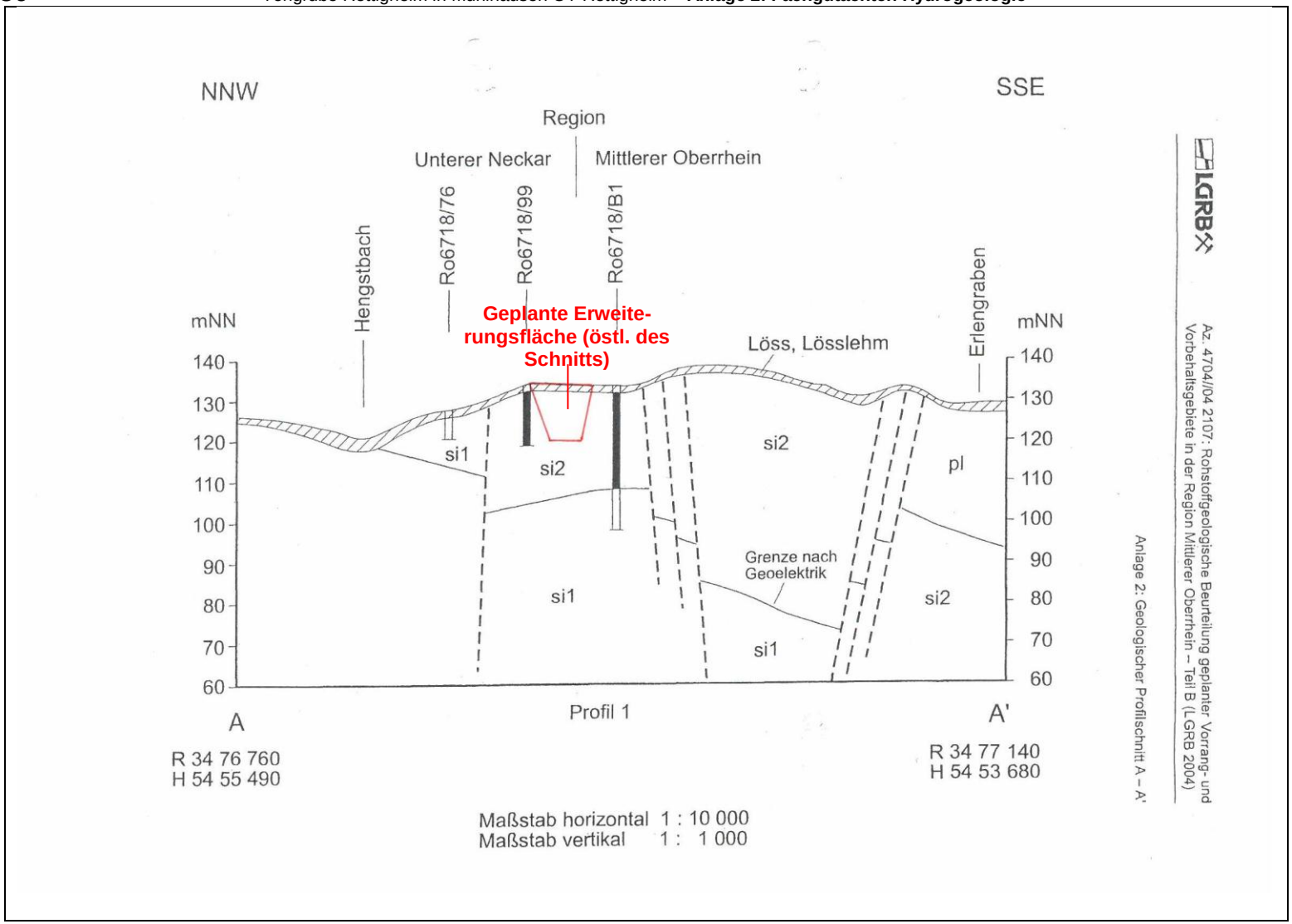


Abb. 2: Geologischer Profilschnitt A – A‘ aus *„Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein“* /10/ (ohne Maßstab!)

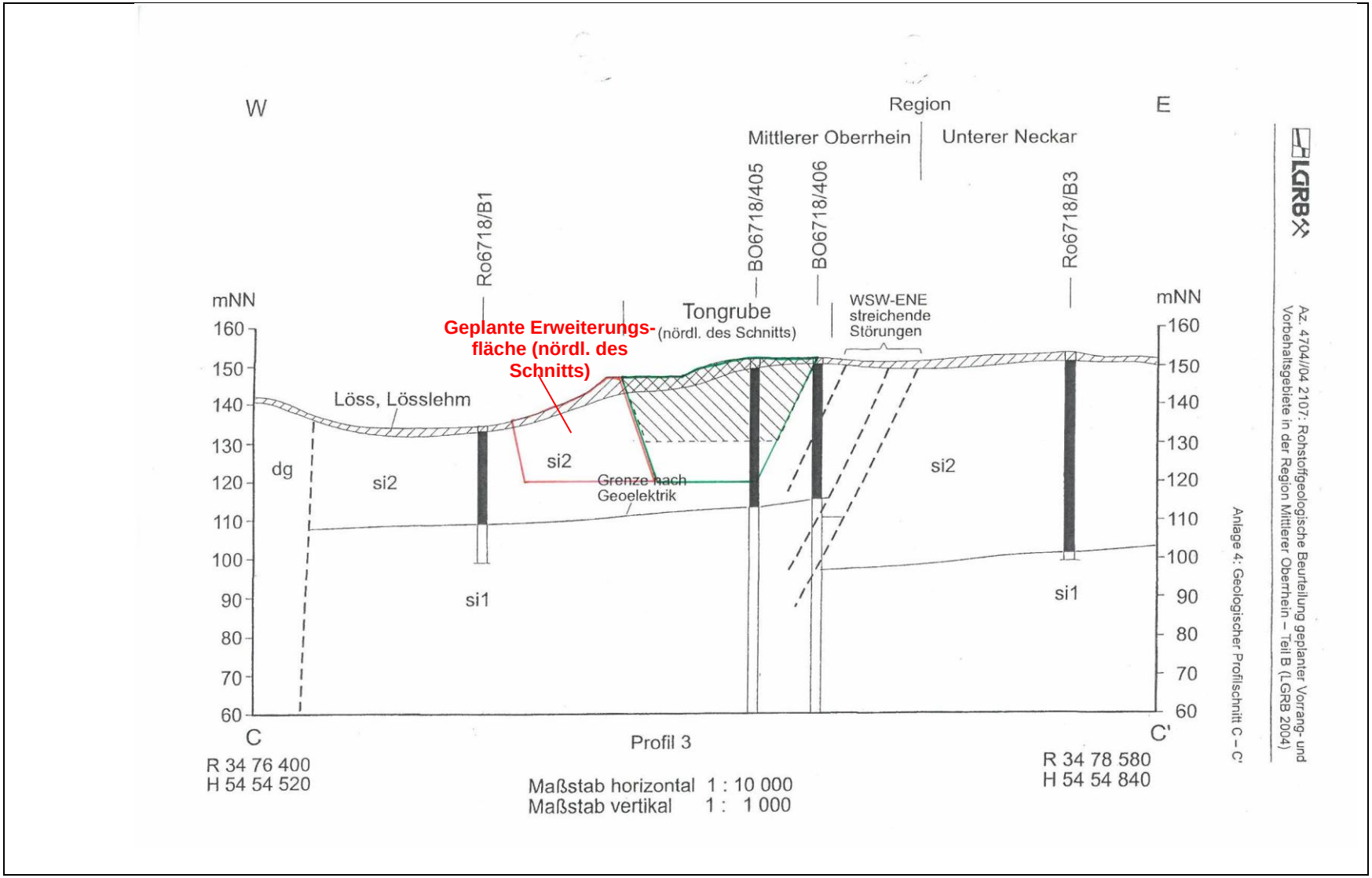


Abb. 3: Geologischer Profilschnitt C – C‘ aus *„Rohstoffgeologische Beurteilung von geplanten Vorrang- und Vorbehaltsgebieten für den Festgesteinsabbau in der Region Mittlerer Oberrhein“* /10/ (ohne Maßstab!)

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 beigefügt.

	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 Bohrkerne 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 quartärzeitlichen 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 *„Psilonotenton-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 Bohrergebnisse 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 Erweite-

rungsfläche verwendet, die bis in das Liegende der Obtususton-Formation abgeteuft 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 Schnittspur 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 Abbaufläche auf einer Horstscholle liegen; der östliche Abschnitt der genehmigten Abbaufläche 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 Abbaufläche liegen.

Wie aus Anlage 5 hervorgeht, ist die Grenzfläche Obtususton-Formation / Langenbrücken-Formation im Bereich der westlichen Teilscholle mit < 1°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 Abbaufläche 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.

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
Ausbauverrohrung:		
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,m u. GOK	+0,90 m bis 10,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
Ringraumverfüllung:		
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 kf ≈ 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 kf = 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 ß Durchlässigkeiten in der Größenordnung kf < 10^{-8} m/s zu erwarten. Nur im tieferen Teil des Lias alpha sind auch etwas höhere Durchlässigkeiten von kf ~ 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 Kalksteinbänkchen 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 Abbaufläche als auch im Bereich der vorgesehenen Erweiterungsfläche werden die Festgesteine des Unterjura (Obtususton-Formation) von bis zu ca. 2 m mächtigen quartärzeitlichen Lockersedimenten (Lößlehmen, 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 Absenkdiagramm für die Pumpmaßnahmen an der Grundwassermessstelle B 1/2015 ist mit Anlage 7a beigefügt; 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 Absenkdiagramm für die Pumpmaßnahmen an der Grundwassermessstelle B 2/2015 ist mit Anlage 7c beigefügt.

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 Teufen 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&Jacob[1] einen Transmissivitätswert von 9,8•10-6 m²/s.

Eine sicherere Bestimmung des Aquifermodells kann anhand des doppellogarithmischen diagnostischen Plots vorgenommen werden. (Anlage 7a) der Absenkphase erreicht die Bourdet[2]-Ableitung δs/ δt•t ab ca. 10.000 s das Plateau, womit Theis'sche[3] Aquiferbedingungen – also homogen infinit – indiziert werden. Der Wert des Plateaus bzw. die Anpassung mit Gringarten[4]-Typkurven für Brunnen liefert einen T-Wert von 1,1•10-5 m²/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•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•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&Papadopulos[5] berechnete T-Wert beträgt 3•10-8 m²/s. Dies entspricht bei ca. 10 m Gebirgsmächtigkeit, die über den Filterkies angeschlossen ist, einem Durchlässigkeitsbeiwert von ca. 3•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.

2.4.3.3.3 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=2x10-4), 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 Davidenkoff[6] 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•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 Abbaufläche 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 Schwankungsbreite 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 Tagebausohle 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 Grundbautaschenbuch[7] 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 kf = 1·10-8 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 – Grundwasser-haltung. – 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 Abbauzeitraum der längsten Abbauphase 3 mit 7,4 Jahren angesetzt.

Der Speicherkoeffizient wird mit 5·10-3 abgeschätzt. Dies einspricht 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:

$h^2(x,t) = h^2 - (h0^2 - h1^2) \cdot f0$

f0 ist die komplementäre Gauß‘sche Fehlerfunktion ERFC($\sqrt{u}$)

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

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 5·10-8 m²/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 Abbauzeitraum der kürzesten und der längsten Abbauphase mit 3 bzw. 7,4 Jahren betrachtet.

Der Speicherkoeffizient wird mit 7·10-3 abgeschätzt. Dies einspricht bei Annahme eines freien Grundwasserspiegels einem Klufhohlraumanteil von 0,7 %.

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

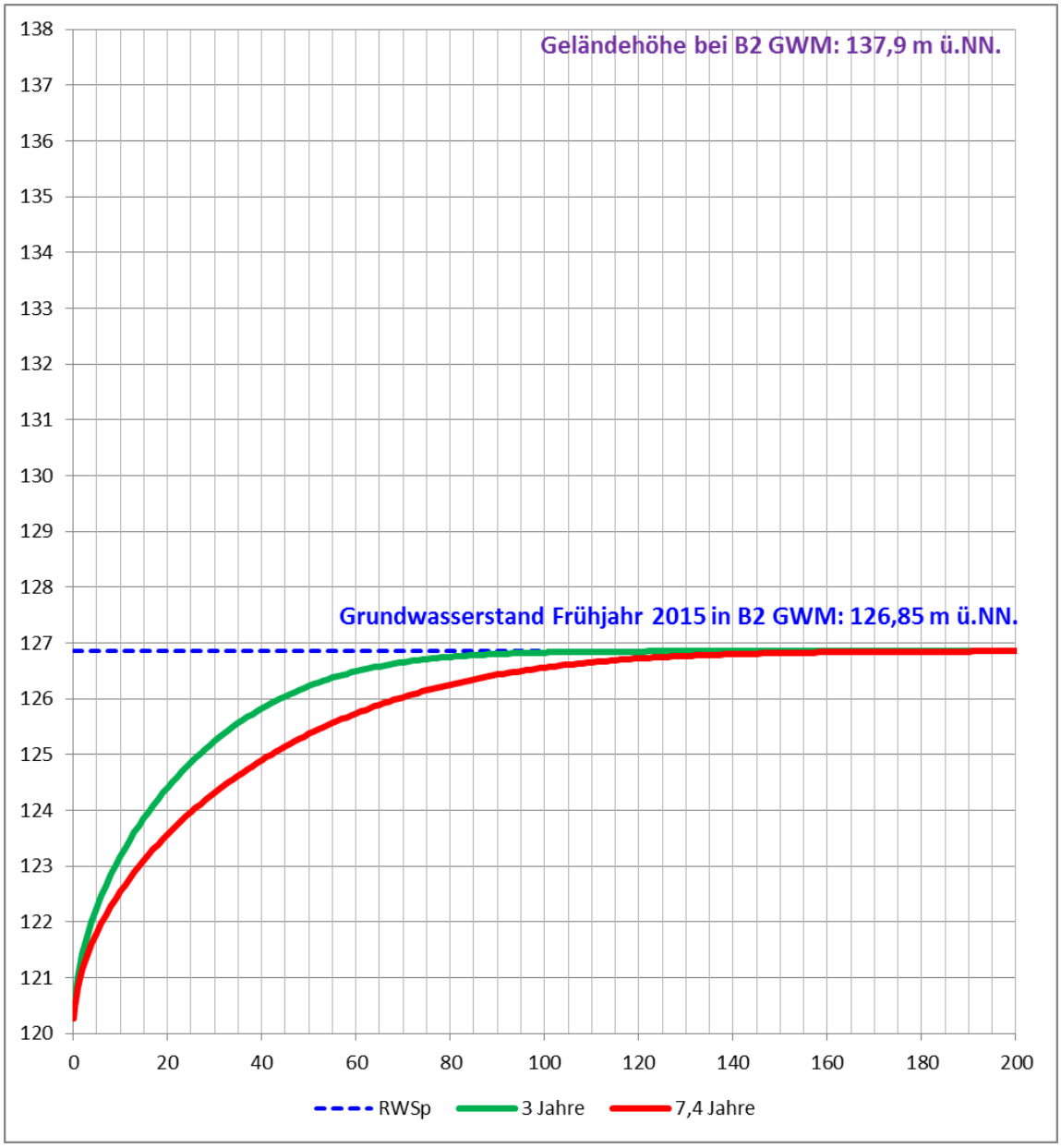


Abb. 4: Grundwasserhöhe bei Absenkung am linken Modellrand (durch Tagebau) auf 120 m ü. NN bei ungespannter Grabenströmung

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 Witterungsbericht 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

693 mm/a
21,98 l/(s * km²)

angegeben.

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

	bestehende Abbaustätte	**vorgesehene Abbaustätte**
Fläche	129.250 m²	51.620 m²
Mittlere jährliche Niederschlagsmenge in der Abbaufläche	2,84 l/s (10,22 m³/h)	1,13 l/s (4,07 m³/h)
Oberflächenwasserandrang	**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•10-5 m²/s (Bereich Störungszone) und 3•10-8 m²/s (Obtususton-Formation), was Durchlässigkeitsbeiwerten von ca. 1•10-6 m/s (Bereich Störungszone) bzw. 3•10-9 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:

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

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, HCO3, NO3, SO4, F, Cl, Bor (Bestimmungsgrenze 1 µg/l), NO2, NO3, NH4, H2S, 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 beigefügt.

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:

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:

Bezeichnung	Chlorid (in mg/l)
Karl-Sigel-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.

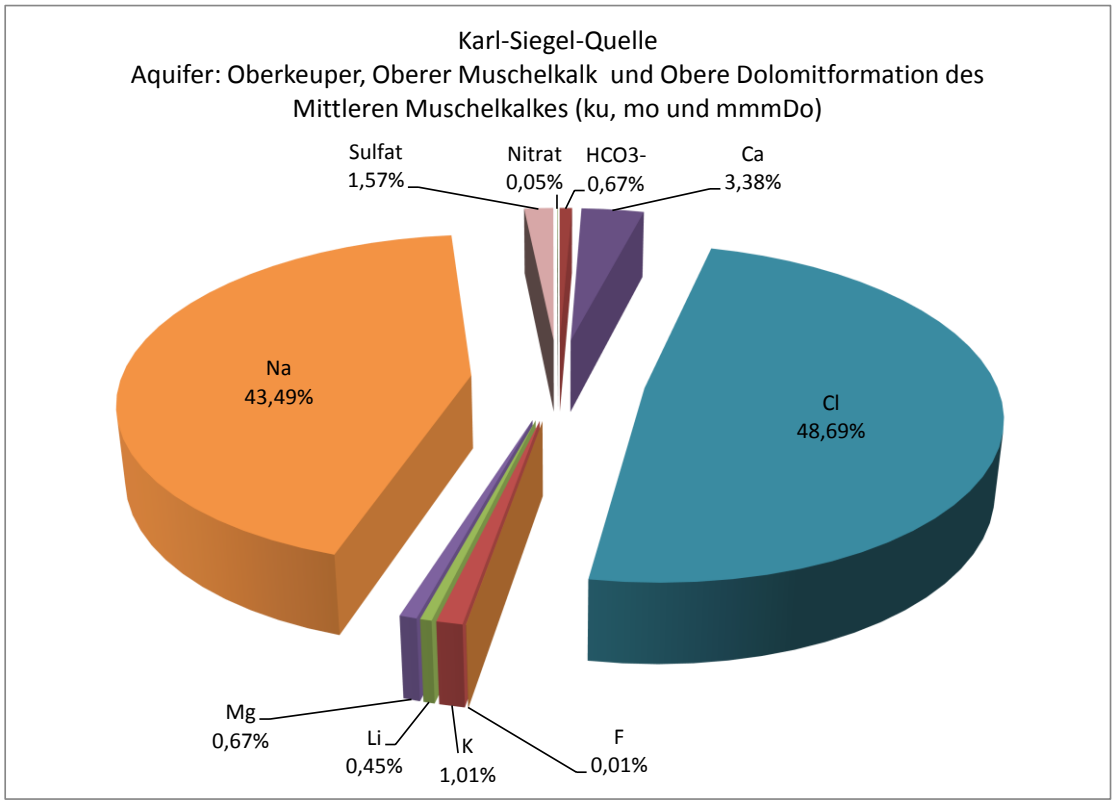


Abb. 5: Speziesverteilung (Hauptionen) im Thermalwasser der Karl-Siegel-Quelle

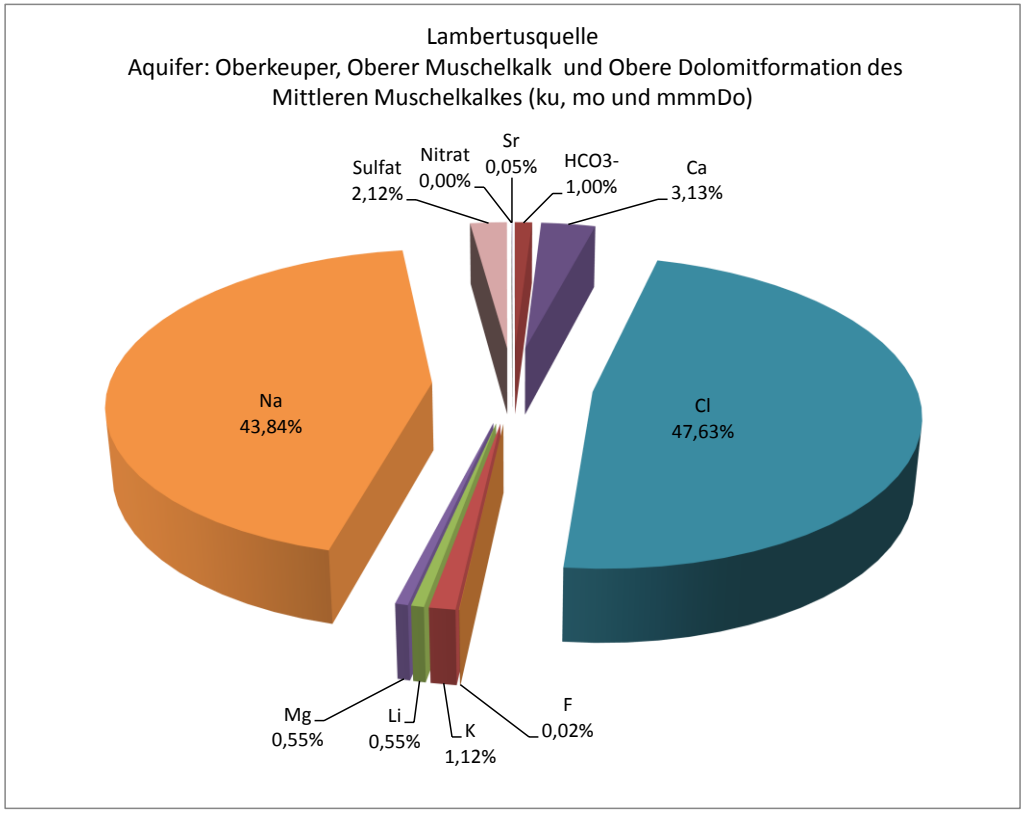


Abb. 6: Speziesverteilung (Hauptionen) im Thermalwasser der Lambertusquelle

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 Ludwigbrunnens 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**	**∑ 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.

Bezeichnung	Hydrogenkarbonat (HCO3-) mg/l	∑ 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.

Bezeichnung	Calcium (Ca2+) mg/l	Magnesium (Mg2+) mg/l	Strontium (Sr2+) mg/l	∑ 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.

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.

Bezeichnung	Sulfat (SO42-) 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.

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.

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 Ludwigsbrunnen aus dem stratigraphisch viel tiefer liegenden Rhät-Sandstein fördert.

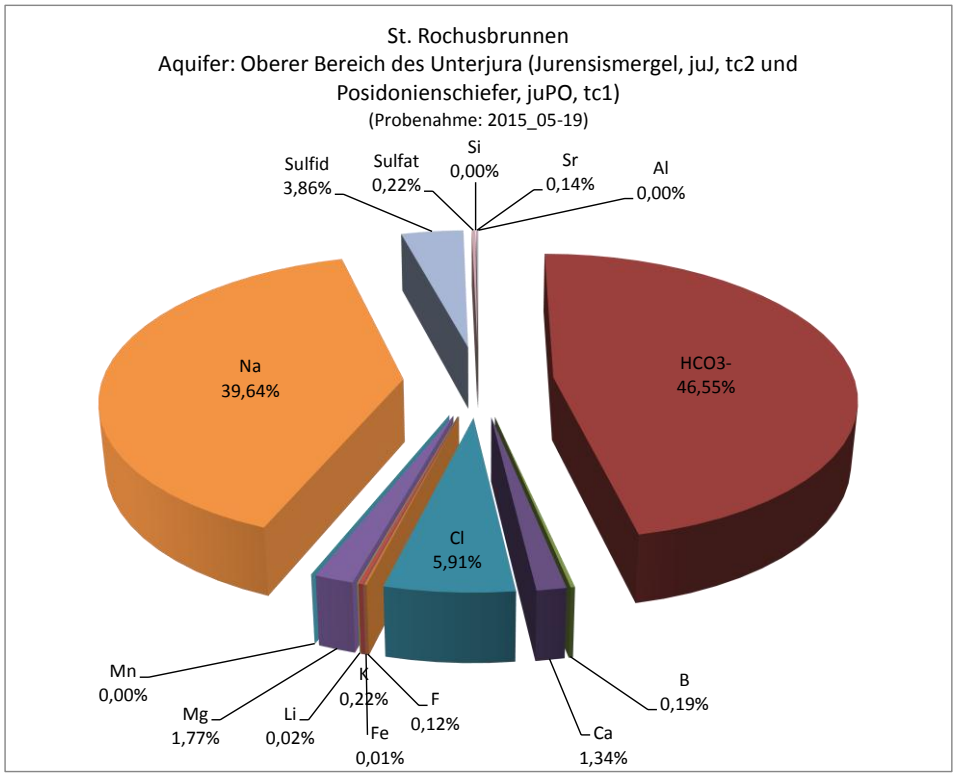


Abb. 7: Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser des Rochusbrunnens

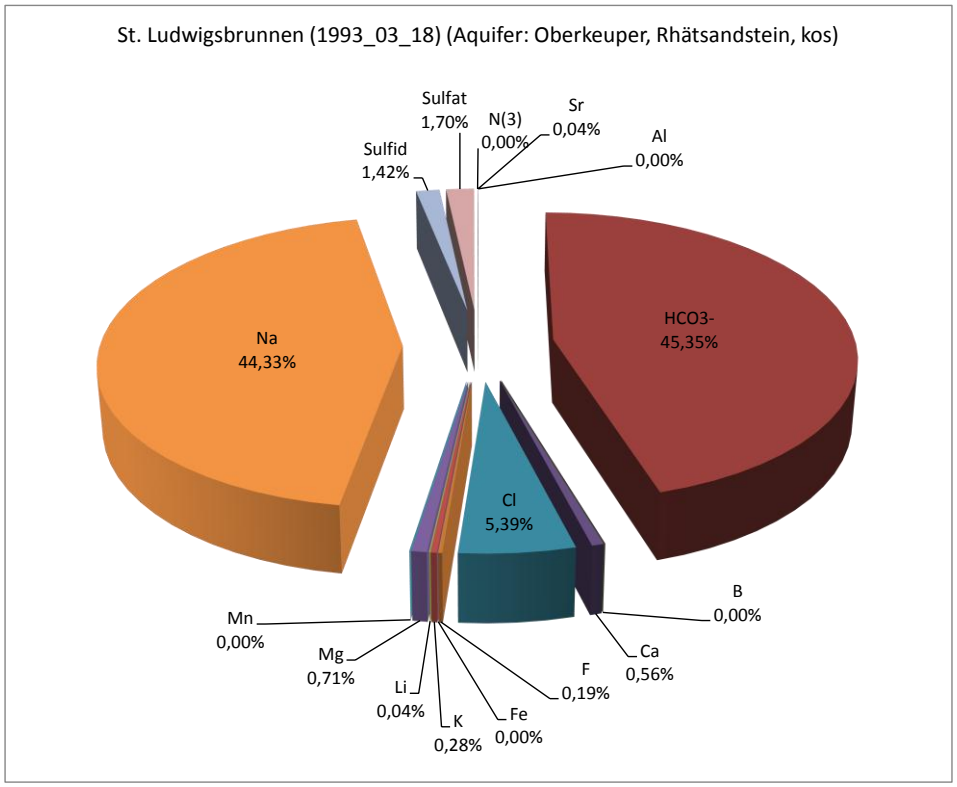


Abb. 8: Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser des Ludwigbrunnens

2.5.5.2.1 Untergruppe Wässer der GWM Rettigheim -2 und -3

Die Grundwassermessstellen Rettigheim -2 und -3 sind im Rhät-Sandstein verfiltert. 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.

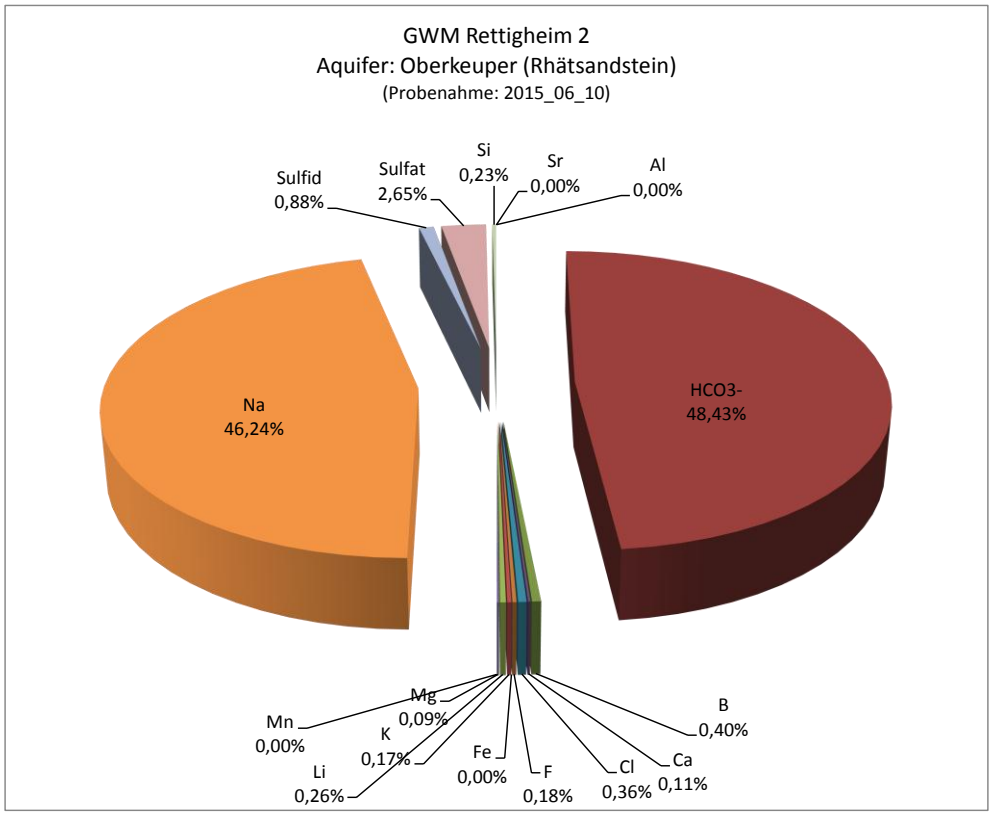


Abb. 9: Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser der GWM Rettigheim -2

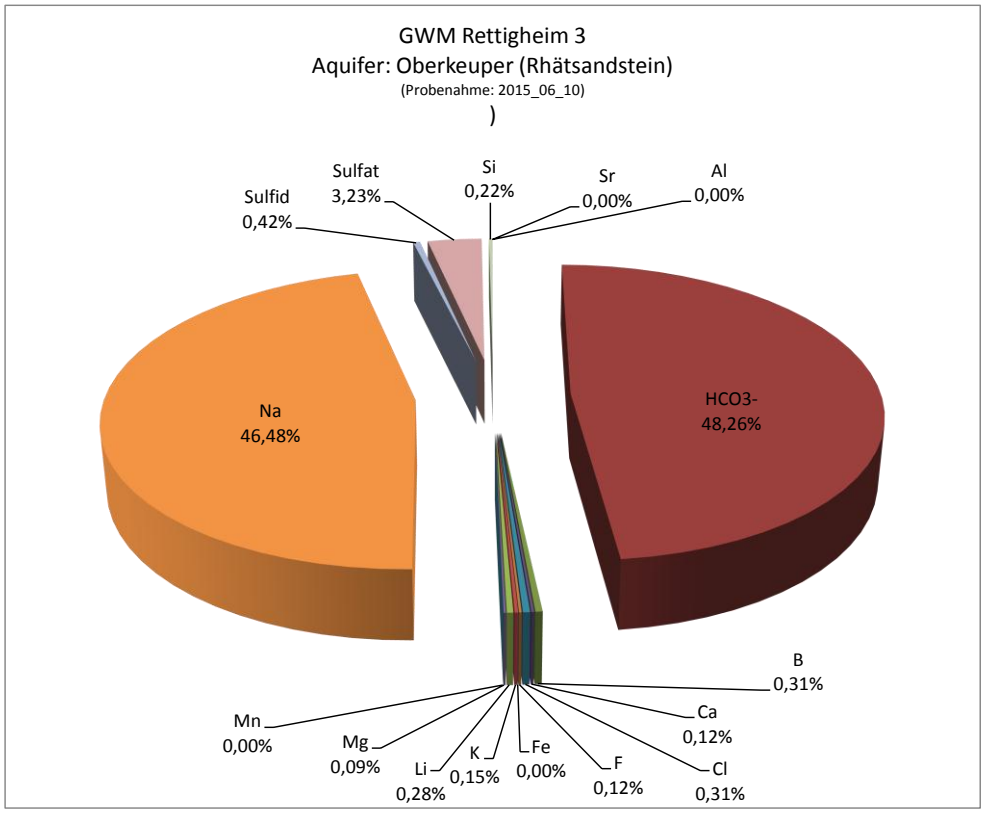


Abb. 10: Speziesverteilung der Hauptkomponenten im Wasser der GWM Rettigheim -3

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.

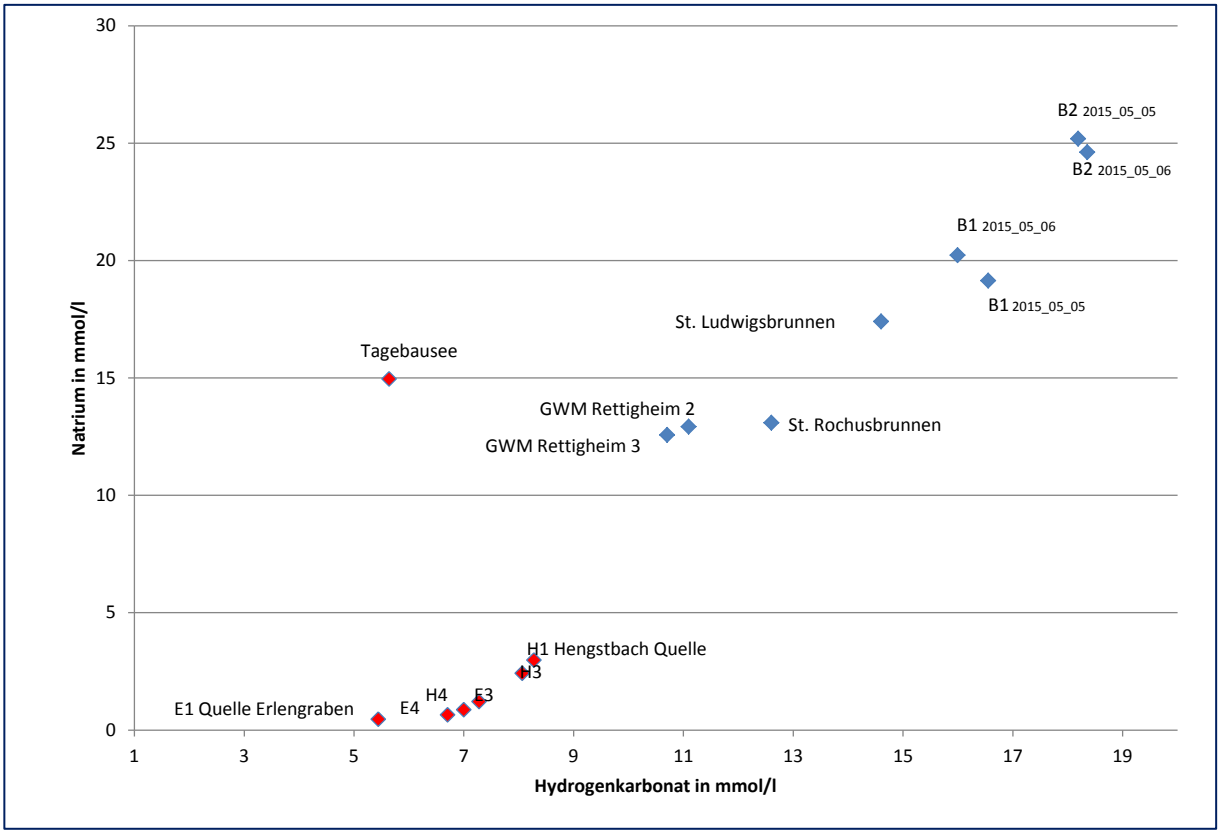


Abb. 11: Natrium- versus Hydrogenkarbonat-Charakteristik der untersuchten Grund- (blaue Signatur) und Oberflächenwässer (rote Signatur)

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

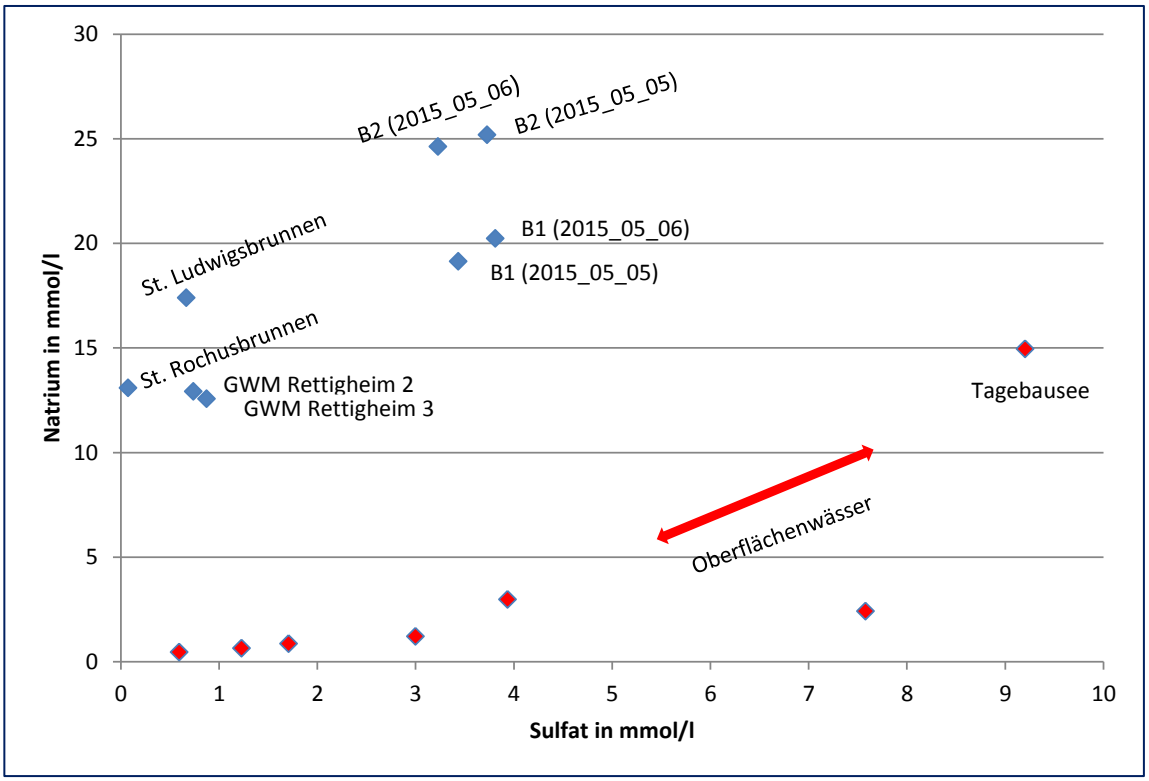


Abb. 12: Natrium- versus Sulfat-Ionen-Konzentration (in mmol/l) der untersuchten Grund- und Oberflächenwässer

Auch die graphische Darstellung der Sauerstoff-Isotopen-Verhältnisse (δ18O) 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).

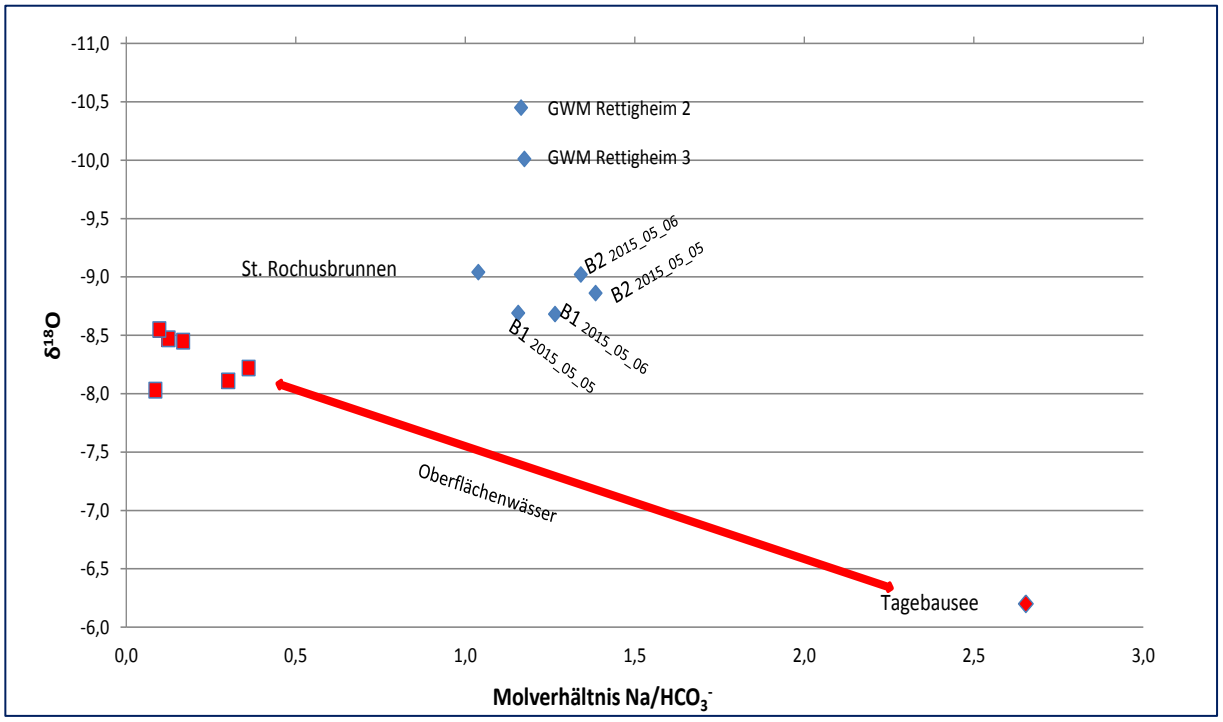


Abb. 13: Sauerstoff-Isotopen-Verhältnis versus Molquotient Na/HCO_3^- der untersuchten Grund- und Oberflächenwässer

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.

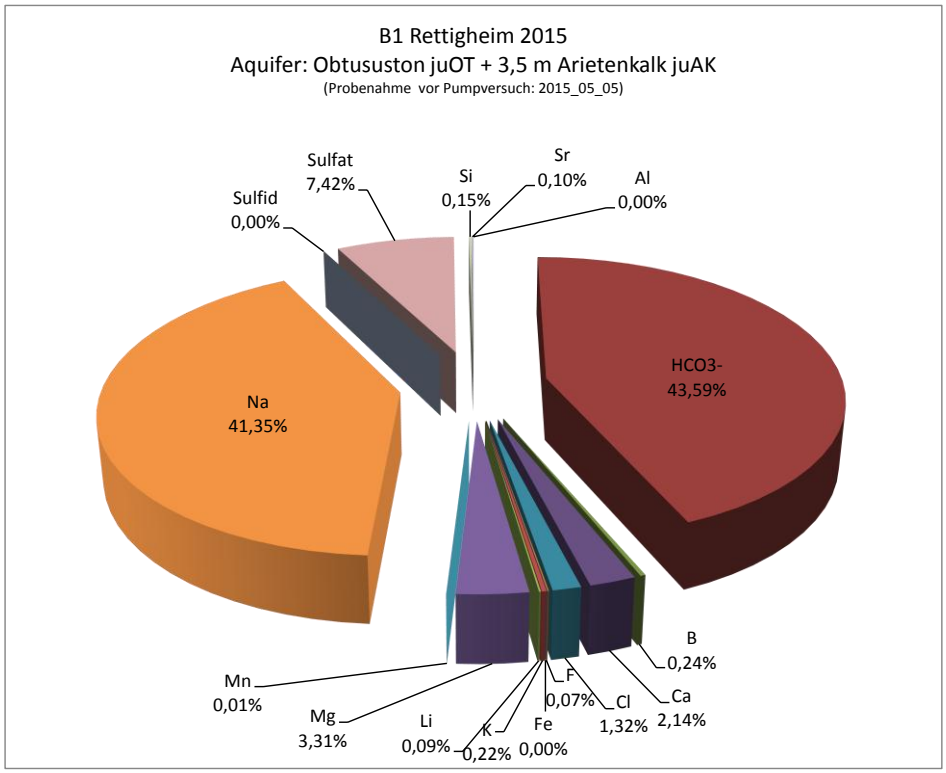


Abb.: 14 Speziesverteilung im Wasser der GWM B 1/2015 vor Pumpversuch

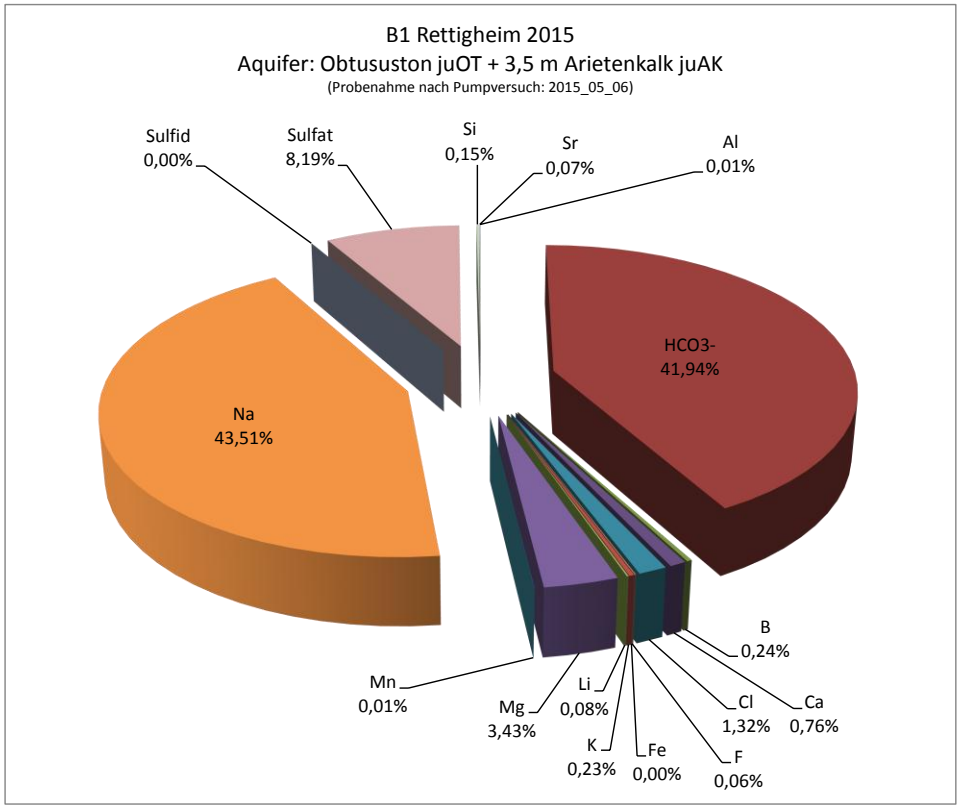


Abb. 15: Speziesverteilung im Wasser der GWM B 1/2015 nach Pumpversuch

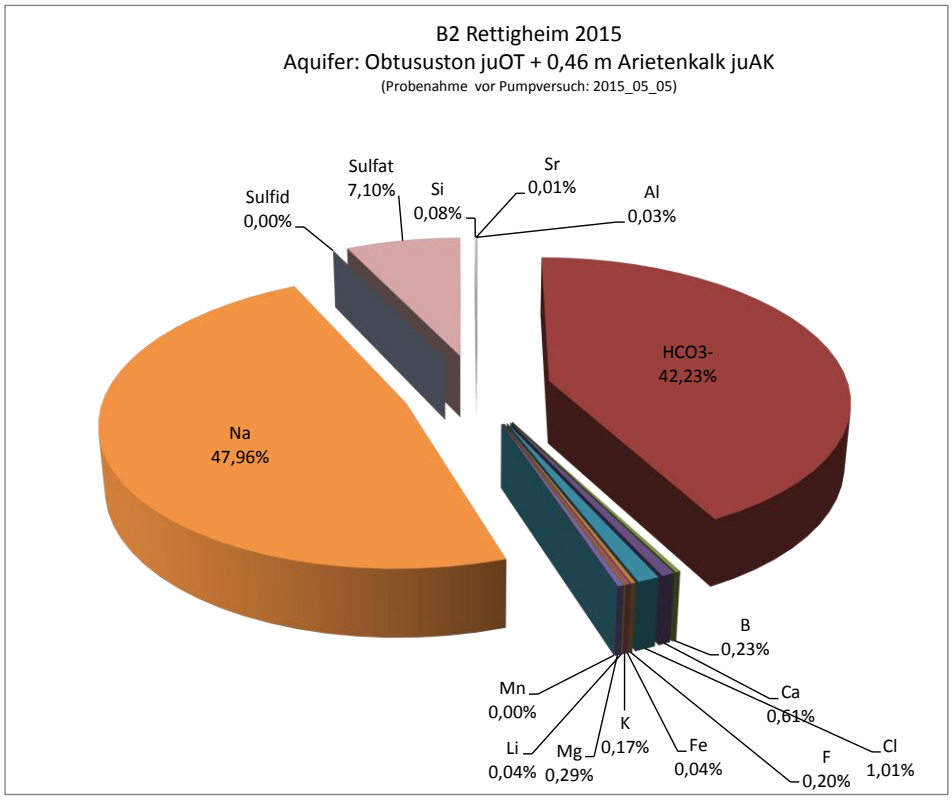


Abb. 16: Speziesverteilung im Wasser der GWM B 2/2015 vor Pumpversuch

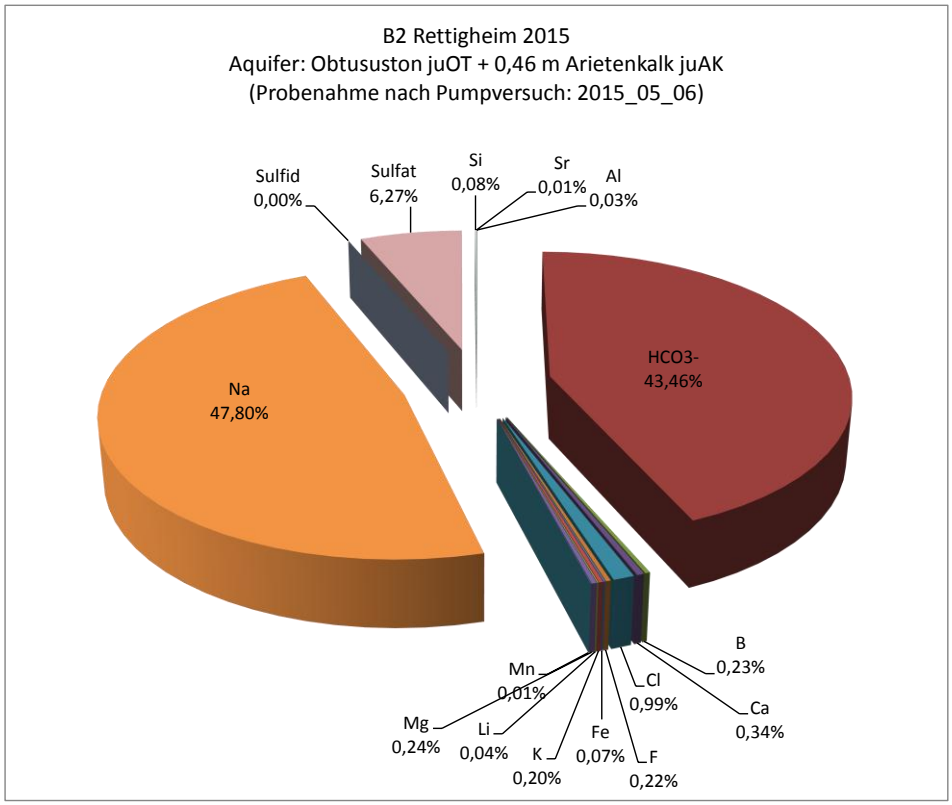


Abb. 17: Speziesverteilung im Wasser der GWM B 2/2015 nach Pumpversuch

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 $T=1x10^{-5}$ m^2/s eine höhere Transmissivität als B 2/2015 mit $T=3x10^{-8}$ m^2/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.

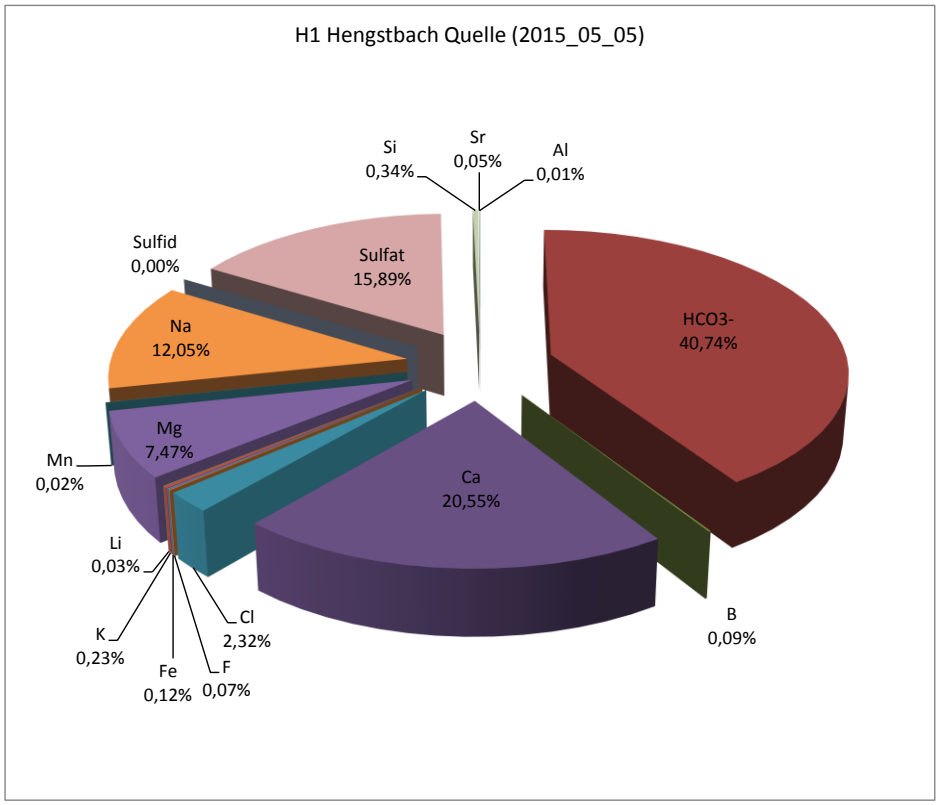


Abb. 18: Speziesverteilung im Wasser der Hengstbach-Quelle

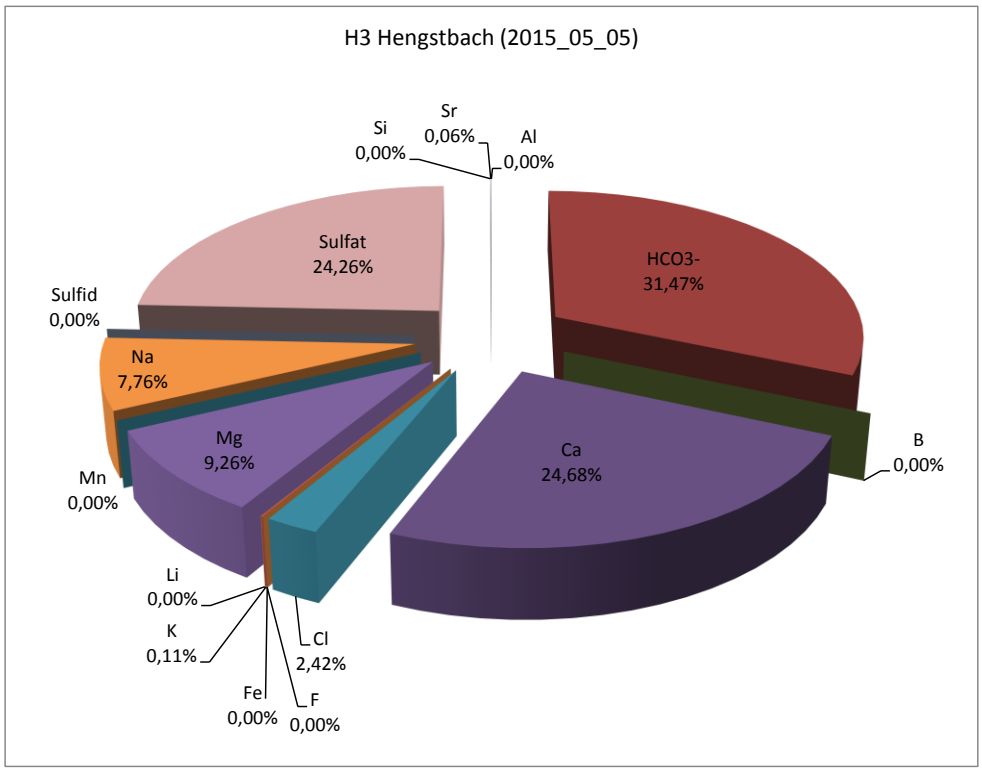


Abb. 19: Speziesverteilung im Wasser Hengstbach H3

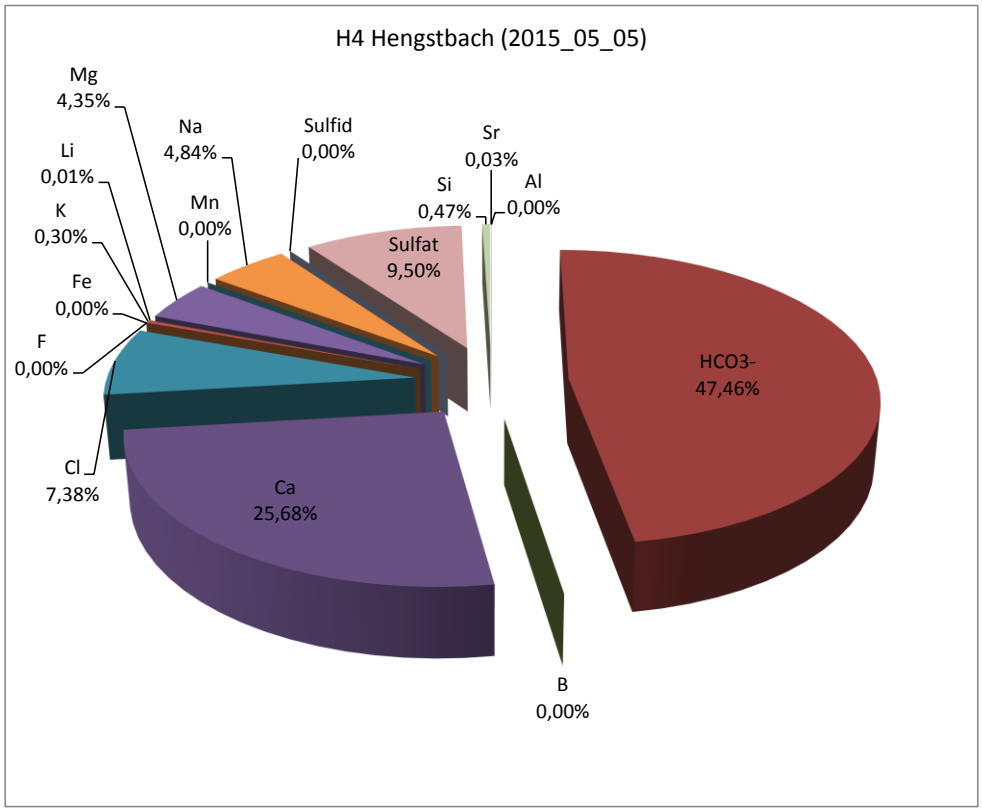


Abb. 20: Speziesverteilung im Wasser Hengstbach H4

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.

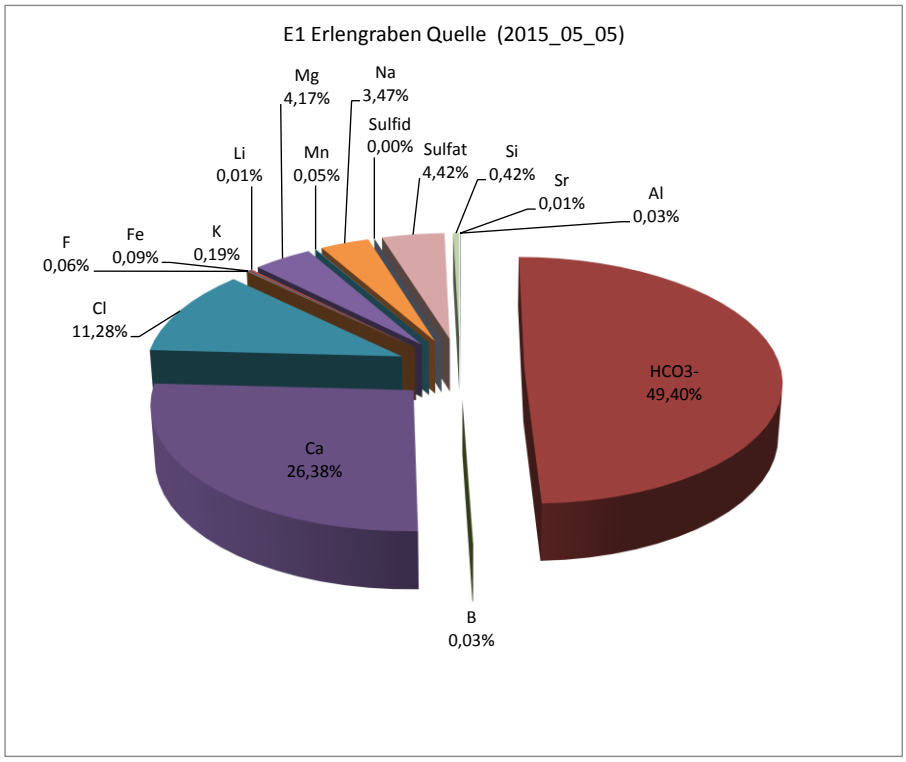


Abb. 21: Speziesverteilung im Wasser der Erlengraben Quelle

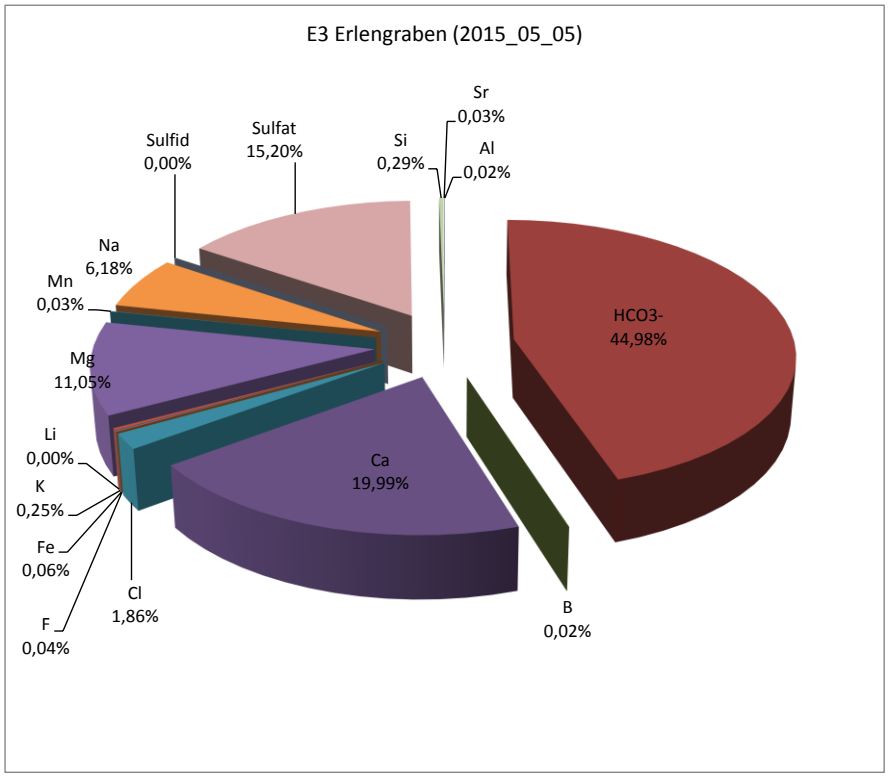


Abb. 22: Speziesverteilung im Wasser Erlengraben E3

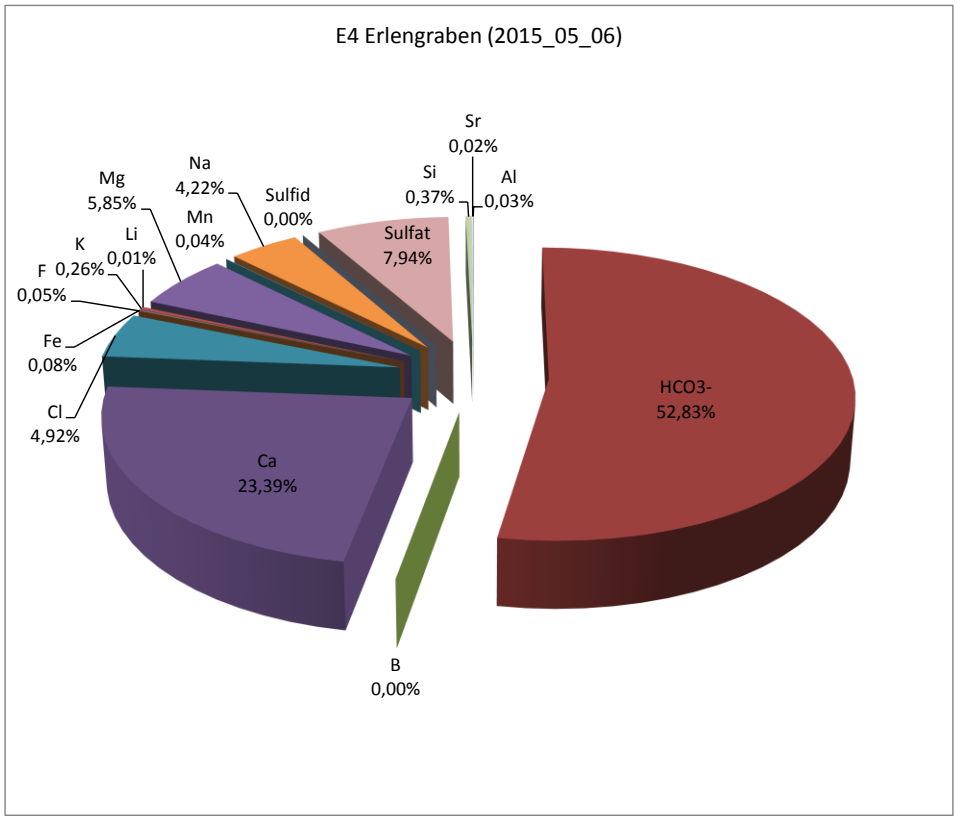


Abb. 23: Speziesverteilung im Wasser Erlengraben E4

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.

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

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

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

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 H_2O wird ein Wasser generiert, das sich durch hohe Alkali- und Sulfat-Konzentrationen auszeichnet.

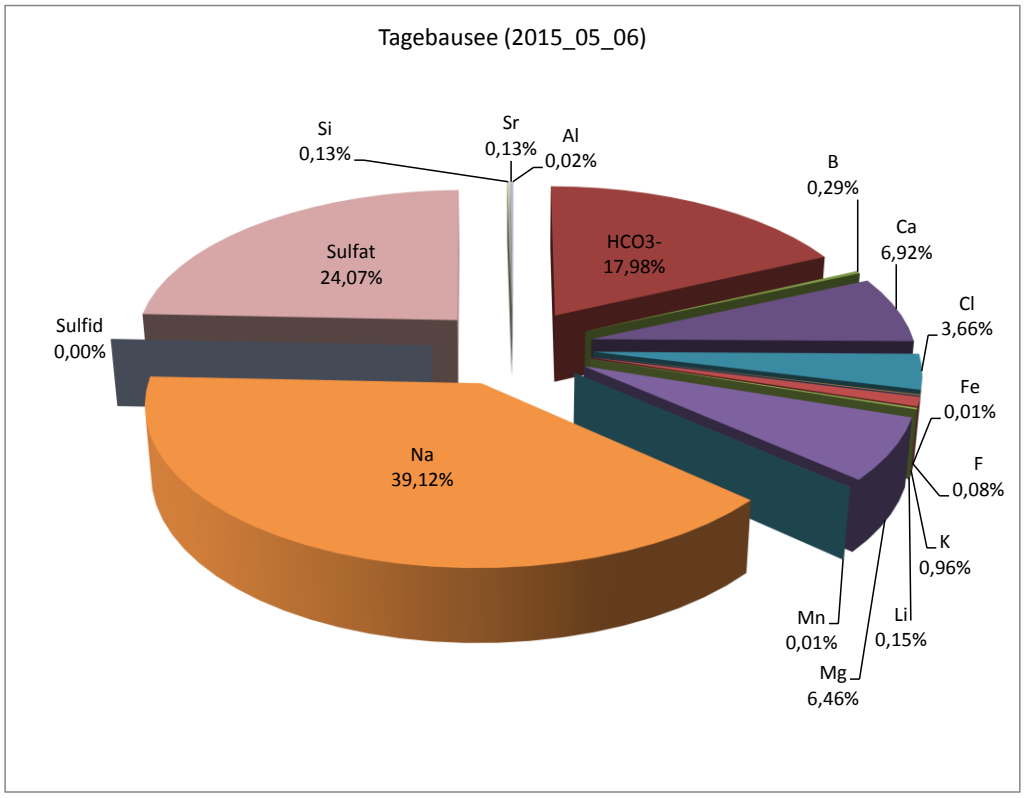


Abb. 24: Speziesverteilung im Wasser des Tagebausees

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 (^{2}H 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 ($\delta^{18}O$ bezogen auf VSMOW, Vienna Standard Mean Ocean Water) und Deuterium ($\delta^{2}O$, 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 (^{3}H) 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 $\delta^{18}O$ Werten dargestellt.

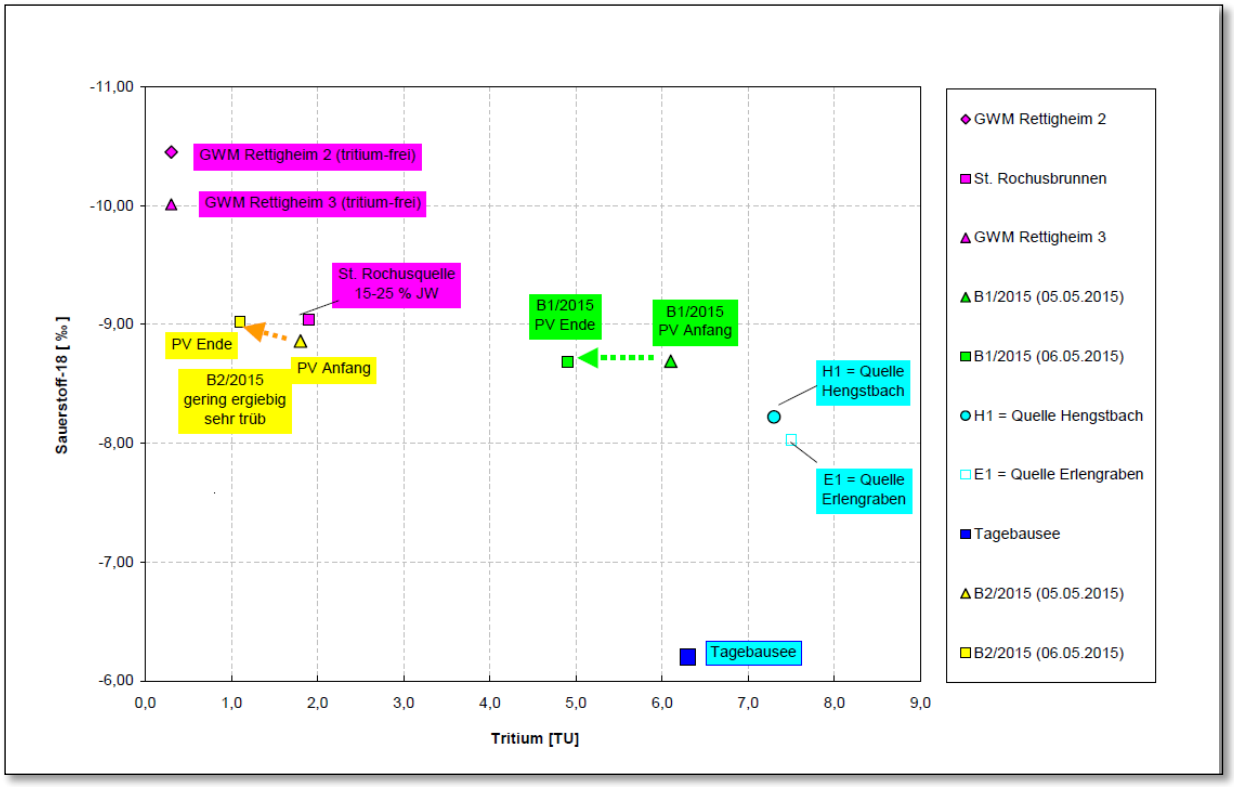


Abb. 25: Tritium versus δ-O18

2.5.6.3 Sauerstoff-δ18O / Deuterium

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

Bezeichnung	Sauerstoff-18 ($\delta^{18}O$) ‰	Deuterium ($\delta^{2}H$) ‰	Deuterium-Exzess ‰
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 $\delta^{18}O$-Wertre zu den $\delta^{2}H$-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.

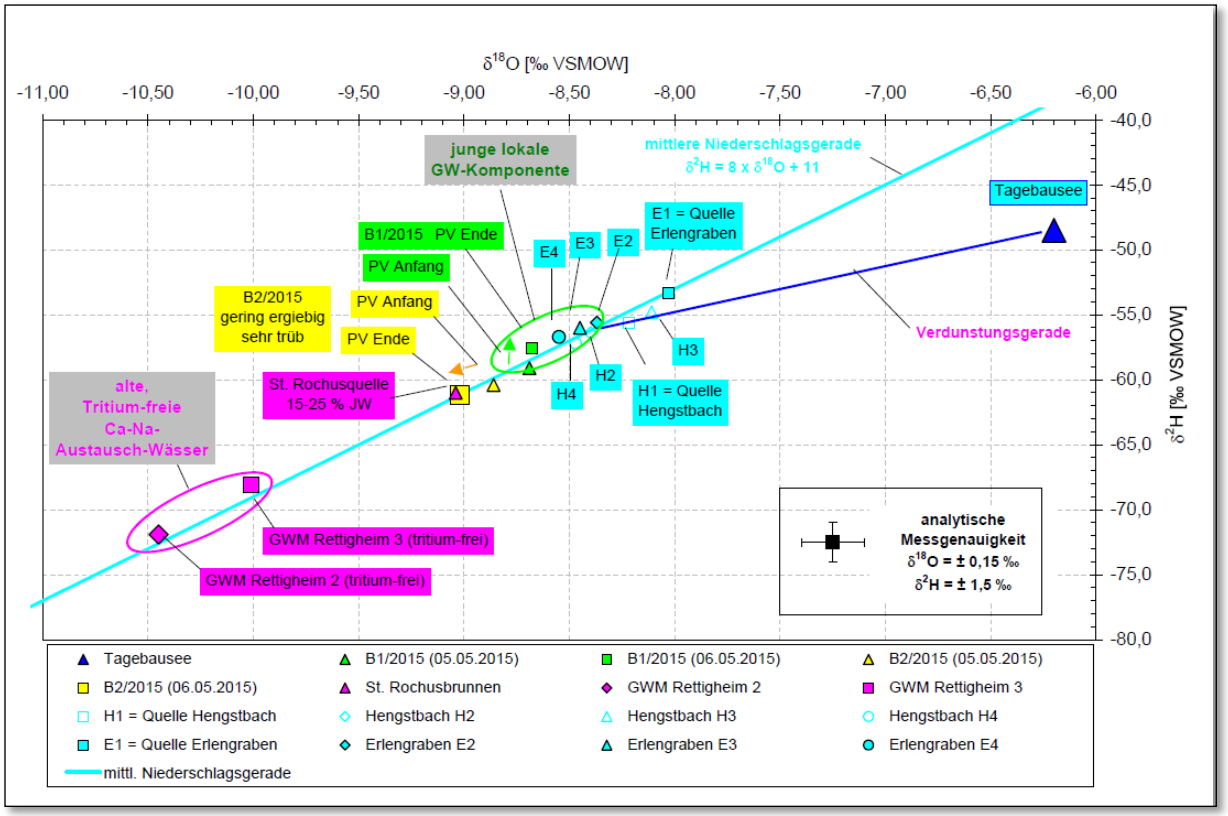


Abb. 26: Korrelation Sauerstoff-18-Gehalt versus Deuterium-Gehalt

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.

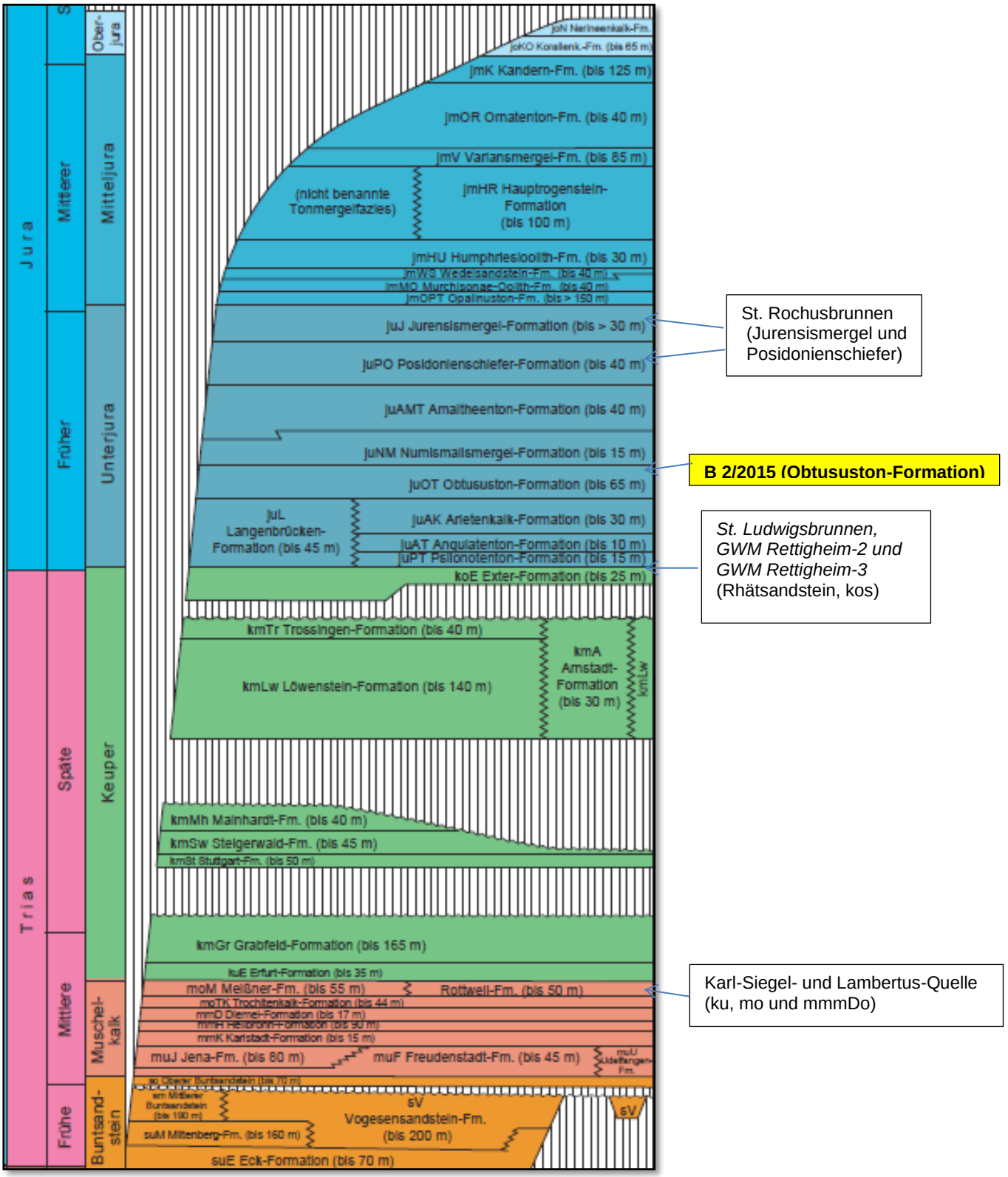


Abb. 27: Ausschnitt aus der Schichtenfolge Baden-Württemberg und schematische Einordnung der Aquifere der untersuchten Grundwässer im Umfeld des Tagebaues Rettigheim

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 (δ18O) versus Molverhältnis Na/HCO3- 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.

- 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.

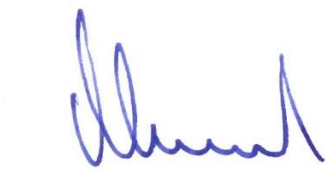
- Die Fließgewässer (Hengstbach und Erlengraben) werden in ihrer Beschaffenheit durch den geochemischen Charakter der durchflossenen Landschaft geprägt. Die Messstelle H3 Hengstbach ist offensichtlich durch Einleitung von Tagebauwässern beeinflusst.

- 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.

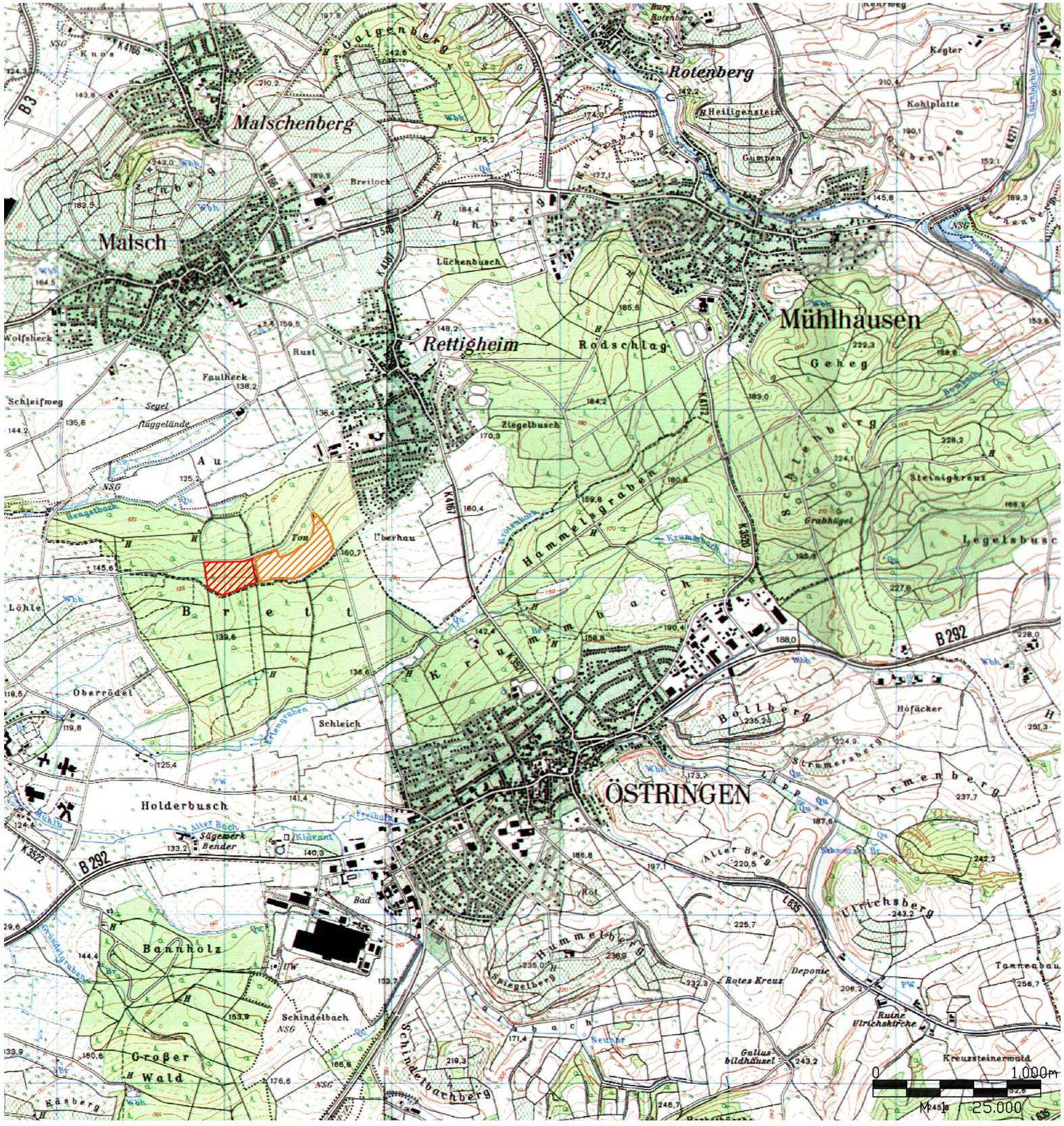
Bearbeiter:
Dr. Carsten Munk, Dr. Uwe Hekel, Prof. Dr. Bernd Voland

HPC AG

ppa.



Dr. Carsten Munk



Legende

- geplante Erweiterungsfläche Tontagebau Rettigheim
- derzeitige Abbaufläche der Wienerberger GmbH

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

Darstellung:

Übersichtskarte
Ausschnitt T□ 25
Blatt 6718 Wiesloch

Anlage:	**1**	
Projekt-Nr.:	**2061178**	
Maßstab:	**1:25.000**	
Zeichnungs-Nr.:	**Anl01_TK25.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:

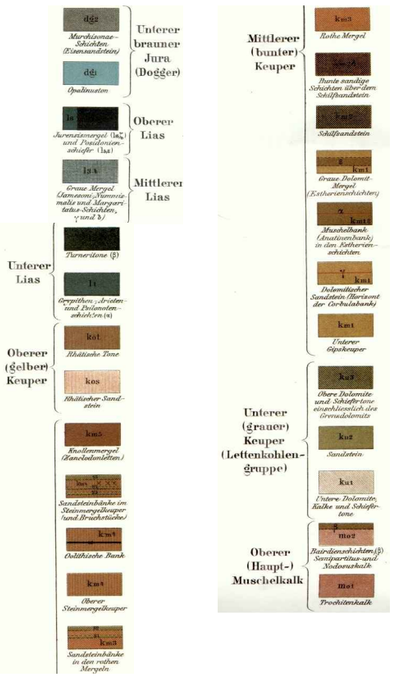
HPC AG
DAS INGENIEURUNTERNEHMEN
Postfach 11 13, 34226 Fuldatal
Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fuldatal
Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82

Pfad: **N:\WIN32APP\Projekte\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_01_26_Antrag\Anl01_TK25.dwg**

Layout: DIN_A3_TK25



Legende



geplante Erweiterungsfläche Tontagebau Rettigheim

derzeitige Abbaufläche der Wienerberger GmbH

Projekt:	**Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rettigheim in Mühlhausen OT Rettigheim**		
Darstellung: Geologische Karte Ausschnitt GK 25 Blatt 6718 Wiesloch	Anlage:	**2a**	
	Projekt-Nr.:	**2061178**	
	Maßstab:	**1:25.000**	
	Zeichnungs-Nr.:	**Anl02a__Geo.dwg**	
		Datum	Name
	gezeichnet:	**26.01.2016**	**mh**
	geprüft:	**26.01.2016**	**cm**

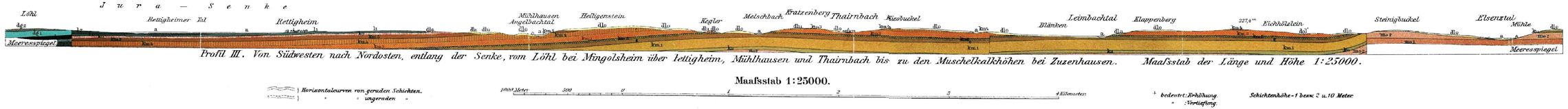
Bauherr/Auftraggeber:
Wienerberger
Wienerberger GmbH
Oldenburger Allee 26
D-30659 Hannover

Planverfasser:
HPC AG
DAS INGENIEURUNTERNEHMEN
Postfach 11 13, 34226 Fuldatal
Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fuldatal
Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82

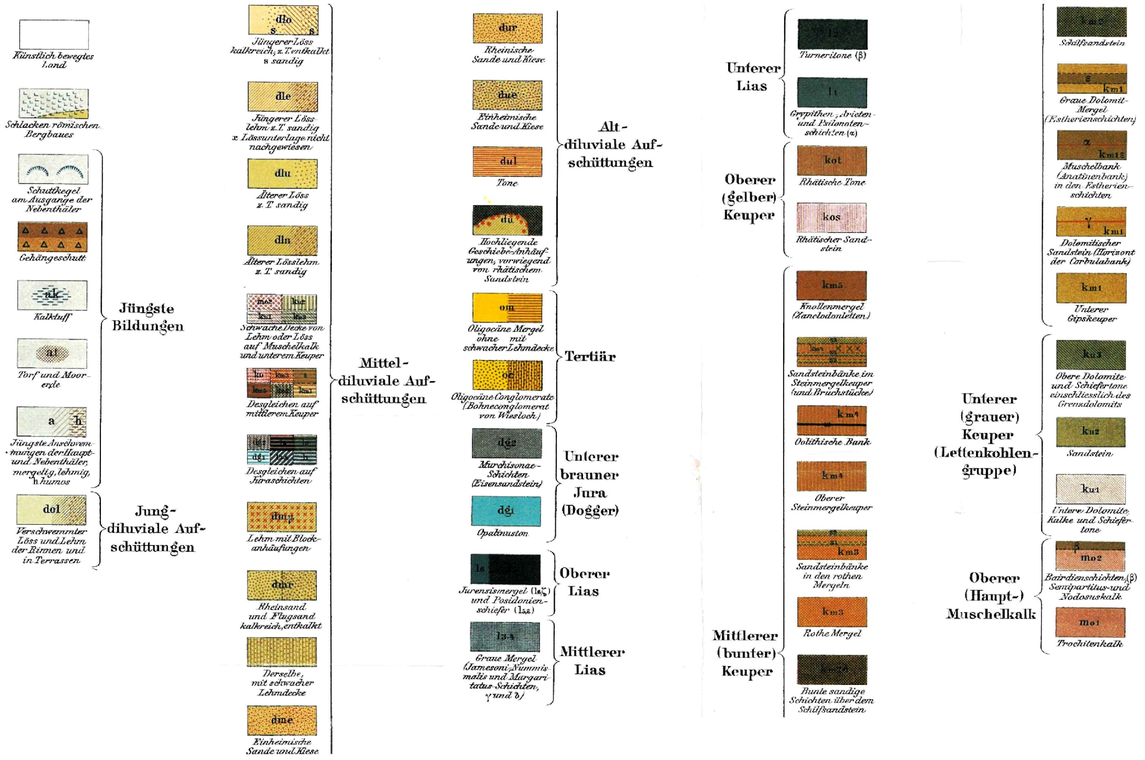
Pfad: **N:\WIN32APP\Projekte\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_01_26_Antrag\Anl02a__Geo.dwg**

Layout: **DIN_A3 Geologische Karte**

Geologischer Profilschnitt

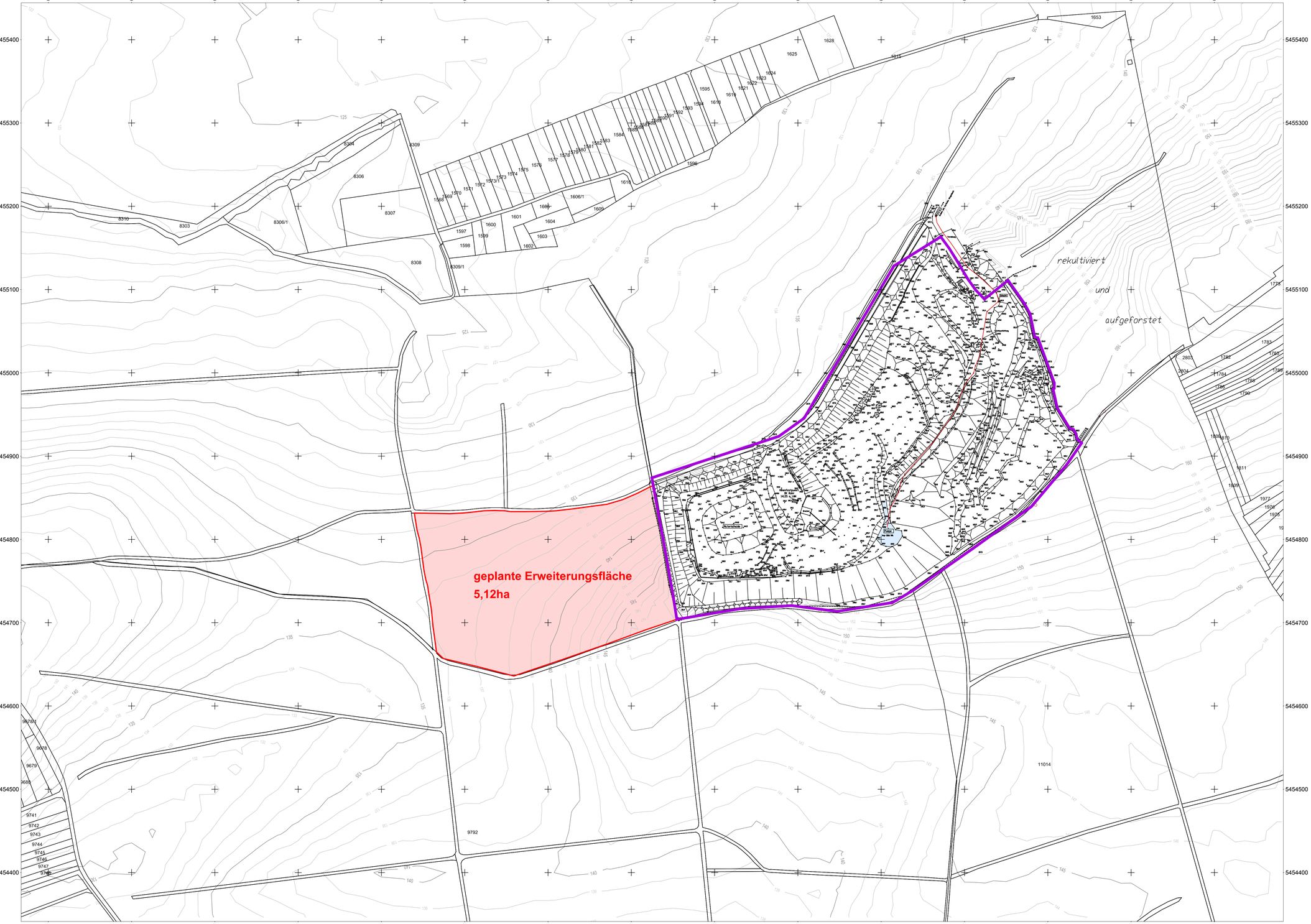


Legende



Projekt:	**Antrag der Wienerberger GmbH auf Zulassung eines Rahmenbetriebsplans zur Erweiterung der Tongrube Rettigheim in Mühlhausen OT Rettigheim**		
Darstellung:	Geologischer Profilschnitt aus Geologische Karte Blatt 6718 Wiesloch	Anlage:	2b
		Projekt-Nr.:	2061178
		Maßstab:	1:25.000
		Zeichnungs-Nr.:	Anl02b_Geo_Schnitt.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 DAS INGENIEURUNTERNEHMEN HPC AG Postfach 11 13, 34226 Fuldatal Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fuldatal Telefon 0561/98183-10, Telefax 0561/98183-82
Pfad:	N:\WIN32APP\Projekte\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_01_26_Antrag\Anl02b_Geo_Schnitt.dwg		

Layout: Geo_Profilschnitt



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 Mühlhausen OT Rettigheim

Darstellung:
Lageplan
mit Darstellung der
vorhandenen Abbaufläche
sowie der geplanten
Erweiterungsfläche

Anlage:	3		
Projekt-Nr.:	2061178		
Maßstab:	1:2.000		
Zeichnungs-Nr.:	An03_Lgpl_Flaechen_A.dwg		
		Datum	Name
gezeichnet:	29.02.2016	ag/mh/nmi	
geprüft:	29.02.2016	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\Projekte\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_2_29_Antrag\An03_Lgpl_Flaechen_A.dwg**

Layout: Layout1

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

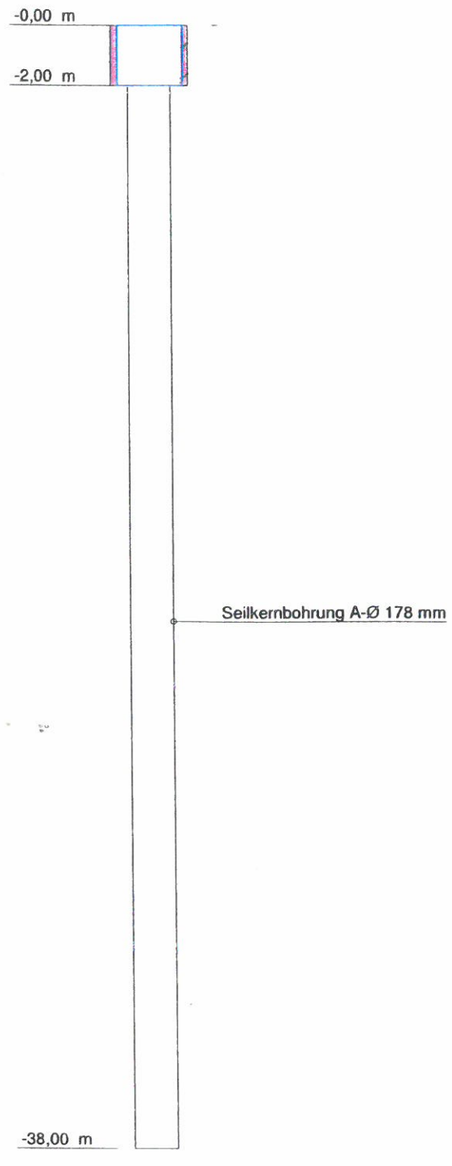
Planverfasser:

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

Pfad: **N:\WIN32APP\Projekte\wienerberger\Rettigheim\Abgabe\2016_01_26_Antrag zur Erweiterung\Anl04a+04b_Spiegel.dwg**

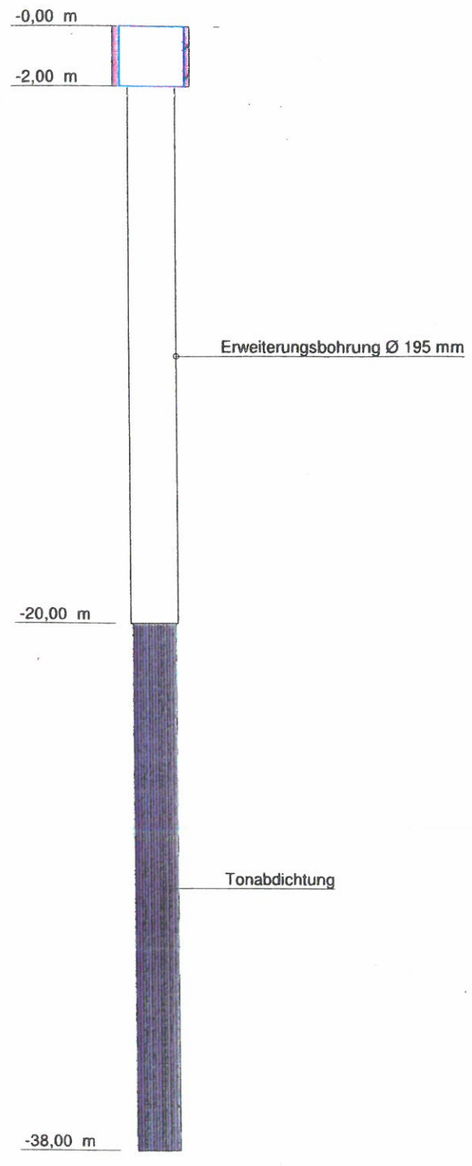
Schritt 1.2

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



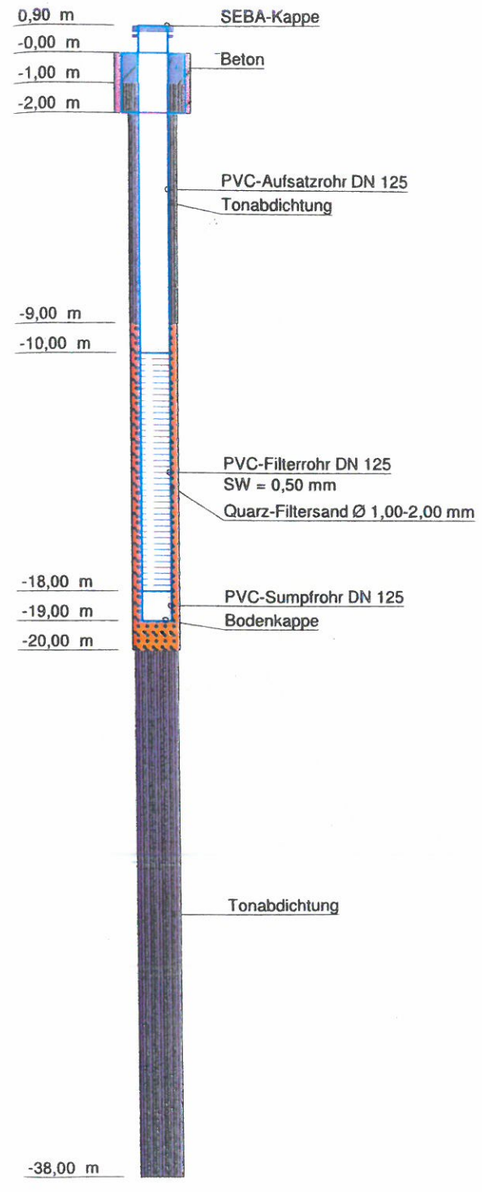
Schritt 1.3

Auffüllen der Kernbohrung bis 1,0 m
unter Pegelausbauteufe,
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

Copyright © 1994-2014 IDAT GmbH - N:\AUFTRAEGE\Bohrdaten\12140900 - Wienerberger.bor

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

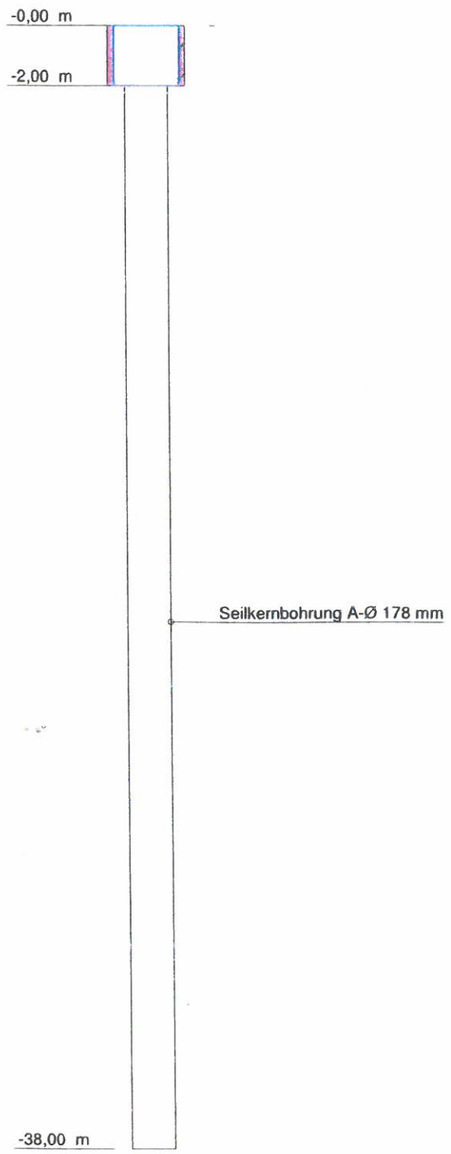
Planverfasser:

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

Pfad: N:\WIN32APP\Projekte\wienerberger\Rettigheim\Abgabe\2016_01_26_Antrag zur Erweiterung\Anl04a+04b_Spiegel.dwg

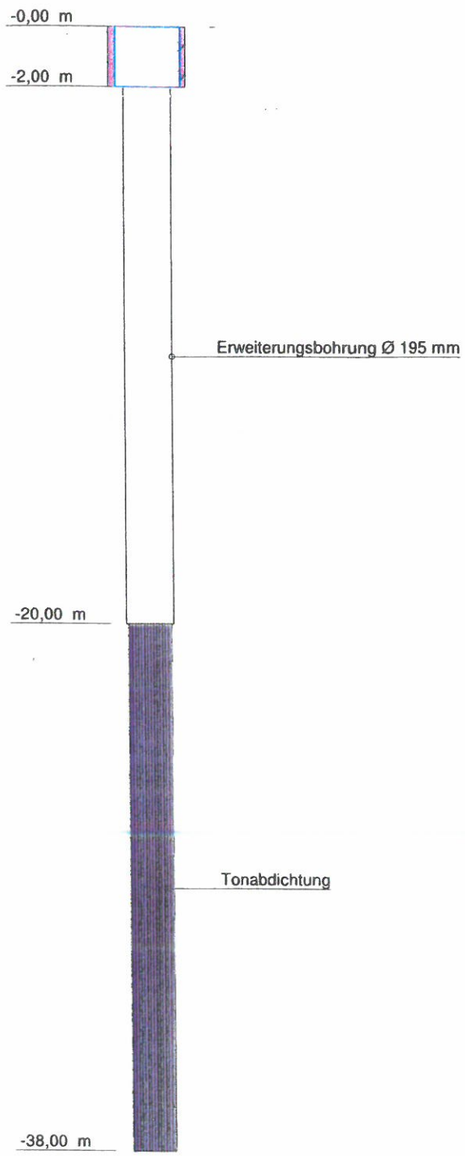
Schritt 1.2

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



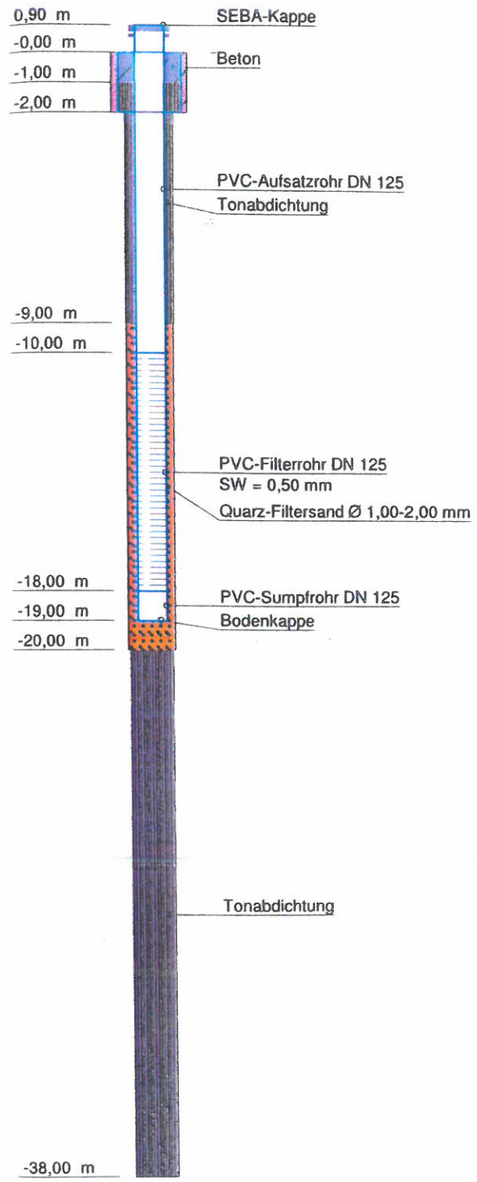
Schritt 1.3

Auffüllen der Kernbohrung bis 1,0 m
unter Pegelausbauteufe,
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

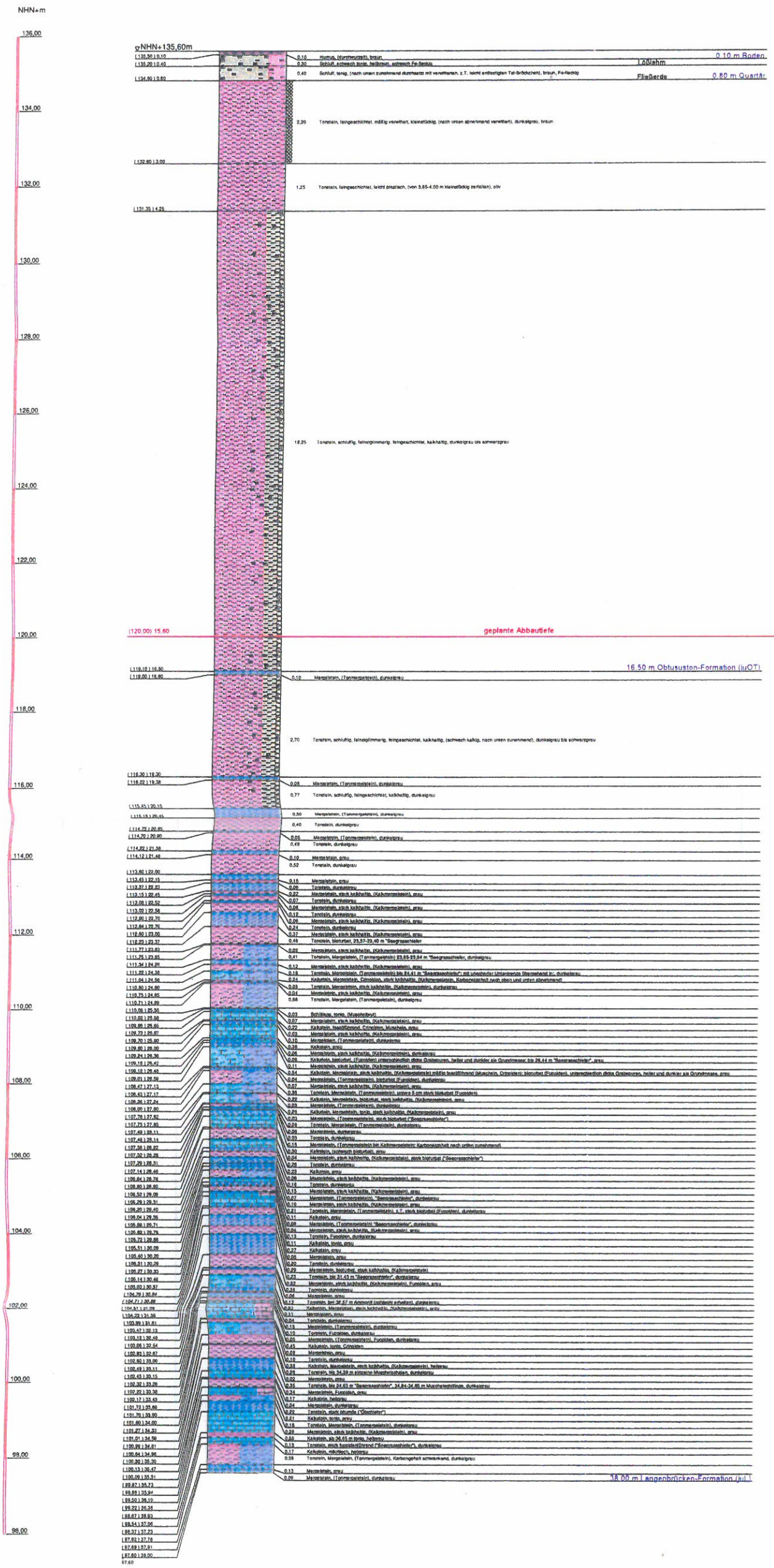
PROJEKT:
Rettigheim
Kern- und Pegelbohrungen
Bohr- und Verrohrungsplan

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

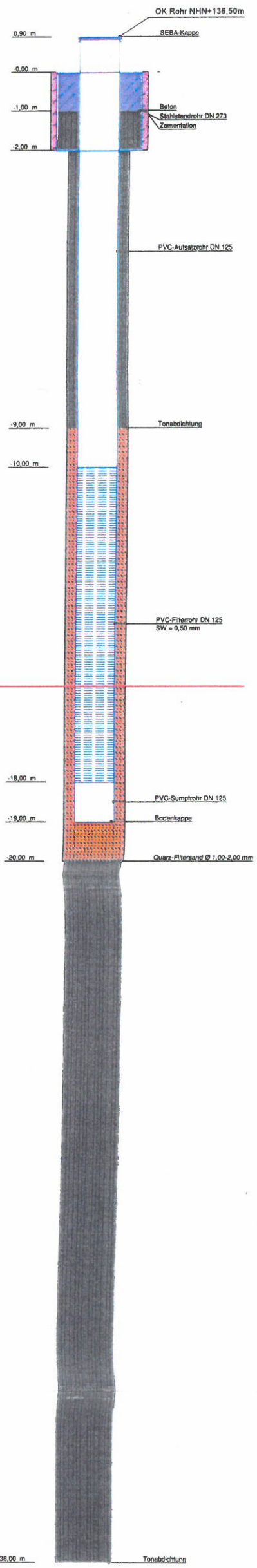
Copyright © 1994-2014 IDAT GmbH - N:\AA_IDAT\BOHRDATEN\Bohrdaten\12140700 - Wienerberger.bgp

Bohrprofil B1/2015

R= 3476856,5
H= 5454745,0



GWM B1/2015



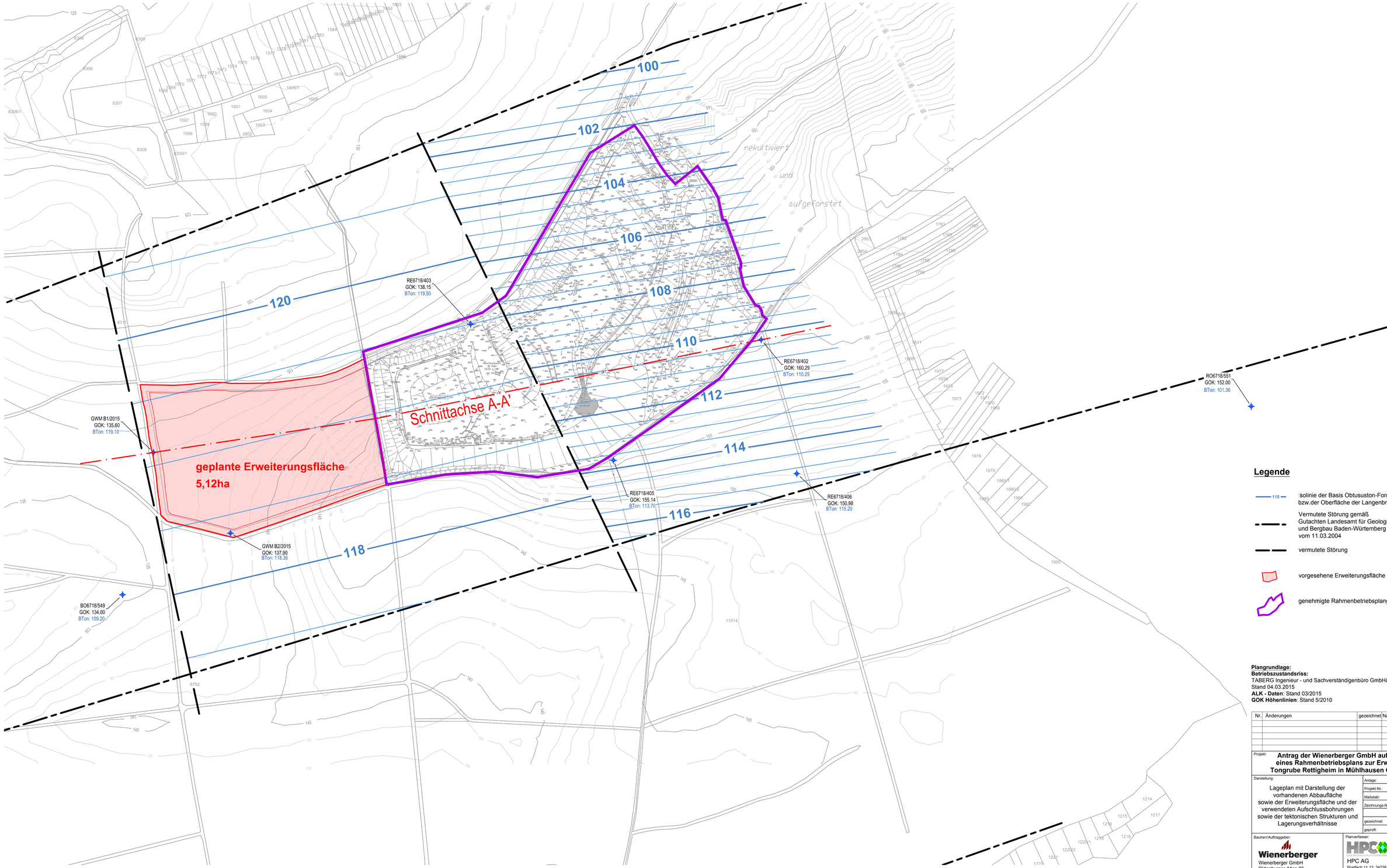
celler brunnenbau gmbh

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



Legende

- 118 — Isolinie der Basis Obtususton-Formation (mNHN) bzw.der Oberfläche der Langenbrücken-Formation
- Vermutete Störung gemäß Gutachten Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau Baden-Würtemberg vom 11.03.2004
- vermutete Störung
- vorgesehene Erweiterungsfläche
- genehmigte Rahmenbetriebsplangrenze

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 Mühlhausen OT Rettigheim

Darstellung:
Lageplan mit Darstellung der vorhandenen Abbaufläche sowie der Erweiterungsfläche und der verwendeten Aufschlussbohrungen sowie der tektonischen Strukturen und Lagerungsverhältnisse

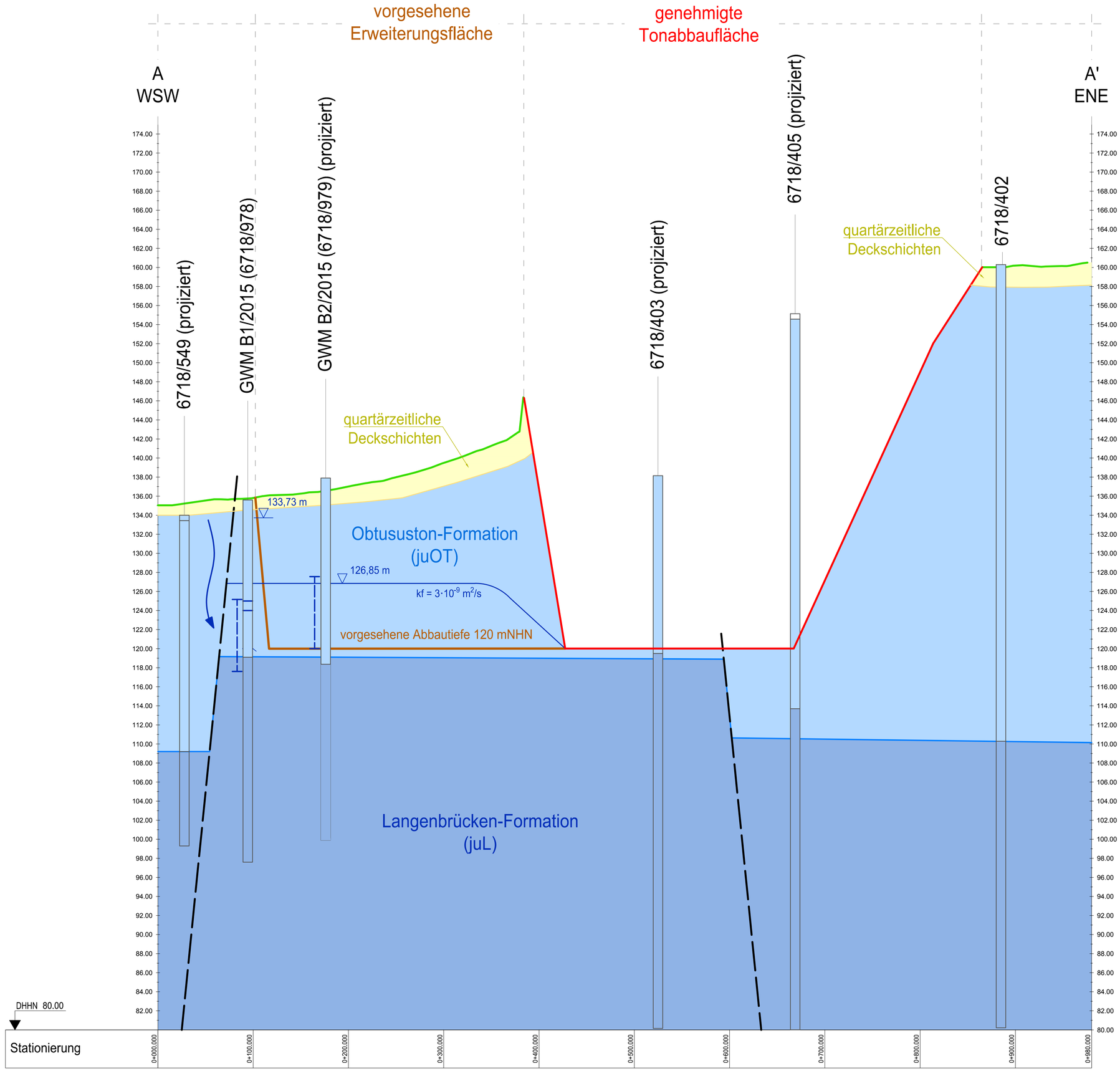
Anlage:	5	
Projekt-Nr.:	2061178	
Maßstab:	1:2.000	
Zeichnungs-Nr.:	Anl5_Lgpl_Flaechen_Profilschnitte_A.dwg	
	Datum	Name
gezeichnet:	29.02.2016	ag/mh/nmi
geprüft:	29.02.2016	cm

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\Projekte\wienerberger\Rettigheim\DGM\DGM_2016_02_29\Anl05_Lgpl_Flaechen_Profilschnitte_A.dwg**

Layout: Layout1



Profil 10-fach überhöht !

Legende

- Störung, vermutet
- Grundwasserbewegung
- Filterstrecke
- 133,73 m — Ruhewasserspiegel (m ü. NN)
- T= 3,0 ·10-6 m2/s — Transmissivität

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

Darstellung: WSW - ENE verlaufender geologischer Profilschnitt A - A'

Anlage:	6
Projekt-Nr.:	2061178
Maßstab:	1:2000 / 1:200
Zeichnungs-Nr.:	2016_06_23_Profilschnitt.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\Projekte\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_06_23_Antrag\2016_06_23_Profilschnitt.dwg

Layout: Layout Schnitt A-A' DIN A1

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

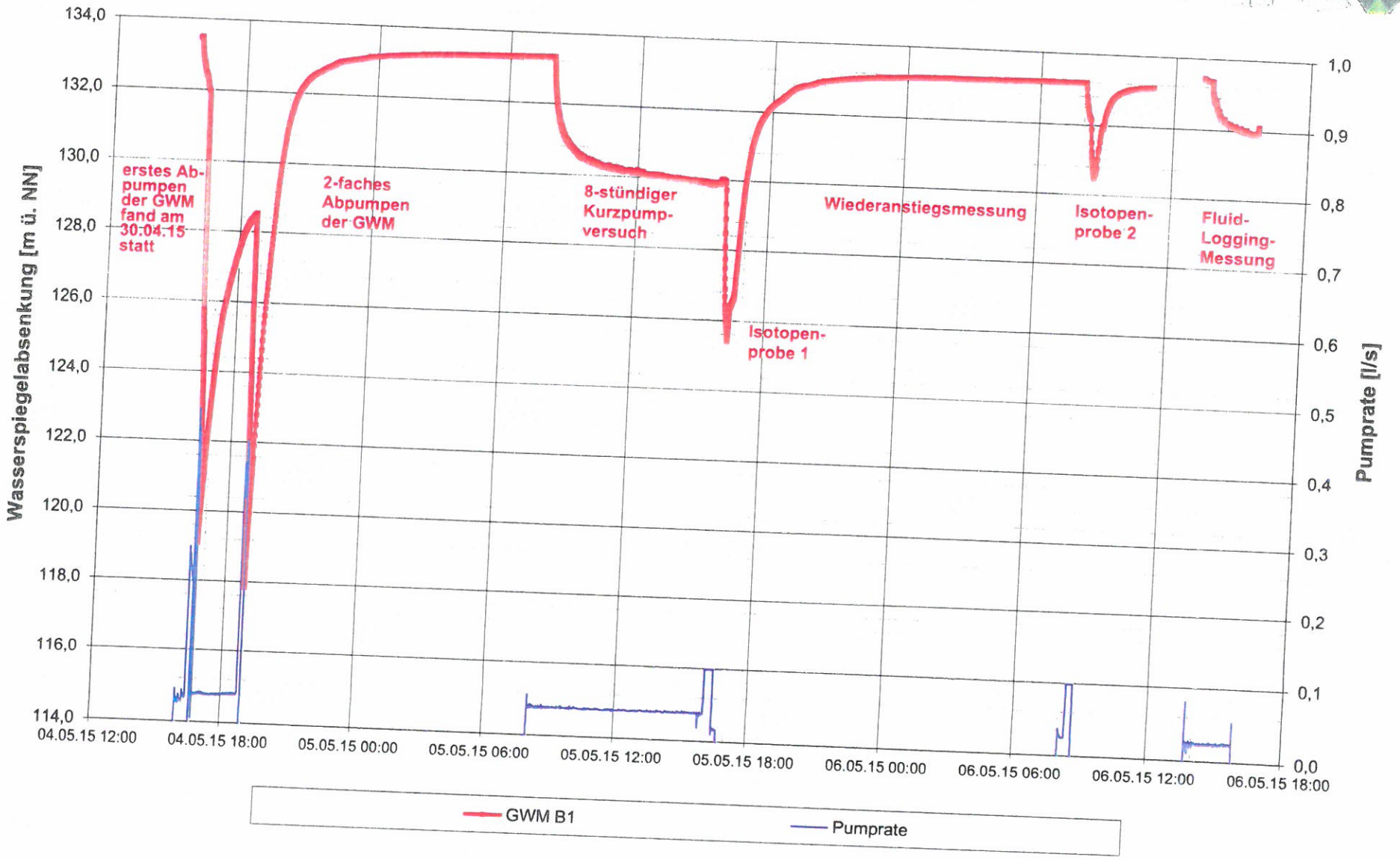
Planverfasser:

HPC
DAS INGENIEURUNTERNEHMEN

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

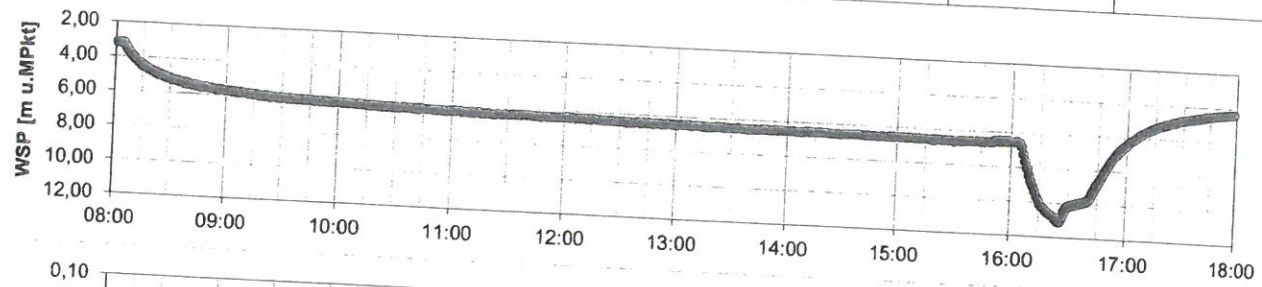
Pfad: N:\WIN32APP\Projekte\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_01_26_Antrag\Anl07a-07c_Spiegel.dwg

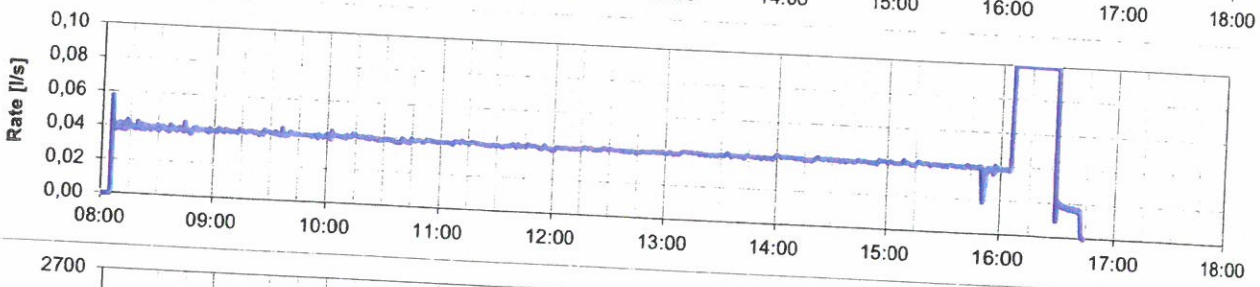
Erweiterung der Tongrube Rettigheim - Wienerberger GmbH
Pumpversuch und Probenahme in GWM B1

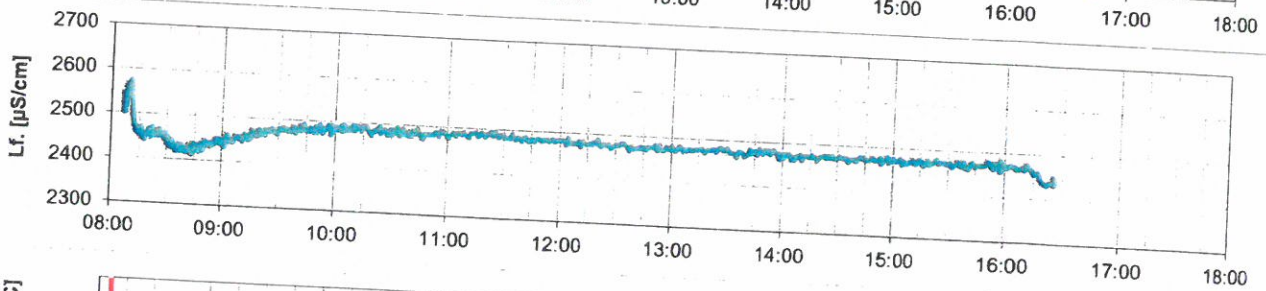


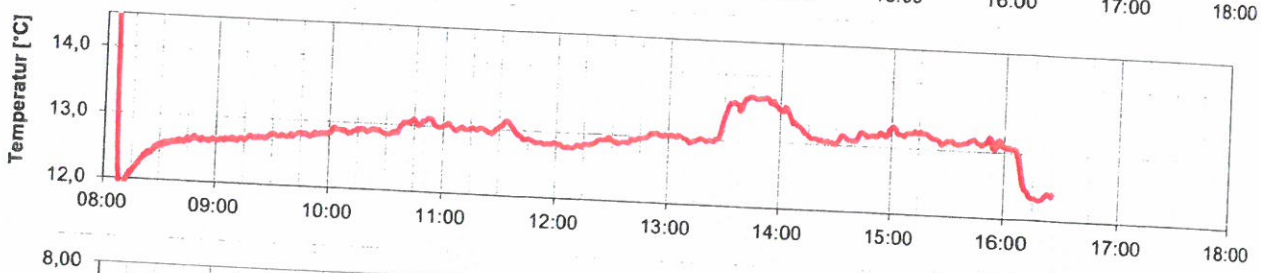
Pumpversuchsdokumentation

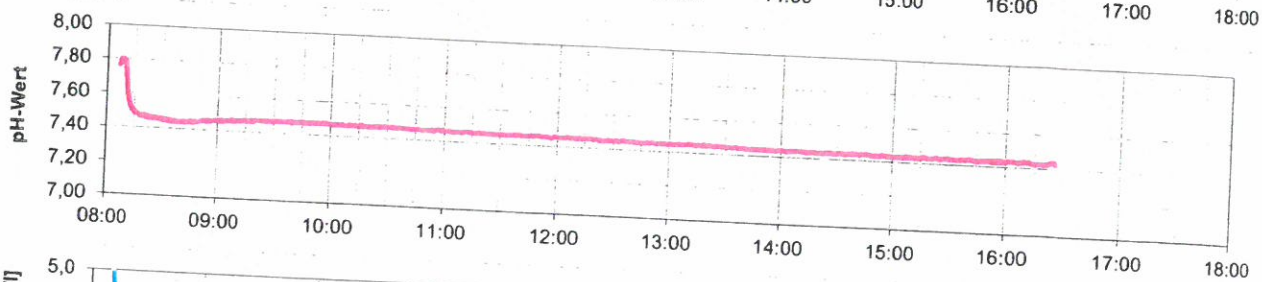
Projekt	Erw. Tongrube	Projektnr.	2061178	Ort	Rettigheim	Datum	05.05.2015
Brunnen	GWM B1	RWSP	3,00	Filter	10 - 18 m	Bemerkung	
		[m u. POK]		[m u. GOK]			

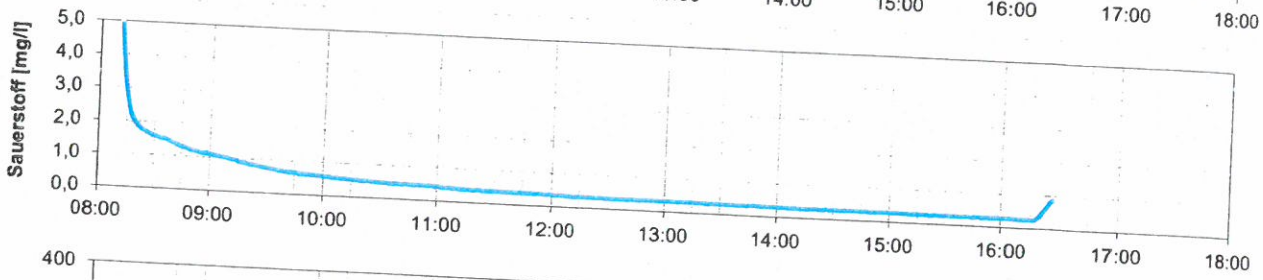


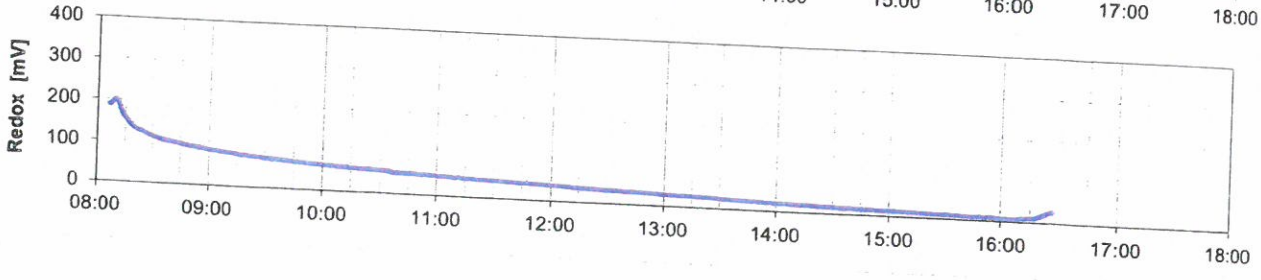












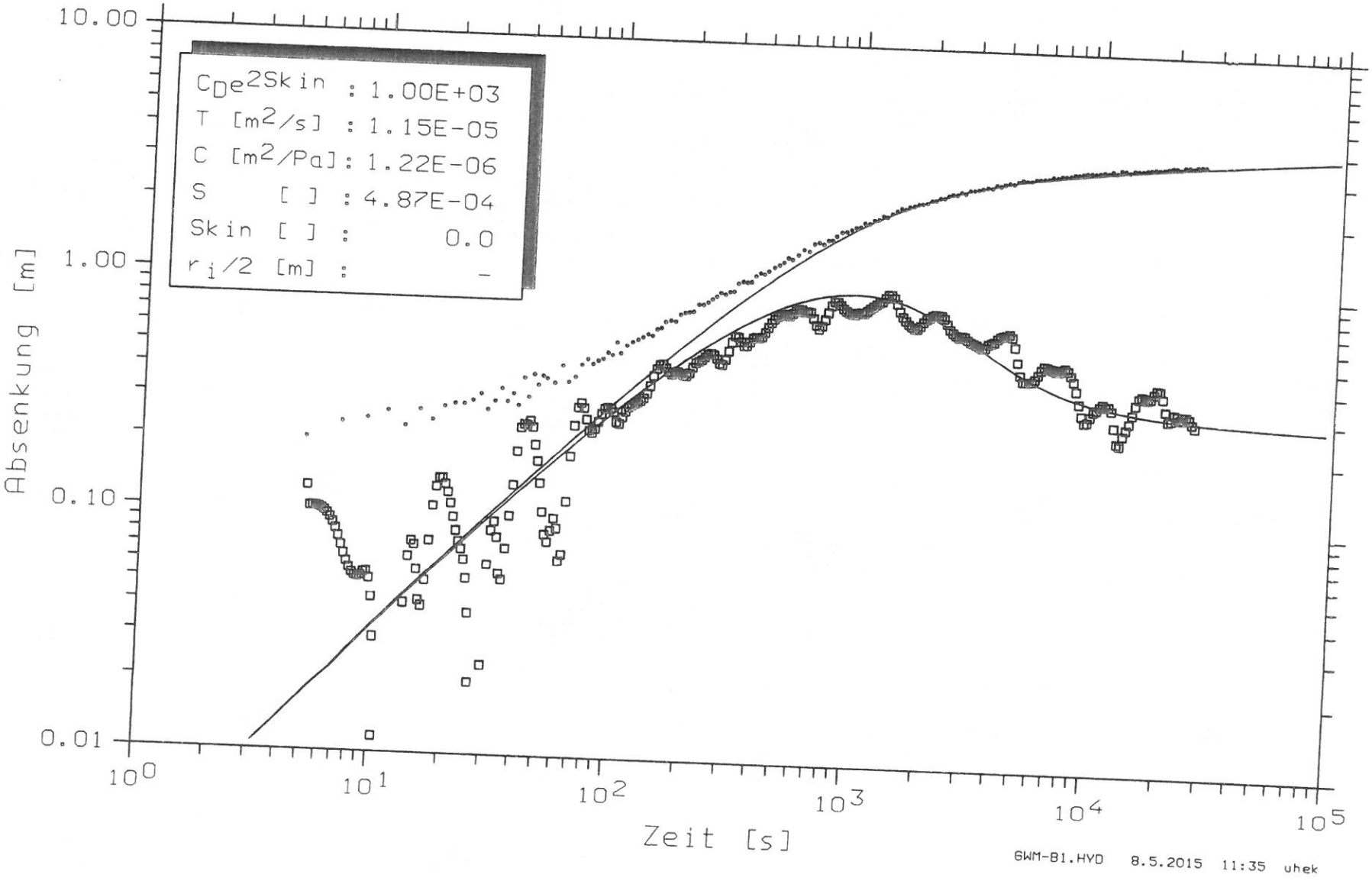
HYDRA 2.0 - AUSWERTUNG GRUNDWASSERHYDRAULISCHER TESTS

Projekt: Tongrube
Bohrung: GWM 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

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



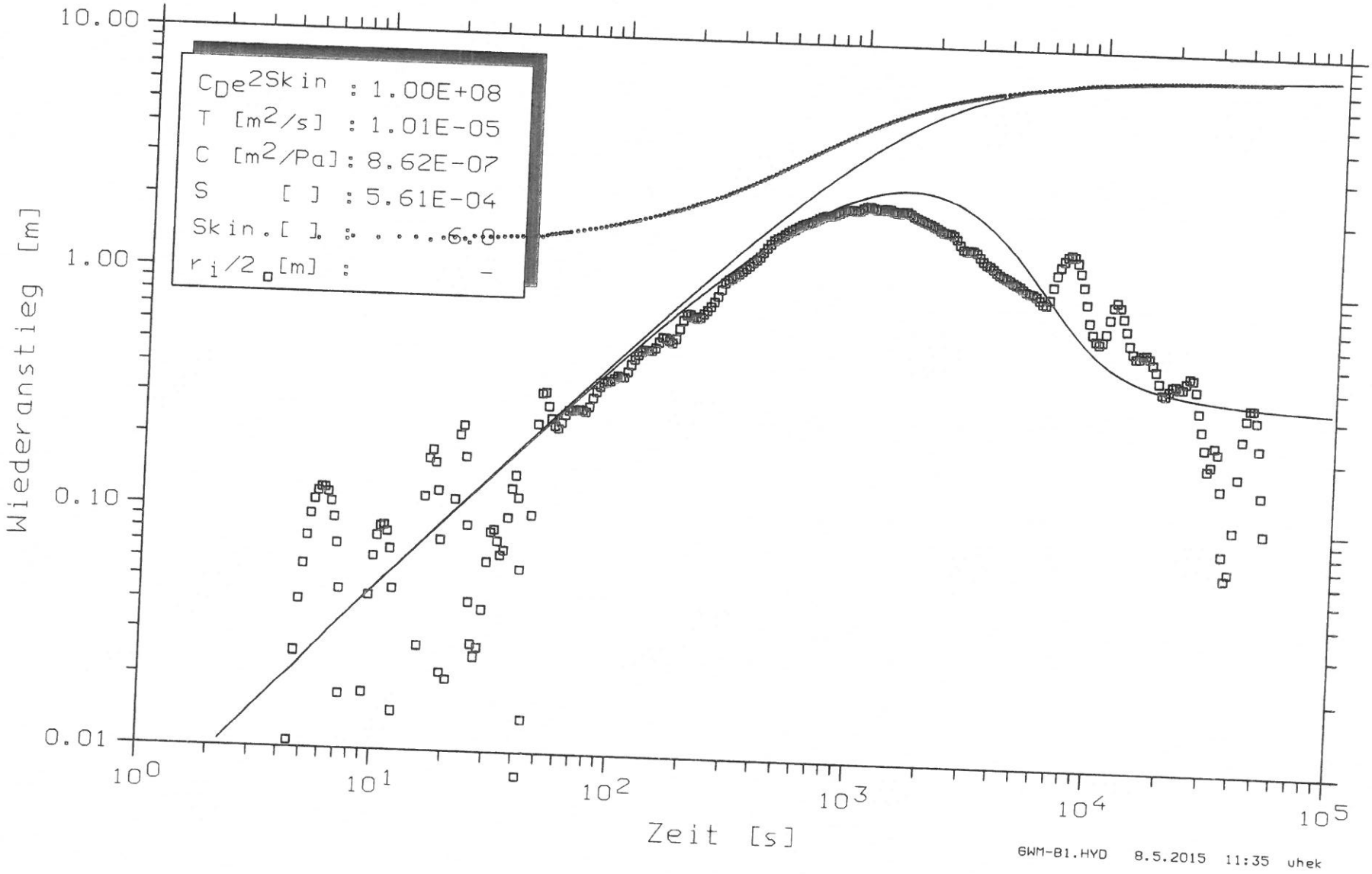
HYDRA 2.0 - AUSWERTUNG GRUNDWASSERHYDRAULISCHER TESTS

Projekt: Tongrube
Bohrung: GWM 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

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

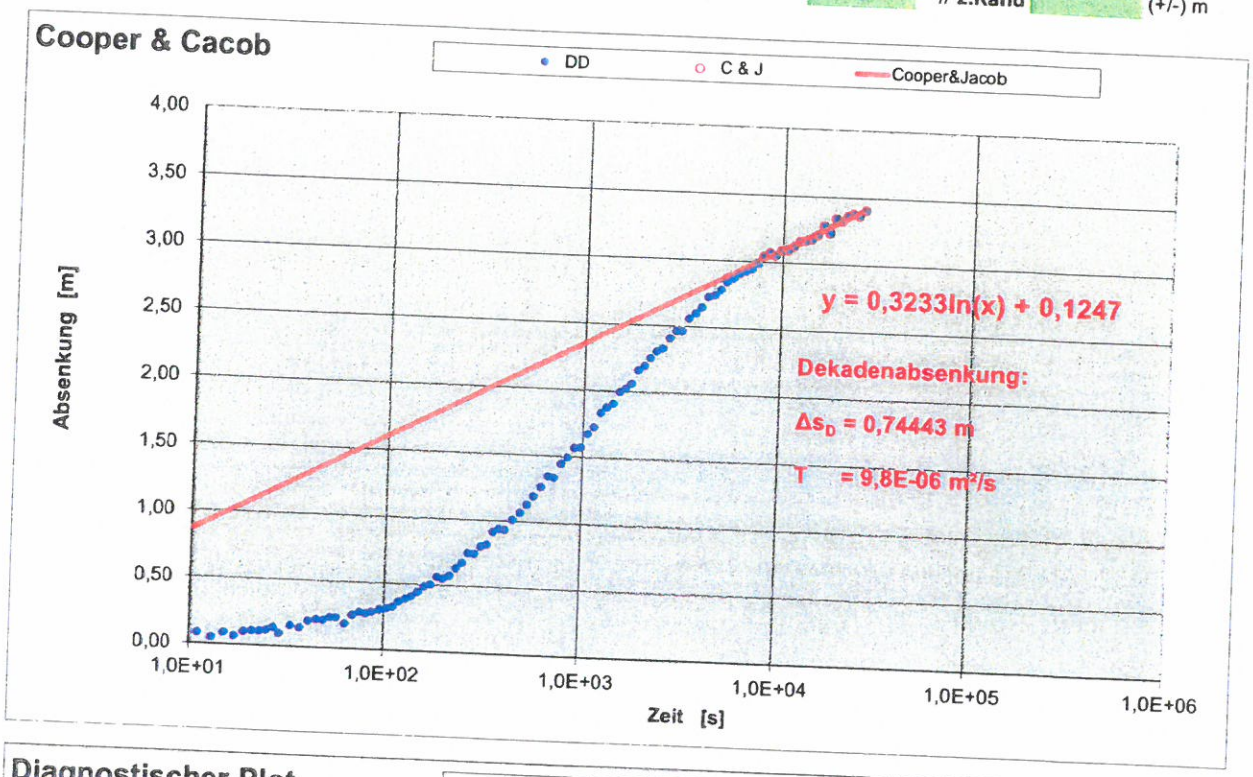


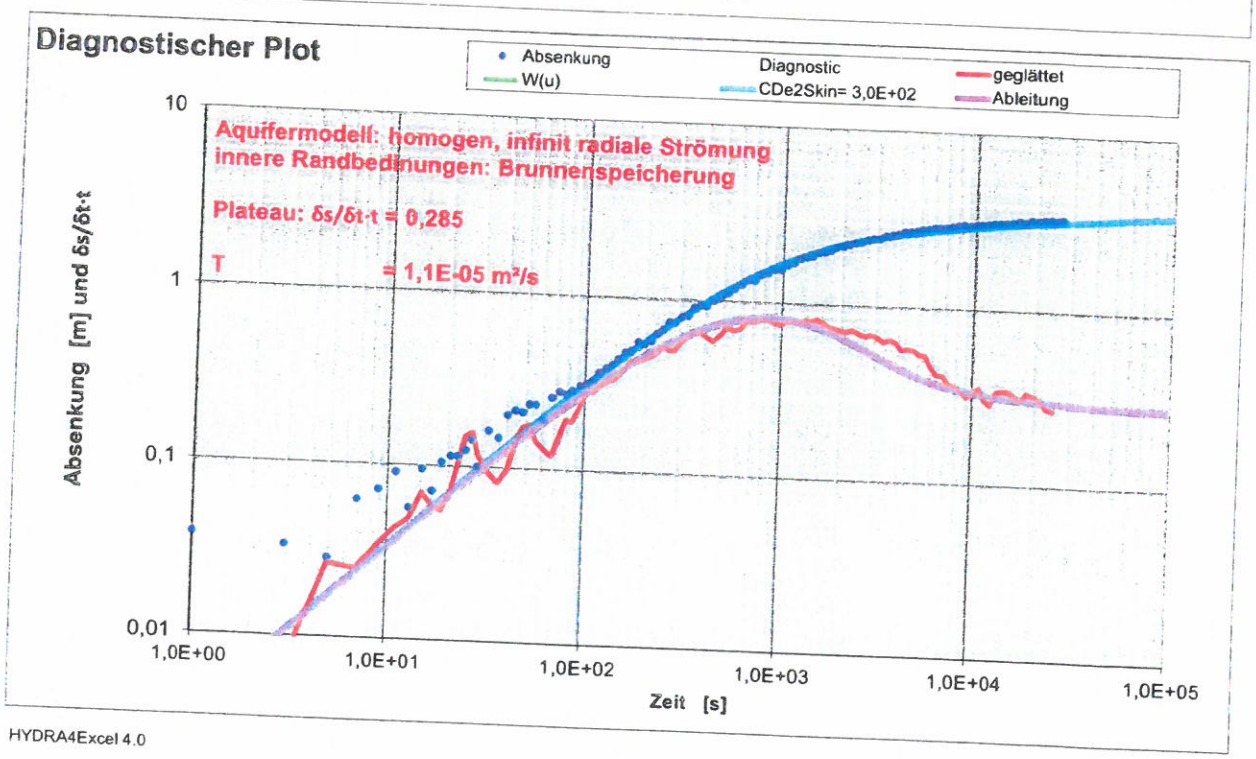
Pumpversuchsauswertung

Absenkung

Projekt		Erw. Tongrube
Projektnummer		2061178
RWSP	gespannt	3,17 m
Pumprate	Q =	0,00004 m³/s
Radius	r =	0,0625 m
	r_B =	0,06 m

Brunnen	GWM B1		**Aquifertop**	10,0 m
GWM	GWM B1		**Aquiferbasis**	18,0 m
Plateau	0,285	m	**T =**	1,1E-05 m²/s
$t_{1/10}$	1	s	**S =**	1,7E-03
Brunnentypkurve Nr. :	8		**/ 1.Rand**	(+/-) m
C_De^{2Skin} =	300		**L 2.Rand**	(+/-) m
Skin	0		**// 2.Rand**	(+/-) m





uhek 19.02.2016

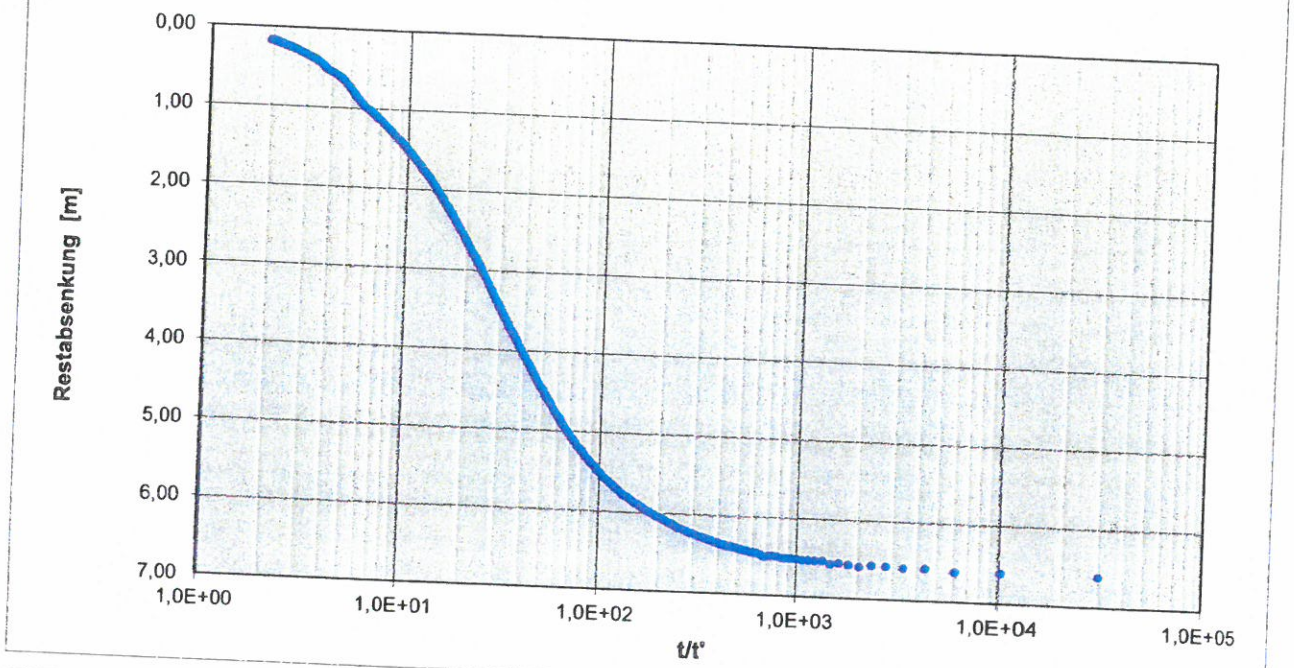
Pumpversuchsauswertung

Wiederanstieg

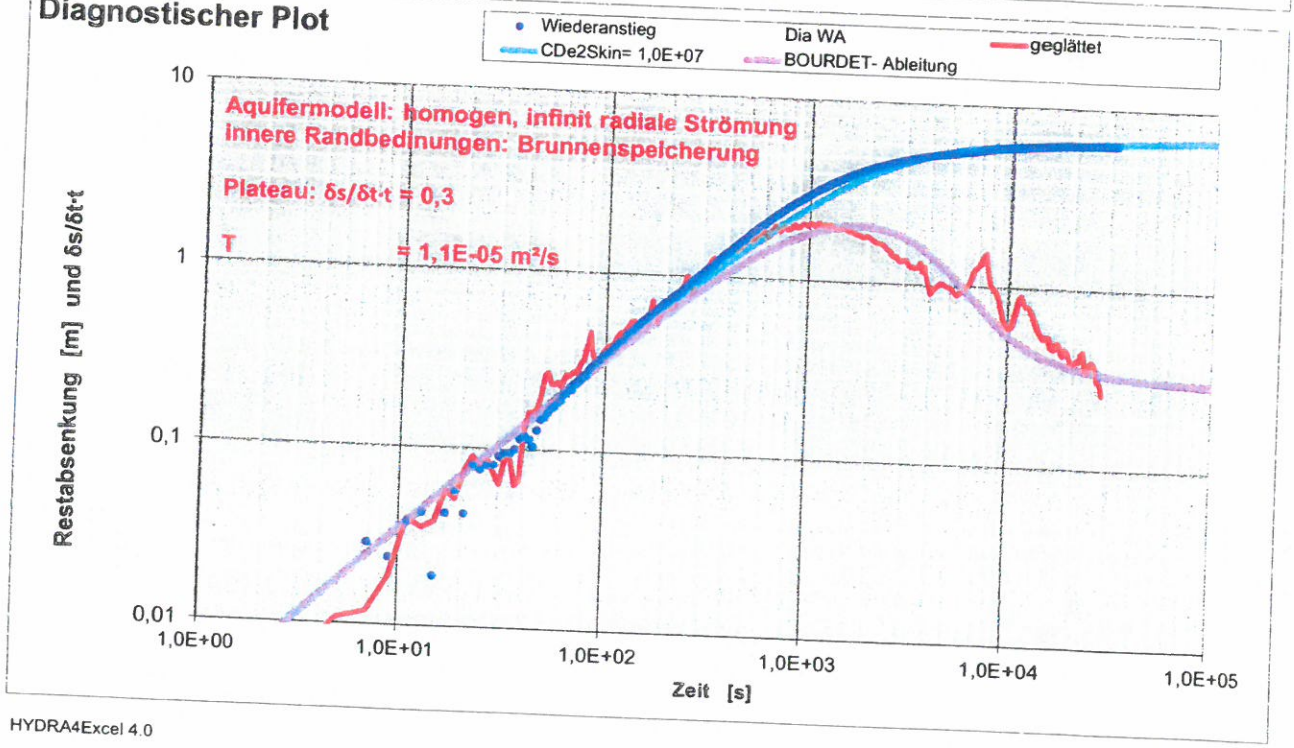
Projekt	Erw. Tongrube	
Projektnummer	2061178	
RWPS	gespannt	3,17 m
Pumprate	Q =	0,00004 m³/s
Radius	r =	0,0625 m
	r_B =	0,06 m

Brunnen	GWM B1		**Aquifertop**	10,0 m	
GWM	GWM B1		**Aquiferbasis**	18,0 m	
Plateau	0,3	m	**T =**	1,1E-05 m²/s	
$t_{1/10}$	1	s	**S =**	1,1E-03	
Brunnentypkurve Nr. :	15		**/ 1.Rand**		(+/-) m
C_De^{2Skin} =	1,0E+07		**L 2.Rand**		(+/-) m
Skin	6		**// 2.Rand**		(+/-) m

Theis Wiederanstieg



Diagnostischer Plot



uhek 19.02.2016

Protokoll
GWM-Test
Schurf

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!

☐ Pump ☐ Auffüll ☐ KRI ☐ Slug/Bail ☐ _____

☐ Pump ☐ Versickerung

Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle B1 **Projekt** Tongrube Rettigheim **Pr.-Nr.** 2061178

Bezugspunkt ☐ GOK ☐ ROK ☒ _____
für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

Grundwasserleiter [illegible]

Pumpentyp SQ 3-40

Rohrdurchmesser gemessen/gelotet 125 mm bis 19 m

Filterrohr von 10,0 m bis 18,0 m

Filterkies von 9,0 m bis 20,0 m

Einbautiefe Pumpe 19,50 m Schlauchleitung _____ m

Meßfahrzeug Nr. _____ MDL-Nummer _____

Dateiname Rettigheim-B1-01

Datum: 30.04.15 Uhrzeit	WSP Lichtlot m	WSP Sonde m	Rate l/s	Leitf. µS/cm	Temp. °C	pH	O_2 mg/l		Bemerkungen und Vorgänge z. B. Schalten Pumpe, Ein/Austauchen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.
9.46									
									Ankunft
10.24	2,77								
11:07	2,63								**WSP vor Einbau**
11:08	6,63								Meßbeginn
11:09	9,80								~~Eichung~~
11:10	12,30								
11:11	14,70								
11:12	16,80								
11:13	18,80								
11:49	6,60								Kmax 0,1 (0,05 l/s)
13:35	3,17								
									=> 0,04

Vorgabe für Testdauer/Ziel:

Meßende 13:35

Ende Ausbau 13:45

Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt
Ort , den

Testleiter

Bauüberwachung

14.01.2011

Protokoll
GWM-Test
Schurf

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!

[X] Pump [ ] Auffüll [ ] KRI [ ] Slug/Bail [ ] _____
[ ] Pump [ ] Versickerung

Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle B1 **Projekt** Wienerberger Ziegel-industrie **Pr.-Nr.** 2061178

Bezugspunkt [ ] GOK [ ] ROK [X] 0,82 m ü. GOK
für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

Grundwasserleiter

Rohrdurchmesser 125 mm bis 20,69 m
gemessen/gelotet

Pumpentyp SP 2 A6

Filterrohr 10 von [illegible] m bis [illegible] m 18 GOK

Einbautiefe Pumpe 19,49 m Schlauchleitung 50 m

Filterkies von [ ] m bis [ ] m

Meßfahrzeug Nr. S-HP-801 MDL-Nummer 118

Dateiname Rettigheim-B1.02 (Beaver)
B1_040515, B1B_040515

Datum: 4.5.15 Uhrzeit	WSP Lichtlot m	WSP Sonde m	Rate l/s	Leitf. µS/cm	Temp. °C	pH	O_2 mg/l	Redox mV	Bemerkungen und Vorgänge z. B. Schalten Pumpe, Ein/Austauchen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.
13.30									
									Ankunft
13.39	2,86								
14.53	2,69								WSP vor Einbau DL
14.55	2,69	2,69							Meßbeginn (Beaver: Rettigheim-B1.02)
15:27		15,90	PÜS						Eichung DL
15:29	2,78	2,78							Meßbeginn MDL
15:34		2,78	0,04						Eichung
15:38	2,52	?	0,03						Pumpe an 391,5371 m³
15:48									zwei Ausfälle Sonde -> Pumpe aus
15:52		15,64	PÜS						Messende
									Meßbeg. MDL (B1B_040515)
15:54	2,99	2,99							391,5477 m³
15:57		2,97	0,043						Eichung
16:10	4,45	4,47	0,040	2450	13,3	7,47	1,10	21	Pumpe an
16:24		4,52	0,225						391,5990 m³
16:35		11,51	0,22						Q ↑
16:43		17,07	>0,4						Pumpe aus -> Tempeln, Pumpe an
18:45	PÜS ->	10,63	0,043	2510	12,8	7,51	7,25	83	Q auf 0,04 l
18:56		18,63	0,38						Q ↑ 392,2130 m³
5.5.15									Pumpe aus 392,4186 m³
7:59	3,16	3,18							
8:04		3,18	0,04						392,4186 m³
8:09		4,04	0,04	2540	11,7	7,72	5,45	201	Pumpe an
									~~Meßende~~ 392,4333 m³

Vorgabe für Testdauer/Ziel:

Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt
Ort , den

Testleiter

Ende Ausbau

Bauüberwachung

14.01.2011

(S.1)

Protokoll
GWM-Test
Schurf

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!

[X] Pump [ ] Auffüll [ ] KRI [ ] Slug/Bail [ ] _____
[ ] Pump [ ] Versickerung

Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle B1 **Projekt** Wienerberger Ziegelindustrie GmbH **Pr.-Nr.** 2061178

Bezugspunkt [ ] GOK [ ] ROK [X] 0,82 ü GOK
für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

Grundwasserleiter
Pumpentyp SP2 A6
Einbautiefe Pumpe 19,49 m Schlauchleitung 50 m
Meßfahrzeug Nr. SHP-801 MDL-Nummer 118
Dateiname B1B_040515

Rohrdurchmesser gemessen/gelotet 125 mm bis 20,69 m
Filterrohr von 10 m bis 18 m [GOK]
Filterkies von ___ m bis ___ m

Datum: 5.5.15 Uhrzeit	WSP Lichtlot m	WSP Sonde m	Rate l/s	Leitf. µS/cm	Temp. °C	pH	O_2 mg/l	Redox mV	Bemerkungen und Vorgänge z. B. Schalten Pumpe, Ein/Austauchen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.
									Ankunft
									WSP vor Einbau
									Meßbeginn
									Eichung
8:19		4,74	0,0397	2,46	12	7,48	2,05	130	Wasser Trüb (mittel) 392,4565
8:29	5,17	5,20	0,0408	2,45	12,2	7,46	1,65	117	392,4797
8:39		5,40	0,0393	2,43	12,3	7,45	1,45	105	392,5029
8:49		5,58	0,0395	2,44	12,7	7,46	1,25	96	392,5275
9:00	5,71	5,73	~~0,0395~~	~~2,46~~	~~12,7~~	~~7,47~~	~~1,05~~	~~84~~	
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	2,49	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_2O klar 392,7935 m³
11:36		6,30	0,0387	2,49	13,1	7,47	0,40	45	392,8482
11:48			0,0402	2,13	13,6	7,31	0,82	90	392,9255
11:55	6,34	6,37	0,0408	2,49	12,9	7,47	0,40	42	WTW Reffer 24 am Ende Ablauf
12:16		6,37	0,0403	2,49	12,9	7,47	0,40	38	392,9696
12:36	6,42	6,44	0,0397	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
									393,1130

Vorgabe für Testdauer/Ziel:

Meßende
Ende Ausbau
Bauüberwachung

Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt
Ort Rettigheim, den 5.5.15

Testleiter Zischr

14.01.2011

(52)

Protokoll
GWM-Test
Schurf

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!

[X] Pump [ ] Auffüll [ ] KRI [ ] Slug/Bail [ ] _____
[ ] Pump [ ] Versickerung

Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle B1 **Projekt** Wieneberger Ziegel-industrie GmbH **Pr.-Nr.** 206 1178

Bezugspunkt [ ] GOK [ ] ROK [X] 0,82 m ü GOK
für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

Grundwasserleiter
Pumpentyp SP2 46
Einbautiefe Pumpe 19,49 m Schlauchleitung 50 m
Meßfahrzeug Nr. S-HP 801 MDL-Nummer 118
Dateiname B1B-040515

Rohrdurchmesser gemessen/gelotet 125 mm bis 20,69 m
Filterrohr von 10 m bis 18 m [GOK]
Filterkies von ___ m bis ___ m

Datum: 5.5.15 Uhrzeit	WSP Lichtlot m	WSP Sonde m	Rate l/s	Leitf. µS/cm	Temp. °C	pH	O_2 mg/l	Redox mV	Bemerkungen und Vorgänge z. B. Schalten Pumpe, Ein/Austauchen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.
									Ankunft
5.5.15 16:20	6,50		0,04	2140	11,8	7,27	1,58	+90	**WSP vor Einbau**
									~~Meßbeginn~~ Isotopentesting weite
13:16	6,46	6,48	0,0401	2,49	13,1	7,46	0,35	29	Eichung
13:37		6,50	0,0392	2,49	13,5	7,45	0,35	26	393,1629
13:58	6,52	6,50	0,0406	2,48	13,6	7,45	0,35	23	393,2133
14:19		6,55	0,0404	2,48	13,2	7,45	0,35	20	393,2628
14:42	6,53	6,54	0,0390	2,48	13,3	7,45	0,35	17	393,3132
15:04		6,54	0,0396	2,48	13,3	7,44	0,30	15	393,3662
15:26	6,58	6,61	0,040	2,48	13,2	7,45	0,30	13	393,4185
15:54	6,49	6,51	0,0382	2,48	13,1	7,44	0,30	13	* 15:52 Probenehmer ventil getestet 393,4728
16:04									393,5430
16:40	9,20	9,58		2,48	13,0	7,47	0,85	23	Isotopentesting
6.5.15									Pumpe aus
7:51	3.28								
8:03	3.28	3.30	0,02						
8:20		4.36							Pumpe an
8.25	5,21	5,30		2140	11,9	7,27	0,80	+105	Isotopentesting
8:51	4,56	4,64							weite vom Isotopentesting
11:03	3,34	3,36							Pumpe aus
11:03									
~~[illegible]~~	~~6,49~~	~~6,51~~	~~0,0382~~	~~[illegible]~~	~~[illegible]~~	~~[illegible]~~	~~0,30~~	~~13~~	Meßende

Vorgabe für Testdauer/Ziel:

Meßende
Ende Ausbau
Bauüberwachung

Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt
Ort Rettigheim, den 5.5.15

Testleiter Zischr.

14.01.2011

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

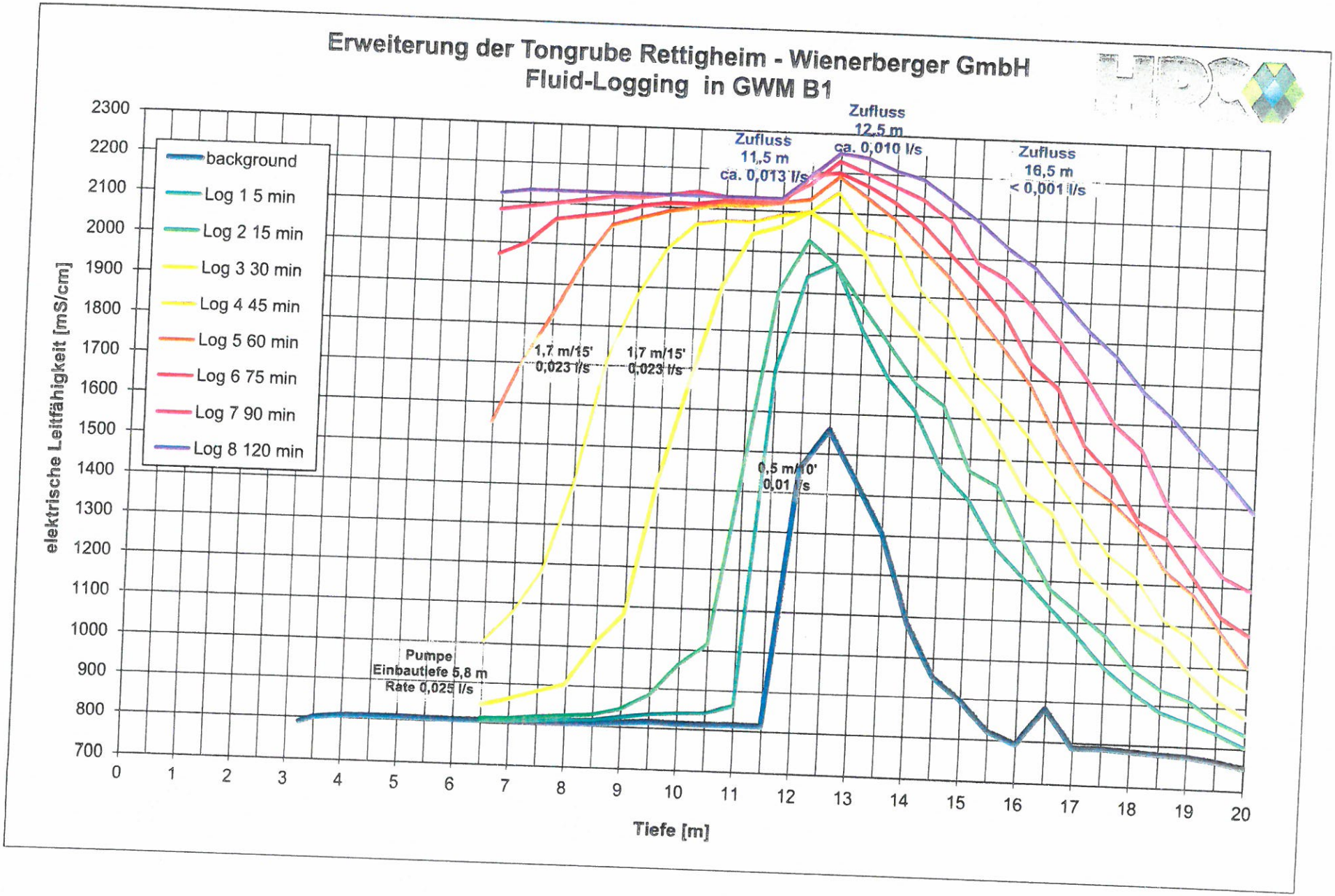
Wienerberger GmbH
Oldenburger Allee 26
D-30659 Hannover

Planverfasser:

HPC
DAS INGENIEURUNTERNEHMEN

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

Pfad: N:\WIN32APP\Projekte\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_01_26_Antrag\Anl07a-07c_Spiegel.dwg


Erweiterung der Tongrube Rettigheim - Wienerberger GmbH
Fluid-Logging in GWM B1
elektrische Leitfähigkeit [mS/cm]
Tiefe [m]
background
Log 1 5 min
Log 2 15 min
Log 3 30 min
Log 4 45 min
Log 5 60 min
Log 6 75 min
Log 7 90 min
Log 8 120 min
Zufluss 11,5 m ca. 0,013 l/s
Zufluss 12,5 m ca. 0,010 l/s
Zufluss 16,5 m < 0,001 l/s
1,7 m/15' 0,023 l/s
1,7 m/15' 0,023 l/s
0,5 m/10' 0,01 l/s
Pumpe Einbautiefe 5,8 m Rate 0,025 l/s

Fluid-Logging-Messungen

Projekt **Tongrube Rettigheim** **Pr.-Nr.** **2061178**

Messstelle B 1 Geolog. Schicht Schwarzjura-Tonstein

Rohrdurchmesser 125 mm bis 19,0 m Pumpentiefe 5,77 m

Filterrohr von 10,0 m bis 18,0 m Pumpbeginn 13:41 Uhr

Filterkies von 9,0 m bis 20,0 m 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.	µS/cm	µS/cm	µS/cm	µS/cm	µS/cm	µS/cm	µS/cm	µS/cm	µS/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 Fluid logging
GWM-Test
Schurf

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!

☐ Pump ☐ Auffüll ☐ KRI
☐ Pump ☐ Versickerung
☐ Slug/Bail ☐ _____

Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle B1 **Projekt** Rettigheim **Pr.-Nr.** 20.1178

Bezugspunkt für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt ☐ GOK ☒ ROK ☐ _____

Rohrdurchmesser gemessen/gelotet 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. ____ MDL-Nummer 118
Dateiname 31.065.mdl

Datum: 6.5.15 Uhrzeit	WSP Lichtlot m	WSP Sonde m	Rate l/s	Leitf. µS/cm	Temp. °C	pH	O_2 mg/l	Bemerkungen und Vorgänge (z. B. Schalten Pumpe, Ein/Austauchen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.)
								Ankunft
11:40	3,34							
12:08	3,32							WSP vor Einbau SQ
12:14	3.32		Pmin SQ					Meßbeginn
12:26			~0.38 l/s	SQ und Gartenpumpe				~~Eichung~~ Start Fluidaustausch
12:29	3.23							aus; erneut an
12:41	32		~0.38 l/s					
12:42								
								Ende Fluidaustausch
13:19								
13:21	3.05	4.01						Messbeginn
13:40	3.13	3.11						Eichung
13:41	~~3.11~~	3.12	0.025					
13:46		3.62	0.027	→ ging runter auf 0.012 l/s				Start PV für FL
13:53	3.77		0.025					
14:00		3.98	0.0251					
14:01	4.06	4.05						
14:40	4.41	4.38						
15:17	4.54	4.52	0.0253	2224	96.1	7.41	2.96	
15:38	4.59	4.57	0.0248	2331	14.9	7.40	2.11	
15:47	4.56	4.53						
								Pumpe aus
15:49								

Vorgabe für Testdauer/Ziel:

Meßende
Ende Ausbau
Bauüberwachung

Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt
Ort Rettigheim, den 6.5.15

Testleiter mbo / josh.

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\Projekte\wienerberger\Rettigheim\acad\2016_01_26_Antrag\Anl07a-07c_Spiegel.dwg

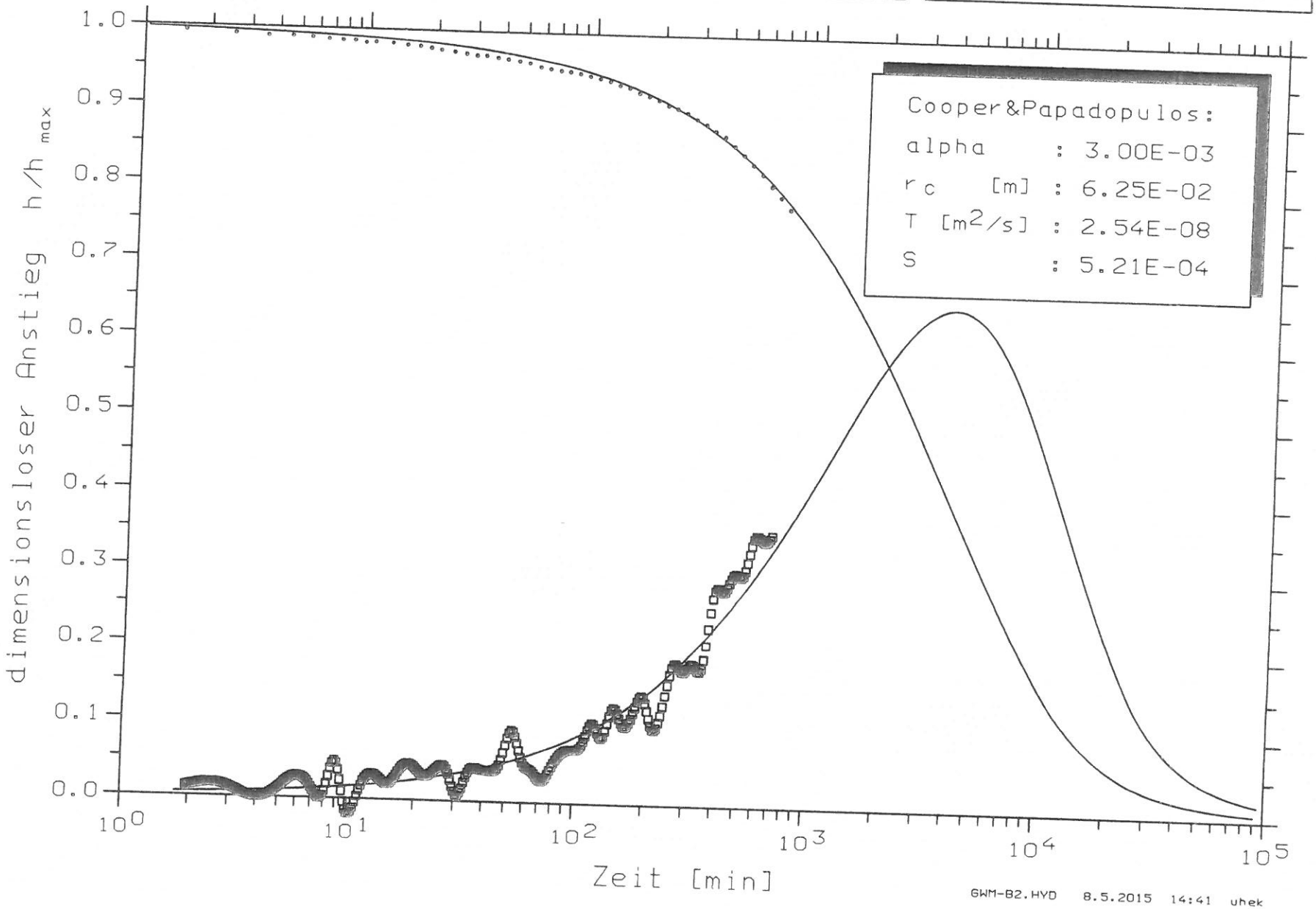
HYDRA 2.0 - AUSWERTUNG GRUNDWASSERHYDRAULISCHER TESTS

Projekt: Tongrube
Bohrung: GWM B2
Datum : 04.05.2015

Aquifer : 10.0-18.0m
Geologie: Lias

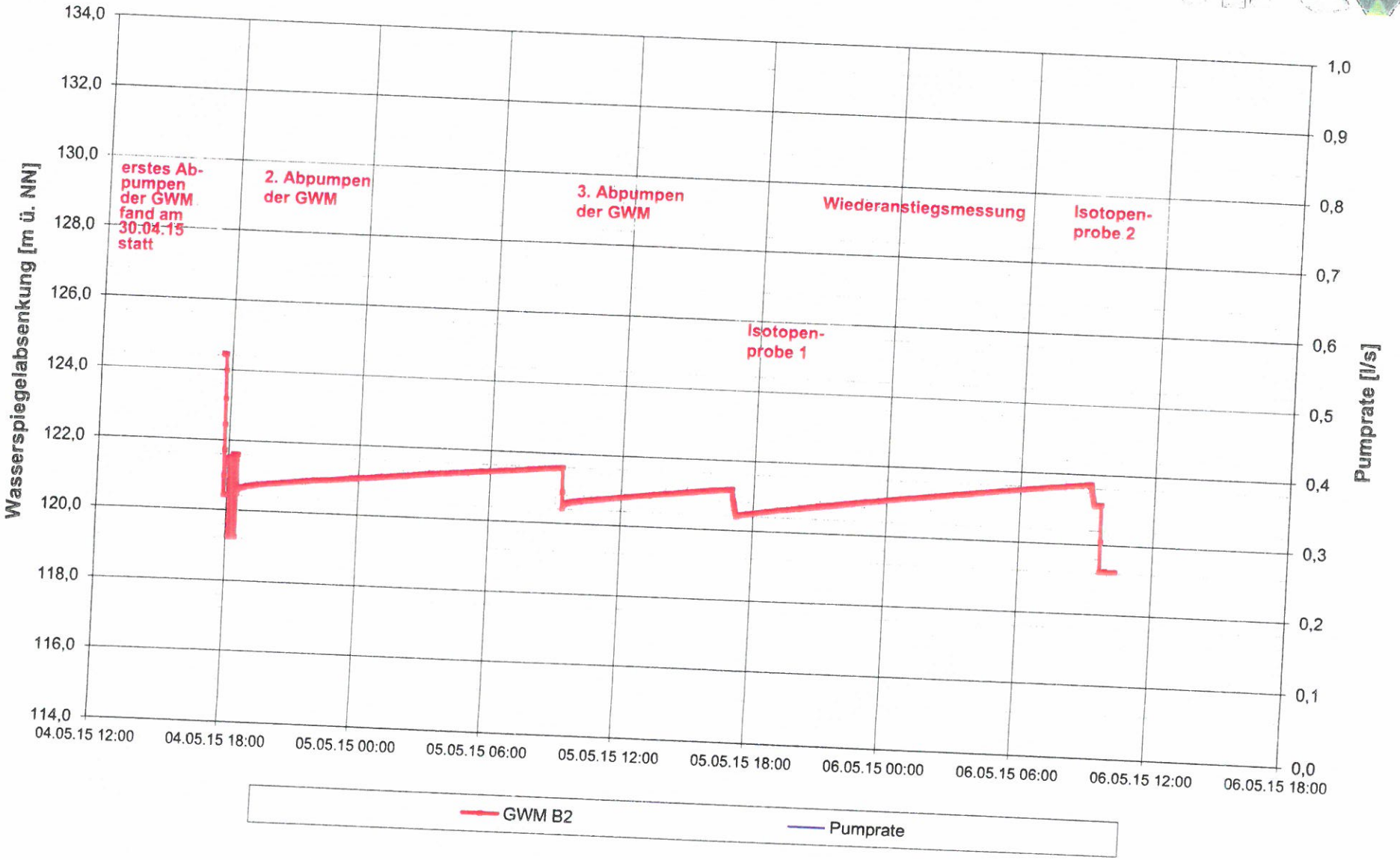
Projektnummer: 061178
RWSP[m u.MP.]: 14.36
Pumprate[l/s]: 0.0000

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



GWM-B2.HYD 8.5.2015 14:41 uhek

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



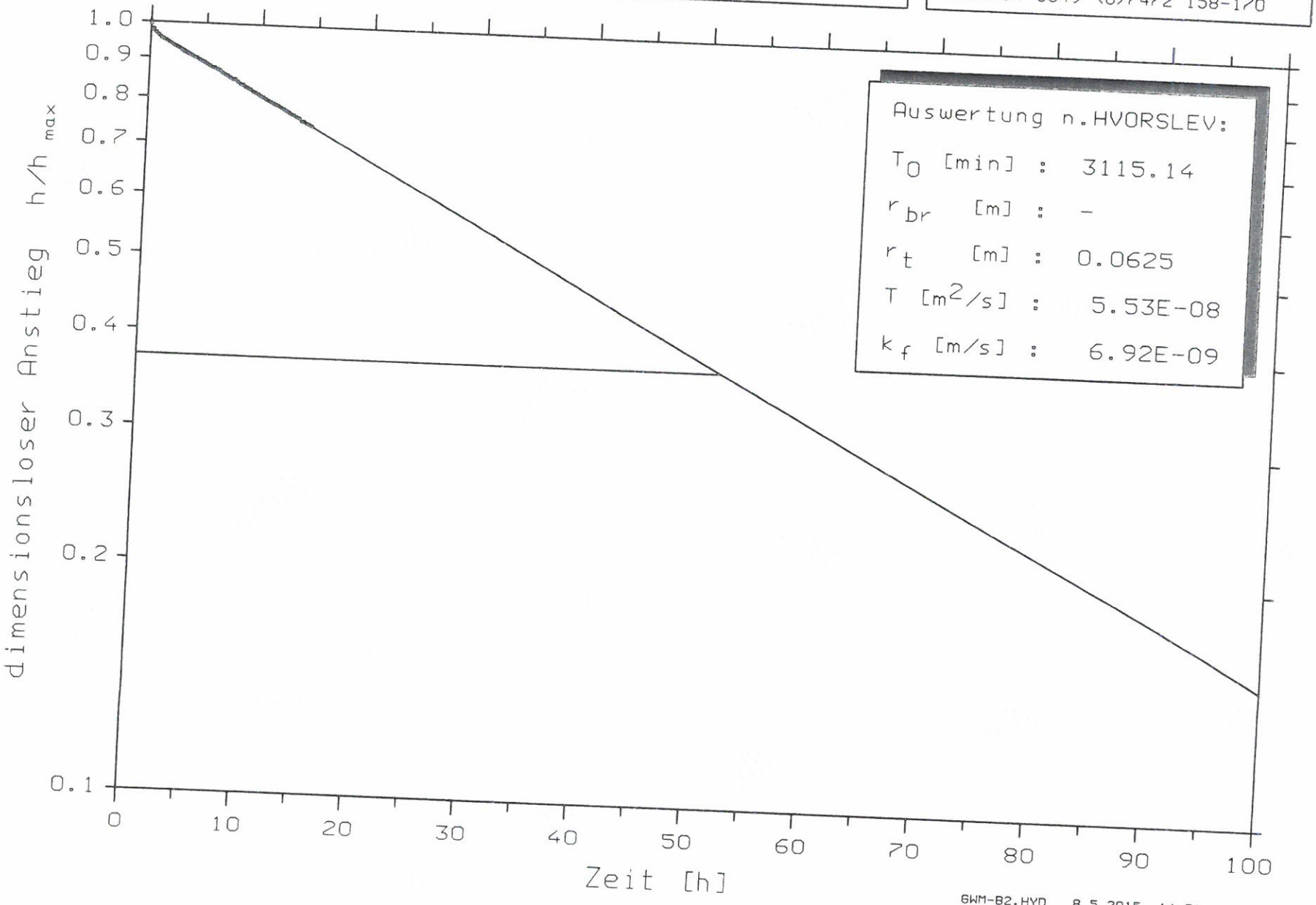
HYDRA 2.0 - AUSWERTUNG GRUNDWASSERHYDRAULISCHER TESTS

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

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



GWM-B2.HYD 8.5.2015 14:31 uhek

Protokoll
GWM-Test
Schurf

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!

☐ Pump ☐ Auffüll ☐ KRI ☐ Slug/Bail ☐ _____
☐ Pump ☐ Versickerung

Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle B2 **Projekt** Tongrube Rettigheim **Pr.-Nr.:** 206 1178

Bezugspunkt für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt ☐ GOK ☐ ROK ☒ _____

Rohrdurchmesser gemessen/gelotet 125 mm bis 19,0 m
Filterrohr von 10,0 m bis 18,0 m
Filterkies von 9,0 m bis 20,0 m

Grundwasserleiter
Pumpentyp ~~P1082~~ SQ2-35
Einbautiefe Pumpe 19,70 m Schlauchleitung ____ m
Meßfahrzeug Nr. ____ MDL-Nummer ____
Dateiname Rettigheim_B2_0.1

Datum: 30.04.15 Uhrzeit	WSP Lichtlot m	WSP Sonde m	Rate l/s	Leitf. µS/cm	Temp. °C	pH	O_2 mg/l	Bemerkungen und Vorgänge (z. B. Schalten Pumpe. Ein/Austauchen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.)
10:48								
1								Ankunft
12.19	11,95							
12 42	11,90							WSP vor Einbau
								~~Meßbeginn~~ nach Einbau
12:49	11,80							Eichung
12:51	14,20							Meßbeginn
12:52	15,50							
12 53	16,70							
12:54	17,90							
12:55	18,10							
12:59	17,25							
14:17	16,77							
14:26	16,85							

Vorgabe für Testdauer/Ziel:

Meßende 14:18
Ende Ausbau 14 23

Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt
Ort Rettigheim, den 30.4.15

Testleiter JST

Bauüberwachung

14.01.2011

Protokoll
GWM-Test
Schurf

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!

[X] Pump [ ] Auffüll [ ] KRI [ ] Slug/Bail [ ] _____

[ ] Pump [ ] Versickerung

Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle B2 **Projekt** Wienebeger Ziegeleindustrie GmbH **Pr.-Nr.** 2061178

Bezugspunkt [ ] GOK [ ] ROK [X] 0,75 in GOK
für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

Grundwasserleiter

Pumpentyp SQ-2-35

Rohrdurchmesser gemessen/gelotet 125 mm bis 19,72 m

Einbautiefe Pumpe 18,52 m Schlauchleitung ___ m

Filterrohr von 10 m bis 18 m GOK

Meßfahrzeug Nr. TU HP 103 MDL-Nummer

Filterkies von ___ m bis ___ m

Dateiname Re Higham_B2_02

Datum: 4.5/5.5. Uhrzeit	WSP Lichtlot m	WSP Sonde m	Rate l/s	Leitf. µS/cm	Temp. °C	pH	O_2 mg/l	Rdox mV	Bemerkungen und Vorgänge z. B. Schalten Pumpe, Ein/Austauchen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.
17.20									
									Ankunft
17.28	14,52								
17:40		5,20	PiS						WSP vor Einbau
17:36	14,36	~~[illegible]~~	← 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 ein
18:29	17,78								
13:30	18:28								
5.5.15									Pumpe aus
9:17	17,31	17,22							
9:20		17,22	0,19						68,107 m³
9:22		18,42	0,2	24,30	17,1	8,28	0,74	88	Pumpe an
									Pumpe aus 68,125 m³
9:27	18,32	18,25							H_2O sehr spärlich (dgr
12:02	18,06								
15:30	17,82								

Vorgabe für Testdauer/Ziel:

Meßende

Ende Ausbau

Bauüberwachung

Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt
Ort Re Higham, den 5.5.15

Testleiter Uschr

14.01.2011

Protokoll
GWM-Test
Schurf

Fettgedruckte Angaben zwingend ausfüllen!

☐ Pump ☐ Auffüll ☐ KRI ☐ Slug/Bail ☐ _____

☐ Pump ☐ Versickerung

Schurfabmessungen siehe Rückseite

Meßstelle B2

Projekt Wienebergen Ziegelindustrie GmbH

Pr.-Nr. 206 1178

Bezugspunkt ☐ GOK ☐ ROK ☒ 0,75 ü GOK
für alle Messungen, falls nicht anders vermerkt

Grundwasserleiter

Rohrdurchmesser 125 mm bis 19,72 m
gemessen/gelotet

Pumpentyp SQ-2-35

Filterrohr von 16 m bis 18 m GOK

Einbautiefe Pumpe 18,52 m Schlauchleitung ____ m

Filterkies von ____ m bis ____ m

Meßfahrzeug Nr. ____ MDL-Nummer ____

Dateiname Rettigheim_B2_02

Datum: 5.5.15 6.5.15 Uhrzeit	WSP Lichtlot m	WSP Sonde m	Rate l/s	Leitf. µS/cm	Temp. °C	pH	O_2 mg/l	Redox mV	Bemerkungen und Vorgänge z. B. Schalten Pumpe, Ein/Austauchen V-Körper, Probenahme Beginn und -Ende, etc. Bei mehrtägigen Tests sind Ankunfts- und Abfahrtszeiten auf der Baustelle festzuhalten.
									Ankunft
									WSP vor Einbau
									Meßbeginn
16:59	17,71	17,65							Eichung
17:03	17,71								vor Pumpbeginn
17:09		18,11	0,05						Pumpe an
17:17		18,41	0,05	2220	21,4	8,23	0,05	-37	Pumpe aus, WTW Daten um Herr Bürger
17:25	18,41								
17:30	18,39								
5.5.15 9:00	17,14								
9:09		17,07							vor Pumpbeginn
9:17		17,52	0,05						Pumpe an
9:20		17,70							
9:25	17,71								Pumpe aus

Vorgabe für Testdauer/Ziel:

Test gem. Vorgaben der BÜ durchgeführt
Ort , den

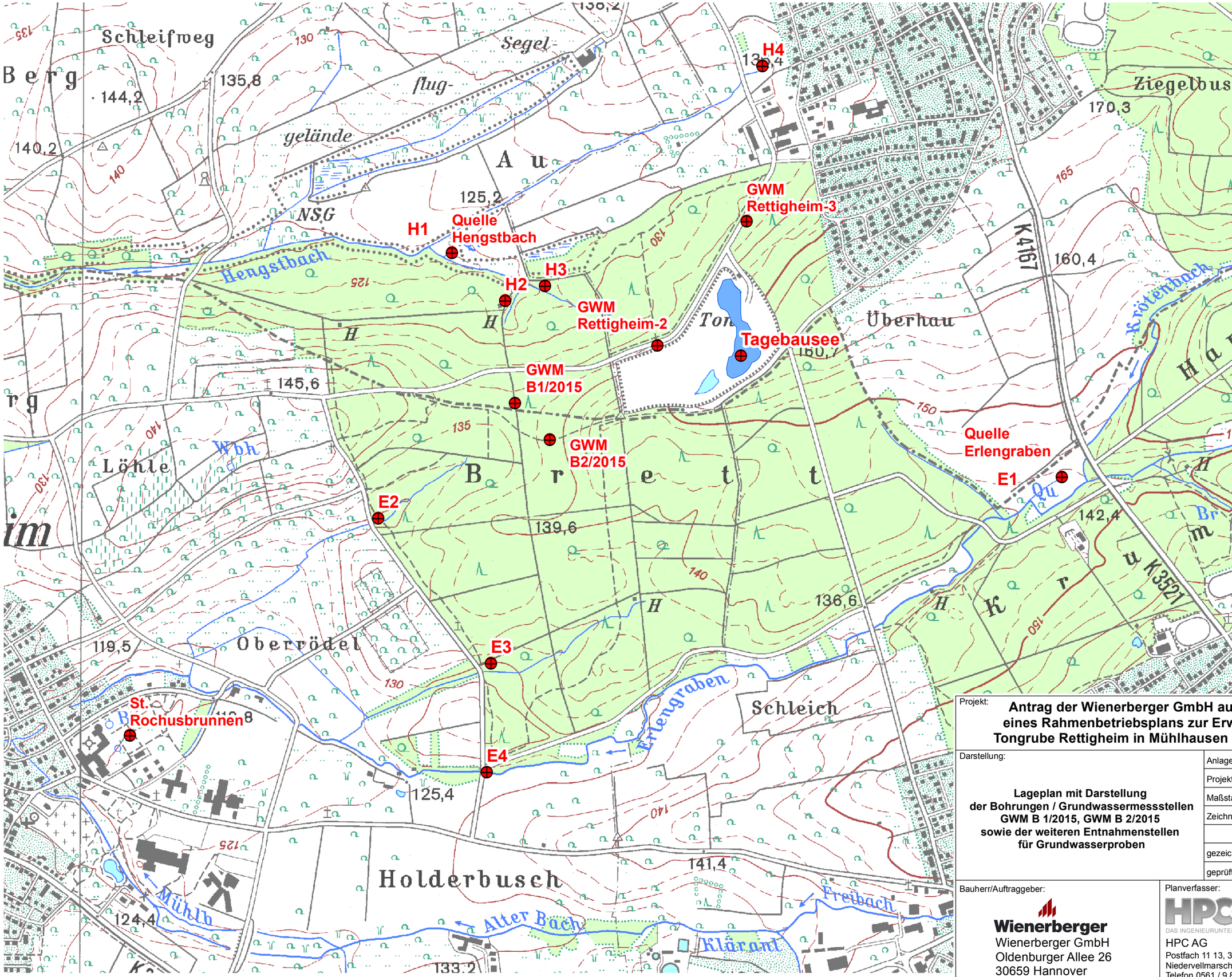
Testleiter

Meßende

Ende Ausbau

Bauüberwachung

14.01.2011



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 Fuldatal
Niedervellmarsche Straße 30, 34233 Fuldatal
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 Analysenergebnisse (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 Analysenergebnisse

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 Numismalismergel-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, 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 Bohrergebnissen 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-Ohm FH-Nürnberg 2002). Weitere 45–50 % der Rohstoffmischung werden von der Tongrube 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 (Profilaufnahmen, Gefügemessungen, Probenahmen) in der Tongrube Rettigheim begonnen wurde. Anschließend erfolgte eine geophysikalische (geoelektrische) Erkundung der Schichtenfolge zur quantitativen Erfassung potenzieller Vorkommen der Obtususton-Formation nach 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 dienten 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 Bohrkerne.

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. ¾ 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. ¼) der Formation sind in die oben beschriebene Grundsedimentation häufiger Horizonte mit Crinoidenbruchstücken (bis 1 cm), Kalkschalen (bis 3 cm) und Belemnitenrostren (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 Brekziierung 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, FeO(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 ⅔ als Kaolinit und ⅓ als Illit bestimmt. Eine weitere Aufschlüsselung wurde nicht vorgenommen, da die Tonmineralverteilung für Mauerziegelmassen im Gegensatz zu feinkeramischen oder Feuerfest-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 Aufbereitungserschwernis 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 SO_4-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 ⅔ Kaolinit und ⅓ 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
SO_4-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 Verwertungserschwernis 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.].

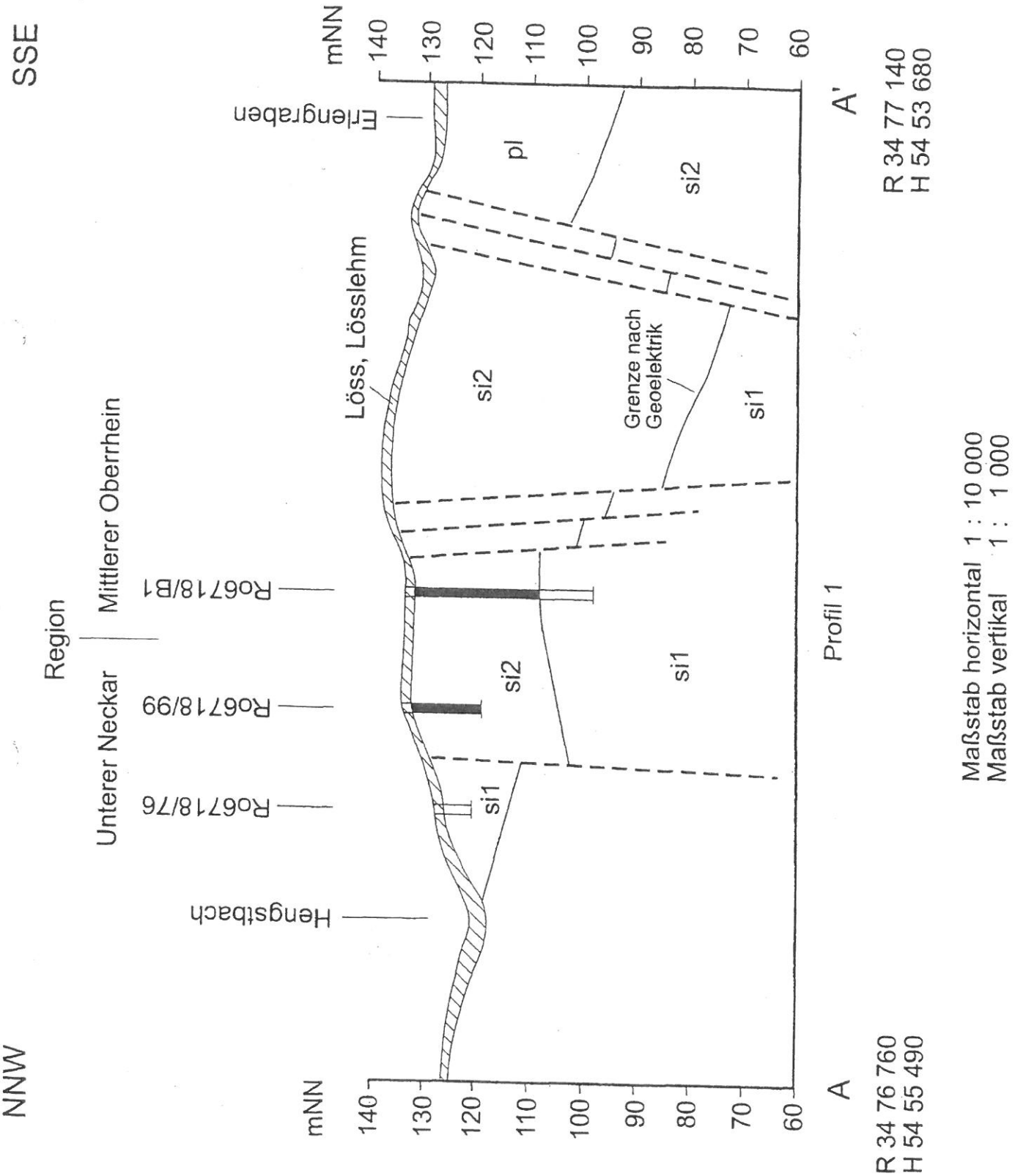
SCHMIDT (1973): Rohstoffkenndaten der verschiedenen Erzeugnisarten der Ziegelindustrie. – ZI Ziegelindustrie International, H.6, 212–216; Bonn.

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

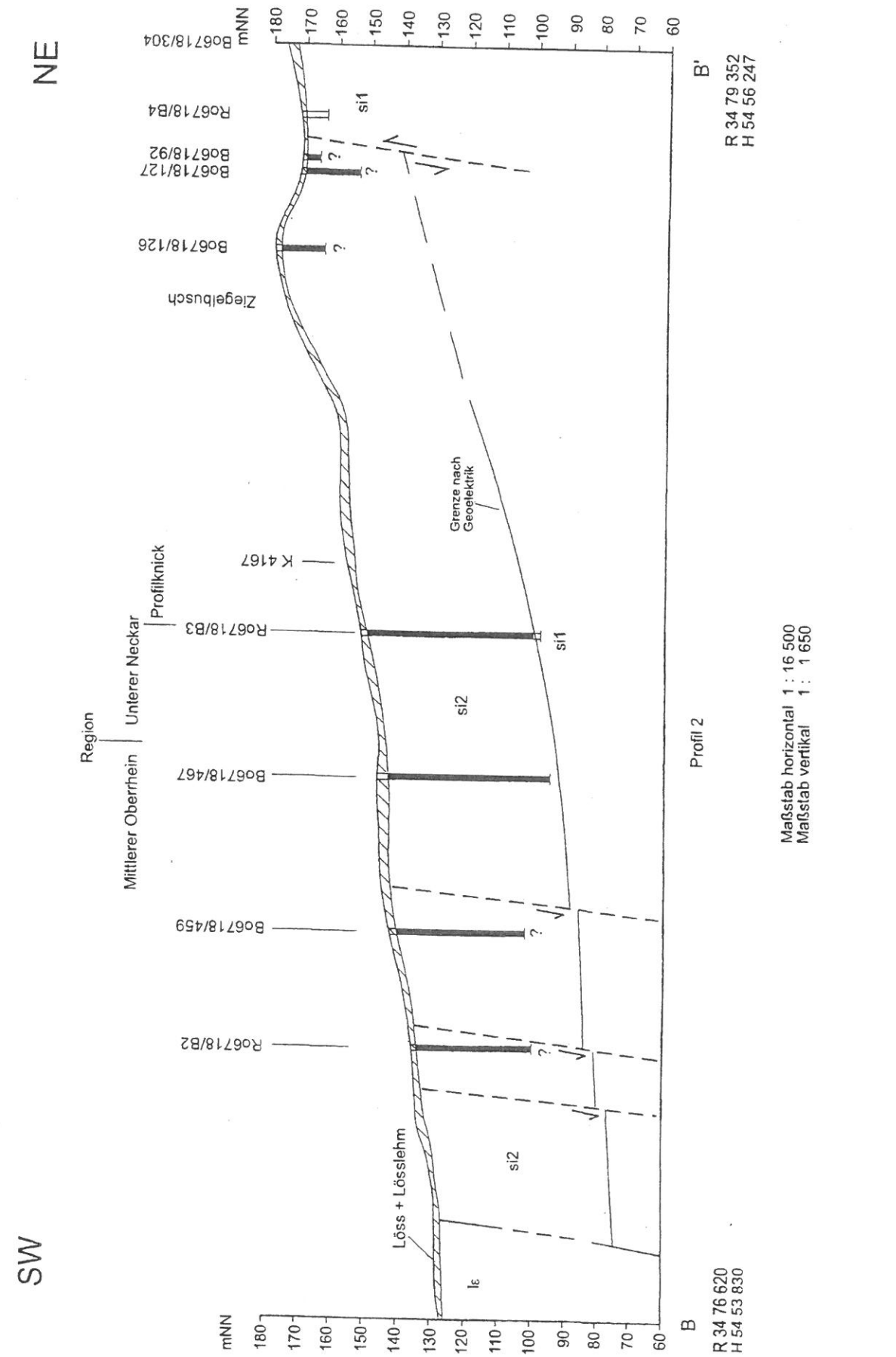
THÜRACH, H. (1902): Blatt 41 (6718) Wiesloch – Geol. Spec.- Kt. Baden 1 : 25 000 – Freiburg i. Br. (Großherzgl. Bad. Geol. L.-Anstalt).

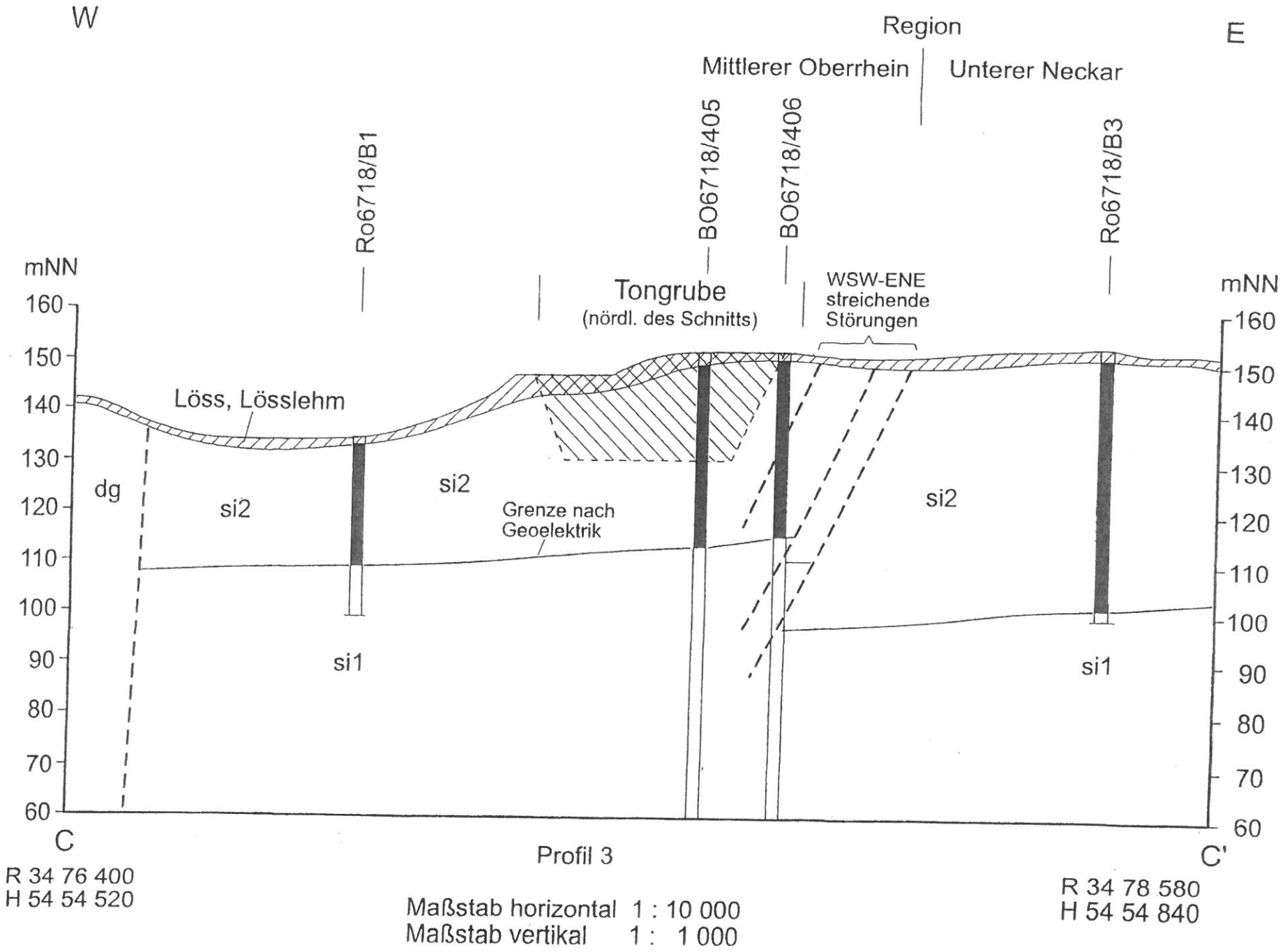
WERNER, W., KIMMIG, B., BRASSE, A., BOCK, W.D., FINGER, P., TRAPP, C., SCHLOZ, W., WEINZIERL, W., DENNERT, V., FROMM, F., BOCK, H., KÖBERLE, G., KÜCK, J. & ANDRÄ, H. (2002): Rohstoffbericht Baden-Württemberg 2002. – Informationen: **14**: 92 S., 58 Abb., 12 Tab.; Freiburg i. Br. (Landesamt für Geologie,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

Anlage 2: Geologischer Profilschnitt A – A'



Anlage 3: Geologischer Profilschnitt B – B'



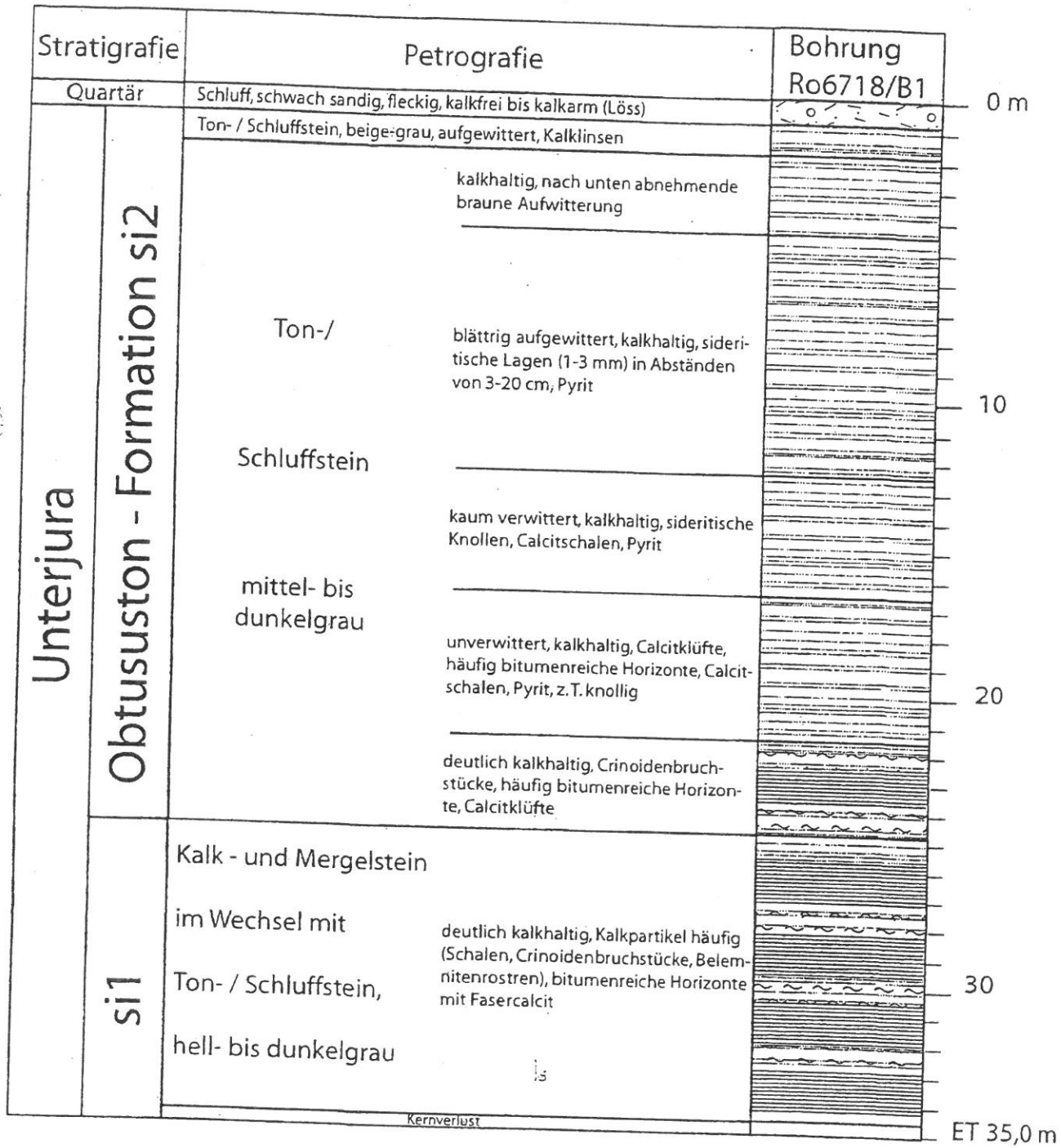


LGRB

Az. 4704//04 2107: Rohstoffgeologische Beurteilung geplanter Vorrang- und Vorbehaltsgebiete in der Region Mittlerer Oberrhein – Teil B (LGRB 2004)

Anlage 4: Geologischer Profilschnitt C – C'

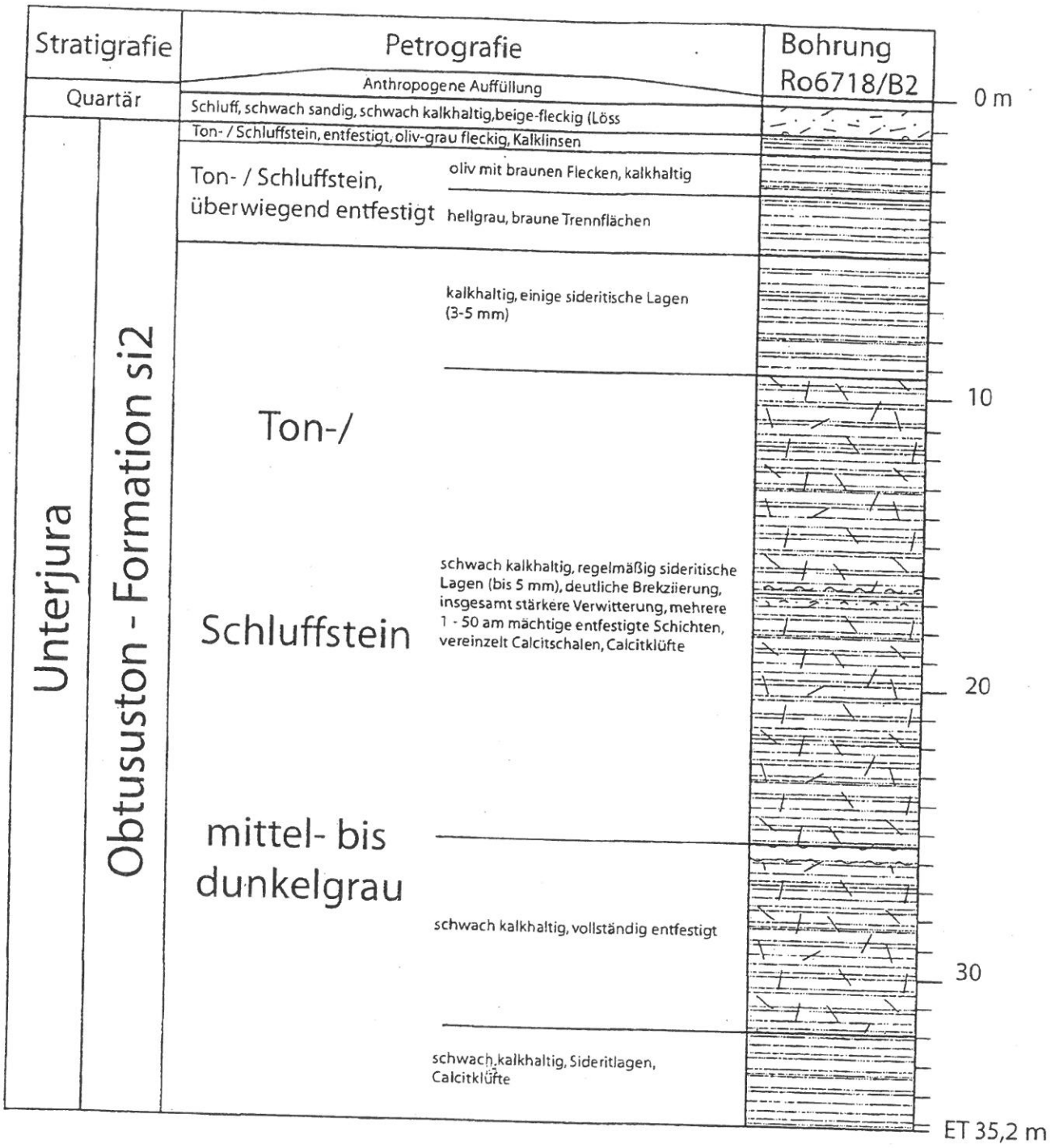
Anlage 5: Bohrprofil der Bohrung Ro6718/B1



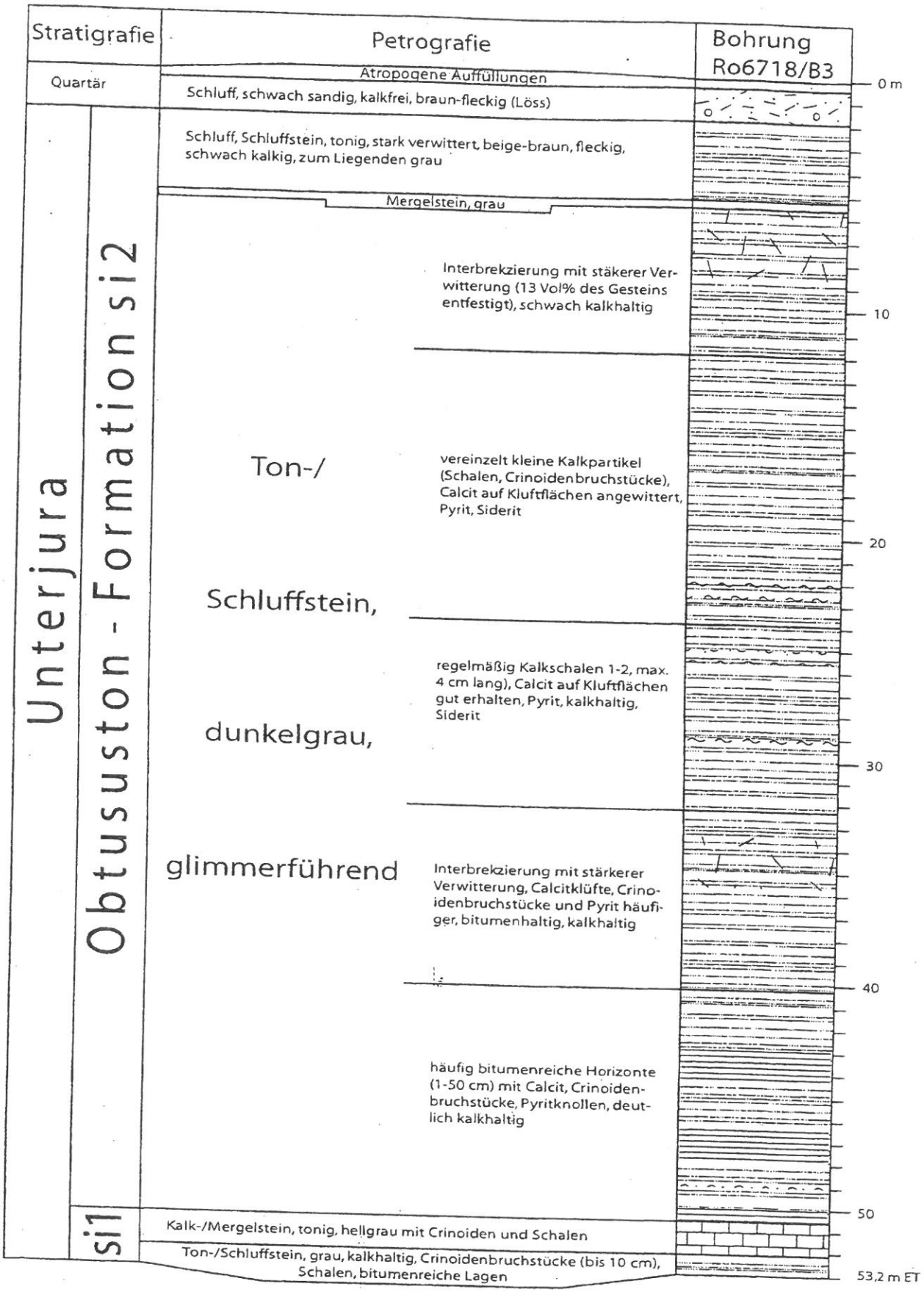
Legende zu Anlage 5

- Ton- und Schluffstein
- Kalk- / Mergelstein
- Kalk- und Mergelstein
- Schluff
- Horizonte mit Kalkpartikeln und Pyrit
- Brekziierte Horizonte
- Bituminöse Horizonte

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: ^{34}76 917 **H:** ^{54}54 563
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 Vewitterung: im oberen Abschnitt nur fleckig auftretende 1–4 cm große, mittelgraue Ton-/Schluffsteinrelikte, im unteren Abschnitt nur noch Schicht- und Kluftflächen 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-konkretionäre 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, insgesamtdeutlich kalkhaltig, Kalkgehalt schwankend, häufig Crinoidenbruchstücke lagenweise angereichert, Pyrit, deutlich bituminös, die bitumenreichen Abschnitte fallen oft mit schichtparallelen Nagelkalken (1–3 mm) zusammen (Obtususton-Fm.)

- 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 Pyrithorizont
- 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: ^{34}77 318 **H:** ^{54}54 207
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 vereinzelten 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 Teufe 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 Brecciierung mit unterschiedlich orientierten Kluftrichtungen: 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 brecciiert, 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: ^{34}78 360 **H:** ^{54}54 804
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 (Betakalkbank)
– 11,90 Ton-/Schluffstein, tonig, schwach kalkhaltig, grau, glimmerführend, alle 1–5 cm feine 1–2 mm mächtige, beigegraue 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, beigegraue 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 Kluftflächen 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 radialfaserigem Aufwuchs zentral oder außen (Calcit und Pyrit), Klüftung parallel und spitzwinklig zur Kernachse, Calcitmineralisationen (bis 1 mm mächtig) auf den Kluftflächen 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 Lehmbildung
- 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 Internbrekziierung 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 Brecciierung
- 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 Fucoidenhorizont
- 50,02–50,07 bitumenreicher Horizont (bräunlich) mit feinen calcitischen Rissen
- 50,09–50,11 knolliger Pyrithorizont
- 50,41–50,43 knolliger Pyrithorizont
- 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 vereinzelten 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

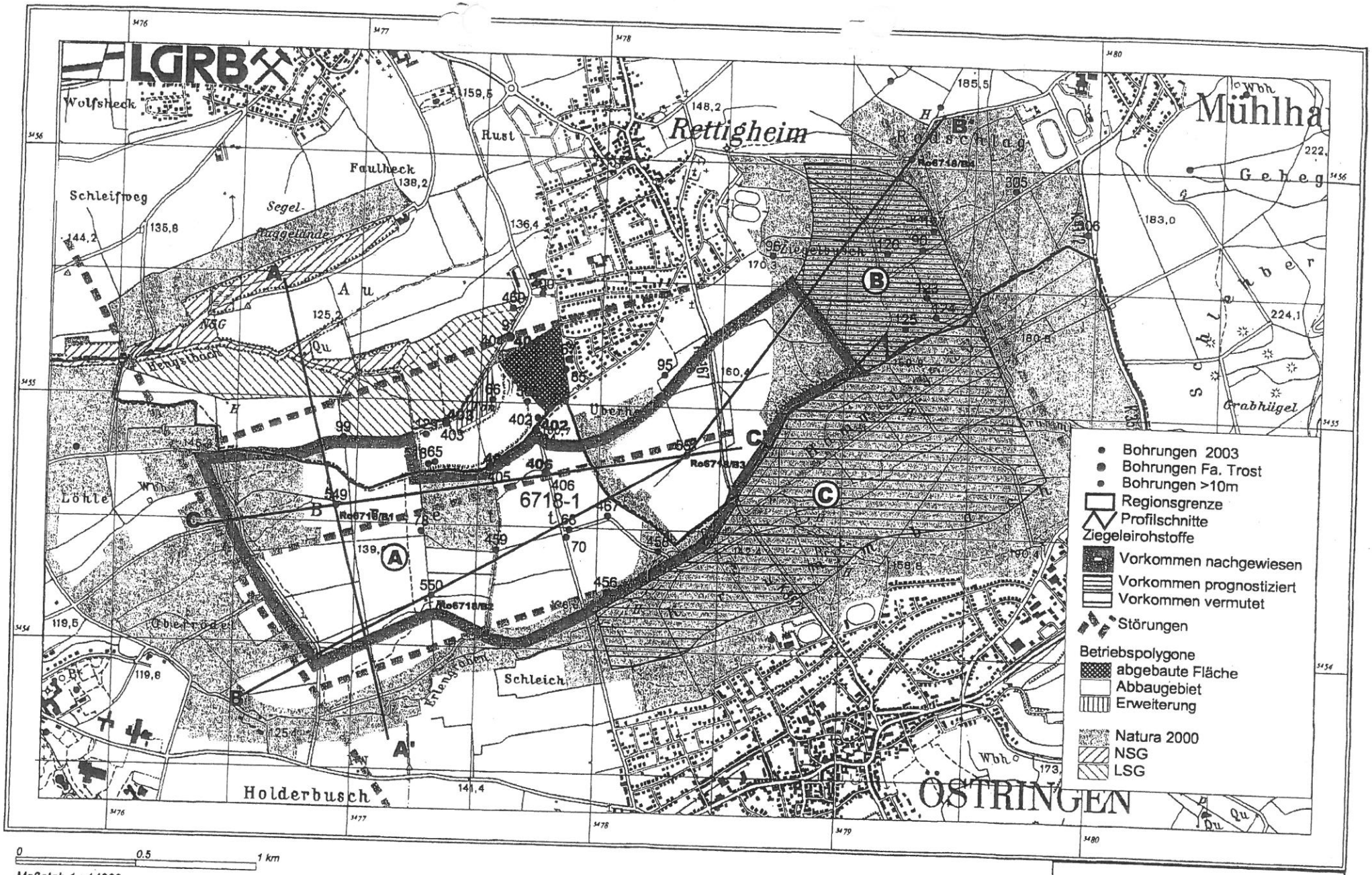
LGRB-Archiv-Nr.: BO6718/552
R: ^{34}79 235 **H:** ^{54}56 050
Ansatzpunkt: ca. 172,5 m NN
Ruhewasserspiegel: k. Angabe

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 Kalkmergelsteineinschaltungen 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



Maßstab 1 : 14000

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

Aktenzeichen: 4704 // 02 7114, 11.03.2004	LGRB
Bearb.: Dr. A. Gilthaus, Dr. W. Werner	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

Regierungspräsidium Freiburg
Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau

Az.: 4721.5//00-00000

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

Regierungspräsidium Freiburg
Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau

Az.: 4721.5//00-00000

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

Labor-Nr.		270936	270927	270934	272259	272260	270928	270935	271055	270929	270930	270931	270932	270933	270937	270938	270939
Bezeichnung		Tagebausee	B1/2015 (05.05.2015)	B1/2015 (08.05.2015)	GWM Rettigheim 2	GWM Rettigheim 3	B2/2015 (05.05.2015)	B2/2015 (08.05.2015)	St. Rochusbrunnen	H1 = Quelle Hengstbach	Hengstbach H2	Hengstbach H3	Hengstbach H4	E1 = Quelle Erlengraben	Erlengraben E2	Erlengraben E3	Erlengraben E4
Entnahmedatum		06.05.2015	05.05.2015	06.05.2015	10.06.2015	10.06.2015	05.05.2015	06.05.2015	19.05.2015	05.05.2015	05.05.2015	05.05.2015	05.05.2015	05.05.2015	06.05.2015	06.05.2015	06.05.2015
Uhrzeit		10:10	16:20	08:25	14:25	15:00	17:20	09:20	15:40	18:15	18:50	19:00	20:00	20:40	10:50	11:15	11:30
Vor-Ort																	
Ausbautiefe	m	-	21,5	20,7	-	-	19,72	19,7	33	-	-	-	-	-	-	-	-
Ausbaudurchmesser	cm	-	13	13	-	-	13	13	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Entnahmetiefe	m	-	-	18,5	-	-	18,5	18,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Ruhewasserspiegel	m	-	2,86	2,86	-	-	14,52	17,14	ca. 5	-	-	-	-	-	-	-	-
Förderdauer	min	-	-	-	-	-	15	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Förderstrom	l/sec	-	0,4	0,02	-	-	0,02	0,05	-	-	-	-	-	-	-	-	-
abgesenkter Wasserspiegel	m	-	6,5	-	-	-	18,4	17,71	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Schüttung	l/sec	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Färbung		farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	grau	grau	farblos	0,1	-	0,1	-	0,2	0,1	0,1	-
Trübung visuell		klar	klar	klar	klar	klar	stark	stark	klar	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos	farblos
Geruch		neutral	neutral	neutral	H2S	H2S	neutral	neutral	H2S	klar	klar	klar	klar	klar	klar	klar	klar
Temperatur	°C	18,7	11,8	11,9	13,2	12,7	21,2	12,8	14,5	neutral	neutral	neutral	neutral	neutral	neutral	neutral	neutral
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) vor O	µS/cm	2270	2140	2140	1192	1176	2220	2140	1440	15,1	16,1	15,2	12,3	15,7	14,1	14,3	13,4
spez. el. Leitfähigkeit (25°C) Labor	µS/cm	2250	2120	2100	1179	1171	2300	2220	1383	1419	1381	1889	1054	847	983	1130	901
pH-Wert (tgem) vor Ort		8,12	7,27	7,27	9,21	9,18	8,23	8,41	7,73	1430	-	1860	1042	844	-	1127	908
pH Wert Labor		7,85	7,41	7,34	8,93	8,83	8,38	8,43	7,77	7,66	7,52	7,52	7,76	7,44	7,7	8	7,9
Temperatur Labor	°C	21	20,7	20,9	27,4	27,6	20,7	21	22,9	7,68	-	7,5	7,81	7,16	-	7,87	7,88
gelöster Sauerstoffgehalt	mg/l	11,3	1,6	0,8	0,11	1,13	< 0,1	< 0,1	< 0,1	20,7	-	20,9	20,9	20,9	-	21	21
Redoxpotential (berechnet)	mV	408	306	321	-186	-136	172	75	-128	5,5	5	5,9	9,5	7,8	10,1	-	8,5
Bk-Wert (pH 8,2)	mmol/l	0,08	1,82	1,47	-	-	-	-	0,65	372	403	323	480	463	-	-	434
Sk-Wert (pH 4,3) vor Ort	mmol/l	5,95	17,7	16,9	11,2	10,8	-	-	13,3	0,61	0,59	0,6	-	1,1	-	-	-
Sk-Wert (pH 4,3) Labor	mmol/l	5,64	16,6	16	11,1	10,7	18,2	18,4	12,6	8,65	8,2	8,35	-	5,65	-	-	-
Sk-Wert (pH 8,2) vor Ort	mmol/l	-	-	-	1,4	1,3	-	-	-	8,28	-	8,06	7	5,44	-	7,28	6,7
Sk-Wert (pH 8,2) Labor	mmol/l	-	-	-	0,82	0,66	0,56	0,66	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Anionen-Kationen										-	-	-	-	-	-	-	-
Natrium (Na+)	mg/l	344	440	465	297	289	579	566	301								
Kalium (K+)	mg/l	14,4	3,9	4,1	1,9	1,8	3,5	3,7	2,8	68,6	-	55,7	20,3	10,7	-	27,6	15,2
Calcium (Ca2+)	mg/l	106	39,7	14,1	1,2	1,3	12,9	6,6	17,8	2,2	-	1,3	2,1	1,0	-	1,9	1,6
Magnesium (Mg2+)	mg/l	60,1	37,2	36,8	0,6	0,6	3,7	3,2	14,2	204	-	309	185	142	-	158	145
Ammonium (NH4+)	mg/l	0,15	1,08	1,33	0,54	0,4	0,08	0,41	< 0,1	45	-	70,3	18,4	13,6	-	53	22,4
Hydrogenkarbonat (HCO3-)	mg/l	344	1010	976	677	653	1110	1120	769	< 0,05	-	-	-	< 0,05	-	-	-
Chlorid (Cl-)	mg/l	49,6	21,6	21,6	3,6	3,0	18,8	17,8	69,2	505	500	492	427	332	-	444	409
Sulfat (SO42-)	mg/l	884	330	366	70,5	84,3	358	310	7,3	20,4	-	26,8	47,2	53,7	-	13,0	26,5
Nitrat (NO3-)	mg/l	4,8	< 0,2	5,1	< 0,2	< 0,2	< 0,2	< 0,2	< 0,2	378	-	728	184	57	-	288	118
Nitrit (NO2-)	mg/l	< 0,01	0,1	0,05	< 0,01	< 0,01	0,02	< 0,01	< 0,01	8,2	-	0,2	7,2	40,2	-	0,5	3,9
Ionenbilanzfehler	%	0,19	0,6	0,14	1,13	0,48	0,28	0,26	0,84	< 0,01	-	-	-	< 0,01	-	-	-
Bor	mg/l	1,2	1,2	1,2	1,2	0,92	1,3	1,3	0,69	0,24	-	1,33	0,83	1,07	-	1,15	2,29
Fluorid (F-)	mg/l	0,6	0,6	0,54	0,95	0,6	2,0	2,2	0,77	0,25				0,053			
Lithium (Li+)	mg/l	0,4	0,28	0,27	0,5	0,53	0,16	0,16	0,05	0,35	-	-	-	0,16	-	-	-
Silizium	mg/l	3,0	4,1	4,1	3,8	3,6	3,7	2,5	0,06	0,05	-	0,027	0,009	< 0,01	-	0,003	0,007
Strontium (Sr2+)	mg/l	4,4	4,2	2,9	< 0,1	< 0,1	0,63	0,61	4,0	5,1	-	-	-	3,4	-	-	-
Sulfid ges. (HS-, S2-)	mg/l	< 0,01	< 0,01	< 0,01	7,9	3,6	< 0,01	< 0,01	40,9	1,0	-	1,53	0,41	0,17	-	0,48	0,30
Aluminium	mg/l	0,230	0,037	0,075	< 0,005	0,007	0,460	0,440	< 0,005	< 0,01	-	-	-	< 0,01	-	-	-
Arsen	mg/l	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	0,005	0,004	0,002	0,076				0,110			
Blei	mg/l	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	-	-	-	< 0,001	-	-	-
Cadmium	mg/l	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	< 0,001	-	-	-	< 0,001	-	-	-
Eisen ges.	mg/l	0,31	0,12	0,04	0,05	< 0,02	1,15	1,99	0,12	< 0,0002	-	-	-	< 0,0002	-	-	-
Kupfer	mg/l	0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	< 0,001	1,89	-	-	-	0,87	-	-	-
Mangan ges.	mg/l	0,16	0,19	0,14	0,06	0,03	0,1	0,35	0,01	< 0,001	-	-	-	< 0,001	-	-	-
Quecksilber	mg/l	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	< 0,0002	0,0003	0,0003	< 0,0002	0,24	-	-	-	0,34	-	-	-
Zink	mg/l	0,002	0,005	0,015	0,068	0,021	0,011	0,015	0,002	< 0,0002	-	-	-	< 0,0002	-	-	-
Gesamthärte berechnet	mmol/l	5,16	2,57	2,00	0,10	0,11	0,52	0,35	1,08	0,003	-	-	-	0,003	-	-	-
Gesamthärte berechnet	°dH	28,7	14,2	11,0	0,4	0,4	2,7	1,7	5,8	6,99	-	10,60	5,46	4,15	-	6,17	4,59
Isotopen										39,0	-	59,5	30,4	23,1	-	34,4	25,5
Sauerstoff-18 (*18O) CRDS	‰	-8,20	-8,69	-8,68	-10,45	-10,01	-8,86	-9,02	-9,04								
Deuterium (*2H) CRDS	‰	-48,5	-59,1	-57,6	-71,9	-68,1	-60,4	-61,2	-61,0	-8,22	-8,40	-8,11	-8,47	-8,03	-8,37	-8,45	-8,55
Deuterium-Exzess	‰	1,1	10,4	11,8	11,7	12,0	10,5	11,0	11,3	-55,6	-56,4	-54,8	-57,2	-53,3	-55,6	-56,0	-56,7
Tritium (*3H)	TU	6,3 ± 1,0	6,1 ± 0,7	4,9 ± 0,7	< 0,6	< 0,6	1,8 ± 0,8	1,1 ± 0,8	1,9 ± 0,7	10,2	10,8	10,1	10,6	10,9	11,4	11,6	11,7
										7,3 ± 1,0	-	-	-	7,5 ± 0,9	-	-	-

Anlage 1: Ergebnisse der hydrochemischen und isotopenhydrologischen Untersuchungen im Umfeld der Tongrube Rettigheim (Untersuchungen vom Mai/Juni 2015)

Woelkestraße 9 · 85301 Schweitenkirchen · Tel +49 8444 92890 · Fax +49 8444 928929 · Email info@Hydroisotop.de

HYDROISOTOP

Prüfbericht Nr. 270927 - 272260

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	
PROBENAHME				
Ausbautiefe	21,5	19,72	-	m
Ausbaudurchmesser	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**
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	
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**	
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		
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 ($\delta^{18}O$)	-8,69	-8,86	-8,22	‰	
Deuterium ($\delta^{2}H$)	-59,1	-60,4	-55,6	‰	
Deuterium-Exzess	10,42	10,48	10,16	‰	
Tritium (^{3}H)	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	
PROBENAHME				
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**
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	
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**	
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		
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 ($\delta^{18}O$)	-8,03	-8,68	-9,02	‰	
Deuterium ($\delta^{2}H$)	-53,3	-57,6	-61,2	‰	
Deuterium-Exzess	10,94	11,84	10,96	‰	
Tritium (^{3}H)	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**
PROBENBEZEICHNUNG	**Tagebausee**	**St. Rochus-brunnen**	**GWM Rettigheim 2**	
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_2S	H_2S	
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**	
PROBENBEZEICHNUNG	**Tagebausee**	**St. Rochus-brunnen**	**GWM Rettigheim 2**		
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**	
PROBENBEZEICHNUNG	**Tagebausee**	**St. Rochus-brunnen**	**GWM Rettigheim 2**		
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 ($\delta^{18}O$)	-6,2	-9,04	-10,45	‰	
Deuterium ($\delta^{2}H$)	-48,5	-61	-71,9	‰	
Deuterium-Exzess	1,10	11,32	11,70	‰	
Tritium (^{3}H)	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_2S	
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 ($\delta^{18}O$)	-10,01	‰	(s)
Deuterium ($\delta^{2}H$)	-68,1	‰	(s)
Deuterium-Exzess	11,98	‰	
Tritium (^{3}H)	< 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)	
pH-Wert (t_{gem}) vor Ort	DIN ES ISO 10523: 2012-04	
pH Wert Labor	DIN ES 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	
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 (δ^2H) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: 1σ = ± 1,0 ‰	
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}O$) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: 1σ = ± 0,10 ‰	

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	
PROBENAHME				
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 ($\delta^{18}O$)	-8,40	-8,11	-8,47	‰
Deuterium ($\delta^{2}H$)	-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_{gem}) vor Ort	DIN ES ISO 10523: 2012-04
pH Wert Labor	DIN ES 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 (δ^2H) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: $1\sigma = \pm 1{,}0$ ‰
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}O$) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: $1\sigma = \pm 0{,}10$ ‰

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

Prüfbericht Nr. 270937 - 270939 **Blatt 1 von 5**

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	
PROBENAHME				
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**
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	
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**
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	
SUMMEN- UND EINZELPARAMETER				
Gesamthärte berechnet	-	6,12	4,54	mmol/l
Gesamthärte berechnet	-	34,3	25,5	°dH
ISOTOPE				
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}O$)	-8,37	-8,45	-8,55	‰
Deuterium ($\delta^{2}H$)	-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 ES ISO 10523: 2012-04
pH Wert Labor	DIN ES 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 (δ^2H) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: 1σ = ± 1,0 ‰
Sauerstoff 18 ($\delta^{18}O$) (s)	Cavity-Ringdown-Spektrometrie (CRDS); bezogen auf VSMOW-Std.: 1σ = ± 0,10 ‰

Woelkestraße 9 · 85301 Schweitenkirchen · Tel +49 8444 92890 · Fax +49 8444 928929 · Email info@Hydroisotop.de

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

Woelkestraße 9 · 85301 Schweitenkirchen · Tel +49 8444 92890 · Fax +49 8444 928929 · Email info@Hydroisotop.de

HYDROISOTOP

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.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 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
Halite	-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.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 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.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_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.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 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).pqi
  Output file: C:\DATA\HPC\Rettigheim\PHREEQC\Karl-Siegel-Quelle (Vers2).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 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.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 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.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 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.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 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.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 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.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 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.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 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.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 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.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 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.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 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
AlOH+2	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.
