

Inhaltsverzeichnis

1 Theorie	1
1.1 Gleichgewichtsreaktionen	1
1.1.1 Einführung	1
1.1.2 Thermodynamische Grundlagen	5
1.1.2.1 Massenwirkungsgesetz	5
1.1.2.2 Gibbs´sche freie Energie	7
1.1.2.3 Gibbs´sche Phasenregel.....	8
1.1.2.4 Aktivität.....	9
1.1.2.5 Ionenstärke	9
1.1.2.6 Aktivitätskoeffizienten-Berechnung	11
1.1.2.6.1. Ionendissoziationstheorie	11
1.1.2.6.2. Ioneninteraktionstheorie.....	14
1.1.2.7 Vergleich Ionendissoziations-Ioneninteraktionstheorie	15
1.1.3 Wechselwirkungen an der Phasengrenze gasförmig-flüssig.....	18
1.1.3.1 Henry-Gesetz.....	18
1.1.4 Wechselwirkungen an der Phasengrenze fest-flüssig	20
1.1.4.1 Lösung und Fällung.....	20
1.1.4.1.1. Löslichkeitsprodukt.....	20
1.1.4.1.2. Sättigungsindex	22
1.1.4.1.3. Begrenzende Mineralphasen	24
1.1.4.2 Sorption	26
1.1.4.2.1. Hydrophobe/ hydrophile Stoffe.....	27
1.1.4.2.2. Ionenaustausch	27
1.1.4.2.3. Mathematische Beschreibung der Sorption.....	33
1.1.5 Wechselwirkungen in der flüssigen Phase.....	38
1.1.5.1 Komplexbildung.....	38
1.1.5.2 Redoxprozesse.....	40
1.1.5.2.1. Messung des Redoxpotentials	40
1.1.5.2.2. Berechnung des Redoxpotentials	41
1.1.5.2.3. Darstellung in Prädominanzdiagrammen	45
1.1.5.2.4. Redoxpuffer.....	50
1.1.5.2.5. Bedeutung von Redoxreaktionen	50
1.2 Reaktionskinetik	53
1.2.1 Reaktionskinetik verschiedener chemischer Prozesse	53
1.2.1.1 Halbwertszeiten	53

2.2.2.2 Einführungsbeispiele zur Sorption	115
2.2.2.3 Einführungsbeispiele zur Kinetik.....	123
2.2.2.3.1. Definition von Reaktionsraten.....	124
2.2.2.3.2. Basic innerhalb von PHREEQC.....	127
2.2.2.4 Einführungsbeispiel zur Isotopenfraktionierung.....	132
2.2.2.5 Einführungsbeispiel zum reaktiven Stofftransport.....	136
2.2.2.5.1. Einfacher 1D Transport: Säulenexperiment	136
2.2.2.5.2. 1D Transport, Verdünnung und Oberflächenkomplexierung in einem stillgelegten Uran-Bergwerk	140
2.2.2.5.3. 3D Stofftransport mit PHAST	145
3 Aufgaben.....	151
3.1 Gleichgewichtsreaktionen	153
3.1.1 Grundwasser - Lithosphäre	153
3.1.1.1 Standard-Output Brunnenanalyse	153
3.1.1.2 Gleichgewichtsreaktion Gipslösung.....	154
3.1.1.3 Ungleichgewichtsreaktion Gipslösung.....	154
3.1.1.4 Temperaturabhängigkeit der Gipslösung in Brunnenwasser.....	154
3.1.1.5 Temperaturabhängigkeit Gipslösung in destilliertem Wasser.....	155
3.1.1.6 Calcitlösung in Abhängigkeit von Temperatur und CO ₂ - Partialdruck	155
3.1.1.7 Calcitfällung und Dolomitlösung	155
3.1.1.8 Vergleich der Calcitlösung im offenen und geschlossenen System.....	155
3.1.1.9 Pyritverwitterung.....	156
3.1.2 Atmosphäre - Grundwasser – Lithosphäre.....	157
3.1.2.1 Regenwasserinfiltration unter dem Einfluss des Boden-CO ₂	157
3.1.2.2 Puffersysteme im Boden	157
3.1.2.3 Abscheidung an heißen Schwefel-Quellen.....	157
3.1.2.4 Stalagtitbildung in Karsthöhlen.....	158
3.1.2.5 Evaporation	159
3.1.3 Grundwasser	160
3.1.3.1 pE-pH-Diagramm für das System Eisen	160
3.1.3.2 Änderungen im Fe-pE-pH-Diagramm bei Anwesenheit von Kohlenstoff bzw. Schwefel	163
3.1.3.3 Änderung der Uranspezies in Abhängigkeit vom pH-Wert	163
3.1.4 Herkunft des Grundwassers	164
3.1.4.1 Förderung fossilen Grundwassers in ariden Gebieten.....	166
3.1.4.2 Salzwasser-/Süßwasser-Interface	167
3.1.5 Anthropogene Nutzung von Grundwasser	168
3.1.5.1 Probenahme: Ca-Bestimmung durch Titration mit EDTA	168
3.1.5.2 Kohlensäure-Aggressivität.....	169
3.1.5.3 Wasseraufbereitung durch Belüftung - Brunnenwasser	169
3.1.5.4 Wasseraufbereitung durch Belüftung - Schwefelquelle	169

3.1.5.5	Verschneiden von Wässern	170
3.1.6	Sanierung von Grundwasser	171
3.1.6.1	Nitratreduktion mit Methanol.....	171
3.1.6.2	Fe(0)-Wände	171
3.1.6.3	pH-Anhebung mit Kalk	171
3.2	Reaktionskinetik	172
3.2.1	Pyritverwitterung	172
3.2.2	Quarz-Feldspat-Lösung.....	172
3.2.3	Abbau organischer Substanz im Grundwasserleiter unter Reduktion redoxsensitiver Elemente (Fe, As, U, Cu, Mn, S).....	173
3.2.4	Tritium-Abbau in der ungesättigten Zone.....	174
3.3	Reaktiver Stofftransport	178
3.3.1	Lysimeter	178
3.3.2	Quellaustritt Karstquelle	178
3.3.3	Verkarstung (Korrosion einer Kluft).....	179
3.3.4	pH-Anhebung eines sauren Grubenwassers.....	180
3.3.5	In-situ leaching.....	181
3.3.6	3D Stofftransport – Uran und Arsen Kontaminationsfahne.....	183
4	Lösungen.....	185
4.1	Gleichgewichtsreaktionen	185
4.1.1	Grundwasser - Lithosphäre	185
4.1.1.1	Standard-Output Brunnenanalyse	185
4.1.1.2	Gleichgewichtsreaktion Gipslösung.....	187
4.1.1.3	Ungleichgewichtsreaktion Gipslösung.....	188
4.1.1.4	Temperaturabhängigkeit der Gipslösung in Brunnenwasser.....	188
4.1.1.5	Temperaturabhängigkeit Gipslösung in destilliertem Wasser...	189
4.1.1.6	Calcitlösung in Abhängigkeit von Temperatur und CO ₂ - Partialdruck	189
4.1.1.7	Calcitfällung und Dolomitleösung	190
4.1.1.8	Vergleich der Calcitlösung im offenen und geschlossenen System.....	191
4.1.1.9	Pyritverwitterung.....	192
4.1.2	Atmosphäre - Grundwasser - Lithosphäre	194
4.1.2.1	Regenwasserinfiltration unter dem Einfluss des Boden-CO ₂	194
4.1.2.2	Puffersysteme im Boden	194
4.1.2.3	Abscheidung an heißen Schwefel-Quellen.....	194
4.1.2.4	Stalagitbildung in Karsthöhlen.....	195
4.1.2.5	Evaporation	196
4.1.3	Grundwasser	197
4.1.3.1	pE-pH-Diagramm für das System Eisen	197
4.1.3.2	Änderungen im Fe-pE-pH-Diagramm bei Anwesenheit von Kohlenstoff bzw. Schwefel	197
4.1.3.3	Änderung der Uranspezies in Abhängigkeit vom pH-Wert	200

4.1.4 Herkunft des Grundwassers 201

 4.1.4.1 Förderung fossilen Grundwassers in ariden Gebieten..... 201

 4.1.4.2 Salzwasser-/Süßwasser-Interface 202

4.1.5 Anthropogene Nutzung von Grundwasser 203

 4.1.5.1 Probenahme: Ca-Titration mit EDTA 203

 4.1.5.2 Kohlensäure-Aggressivität 204

 4.1.5.3 Wasseraufbereitung durch Belüftung - Brunnenwasser 204

 4.1.5.4 Wasseraufbereitung durch Belüftung - Schwefelquelle 204

 4.1.5.5 Verschneiden von Wässern 206

4.1.6 Sanierung von Grundwasser 207

 4.1.6.1 Nitratreduktion mit Methanol..... 207

 4.1.6.2 Fe⁰-Wände..... 208

 4.1.6.3 pH-Anhebung mit Kalk 209

4.2 Reaktionskinetik 210

 4.2.1 Pyritverwitterung 210

 4.2.2 Quarz-Feldspat-Lösung..... 212

 4.2.3 Abbau organischer Substanz im Grundwasserleiter unter
 Reduktion redoxsensitiver Elemente (Fe, As, U, Cu, Mn, S) 214

 4.2.4 Tritium-Abbau in der ungesättigten Zone..... 217

4.3 Reaktiver Stofftransport 218

 4.3.1 Lysimeter 218

 4.3.2 Quellaustritt Karstquelle 219

 4.3.3 Verkarstung (Korrosion einer Kluft)..... 220

 4.3.4 pH-Anhebung eines sauren Grubenwassers..... 221

 4.3.5 In-situ leaching..... 223

 4.3.6 3D Stofftransport – Uran und Arsen Kontaminationsfahne 225

Literatur 227

Index..... 233