

**Modellgestützte Untersuchungen zur
Grundwassergüteentwicklung in Braunkohleabraumkippen und
deren Abstrom unter Berücksichtigung natürlicher
Rückhalt- und Abbauprozesse**

Von der Fakultät für Geowissenschaften, Geotechnik und Bergbau
der Technischen Universität Bergakademie Freiberg
genehmigte

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor Ingenieur

Dr.-Ing.

vorgelegt

von Dipl.-Ing. Nils Hoth

geboren am 27.01.1968 in Freiberg

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Frieder Häfner, Freiberg
Prof. Dr. rer. nat. habil. Georg Teutsch, Tübingen
Prof. Dr.-Ing. habil. Ludwig Luckner, Dresden

Tag der Verleihung: 14.5.2003

„ ... Man muss dem Menschen da begegnen wo er ist.“

Peter Aggeler, 7 Jahre, Weisstannen

Im Denken an

Simmi und Sepp Tschirky, Oberrüti Weisstannen

Vorbemerkungen

Die vorliegende Dissertation resultiert aus Forschungsprojekten im Auftrag von BMBF und LMBV bzw. der LAUBAG, an deren Bearbeitung ich als wissenschaftlicher Mitarbeiter des Instituts für Bohrtechnik und Fluidbergbau maßgebend beteiligt war.

Danken möchte ich Allen, die mich bei der Entstehung dieser Arbeit durch Diskussionen, Zuarbeiten, Hilfestellungen, Schulterklopfen ... unterstützt haben. Es ist nur möglich, einem Teil von Ihnen namentlich zu danken. Die zu Unrecht nicht Genannten mögen es mir nachsehen. Namentlich möchte ich an dieser Stelle folgenden Personen Dank sagen:

Meinem Betreuer Herrn Prof. Dr. F. Häfner dafür, dass er das Umfeld für meine Tätigkeit schuf, mir immer wieder den Rückhalt und Freiraum gab, verschiedene Untersuchungen zu verknüpfen und mich anhielt, den Kern der Ergebnisse prägnant herauszustellen.

Herrn Prof. Dr. L. Luckner und Herrn Prof. Dr. G. Teutsch dafür, dass sie sich die Zeit zur Begutachtung dieser Arbeit nehmen.

Frau Angelika Liedtke für die vielfältige, engagierte Unterstützung bei den Laborarbeiten.

Meinen beiden „Feldmitstreitern“ im Espenhainprojekt, Herrn Dr. Andreas Rinker und Herrn Henryk Feldmann im Denken an die anstrengenden Arbeiten, aber auch schönen Stunden mit Zelt und Grill auf der Kippe Espenhain.

Dem gesamten Team des Instituts für das kollegiale Klima und die Hilfe bei kleinen und größeren Problemen.

Herrn Dr. Steffen Wagner, meinem Vater Dr. Klaus Hoth und meiner Lebensgefährtin Jana Tschapek für die fruchtbringenden Diskussionen zum Manuskript.

Für Diskussionen und die gute Zusammenarbeit bei Untersuchungen und Datenbereitstellung: Herrn Dr. D. Sames (IBGW Leipzig), Herrn Dr. H.-M. Nitzsche (INC Leipzig), Frau B. Kluge, Herrn Peter Süßmilch und Herrn Marian Mietzsch (LAUBAG), Herrn E. Zeh (LMBV), Herrn F. Karnatz (G.E.O.S. Freiberg), Arbeitsgruppe Prof. D. Hebert (TU BAF), Herrn Detlef Tondera (TU BAF), Herrn Arndt Weiske (TU Dresden), Frau Dr. Gerda Standke, Herrn Peter Suhr und Herrn Tobias Duteloff (LfUG Sachsen), Frau Andrea Kassahun, Herrn Dr. Wolfgang Berger, Herrn Dr. Florian Werner und Herrn Felix Bilek (DGFZ), Herrn Wolfgang Storz (HGN Torgau), Herrn P. Volke und Herrn Hans-Joachim Peter (TU BAF).

Nicht zuletzt Jana und Martha für ihr Verständnis, dass sie manche Spielplatz-Tierpark-Runden alleine drehen mussten.

Zusammenfassung

Die teilweise Verwitterung der im Braunkohlenabraum enthaltenen Sulfidminerale führt zur Bildung stark mineralisierter, saurer Kippengrundwässer. Eine Gefährdungsprognose für die umgebenden Grundwasserleiter (GWL) bedarf der Charakterisierung des Kippengrundwassers zum Abstromzeitpunkt. Weiterhin ist der Abstromprozess mit geeigneten Modellen zu simulieren. Es ist Ziel der Arbeit, eine Methodik zur Gefährdungsabschätzung zu entwickeln. Das Hauptaugenmerk liegt in der Charakterisierung der im Kippenkörper und im Abstrom ablaufenden Prozesse. Die Bearbeitung erfolgte für die Standorte Espenhain (Mitteldeutsches Revier) und Jänschwalde (Niederlausitzer Revier). Einführend werden die theoretischen Grundlagen zum geogenen Ausgangszustand, zum hydraulischen und geochemischen System „Kippe“ sowie zur reaktiven Stofftransportmodellierung dargestellt. Daraus werden Untersuchungsschwerpunkte abgeleitet. Einer kurzen Charakterisierung der Untersuchungsgebiete folgt die Bearbeitung der einzelnen Schwerpunkte.

Die exemplarische Simulation der Kippenwiederaufsättigung mit einem 2-Fluidphasensimulator zeigt, dass die Diskrepanz zwischen starken Anstiegen der Kippengrundwasserstände und geringen Versickerungsmengen aus der Bodenzone auf die Umverteilung des Anfangswassergehaltes zurückzuführen ist. Die Versickerung aus der Bodenzone und die Grundwasserneubildung sind bis zur Einstellung quasi-stationärer Verhältnisse völlig entkoppelt. Für beide Untersuchungsgebiete werden geochemische Kippenmodelle aus einer Vorfelddbilanzierung abgeleitet. Dies trägt wesentlich zum Verständnis der sich entwickelnden Kippengrundwasserbeschaffenheiten bei. Die intensiven Untersuchungen am Kippenstandort Espenhain zeigen, dass es nach längeren Kippeliegezeiten zu einer vertikalen geochemischen Zonierung innerhalb der Kippe kommt. Die sekundären Verwitterungszonen der Hangendbereiche der Absetzer- und Förderbrücken-Kippen weisen erhebliche mobile Eisen-, Sulfat-, Aluminium- und Spurenmetall-Gehalte auf. Im Liegenden dieser Verwitterungszonen kommt es hingegen zum Ablauf einer reduktiven Prozesskette bis hin zur Sulfatreduktion. Diese Prozesskette basiert auf der mikrobiellen Umsetzung tertiärer organischer Substanz. Die Abfolge der Redoxsequenz bis zum Sulfatreduktions-Stadium ist als wesentlicher Selbsthilfemechanismus anzusehen. Die weitere Untersuchung dieser Prozesskette und ihrer technischen Beeinflussbarkeit ist geboten, da dies eine Chance der mittel- bis langfristigen Minimierung der „Quellstärke“ des Emissionsherdes „Kippe“ darstellt.

Das reaktive Stofftransportprogramm PCGEOFIM (IBGW [2000]) wird an Hand von Benchmark-Beispielen und Säulenversuchen verifiziert. Die reaktiven Abstrommodellierungen der Kippengrundwässer zeigen, dass es in den gewachsenen GWL langfristig zur Entwicklung von quasi-stationären „Beeinflussungssäumen“ kommen wird. Hauptkennzeichen des Abstromprozesses ist die Ausbildung einer Sulfatfront. Die pH-Werte werden in karbonathaltigen GWL gut gepuffert. Der Rückhalt der Eisengehalte basiert auf Kationenaustausch bzw. Bildung von Eisenhydroxidphasen. Die effektive Wirksamkeit der benannten Puffersysteme wird an Hand von Säulenversuchen nachgewiesen.

Die wesentlichen Schlussfolgerungen für das Mitteldeutsche und Niederlausitzer Revier werden in einem abschließenden Kapitel dargestellt.

Inhaltsverzeichnis

ZUSAMMENFASSUNG	I
INHALTSVERZEICHNIS.....	II
1 VERANLASSUNG UND ZIELSTELLUNG	1
2 THEORETISCHE GRUNDLAGEN.....	3
2.1 HYDROGEOCHEMISCHE UND HYDRAULISCHE CHARAKTERISTIK DES SYSTEMS „KIPPE – RESTSEE – GEWACHSENER GRUNDWASSERLEITER“	3
2.2 GEOGENER AUSGANGSZUSTAND	4
2.3 HYDRAULISCHES SYSTEM „KIPPE“	7
2.3.1 Kippenaufbau, Abbautechnologie und Modellvorstellung	7
2.3.2 Prozess der Wiederaufsättigung der Kippen	10
2.4 GEOCHEMISCHES SYSTEM „KIPPE“	12
2.4.1 Pyritverwitterung	12
2.4.2 Pufferungsreaktionen- und Sekundärmineralbildungen.....	16
2.4.3 Mikrobielle Redoxreaktionen	18
2.5 MIGRATIONSPROZESS	21
2.5.1 Herkömmliche Transportmodellierung	21
2.5.2 Reaktive Transportmodellierung	22
2.5.3 Hydrogeochemische Gleichgewichtsmodelle	23
2.6 ABGELEITETE UNTERSUCHUNGSSCHWERPUNKTE	25
3 CHARAKTERISTIK DER UNTERSUCHUNGSGBIETE.....	26
3.1 UNTERSUCHUNGSGBIET ESPENHAIN.....	26
3.1.1 Geographische Lage und klimatische Verhältnisse.....	26
3.1.2 Geologische Verhältnisse	26
3.1.3 Tagebautwicklung, Abbautechnologie und Kippenaufbau	28
3.2 UNTERSUCHUNGSGBIET JÄNSCHWALDE.....	29
3.2.1 Geographische Lage und klimatische Verhältnisse.....	29
3.2.2 Geologische Verhältnisse	30
3.2.3 Tagebautwicklung, Abbautechnologie und Kippenaufbau	32
4 HYDRAULISCHE MODELLIERUNGEN ZUR WIEDERAUFSÄTTIGUNG VON KIPPEN	34
4.1 MODELLGRUNDLAGEN	34
4.2 MODELLANSÄTZE.....	36
4.2.1 Problemstellung	36
4.2.2 Modellierungsprogramm und Modellvarianten	37
4.2.3 Modellparameter.....	39
4.3 MODELLERGEBNISSE	41
4.3.1 Modellvariante 1	41
4.3.2 Modellvariante 2	41
4.4 DISKUSSION DER MODELLERGEBNISSE.....	45
5 VORFELDBILANZIERUNG UND KIPPENMODELLERSTELLUNG.....	46
5.1 VORGEHENSWEISE.....	46
5.2 DATENGRUNDLAGE BODENGEOLOGISCHE VORFELDGUTACHTEN	47

5.3	ERGEBNISSE ESPENHAIN.....	48
5.3.1	<i>Datengrundlage</i>	48
5.3.2	<i>Vorfeldanalyse - Ergebnisse an ausgewählten Einzelbohrungen</i>	49
5.3.3	<i>Vorfeldanalyse – Flächenhafte Ergebnisse</i>	51
5.3.4	<i>Ergebnisse Kippenmodell</i>	51
5.4	ERGEBNISSE JÄNSCHWALDE.....	53
5.4.1	<i>Datengrundlage</i>	53
5.4.2	<i>Vorfeldanalyse - Ergebnisse an ausgewählten Einzelbohrungen</i>	54
5.4.3	<i>Vorfeldanalyse – Flächenhafte Ergebnisse</i>	56
5.4.4	<i>Ergebnisse Kippenmodell</i>	59
6	KENNZEICHNUNG DER HYDROGEOCHEMISCHEN PROZESSE – KIPPE ESPENHAIN	61
6.1	VORGEHENSWEISE UND UNTERSUCHUNGSMETHODEN	61
6.1.1	<i>Festphase - Probenahme und Untersuchungsmethoden</i>	61
6.1.2	<i>Wasserphase – Probenahme und Untersuchungsmethoden</i>	61
6.1.3	<i>Gasphase – Probenahme und Untersuchungsmethoden</i>	62
6.1.4	<i>Charakterisierung von Wasseranalysen</i>	62
6.2	KENNZEICHNUNG DER MOBILISIERBAREN STOFFPOTENTIALE	63
6.2.1	<i>Verwitterungsversuche</i>	63
6.2.2	<i>Porenwasserbeschaffenheit der Restlochböschungen</i>	64
6.2.3	<i>Elutionsversuche</i>	66
6.3	UNTERSUCHUNG DER SEKUNDÄREN VERWITTERUNGSZONE DER ABSETZERKIPPE	69
6.3.1	<i>Wesentliche Ergebnisse der Untersuchungen der Wasser- und Festphase</i>	69
6.3.2	<i>Wesentliche Ergebnisse der Untersuchungen der Gasphase</i>	73
6.4	UNTERSUCHUNGEN AN TIEFEN KIPPEN-BOHRUNGEN	74
6.4.1	<i>Ergebnisse Feldelutionen</i>	74
6.4.2	<i>Ergebnisse Analytik Porenwasser</i>	75
6.4.3	<i>Mineralphasen-Sättigungszustände der Porenwässer</i>	77
6.4.4	<i>Tritiumuntersuchungen an den Porenwässern</i>	78
6.4.5	<i>Ergebnisse Gasphasenuntersuchungen</i>	80
6.5	UNTERSUCHUNG DER REDUKTIVEN PROZESSKETTE	82
6.5.1	<i>Untersuchungsergebnisse</i>	82
6.5.2	<i>Diskussion</i>	85
6.6	BESCHAFFENHEITSPROGNOSE ZUM ABSTROMZEITPUNKT.....	88
6.6.1	<i>Vorgehensweise</i>	88
6.6.2	<i>Ergebnisse</i>	89
7	KENNZEICHNUNG DER HYDROGEOCHEMISCHEN PROZESSE – KIPPE JÄNSCHWALDE ..	91
7.1	KENNZEICHNUNG DER STOFFPOTENTIALE UND DER VERWITTERUNGSPROZESSE	91
7.2	BESCHAFFENHEITSPROGNOSE ZUM ABSTROMZEITPUNKT.....	93
8	REAKTIVES STOFFTRANSPORTPROGRAMM PCGEOFIM	96
8.1	FUNKTIONSWEISE DES GEKOPPELTEN MODELLS.....	96
8.2	BENCHMARK-BEISPIEL 1 – KATIONENAUSTAUSCHPROZESSE.....	97
8.2.1	<i>Problemstellung</i>	97
8.2.2	<i>Modellgrundlagen</i>	97
8.2.3	<i>Modellergebnisse</i>	98
8.3	BENCHMARK-BEISPIEL 2 – ABSTROM VON AMD-WÄSSERN	99
8.3.1	<i>Problemstellung</i>	99
8.3.2	<i>Modellgrundlagen</i>	99
8.3.3	<i>Modellergebnisse</i>	100

8.4	BENCHMARK-BEISPIEL 3 – ABSTROM-SÄULENVERSUCH VON AMD-WÄSSERN	101
8.4.1	<i>Problemstellung</i>	101
8.4.2	<i>Modellgrundlagen</i>	101
8.4.3	<i>Modellergebnisse</i>	102
8.5	SÄULENVERSUCH ZUR ELUTION VON KIPPENWÄSSERN	103
8.5.1	<i>Problemstellung</i>	103
8.5.2	<i>Modellgrundlagen</i>	103
8.5.3	<i>Modellergebnisse</i>	104
8.6	ZUSAMMENFASSENDE DISKUSSION	106
9	REAKTIVE STOFFTRANSPORTMODELLIERUNG – BEISPIEL ESPENHAIN	107
9.1	MODELLGRUNDLAGEN	107
9.1.1	<i>Strömungsmodell</i>	107
9.1.2	<i>Transportmodell</i>	108
9.2	MODELLERGEBNISSE	109
9.2.1	<i>Strömungsmodell</i>	109
9.2.2	<i>Transportmodell</i>	109
9.2.3	<i>Stoffbilanzen für Oberflächengewässer</i>	113
9.3	DURCHSTRÖMUNG VON RESTLOCHVERWITTERUNGZONEN	116
9.3.1	<i>Modellansatz</i>	116
9.3.2	<i>Modellergebnisse und Diskussion</i>	117
10	REAKTIVE STOFFTRANSPORTMODELLIERUNG – BEISPIEL JÄNSCHWALDE.....	121
10.1	MODELLGRUNDLAGEN	121
10.2	MODELLERGEBNISSE	124
10.3	ABSTROM-SÄULENVERSUCHE	127
10.3.1	<i>Versuchs- und Auswertungsdurchführung</i>	127
10.3.2	<i>Versuchsergebnisse Säulenauslauf</i>	128
10.3.3	<i>Auswertung der Vor- und Nachuntersuchungen</i>	132
10.3.4	<i>Modellierung der Abstrom-Säulenversuche</i>	134
11	SCHLUSSFOLGERUNGEN FÜR DAS MITTELDEUTSCHE UND NIEDERLAUSITZER BRAUNKOHLENREVIER	137
	LITERATURVERZEICHNIS	142
	ABBILDUNGSVERZEICHNIS	152
	TABELLENVERZEICHNIS	155
	ABKÜRZUNGS- UND SYMBOLVERZEICHNIS	156
	ANLAGENVERZEICHNIS	161

1 Veranlassung und Zielstellung

Die Gewinnung von festen Bodenschätzen führt durch den bergbaulichen Eingriff zu einem abrupten, drastischen Wechsel in den geochemischen Milieuverhältnissen der Lagerstätten. Die resultierende Exposition sulfidischer Minerale gegenüber Sauerstoff führt zu deren teilweisen oder vollständigen Verwitterung. In Abhängigkeit vom vorhandenen Pufferpotential sinkt der pH-Wert und die Mineralisation der Porenlösung erhöht sich stark. Die Gesamtheit der Phänomene wird unter dem Begriff Acid Mine Drainage (AMD) bzw. Acid Rock Drainage (ARD) zusammengefasst.

Die Gewinnung von Braunkohle in Tagebauen ordnet sich in dieses Problemfeld ein. Die Gesamtheit aller kohlehangenden Sedimente des überbaggerten Bereiches wird während der Tagebauführung kurzzeitig den Atmosphären ausgesetzt. Dieser Prozess ist als drastischer Anschlag der sonst in geologischen Zeiträumen verlaufenden, erosionsbedingten Disulfidoxidation zu verstehen. Es kommt zur starken Erhöhung der gelösten Eisen- und Sulfatgehalte. Bei ungenügender Pufferkapazität der verkippten Sedimente hat der fallende pH-Wert eine Verwitterung von Silikatphasen (z.B. Alumosilikate) zur Folge. Dies ist durch eine Erhöhung der Aluminiumgehalte und der Mobilität der Schwermetalle gekennzeichnet. Beim Wiederanstieg des Kippengrundwassers und dessen Abstrom werden die Produkte der Verwitterungs- und Pufferungsprozesse eluiert. Die Verfrachtung dieser Stoffe kann dann im Abstrom der Kippen gelegene Schutzobjekte/ Schutzgüter gefährden.

Die langfristige Bedeutung dieser Prozesse für die regionale Grundwasserbeschaffenheitsentwicklung wird aus der durch den Braunkohlenbergbau in Anspruch genommenen Fläche ersichtlich. Für die Lausitz ist bis 1996 von ca. 775 km² (DREBENSTEDT [1998]), für das Mitteldeutschen Revier bis 1992 von ca. 470 km² (BERKNER [1998]) auszugehen. Nach DEBRIV [2002] ergibt sich für beide Reviere zusammen derzeit eine Inanspruchnahme von ca. 1275 km². Die Fläche, innerhalb derer eine Beeinflussung des Wasserhaushaltes erfolgte, ist dabei noch weitaus höher. Weiterhin sind die zukünftigen Inanspruchnahmen durch die 1990 privatisierten Bergbauunternehmen (LAUBAG und MIBRAG) zu berücksichtigen.

Mit der politischen Wende in der DDR kam es zu einer schlagartigen Umstellung der Hauptenergieträger. Der Abbau der heimischen Braunkohle wurde erheblich zurückgefahren (1989 ca. 300 Mio. t. ⇒ 1996 ca. 80 Mio. t - PFLUG [1998]¹). Aus diesen drastischen Veränderungen resultiert die Aufgabe, innerhalb möglichst kurzer Zeit den beeinflussten Wasserhaushalt auszugleichen. Dabei sollen die hydrochemischen Auswirkungen auf die Nachbarschaft der Kippenareale so gering wie möglich gehalten werden. Es leitet sich daraus ein Untersuchungsbedarf für die Prozesse innerhalb der Kippenkörper und die langzeitige Prognose der Beeinflussung/ Gefährdung der angrenzenden Schutzobjekte/ Schutzgüter ab.

¹ Nach DEBRIV [2002] betrug die Jahresförderung der beiden ostdeutschen Reviere in 2000/ 2001 70 – 75 Mio. t/a. Der Tiefststand der Förderung wurde 1998 mit ca. 64 Mio. t/a erreicht.

Zielstellung der Arbeit ist die Prognose der zeitlichen Entwicklung der Grundwasserbeschaffenheit im Abstrom von Braunkohleabraumkippen. Dazu bedarf es der Bearbeitung zweier Hauptaspekte:

Zum einen ist das Verständnis für die geohydraulischen und hydrogeochemischen Prozesse innerhalb der Kippe zu verbessern. Deren modellhafte Abbildung und Quantifizierung gestattet dann die Prognose der Kippengrundwasserbeschaffenheit zum Abstromzeitpunkt. Zum anderen bedarf es der Modellierung des Abstroms der Kippengrundwässer in die den Kippenkörper umgebenden Grundwasserleiter, unter Berücksichtigung der wesentlichen hydrogeochemischen Wechselwirkungen. Es soll dabei eine Methodik aufgezeigt werden, die auf die Spezifika des Mitteldeutschen und Niederlausitzer Braunkohlereviers ausgerichtet ist. Die Bearbeitung erfolgte an den Modellstandorten Espenhain (Mitteldeutsches Revier) und Jänschwalde (Niederlausitzer Revier). Der Modellstandort Espenhain kennzeichnet einen bereits stillgelegten Tagebau. Im Gegensatz dazu wird der Tagebau Jänschwalde noch bis ca. 2019 betrieben.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Hydrogeochemische und hydraulische Charakteristik des Systems „Kippe – Restsee – gewachsener Grundwasserleiter“

Die Gewinnung von Braunkohle in Tagebauen führt, wie bereits angemerkt, zur Exposition der im Abraum enthaltenen sulfidischen Minerale gegenüber Sauerstoff. Die resultierende Verwitterung der vor allem in der tertiären Schichtenfolge enthaltenen sulfidischen Minerale ist dabei eingebettet in ein Geflecht von hydrogeochemischen Reaktionen (Pufferreaktionen und Sekundärmineralbildungen). Die Tagebauentwicklung lässt sich im Hinblick auf die Sulfidverwitterung in folgende Abschnitte untergliedern:

Geogener Ausgangszustand (Unverritztes, nicht entwässertes Deckgebirge)

Die Verfügbarkeit von Elektronenakzeptoren im Grundwasser ist gering (niedrige O_2 -Gehalte, geringe Fe^{3+} - und NO_3^- -Konzentrationen). Die Umsetzung von Sulfiden ist zu vernachlässigen, da von einem geogenen Gleichgewichtszustand auszugehen ist.

Vorfeldentwässerung (Unverritztes, teilentwässertes Deckgebirge)

Es erfolgt eine Exposition des Deckgebirges durch Nachlieferung von Sauerstoff in der Gasphase. Auf Grund der langen Fließwege zwischen Geländeoberfläche und tertiären, sulfidhaltigen Schichten kann nur die Sauerstoffmenge des einmalig entwässerten Porenraumes als Oxidationsmittel wirken. Die Umsetzung ist gegenüber den nachfolgenden Abschnitten gering.

Eigentlicher Tagebau (Sauerstoffexposition am Abbau- und Kippenstoß)

Dieser Abschnitt wird nach WISOTZKY [1994] als „primäre Verwitterung“ bezeichnet. Sämtliche Abraumschichten werden gegenüber Sauerstoff exponiert. Dabei sind die Sulfid-Umsatzraten von der Technologie des Abbaues (Expositionsdauer) und dem Anteil der entwässerten Porosität der einzelnen Abraumschichten abhängig. Dieser Prozess an den Tagebaustößen wird durch die effektive Sauerstoffanlieferung kontrolliert, und steht mit der Größe des gasgefüllten Porenraums in engem Zusammenhang.

Geschütteter Kippenkörper (Exposition gegenüber Elektronenakzeptoren- O_2 , Fe^{3+} und NO_3^- , limitiert durch Nachlieferung)

Dieser Abschnitt wird nach WISOTZKY [1994] als „sekundäre Verwitterung“ bezeichnet. Die Umsatzraten werden hauptsächlich durch die limitierte Nachlieferung der Elektronenakzeptoren, vor allem O_2 aus der Kippengasphase, beeinflusst.

Die beiden letztgenannten Abschnitte spielen die entscheidende Rolle für den gesamten Sulfid-Verwitterungsprozess. Die der Verwitterung nachfolgenden Pufferungs- und Sekundärmineralbildungsprozesse vollziehen sich vor allem im geschütteten Kippenkörper.

Die Bergbautätigkeit ist als ein abrupter Wechsel in den geochemischen Milieuverhältnissen zu verstehen. Die Öffnung der Lagerstätte stellt einen drastischen Eingriff in den Schwefel-/ Kohlenstoffhaushalt der Sedimente dar. Die Kinetik des Prozesses übersteigt dabei die des natürlichen Schwefel-/ Kohlenstoffkreislaufes um ein Vielfaches. In diesem erfolgt die Sulfidoxidation zumeist in geologischen Zeiträumen auf Grund von terrestrischer Sediment-

erosion. Die Sulfidbildung ist demgegenüber mit der limnischen oder brackisch-marinen Sedimentablagerung verbunden. Für die anthropogenen Kippenkörper stellt sich die Frage, ob dieser zweite Teil des natürlichen Schwefel-/ Kohlenstoffkreislaufes, als Umkehrung der oxidativen Prozesse, Relevanz besitzt.

Für das Verständnis des hydraulischen Systems „Kippe“ sind diese Körper als anthropogene Sedimente zu begreifen, welche durch die im Vorfeld anstehenden Sedimente und die angewandte Gewinnungs- und Verkippungstechnologie determiniert sind.

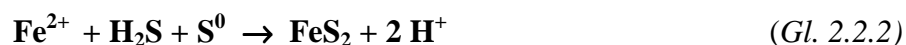
Der Tagebau ist in seinem Endzustand durch ein Massendefizit charakterisiert, welches aus der Gewinnung der Kohle resultiert. Das somit entstehende Restloch wird, nach Aufgabe der Sumpfung, durch dessen Füllung schrittweise in einen Restsee überführt. Dabei wurde und wird für die Restlöcher der ostdeutschen Tagebaue zumeist die Variante der Fremdwasserflutung mittels Oberflächenwasser durchgeführt. Dies erfolgt, um die initiale Bildung von schwefelsauren Seen durch Füllung mit Kippengrundwasser zu verhindern. Weiterhin soll ein schneller Wasseranstieg realisiert werden, der die Erosion der sanierten Böschungsbereiche gering hält (vgl. LUCKNER ET AL.[1997]). Für die Beschaffenheit der Restseen nach Ende ihrer Flutung spielen die Stoffeinträge aus den Kippenbereichen und den gewachsenen Grundwasserleitern (GWL) die wesentliche Rolle. Hierbei ist zu beachten, dass teilweise die unmittelbaren Böschungsbereiche sehr lange Expositionszeiten aufweisen. Es besteht die Frage, ob für diese Bereiche die leicht eluierbaren Stoffpotentiale stark erhöht sind. Die Prognose der Beschaffenheitsentwicklung der Restseen ist allerdings nicht Gegenstand der hier vorliegenden Arbeit.

2.2 Geogener Ausgangszustand

Die sedimentäre Pyritbildung ist innerhalb geologischer Zeiträume einer der Hauptausgleichsmechanismen zwischen Sauerstoffgehalt der Atmosphäre und der Sulfatkonzentration der Ozeane (BERNER [1984]). Es kommt zu einem ständigen Wechsel zwischen mariner Pyritbildung und terrestrischer Pyritverwitterung bei Sauerstoffexposition (z.B. ZEHNDER & ZINDER [1980], VAN BERGK [1996]). Somit ist die durch die Tagebaue hervorgerufene Verwitterungsproblematik als Bestandteil des geochemischen Schwefel-Kohlenstoff-Kreislaufs zu verstehen. Die Pyritbildung ist nach BERNER [1984] ein synsedimentärer bis frühdiagenetischer Vorgang. Abbildung 2.2.1 verdeutlicht die ablaufenden Teilprozesse. Unter reduzierenden Bedingungen kommt es, begleitet von der Umsetzung organischer Substanz (CH₂O), zur Reduktion von Sulfat zu H₂S (Gl. 2.2.1).



Das gebildete H₂S reagiert mit Fe²⁺ zu Pyrit (Gl.2.2.2)².



Diese Modellvorstellung ist eine Vereinfachung der ablaufenden Prozesse. Andere Bildungswege, z.B. über die direkte Reaktion von Fe²⁺ mit Polysulfiden, werden detailliert in RICKARD [1975], MORSE ET AL. [1987] und WILKIN & BARNES [1996] diskutiert. ALTSCHULER ET AL.

² Der Prozess erfolgt dabei über verschiedene thermodynamisch instabilere Eisensulfidzwischenstufen (Mackinawit - Fe₃S₄, Greigit - Fe_{1+x}S) (ebenfalls RICKARD [1975], MORSE ET AL. [1987]).

[1983] untersuchen den Prozess der Umwandlung von Torf in Kohle am rezenten Analogon der Everglades in Florida. Sie zeigen, dass sich an der Sediment-Wassergrenze eine Zone ausbildet, in der eine organische Fixierung des Sulfats erfolgt. Im Bereich unterhalb dieser Zone reagieren dann die entstandenen reduzierbaren organischen Schwefelverbindungen mit Eisen zu Pyrit. Eine detaillierte Modellvorstellung, die auch die Bildungsgesetzmäßigkeiten der organischen Schwefelspezies einbezieht, liefert VAIRAVAMURTHY [1995].

Die wesentlichen Aspekte der Pyritbildung werden mit dem vereinfachten Modell nach BERNER [1984] jedoch erfasst (Abb. 2.2.1). Aus dem Modell wird deutlich, dass drei Limitierungsfaktoren für die Pyritbildung zu unterscheiden sind:

- das Vorhandensein von Sulfat,
- das Vorhandensein von umsetzbarem organischen Kohlenstoff
- das Vorhandensein von „reaktivem Eisen“.

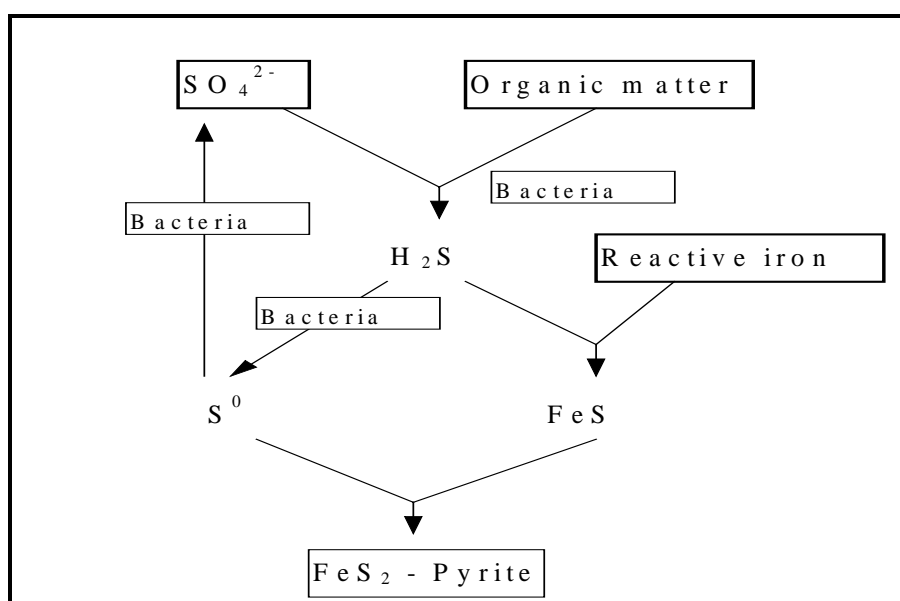


Abb. 2.2.1 Schema der sedimentären Pyritbildung nach BERNER [1984]

Für verschiedene Faziestypen ist jeweils eine der drei Größen der limitierende Faktor.

In mariner Fazies stellt diesen C_{org} dar, da Sulfat und reaktive Eisenminerale ausreichend vorhanden sind. Es resultiert daraus eine Korrelation zwischen C_{org} und S_{red} (vgl. Abb. 2.2.2). Die C_{org}/S_{red} - Verhältnisse³ liegen bei diesem Faziestyp nach BERNER [1984] etwa bei 1 - 5 (siehe Abb. 2.2.3). MORSE & BERNER [1995] präzisieren diese Aussage. Ihre Untersuchungen für verschiedene sedimentäre Körper zeigen auf, dass feinkörnige, silikaklastische, marine Sedimente durch C/S Verhältnisse von $2,8 \pm 0,8$ gekennzeichnet sind. Weitere Untersuchungen bestätigen diese Aussagen (ANDERSON ET AL. [1987], RAISWELL [1988], DAVIES ET AL. [1988], LIN & MORSE [1991]).

In nichtmariner Fazies ist Sulfat der limitierende Faktor, da reaktive Eisenminerale und C_{org} aus terrestrischen Einträgen ausreichend vorhanden sind. Es gibt keine Korrelation zwischen C_{org} und S_{red} (siehe Abb. 2.2.2). Die C_{org}/S_{red} -Verhältnisse liegen bei diesem Faziestyp bei 10 bis >30 (siehe Abb. 2.2.3). Die brackischen Bildungsbedingungen, als Übergang zwischen marinen und terrestrischen Verhältnissen, liegen somit im Bereich von 3 bis 10.

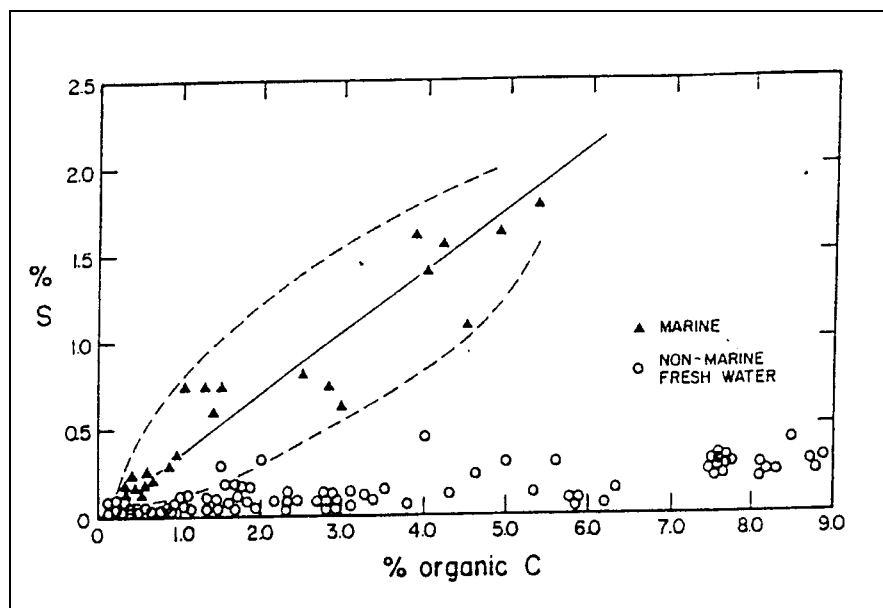


Abb. 2.2.2: C_{org}/S_{ges} - Verhältnisse aus BERNER [1984]

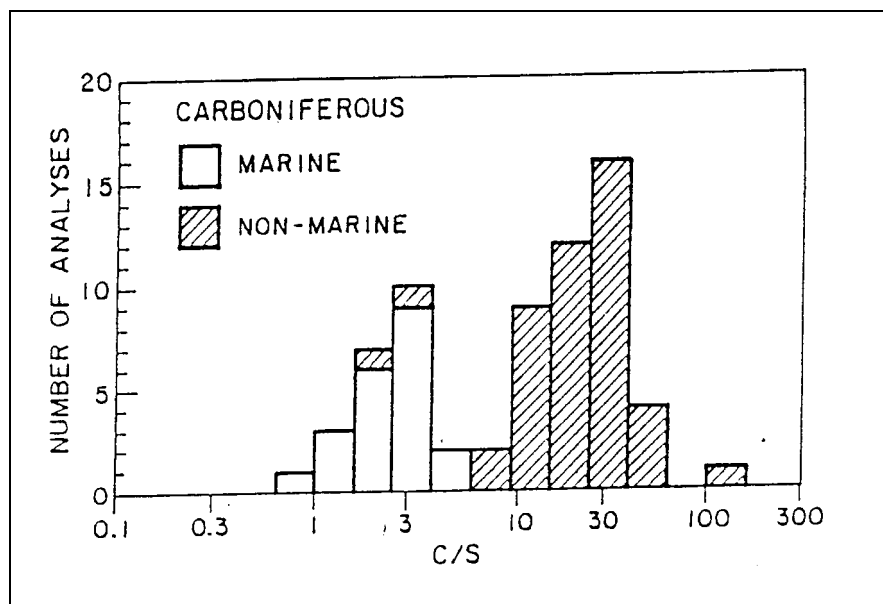


Abb. 2.2.3: Verteilung der C_{org}/S_{ges} - Verhältnisse für Sedimente des Britischen Karbons aus BERNER [1984]

In *euxinischer Fazies* ist reaktives Eisen der limitierende Faktor. Es ergibt sich daraus ein einheitliches Niveau der S_{red} -Gehalte. Es besteht keine Korrelation zwischen C_{org} und S_{red} . Zur Unterscheidung zwischen einer Eisen- und einer C_{org} -Limitierung führen RAISWELL & BERNER [1985] das DOP-Verhältnis (degree of pyritization) ein.

Zusammenfassend stellt das C_{org}/S_{red} -Verhältnis einen Paläosalinitätsindikator dar, sofern eine postgenetische Überprägung auszuschließen ist. Die fazielle Stellung der einzelnen geologischen Einheiten prägt entscheidend deren Pyritgehalte. Somit ist die Untersuchung der C/S-Verhältnisse der Sedimente wesentlich für das Verständnis der Pyritgehaltsverteilung und damit der Aciditätspotentiale im Abraum.

³ BERNER verwendet für die Betrachtungen S_{ges} Gehalte, weil der überwiegende Teil des Schwefels als S_{red} vorliegt.

2.3 Hydraulisches System „Kippe“

2.3.1 Kippenaufbau, Abbautechnologie und Modellvorstellung

Braunkohlenkippen, als anthropogene Sedimentationskörper, sind geprägt durch die Beschaffenheit der abraumrelevanten Vorfeldsedimente und die angewandte Tagebautechnologie. Es ist somit wesentlich, die unterschiedlichen geologischen Verhältnisse des Lausitzer und des Mitteldeutschen Reviers sowie auch Differenzen innerhalb der Reviere zu beachten. Die unterschiedlichen Abbau- und Verkippungstechnologien der einzelnen Tagebaue sind ebenfalls zu berücksichtigen. Für eine Vielzahl großer ostdeutscher Tagebaue erfolgte die Förderung des anstehenden Abraums mittels Abraumförderbrückentechnik (AFB). Für die daraus resultierenden Abraumförderbrückenkippen (AFBK) lässt sich, auf Grund der Technologie, die flächenhafte Verteilung der verstürzten Sedimente gut nachvollziehen. Demgegenüber ist für Absetzerkippen (ASK) die flächenhafte Zuordnung der Vorfeldsedimente schwieriger. Abb. 2.3.1 zeigt schematisch den grundsätzlichen Kippenaufbau einer AFB-Kippe am Beispiel Jänschwalde.

Kippenliegendes

Der im Liegenden des tiefsten gebauten Flözes zumeist anstehende Liegendenschluff wird auf Grund geotechnischer Belange teilweise aufgerissen (Liegendwasserentspannung).

Vorkippe

Vorkippen sind für Tagebaue mit kippenseitigem AFB-Stützfuß relevant. Um für den Stützfuß einen geotechnisch sicheren Stand zu gewährleisten, wurde im oberen Teil, geringer bindiges, zumeist quartäres Material verstürzt. Der untere Teil ist, für Tagebaue mit Direktversturz, durch die zwischen den gebauten Flözen anstehenden Zwischenmittel geprägt. Es handelt sich dabei zumeist um stark kohlehaltige Tertiärsubstrate.

Förderbrückenkippe (AFBK)

Prägend ist der rippen- und scheibenartige Aufbau dieses Kippenteils. Die vertikale Verteilung der Vorfeldsubstrate innerhalb des Kippenkörpers ist abhängig von der Fahrweise der Abraumgewinnung/-verkippung. Die Abraumförderung wurde zumeist über das gesamte Profil gefahren. Es erfolgte somit keine selektive Fahrweise zur Trennung der Quartär- und Tertiärsubstrate.

Absetzerkippe (ASK)

Die ASK stellt eine Abdeckung der AFBK dar. Der Abraum für die ASK wurde über Zug- oder Bandbetrieb zugeführt und mittels Absetzer verstürzt. Die ASK beinhaltet, technologisch bedingt, vor allem Zwischenmittel- (für Tagebaue ohne Direktversturz) und Vorschnittmaterial sowie teilweise auch Aufschlussmassen anderer Tagebaue. An einigen Standorten kann ein langer Zeitraum zwischen Versturz der AFBK und der ASK gelegen haben.

KAUBISCH [1986] zeigt auf, dass der Vermischungsgrad der resultierenden Kippsubstrate entscheidend von der angewandten Technologie abhängt. Tab. 2.3.1 dokumentiert die Mischungskoeffizienten für den gesamten Tagebauprozess, wobei ein Koeffizient von 1 für eine ideale Mischung steht. Es wird deutlich, dass die AFB-Technologie sowie die Gewinnung mittels Eimerkettenbagger zu stark vermischten Substraten führt. Bezüglich der

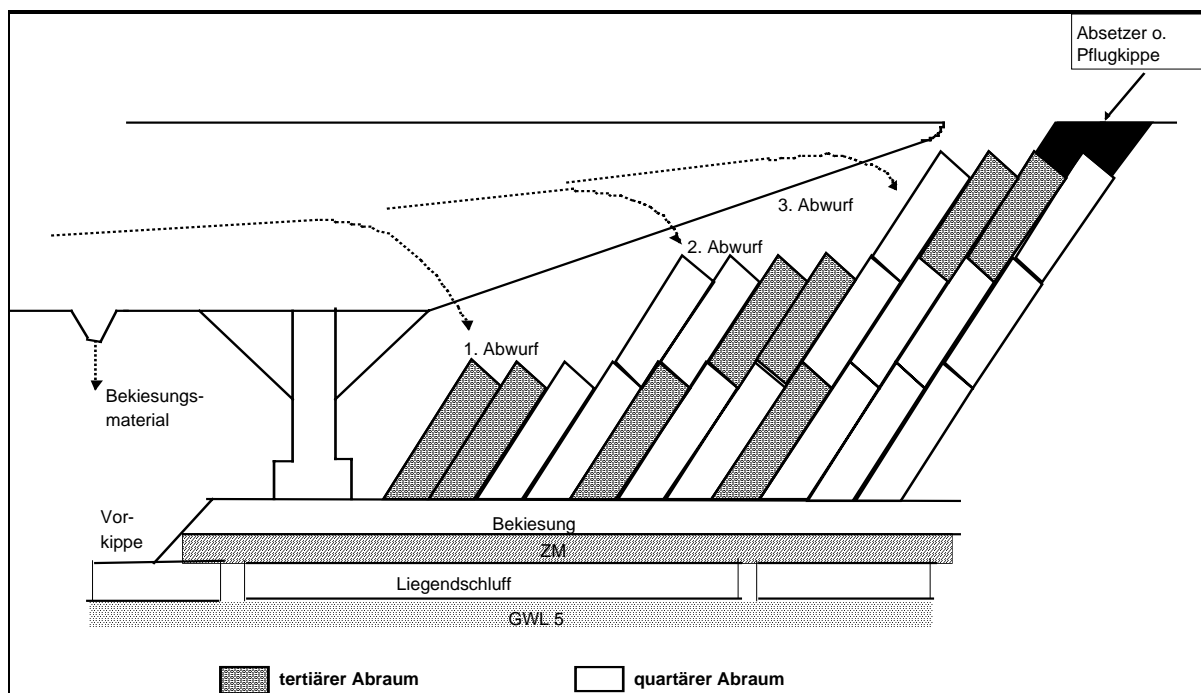


Abb. 2.3.1 Schematische Darstellung der Lagerungsverhältnisse in AFB-Tagebauen am Beispiel Jänschwalde

AFB-Technologie ergibt sich für bindige Substrate eine Abnahme der Mischungskoeffizienten. Dies ist auf Entmischungserscheinungen beim Versturz zurückzuführen (LEIBINGER [1964]). MATSCHAK [1969 A,B] zeigt ebenfalls auf, dass es für bindige Mischböden zur Ansammlung von Schluff-/Tonaggregaten am Böschungsfuß kommt. Dieser Prozess beruht auf Pseudokornbildung (KAUBISCH [1986]). Beim Versturz rolliger Substrate kommt es zur Ansammlung der grobkörnigeren Materialien an der Kippenbasis. Weiterhin sind Aufprallbereiche innerhalb der Rippen zu benennen, in denen die Materialien verdichtet werden MATSCHAK [1969 A,B].

Tab. 2.3.1 Mischungskoeffizienten verschiedener Tagebautechnologien (KAUBISCH [1986])

Tagebautechnologie	Mischungskoeffizient bei rolligem Abraum	Mischungskoeffizient bei bindigem Abraum
AFB Typ F 60	0.90	0.80
AFB Typ F 34, F 45	0.85	0.70
Eimerkettenbagger-Zug-Absetzer	0.80	0.80
Eimerkettenbagger-Band-Absetzer	0.80	0.60
Schaufelradbagger-Zug-Absetzer	0.20	0.20
Schaufelradbagger -Band-Absetzer	0.30	0.20

DOHRMANN [2000] weist auf die Klassierung der verkippten Substrate an lange offenliegenden, nicht planierten Kippenoberflächen hin. Es kommt zur Ansammlung von Schluff-/Tonanteilen in den Rippentälern, aus denen sich in diesen Bereichen stellenweise zentimeterstarke Kolmationskrusten bilden.

SCHOLZ & KAUBISCH [1986] weisen an Hand von Tritiumuntersuchungen nach, dass es vornehmlich in den Rippentälern zur Versickerung von Wasser kommt. Für die von ihnen untersuchte Kippe im Lausitzer Revier zeigt sich ein Unterschied in den Versickerungsraten zwischen Rippentälern und Rippen um den Faktor 6. Diese Aussage wird gestützt durch

BUCZKO [1999], der nachweist, dass die ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeiten der „Abrollbereiche“ (Rippentäler) um den Faktor 2 bis 5 größer sind als die der „Aufprallbereiche“ (Rippen).

In Bezug auf die Erkundung der hydrogeologischen Parameter von Kippen mittels geoelektrischer Verfahren zeigt JACOB [1984], dass diese Verfahren vor allem für bindige Mischbodenkippen nicht geeignet sind. Auch die Ermittlung der Wassersättigungen kann nicht exakt erfolgen. Dies beruht unter anderem auf der Überprägung der spezifischen elektrischen Widerstände infolge Aufmineralisation des Porenwassers (Pyritverwitterung und Folgereaktionen). Die aus diesem Grund erhöhten elektrischen Leitfähigkeiten der Poren- und Kippengrundwässer lassen keinen Schluss auf die Wassersättigung zu (BAF [1984]). Auch Georadar Messungen lassen keinen direkten Schluss auf die hydraulischen Eigenschaften der Kippenmaterialien zu (BUCZKO [1999]). Die durch Messungen im Tagebau Schlabendorf-Nord (Niederlausitz) von PETZOLD und GROßE (in BUCZKO [1999]) ermittelten Strukturen der Georadar-Reflexionskoeffizienten sind nicht identisch mit den hydraulischen Strukturen des Kippenmassivs.

Die angeführten Phänomene machen deutlich, wie komplex und „strukturiert heterogen“ die entstandenen Kippenkörper im Detail sind. Dies gilt vorrangig für Bereiche, in denen die zur Verkippung gelangten Vorfeldsubstrate stark variierten. Der Vorgang der Wiederaufsättigung der Kippen mit Grundwasser ist demzufolge sehr komplex. Bei aller Heterogenität im Detail ist allerdings für die AFBK festzuhalten, dass sie bei großräumiger Betrachtungsweise eine Homogenisierung der verstürzten Vorfeldsedimente darstellt. Deshalb sind Punktinformationen (Bohrungen etc.) mit flächenhaften Aussagen zu untersetzen. Da, wie oben ausgeführt, die Erkundung der hydraulischen Parameter durch geophysikalische Verfahren jedoch stark eingeschränkt ist, kommt der indirekten Bestimmung der hydraulischen Kennwerte, an Hand der Bilanzierung der Vorfeldbeschaffenheit eine wichtige Bedeutung zu. KAUBISCH [1986] entwickelte eine Methodik zur Prognose der wassergesättigten Durchlässigkeitsbeiwerte an Hand der Bestimmung der mittleren Kornzusammensetzung des Kippenmischsubstrates. Dazu ist die Kenntnis der Schichtmächtigkeiten der einzelnen kippenrelevanten geologischen Einheiten im Vorfeld und deren Körnungsverhältnisse notwendig. Es wurde dazu eine Vielzahl von Durchströmungsversuchen an gestörtem Probenmaterial durchgeführt und die Durchlässigkeitsbeiwerte dieser Proben bestimmt. Gleichzeitig erfolgte die Körnungsanalyse der durchströmten Materialien (siehe auch KAUBISCH & FISCHER [1984A], [1984B], [1985] und BAF [1984]). Es wurden Kippensubstrate der Tagebaue Jänschwalde, Nochten und Espenhain untersucht. Die Regressionsanalyse zeigte für Proben mit erhöhtem Pelitanteil ($< 0,063$ mm) einen sehr engen funktionalen Zusammenhang zwischen Pelitgehalt und Durchlässigkeitsbeiwert auf. Die ausgewiesene Formel (Gl. 2.3.2) wies einen Korrelationskoeffizienten von $r = 0,95$ auf. Dabei fügten sich die bearbeiteten Proben, unabhängig von geologischer Stellung, Beprobungsort und Ungleichförmigkeitsgrad in das Funktionsbild ein.

Folgende Vorgehensweise leitet sich zur flächenhaften Ermittlung von mittleren k_f -Werten der Kippsubstrate nach KAUBISCH [1986] ab :

1. Ermittlung der mittleren Kornzusammensetzung an jedem Rasterelement, indem Gl. 2.3.1 für jede betrachtete Korngrößenklasse zu lösen ist.

$$\text{frac } KG_{\text{Kippe}} = \sum_{j=1}^n (\text{frac } m_j * \text{frac } KG_j) \quad (\text{Gl. 2.3.1})$$

$\text{frac } KG_{\text{Kippe}}$ fraktioneller Anteil der Korngrößenklasse auf der Kippe (im Rasterelement)

$\text{frac } m_j$ fraktioneller Anteil der Schicht j an der Gesamtmächtigkeit im Vorfeld

$\text{frac } KG_j$ fraktioneller Anteil der Korngrößenklasse innerhalb der Schicht j

2. Bestimmung der k_f - Werte nach folgenden Formeln:

Pelitanteil(P) > 10% und < 60 %

$$k_f = 10^z \quad \text{mit } z = 0,0005 * P^2 - 0,12 * P - 3,59 \quad (\text{Gl. 2.3.2})$$

Pelitanteil(P) < 10% und U < 4,2 (nach BEYER [1964])

$$k_f = d_{10}^2 * (0,01182 - 0,0047 \log U) \quad (\text{Gl. 2.3.3})$$

Pelitanteil(P) < 10% und U > 4,2 (nach BEYER [1964])

$$k_f = d_{10}^2 * (0,01107 - 0,0035 \log U) \quad (\text{Gl. 2.3.4})$$

3. Bestimmung der n_e Werte

$$n_{\text{eff}} = 0,05 * \log k_f + 0,4 \quad (\text{Gl. 2.3.5})$$

2.3.2 Prozess der Wiederaufsättigung der Kippen

MATSCHAK & WALDE [1968], [1970] vergleichen Versickerungsraten aus Lysimeteruntersuchungen mit Anstiegen in zugehörigen Kippengrundwassermessstellen (KGM). Dies erfolgt für die Kippe Kleinleipisch (Niederlausitzer Revier) und Espenhain (Mitteldeutsches Revier). Für Kleinleipisch werden für den Betrachtungszeitraum (11/1963 – 1/1967) folgende Kenngrößen dokumentiert: Versickerung = 800 mm; $n_{\text{eff}} = 0,35$; KGM-Anstieg = 3370 mm. Für Espenhain werden für den Betrachtungszeitraum (11/1963 – 4/1965) folgende Kenngrößen dokumentiert: Versickerung = 127 mm; $n_{\text{eff}} = 0,18$; KGM-Anstieg = 700 mm. Die sich für den Standort Kleinleipisch ergebende Diskrepanz zwischen Versickerung und GWN ist den Autoren kaum erklärlich und wird durch laterale Zuflüsse begründet.

BUCZKO [1999] führte umfangreiche Modellierungen für den Wasser- und Stofftransport eines 22 * 29 m großen 2D-vertikalen Ausschnitts der AFBK Schlabendorf Nord (Niederlausitz) durch. Diese sind auf Messungen hydraulischer und bodenphysikalischer Größen gestützt. Der Autor führt aus, dass die Wasserflüsse durch die ca. 45° geneigten Kippstrukturen kanalisiert werden und bevorzugt parallel zur geneigten Schichtung erfolgen. Weiterhin wird festgestellt, dass der Wasserfluss eher durch deterministische Ansätze, welche die in Kap. 2.3.1 angesprochenen Strukturen berücksichtigen, abgebildet werden kann, als durch geostatistisch generierte Verteilungen der Parameter.

RINKER [2001] untersucht intensiv die Versickerungsrate für die Kippe Espenhain. Dies erfolgt an zwei ca. 40 Jahre alten Standorten mit unterschiedlicher Nutzung (Wald und Grünbrache, siehe auch RINKER in TUBAF [2000]). An Bodenintensivmessflächen wurden Klima- und Bodenwasserhaushaltsgrößen zeitlich hochauflösend erfasst. Die Berechnung der Versickerung erfolgte zum einen nach RENGER & STREBEL [1980], zum anderen mittels des Bodenwasserhaushaltsmodells WASMOD (REICHE [1991]). Es ergeben sich, bei ca. 570

mm/a Niederschlag (NDS), Sickerraten von 10 - 25 mm/a (Wald) bzw. 30 - 50 mm/a (Grünbrache). Nach weiterer Validierung des Modells an Zeitreihen der Lysimeterstation Brandis (Kippenlysimeter), erfolgt eine flächenhafte Berechnung der Versickerungsraten für den Istzustand der Kippe Espenhain. Dabei werden die Einflussgrößen Bodenart, Bodennutzung und Relief durch Verkopplung von WASMOD mit einem GIS berücksichtigt. Für „Laubwald-/ Landwirtschaftsflächen“ werden 40 – 60 mm/a, für Nadelwald 0 – 20 mm/a und für nicht rekultivierte Bereiche mehr als 150 mm/a Versickerungsrate ausgewiesen. Höchste Sensitivitäten besitzen dabei die Größen „Klima“ und „Nutzung“. Der Parameter „Bodenart“ tritt in seiner Bedeutung zurück.

KNOCHE ET AL. [1999] dokumentieren ähnliche Untersuchungen für das Niederlausitzer Revier. Es werden 4 Kiefernstandorte und 3 Eichenstandorte unterschiedlichen Alters untersucht. Bei ähnlichen Substrateigenschaften (meliorierte Kipp-Kohlelehmsande) aller 4 Standorte zeigt sich für den 2 jährigen Kiefernbestand eine Versickerungsrate von 221 mm/a (560 mm/a NDS). Die drei 16 – 34 jährigen Kiefernstandorte zeigen hingegen Versickerungsraten von 50 – 77 mm/a (bei 541 – 634 mm NDS). Der 2 jährige Eichenbestand weist eine Versickerungsrate von 314 mm/a auf (NDS = 645 mm/a), während für die 25 bzw. 37 jährigen Standorte \approx 50 mm/a Versickerung ausgewiesen werden.

BRÄUNIG [2000] untersucht die Versickerungsrate auf forstlich rekultivierten Kippen. Es werden 100 Referenzflächen des Mitteldeutschen Reviers (Leipzig – Halle - Bitterfeld) bodenkundlich, bodenphysikalisch charakterisiert. Sie weisen dabei unterschiedliche Alter (Verkipfung 30 – 100 a, Aufforstung 20 – 80 Jahre), Boden- und Nutzungsarten auf. Die Berechnung der Sickerwasserabflüsse erfolgt mit dem Speicherbilanzierungsmodell – SIMPLE (HÖRMANN [1997]). Die Ergebnisse zeigen, dass in Abhängigkeit vom Standort, Sickerwasserraten zwischen 0 – 450 mm/a (Extremwerte) möglich sind. Wobei sich die Spannweite bei geschlossener Vegetationsdecke auf 0 – 240 mm/a (Extremwerte) verringert. BRÄUNIG führt an, dass für nFK⁴ von 30 – 180 mm, verbunden mit Durchwurzlungstiefen \leq 60 cm, kaum Unterschiede zwischen den Sickerwasserraten von Wald – und Landwirtschaftsflächen bestehen. Bei nFK > 180 mm zeichnen sich Waldbestände durch tiefere Durchwurzelung und höhere Interzeption aus, was zu geringeren mittleren Sickerwassermengen von 0 – 50 mm/a führt. Die Entwicklung der Sickerwasserabflüsse wird an Hand vergleichbarer Referenzflächen unterschiedlichen Alters dokumentiert. Die mittlere Sickerrate sinkt von 300 mm/a zu Rekultivierungsbeginn auf 50 mm/a nach 100 Jahren. Es ergibt sich dabei folgende Sensitivitätsabfolge: „Jährliche Klimavariabilität >> Bewuchs (Nutzung) > Bodenart >> regionale Klimavariabilität“. Alle drei Untersuchungen führen somit zu ähnlichen Ergebnissen. Frisch geschüttete, kaum bewachsene Kippenstandorte besitzen vergleichsweise hohe Versickerungsraten, diese sinken bei Bewuchs deutlich ab. Die Nutzung der Böden besitzt einen wesentlichen Einfluss auf die Versickerungsraten. Waldstandorte besitzen bei hohen nFK sehr niedrige Versickerungsraten.

⁴ nFK = nutzbare Feldkapazität = Wasseranteil der zwischen den Druckstufen pF 1,8 – 4,2 entwässerbar ist. Dabei ist pF= 1,8 = 10^{1,8} cm WS \approx 0,63 m WS und pF= 4,2 = 10^{4,2} cm WS \approx 158,5 m WS. Eine nFK von 30 mm = 3 Vol % und eine nFK von 180 mm = 18 Vol %.

Für die bereits aufgezeigte Diskrepanz zwischen Versickerungsraten und Anstiegen in KGM ist zuerst die örtliche Trennung zwischen Versickerung aus der Wurzelzone und Grundwasserneubildung/-wiederanstieg im Liegenden der Kippe festzuhalten. Zur Klärung des Widerspruchs werden in CHRISTOPH [1999] und DOHRMANN [2000] prinzipielle Modellierungen zur Aufsättigung der Kippen durchgeführt.

Die Modellierungen erfolgten mit dem FEM-Programm FEFLOW (DIERSCH [1998]), dessen Grundlage die RICHARDS-Gleichung darstellt. Die Autoren weisen auf, dass es zunächst zur Umverteilung des zum Verkippungszeitpunkt enthaltenen beweglichen Porenwassers kommt. In dieser Anfangsphase besitzt die Versickerungsrate der oberen Bodenzone nur eine geringe Bedeutung bezüglich des Grundwasserwiederanstiegs. Die Autoren benennen als wesentliche Faktoren die Geometrie (Rippenstrukturen) und die k_f - Wertverteilung der Kippe. Sie führen dabei die schnellen Anstiege in den KGWM auf aushaltende, ca. 45 ° geneigte „Drainagezonen“ zurück. Das Vorhandensein solcher großräumig aushaltender Drainagesysteme, beruhend auf Klassierungsprozessen, ist zumindest als strittig anzusehen. Da weiterhin bezüglich der Kapillardruck- Sättigungsbeziehungen sehr vereinfachte Modellannahmen getroffen wurden, sollen die prinzipiellen Modellierungen von CHRISTOPH und DOHRMANN durch eigene Modellbetrachtungen in Kap. 4 unteretzt werden.

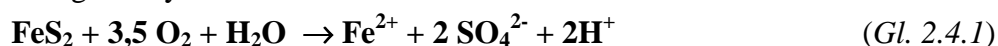
2.4 Geochemisches System „Kippe“

2.4.1 Pyritverwitterung

Die Eisendisulfidverwitterung ist seit den 60er Jahren umfassend in der nordamerikanischen Literatur untersucht worden. Die Arbeiten konzentrierten sich dabei auf die Pyritverwitterung im Zusammenhang mit der Kohlegewinnung sowie auf die Prozesse in stark Metallsulfidhaltigen Tailings. Als grundlegende Arbeit im Bezug auf die chemisch ablaufenden Prozesse ist SINGER & STUMM [1970] anzusehen. Umfassende Betrachtungen zur laborativen Kinetik und zum chemischen Grundverständnis sind sehr zahlreich (z.B. LOWSON [1982], MC KIBBEN & BARNES [1986], DE HAAN [1991], NICHOLSON [1994], EVANGELOU [1995]). Für die Problematik der Disulfidoxidation in deutschen Braunkohletagebauen besitzen die Arbeiten im Rheinischen Revier grundlegenden Charakter (WISOTZKY [1994]). Ebenfalls zu erwähnen sind die von DYBEK & SCHWAN [1988] getroffenen ersten Abschätzungen zu Auswirkungen der Pyritverwitterung auf die Grundwasserqualität in den Braunkohle-Bergbaugebieten der DDR.

Die thermodynamische Stabilität der Eisendisulfidverbindungen beschränkt sich auf einen relativ schmalen Bereich im Eh-pH-Diagramm (siehe Abb. 2.4.1).

Wie Gl. 2.4.1 zeigt, kommt es bei Vorhandensein von Wasser und Sauerstoff zur Verwitterung des Pyrits⁵.



Diese Reaktion ist nach SINGER & STUMM [1970] als initiale Reaktion („Initiator reaction“) des Verwitterungsprozesses zu verstehen. GOLDHABER [1983] erklärt diesen initialen Schritt mit der Anlagerung von $\text{O}_{2(\text{aq})}$ an protonierte Oberflächen. Die gebildeten Fe^{2+} -Ionen werden

⁵ Im weiteren Text soll unter dem Begriff „Pyrit“ die Gesamtheit der disulfidischen Eisenminerale verstanden werden.

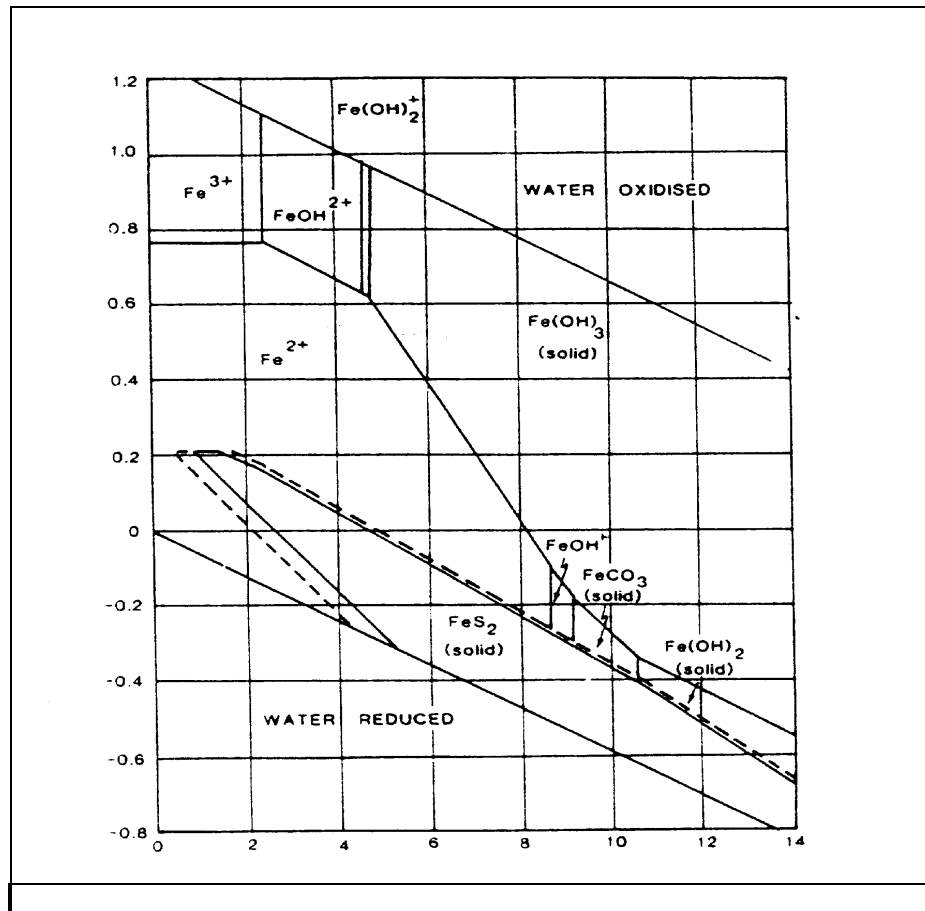
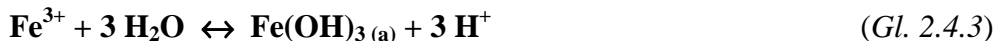


Abb. 2.4.1 Eh-pH Diagramm - Stabilitätsfelder der Eisenspezies; x-Wert = pH, y-Wert = Eh [V] (nach HEM [1961] in DE HAAN [1991])

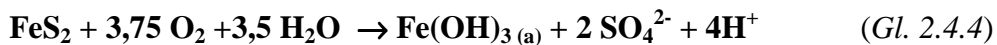
nach Gl. 2.4.2 zu Fe^{3+} oxidiert.



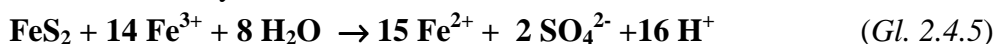
Als dritter Schritt (Gl. 2.4.3) schließt sich die Ausfällung von Eisenhydroxid am Pyritkorn an.



Diese 3 Stufen der Pyritverwitterung (Gl. 2.4.1 bis 2.4.3) lassen sich zu der folgenden Nettogleichung zusammenfassen (z.B. DYBEK & SCHWAN [1988]):



Dabei werden bei Umsetzung von einem Mol Pyrit vier Mol H^+ -Ionen freigesetzt. Diese Nettogleichung (Gl. 2.4.4) hat einen pH-abhängigen Gültigkeitsbereich (DYBEK & SCHWAN [1988], NICHOLSON [1994]). Bei pH-Werten < 3 bis 3,5 kommt es nicht mehr zur $\text{Fe(OH)}_{3(a)}$ Bildung. Somit fungieren die nicht mehr nach Gl. 2.4.3 umgesetzten Fe^{3+} Ionen als Oxidationsmittel. Die Pyritoxidation vollzieht sich nun nach Gl. 2.4.5.



Anschließend wird das gebildete Eisen (II) nach Gl. 2.4.2 wieder zu Eisen (III) oxidiert. Es entsteht somit ein Kreislauf (siehe Abb. 2.4.2). DYBEK & SCHWAN [1988] fassen diesen zweiten Verwitterungsweg zu einer Nettogleichung zusammen, welche der Gleichung 2.4.1, also der Initiatorreaktion entspricht.

Insgesamt ist zu beachten, dass der Verwitterungsprozess des Pyrits im Detail noch wesentlich komplexer ist. Der Gesamtprozess erfolgt über eine Vielzahl von Zwischenstufen,

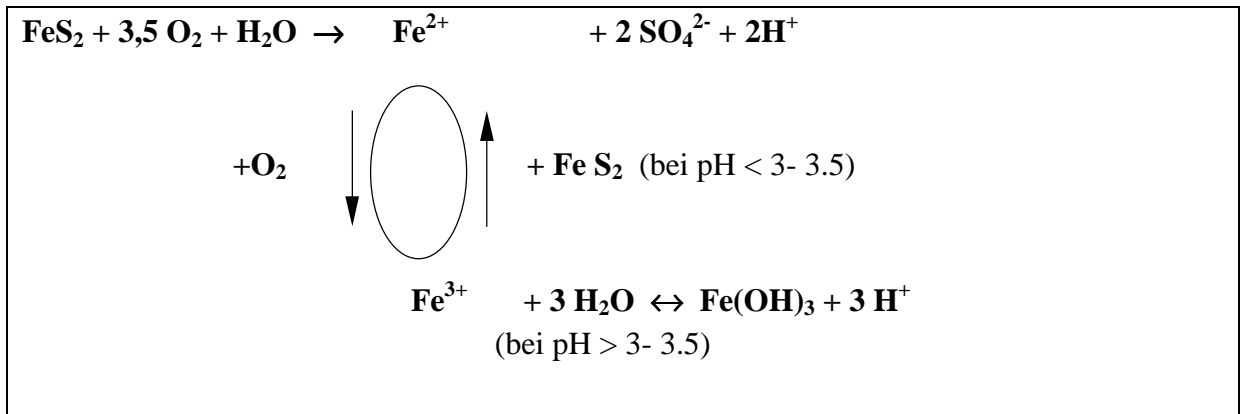


Abb. 2.4.2 Verwitterungskreislauf des Pyrits (nach SINGER & STUMM [1970])

da bei der Umwandlung von S_2 (-1) in FeS_2 zu 2 S (+6) in SO_4^{2-} 14 Elektronen zu transferieren sind. Die dabei entstehenden Schwefelspezies (z.B. Thiosulfate – $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$, Polythionate – $\text{S}_n\text{O}_6^{2-}$ - siehe GOLDHABER [1983]) sind in natürlichen Wässern zumeist von untergeordneter Bedeutung, da sie schnell umgewandelt werden (APPELO & POSTMA [1996]).

Der oben beschriebene Wechsel der Verwitterungswege lässt sich sehr gut an Hand des „shrinking core“-Ansatzes (schrumpfende Körner) erklären (siehe Abb. 2.4.3). Nettogleichung Gl. 2.4.4 belegt das Ausfallen von amorphem Eisenhydroxid⁶ am verwitterten Pyritkorn. Es bildet sich somit eine „Verwitterungshaut“ („reaction coating“) aus, welche die Diffusion des aquatischen Sauerstoffes an die Oberfläche des unverwitterten Pyritkorns immer stärker behindert. Fallen die pH-Werte unter das oben angesprochene Niveau von 3 bis

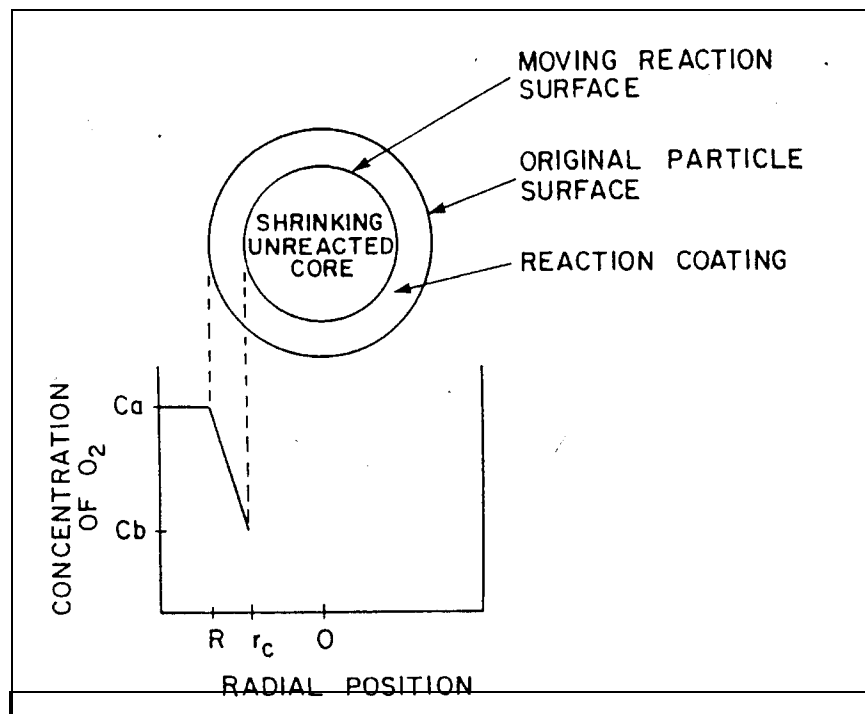


Abb. 2.4.3: „Shrinking core“-Modell aus NICHOLSON [1994] - Abnahme des Pyritkorn-durchmessers durch Verwitterung, Aufbau eines „reaction coating“ (Darstellung des O_2 - Gradienten zwischen Porenwasser und Pyritkornoberfläche)

⁶ Genauer kommt es zur Ausfällung einer Mischung unterschiedlicher Sekundärminerale ($\text{Fe(OH)}_{3(a)}$, Eisensulfate, Gips etc.) am Korn.

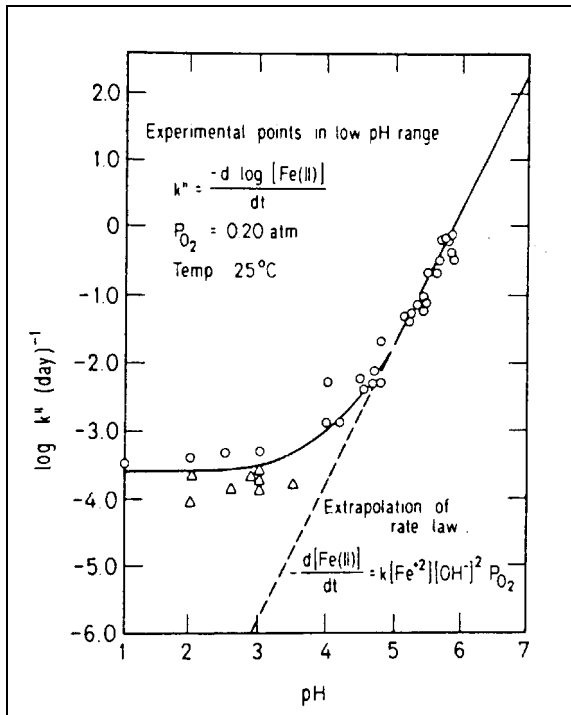


Abb. 2.4.4 Oxidationsraten für Eisen(II) zu Eisen(III) als Funktion des pH – Wertes (aus APPELO & POSTMA [1996] nach SINGER & STUMM [1970])

3,5, kommt es nicht mehr zur Bildung von $\text{Fe}(\text{OH})_{3(a)}$ sondern zur schrittweisen Auflösung der $\text{Fe}(\text{OH})_{3(a)}$ -Phasen. Damit übernehmen die Fe^{3+} -Ionen die Rolle des Oxidationsmittels. Dieser Übergang in den Verwitterungsmechanismen ist als fließender Prozess zu verstehen. Das Bestehen dieser Coatings und ihre Auswirkungen auf die Umsetzungsraten werden durch die Untersuchungen von NICHOLSON [1990] und ZHANG & EVANGELOU [1996] unterstrichen. NICHOLSON [1994] fasst frühere Untersuchungen zusammen, die einen linearen Zusammenhang zwischen Pyrit-Umsatzrate und verfügbarer Oberflächengröße der Pyrite aufzeigen.

Für beide Verwitterungswege besteht eine entscheidende Abhängigkeit von der Verfügbarkeit des Sauerstoffes (Gl. 2.4.2). SINGER & STUMM [1970] weisen nach, dass diese Reaktion die Rate der Pyritverwitterung limitiert. Abb. 2.4.4 zeigt die von ihnen ermittelte Abhängigkeit dieser Reaktion vom pH Wert auf.

Als wesentliche Arbeit zur Kennzeichnung der Kinetik für die beiden oben angesprochenen Verwitterungsmechanismen ist WILLIAMSON & RIMSTIDT [1994] anzusehen. Die Autoren führen eigene intensive Laboruntersuchungen zur Verwitterung mittels Fe^{3+} (vgl. Gl. 2.4.5) durch und werten in der Literatur dokumentierte Versuche bezüglich der Umsetzung mittels $\text{O}_{2(aq)}$ (vgl. Gl. 2.4.1 – 2.4.4) umfassend aus. Weiterhin wird die Abhängigkeit der Umsatzrate von SO_4^{2-} , Cl^- -Konzentrationen und der Ionenstärke allgemein untersucht. Diese Abhängigkeiten erweisen sich als vernachlässigbar. Die Autoren weisen nach, dass im Gegensatz zu MOSES ET AL. [1987] (Fe^{3+}) nicht von einem bevorzugten Verwitterungsweg ausgegangen werden kann. Der Prozess ist differenzierter zu sehen. Für die Experimente mit $\text{O}_{2(aq)}$ liefert die Regression der Versuchsergebnisse von SMITH ET AL. [1970], MC KIBBEN [1984], NICHOLSON [1988] und MOSES & HERMAN [1991] ein Umsatzraten-Gesetz nach Gl. 2.4.6. Dieses hat nach WILLIAMSON & RIMSTIDT [1994] einen Gültigkeitsbereich für pH 2 bis 10 und erklärt die Versuchsergebnisse für $\text{O}_{2(aq)}$ Konzentrationen zwischen 10^{-6} und 10^{-2} mol/ kg Wasser.

$$r(\text{O}_{2(aq)}) [\text{mol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}] = 10^{-8.19(\pm 0.1)} \cdot \frac{m_{\text{O}_{2(aq)}}^{0.5(\pm 0.04)}}{m_{\text{H}^+}^{0.11(\pm 0.01)}} \quad (\text{Gl. 2.4.6})$$

Die Verwitterungsreaktion mittels Fe^{3+} wurde von den Autoren im relevanten pH-Bereich von 0,5 – 3 untersucht. Es zeigt sich, dass zwei verschiedene Umsatzraten-Gesetze zu unterscheiden sind. Bei Anwesenheit von $\text{O}_{2(aq)}$ ergibt sich Gl. 2.4.7, bei Abwesenheit Gl. 2.4.8.

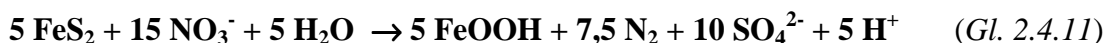
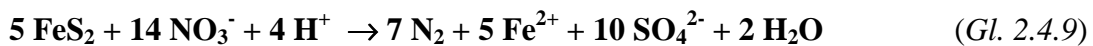
$$r \left(Fe_{O_{2(aq)=0}}^{3+} \right) \left[mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1} \right] = 10^{-8.58(\pm 0.15)} \cdot \frac{m_{Fe^{3+}}^{0.3(\pm 0.02)}}{m_{Fe^{2+}}^{0.47(\pm 0.03)} \cdot m_{H^+}^{0.32(\pm 0.04)}} \quad (Gl. 2.4.7)$$

$$r \left(Fe_{O_{2(aq)>0}}^{3+} \right) \left[mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1} \right] = 10^{-6.07(\pm 0.57)} \cdot \frac{m_{Fe^{3+}}^{0.93(\pm 0.07)}}{m_{Fe^{2+}}^{0.4(\pm 0.06)}} \quad (Gl. 2.4.8)$$

Ein weiterer wichtiger Effekt ist die mikrobielle Katalyse der Gl. 2.4.2. Im pH Wertbereich < 4 beschleunigt die acidophile Bakterienart *Thiobacillus ferrooxidans*, gegenüber abiotischer Betrachtungsweise, die Reaktion um ein Vielfaches. Abb. 2.4.4 zeigt den Vergleich der von SINGER & STUMM [1970] für den pH Bereich < 4 extrapolierten Raten mit den tatsächlich gemessenen Raten. Die Umsatzraten sinken im pH Bereich < 4 nicht weiter ab, was durch die mikrobielle Katalyse des Prozesses zu erklären ist.

TAYLOR ET AL. [1984] führten S/O-Isotopenmessungen an Pyrit-Verwitterungsexperimenten (pH = 2) durch. Diese Experimente erfolgten sowohl unter sterilen Bedingungen, als auch mit *Thiobacillus ferrooxidans*. Die Autoren ziehen an Hand der Isotopenfraktionierung für ¹⁸O im System SO₄ – H₂O den Schluss, dass in wassergesättigten Sedimentkörpern (anoxisch) die mikrobiologisch katalysierte Verwitterung eine untergeordnete Rolle spielt. Diese erlangt eine höhere Bedeutung für gut belüftete Standorte.

Neben der Verwitterung von Eisendisulfiden über O_{2(aq)} und Fe³⁺ wird in der Literatur der Mechanismus der Oxidation mittels Nitrat als Elektronendonator aufgezeigt und diskutiert (z.B. APPELO & POSTMA [1996]). Die Teilprozesse (Gl. 2.4.9 und 2.4.10) laufen vergleichbar der Oxidation über O_{2(aq)} ab und ergeben für den Fall der kompletten Fe²⁺-Oxidation die Nettogleichung Gl. 2.4.11.



Dieser Prozess führt neben den Phänomenen der Verwitterung (pH fällt, SO₄²⁻-Konzentration steigt) zur Ausbildung von Stickstoff. Die praktische Relevanz für diesen Verwitterungsweg besteht für Standorte im Gewachsenen Gebirge, die durch massiven Nitratintrag aus der Landwirtschaft gekennzeichnet sind („Fuhrberger Feld - Niedersachsen“ KÖLLE ET AL. [1983], BÖTTCHER ET AL. [1985] ; „Bocholt – Niederrheinische Bucht“ LEUCHS [1985]; „Rabis Grundwasserleiter - Jütland“ POSTMA ET AL.[1991]; „Naizine - Bretagne“ PAUWELS ET AL. [1998], [2001]). Dabei spielt die mikrobielle Katalyse dieser Reaktionen eine wesentliche Rolle. Gl. 2.4.9 wird durch *Thiobacillus denitrificans* katalysiert (JUSTIN & KELLY [1978 A,B] in GOULD ET AL.[1994] sowie KÖLLE [1987] in APPELO & POSTMA [1996]), während die Katalyse der Reaktion Gl. 2.4.10 durch *Gallionella ferruginea* erfolgt (GOUY ET AL. [1984] in APPELO & POSTMA [1996]). Die Relevanz der Pyritoxidation mittels Denitrifikation ist für AMD- Standorte im Vergleich zu den anderen Oxidationswegen als gering einzustufen.

2.4.2 Pufferungsreaktionen- und Sekundärmineralbildungen

Die Pyritverwitterung ist eingebettet in eine Vielzahl anderer hydrogeochemischer Prozesse. Einerseits kommt es zur Pufferung der freigesetzten Protonen. Andererseits vollziehen sich

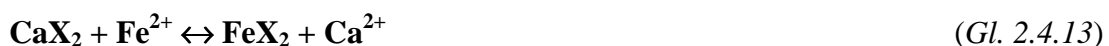
Sekundärmineralbildungen auf Grund der Übersättigung der Bodenlösung in Bezug auf z.B. SO_4^{2-} , Fe^{2+} , Ca^{2+} und HCO_3^- . Die wesentlichen Pufferungsreaktionen sollen im Folgenden in kurzer Form aufgezeigt werden. Genauere Erläuterungen finden sich bei SCHWERTMANN ET AL. [1998] bzw. RITCHIE [1994].

Karbonatpuffer :



Die Nettopufferungswirkung beschränkt sich auf Erdalkalikarbonate, da die Umsetzung von Sideriten zur Erhöhung der Eisengehalte im Porenwasser führt. Weiterhin kommt es zu einer echten langfristigen Pufferung nur dann, wenn die Pufferung in einem offenen System abläuft und das entstehende $\text{CO}_{2(\text{g})}$ irreversibel entweicht. Der Hauptpufferbereich des Prozesses liegt, in saurer Richtung, bei pH Werten von 6,5 – 6. Bei Berücksichtigung der Pufferreaktion des im Porenwasser gelösten HCO_3^- erfolgt eine Pufferung bis pH = 4,5. Die Gesamtreaktion ist als schnelle Reaktion und damit kinetisch kaum gehindert anzusehen, wobei Dolomit etwas träger als Calcit reagiert. Die Verringerung der Karbonatgehalte geht mit der Erhöhung der Wasserhärte und der eventuellen Bildung von Gips einher.

Austauschpuffer :



Der Kationenaustausch erfolgt an Tonmineralen, Al- bzw. Fe-Oxidhydraten sowie an organischer Substanz (Huminstoffe). Im unverwitterten Zustand sind die Kationenaustauschplätze zumeist mit Alkalien und Erdalkalien belegt. Die Pufferung des Verwitterungsprozesses hat demzufolge eine Erhöhung dieser Ionen in der Lösung zur Folge, während die Austauschplätze immer mehr mit Eisen und weiteren Metallen belegt bzw. protoniert werden. Zu beachten ist, dass die Pufferungsprozesse zumeist reversibel sind. Bei steigenden pH-Werten und Veränderungen der Lösungszusammensetzung kommt es zur teilweisen Desorption der Metalle.

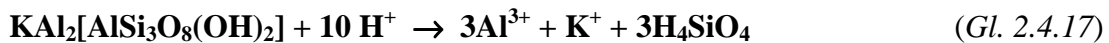
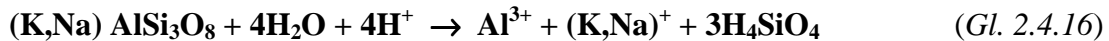
Pufferung durch Al - / Fe (III)- Hydroxide:



Der Pufferungsbereich der Aluminiumhydroxide liegt zwischen pH 5,0 – 3,5, während für die Eisenhydroxidpufferung ein Hauptpufferbereich zwischen 3,5 – 3,0 zu benennen ist. Es handelt sich um ein reversibles Puffersystem. Weiterhin kommt es zur Freisetzung von Fe^{3+} Ionen, die einen weiteren Anschlag der Pyritverwitterung bewirken.

Silikatverwitterung :

Es ist zwischen der Verwitterung primärer Silikate und der späteren Umsetzung der dabei gebildeten Tonminerale zu unterscheiden. Gl. 2.4.16 beschreibt das Beispiel der Alkalifeldspat-Verwitterung. Gl. 2.4.17 zeigt die Umsetzung von Muskovit-Glimmer.



Das Silikat-Puffersystem ist nach SCHWERTMANN ET AL. [1998] bereits im pH-Wertbereich von 5 in Größenordnung wirksam. Zu beachten ist allerdings, dass es sich zumeist um kinetisch behinderte Reaktionen handelt, so dass es erst bei deutlich niedrigeren pH Werten zu großen Umsetzungsraten kommt. Vor allem die Verwitterung der Schichtsilikate hat die Freisetzung von eventuell eingebauten Schwermetallionen zur Folge. Bei niedrigen pH-Werten bleiben diese dann auch in der Wasserphase mobil.

WISOTZKY [1994] fasst zusammen, dass im Gesamtprozess der Versauerung lediglich ein Teil des Silikatpuffers und der irreversible Teil des Carbonatpuffers durch CO₂- Ausgasung eine tatsächliche Verminderung der Acidität bewirken. Die anderen Puffer dämpfen nur die Verwitterungseffekte, entziehen aber über den Gesamtzeitraum keine Acidität.

2.4.3 Mikrobielle Redoxreaktionen

In einem geschlossenen System, welches umsetzbares organisches Material enthält, kommt es zur Abfolge von Redoxprozessen unter schrittweisem Abbau (Oxidation) der organischen Substanz. Diese natürliche Redoxsequenz ist gekennzeichnet durch den Aufbrauch der verschiedenen Elektronenakzeptoren und das Absinken der Redoxspannung des Systems (STUMM & MORGAN [1996]). In der Praxis sind dabei die konzeptionellen und messtechnischen Schwierigkeiten bei der Messung der Redoxspannung zu beachten⁷.

Abb. 2.4.5 zeigt die einzelnen Reduktions- und Oxidationsgleichungen der Sequenz. Ihre Verkopplung zu ablaufenden Redoxreaktionen wird in Abb. 2.4.6 ersichtlich. Für Grundwassersysteme spielt die Abfolge von Reduktionen der Gleichungen A bis G die wesentliche Rolle. Diese sind dabei zumeist mit dem oxidativen Abbau organischer Substanz nach Gleichung L bis L3 verknüpft. Die Abfolge der Redoxprozesse richtet sich nach dem Gewinn an freier Gibbsscher Energie (ΔG_r) durch die Reaktion⁸, wobei auch Redoxreaktionen ohne Verbrauch organischer Substanz in diese Sequenz einzubeziehen sind (Sulfid-, Fe (II)- und Mn (II)- Oxidation). Die Redoxsequenz ist somit eng mit mikrobiologischen Prozessen verknüpft. Die Reduktionen A-G, mit der möglichen Ausnahme der Reaktionen C und E, sind mikrobiell katalysiert (STUMM & MORGAN [1996]). Die Redoxsequenz geht dabei einher mit der Abfolge bevorzugter Lebensbedingungen für unterschiedliche Mikroorganismen. Der Stoffwechsel (Metabolismus) der Mikroorganismen (MO) besteht aus einer Verkopplung von Prozessen des Zellaufbaus (Anabolismus) mit Prozessen zum Energiegewinn durch Abbau organischer/ chemischer Substanzen (Katabolismus). Dabei verkörpern die oben beschriebenen exergonischen Redoxreaktionen den Katabolismus und sind Grundlage für die

⁷ Nach APELLO & POSTMA [1996] ist eine exakte quantitative Interpretation der gemessenen Werte im Sinne der Nernst-Gleichung schwierig. Dies resultiert aus Nichtgleichgewichtszuständen der einzelnen Redoxpaare. Es werden somit Mischpotentiale gemessen (z.B. LINDBERG & RUNNELLS [1984], BÖTTCHER & STREBEL [1985]). Weiterhin stellen in anoxischen Systemen Ausfällungen an den Messelektroden ein Problem dar (z.B. DOYLE [1968]).

⁸ Es laufen zuerst die Reaktionen ab, die durch die negativsten Werte von ΔG_r gekennzeichnet sind. Das negative Vorzeichen weist darauf hin, dass es sich um exergonische Reaktionen handelt, die somit spontan ablaufen. Dabei ist $\Sigma \Delta G_r$ der Reaktionsprodukte niedriger als $\Sigma \Delta G_r$ der Reaktionsausgangsstoffe. Je stärker sich die betrachtete Reduktion und Oxidation in Abb. 2.4.6 überlappen, desto größer ist der Energiegewinn. Nähere thermodynamische Erläuterungen zur Redoxsequenz finden sich z.B. in APELLO & POSTMA [1996] bzw. STUMM & MORGAN [1996].

EXERGONIC PROCESSES (pH = 7)			
Reduction	$pe^{\circ}(W) = \log K(W)$	Oxidation	$pe^{\circ}(W) = -\log K(W)$
(A) $\frac{1}{4}O_2(g) + H^+(W) + e = \frac{1}{2}H_2O$	+13.75	(L) $\frac{1}{4}CH_2O + \frac{1}{4}H_2O = \frac{1}{4}CO_2(g) + H^+(W) + e$	-8.20
(B) $\frac{1}{5}NO_3^- + \frac{6}{5}H^+(W) + e = \frac{1}{10}N_2(g) + \frac{3}{5}H_2O$	+12.65	(L-1) $\frac{1}{2}HCOO^- = \frac{1}{2}CO_2(g) + \frac{1}{2}H^+(W) + e$	-8.73
(C) $\frac{1}{2}MnO_2(s) + \frac{1}{2}HCO_3^-(10^{-3}) + \frac{3}{2}H^+(W) + e = \frac{1}{2}MnCO_3(s) + H_2O$	+8.9	(L-2) $\frac{1}{2}CH_2O + \frac{1}{2}H_2O = \frac{1}{2}HCOO^- + \frac{3}{2}H^+(W) + e$	-7.68
(D) $\frac{1}{8}NO_3^- + \frac{5}{4}H^+(W) + e = \frac{1}{8}NH_4^+ + \frac{3}{8}H_2O$	+6.15	(L-3) $\frac{1}{2}CH_3OH = \frac{1}{2}CH_2O + H^+(W) + e$	-3.01
(E) $FeOOH(s) + HCO_3^-(10^{-3}) + 2H^+(W) + e = FeCO_3(s) + 2H_2O$	-0.8	(L-4) $\frac{1}{2}CH_4(g) + \frac{1}{2}H_2O = \frac{1}{2}CH_3OH + H^+(W) + e$	+2.88
(F) $\frac{1}{2}CH_2O + H^+(W) + e = \frac{1}{2}CH_3OH$	-3.01	(M) $\frac{1}{8}HS^- + \frac{1}{2}H_2O = \frac{1}{8}SO_4^{2-} + \frac{9}{8}H^+(W) + e$	-3.75
(G) $\frac{1}{8}SO_4^{2-} + \frac{9}{8}H^+(W) + e = \frac{1}{8}HS^- + \frac{1}{2}H_2O$	-3.75	(N) $FeCO_3(s) + 2H_2O = FeOOH(s) + HCO_3^-(10^{-3}) + 2H^+(W) + e$	-0.8
(H) $\frac{1}{8}CO_2(g) + H^+(W) + e = \frac{1}{8}CH_4(g) + \frac{1}{4}H_2O$	-4.13	(O) $\frac{1}{8}NH_4^+ + \frac{3}{8}H_2O = \frac{1}{8}NO_3^- + \frac{5}{4}H^+(W) + e$	+6.16
(J) $\frac{1}{6}N_2 + \frac{4}{3}H^+(W) + e = \frac{1}{3}NH_4^+$	-4.68	(P) $\frac{1}{2}MnCO_3(s) + H_2O = \frac{1}{2}MnO_2(s) + \frac{1}{2}HCO_3^-(10^{-3}) + \frac{3}{2}H^+(W) + e$	8.9

Abb. 2.4.5 Reduktions- und Oxidationsprozesse mikrobiell katalysierter Redoxreaktionen (aus STUMM & MORGAN [1996])

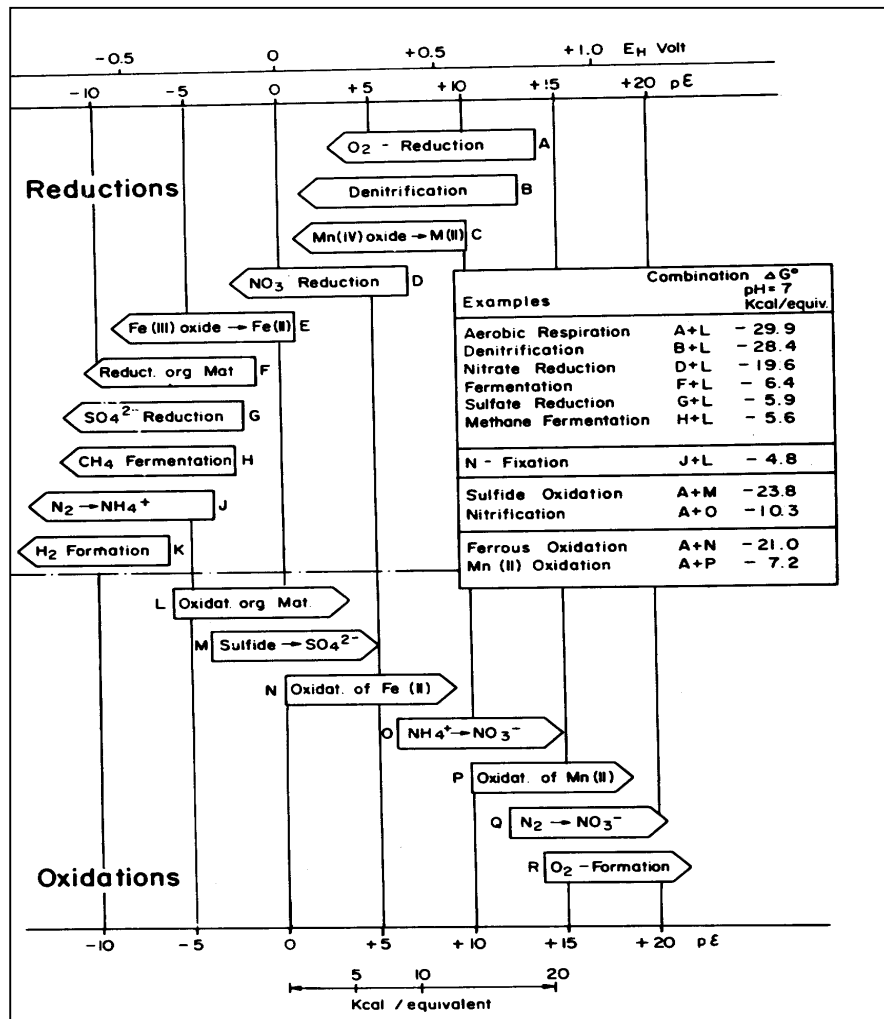


Abb. 2.4.6 Sequenz der Redoxreaktionen (aus STUMM & MORGAN [1996])

endergonischen Prozesse des Zellaufbaus. Der schrittweise Verbrauch von Elektronenakzeptoren führt somit zur Veränderung der Lebensbedingungen der MO. Es erfolgt eine stufenweise „Bevorzugung“ von MO, die am besten auf das jeweilige Angebot an Elektronenakzeptoren (und –donatoren) angepasst sind.

Im Untergrund sind keine phototrophen sondern nur chemotrophe Mikroorganismen von Bedeutung. Sie untergliedern sich bezüglich ihres Katabolismus in chemoorganotrophe und chemolithotrophe MO. An Hand des Anabolismus sind Autotrophier und Heterotrophier zu unterscheiden. Die Autotrophier nutzen als Kohlenstoffquelle CO_2 während die Heterotrophier organische Substanz umsetzen. Die Reaktionen der Redoxsequenz sind exotherm, wobei der Betrag der Wärmefreisetzung innerhalb der Sequenz abnimmt. Der Ablauf der Redoxsequenz wird weiterhin an Hand einer signifikanten Anreicherung der Reaktionsprodukte in der Wasser- bzw. Gasphase deutlich. Die Umsetzung organischer Substanz ist durch eine Freisetzung von $\text{CO}_{2(g)}$ und die Erhöhung der DIC-Gehalte in der Wasserphase gekennzeichnet. Stark reduzierende Bedingungen haben die Bildung von $\text{CH}_{4(g)}$ zur Folge.

Die Unterscheidung des aus dem Abbau der organischen Substanz resultierenden CO_2 von dem der Karbonatpufferung kann an Hand der $\delta^{13}\text{C}$ -Isotopiewerte des CO_2 erfolgen. Abb. 2.4.7 zeigt, dass CO_2 aus marinen Karbonaten durch $\delta^{13}\text{C}$ -Werte von -3 bis $+3$ ‰ PDB gekennzeichnet ist. Im Gegensatz dazu, zeichnet sich CO_2 aus organischem Material durch Werte von -10 bis -30 ‰ PDB aus („Soil- CO_2 “), wobei fossiles Material („Coal“) im Bereich von -20 bis -30 ‰ PDB liegt. Durch Auflösung von marinen Karbonaten in Folge Aciditätspufferung (Pyritoxidation) werden die $\delta^{13}\text{C}$ -Werte des $\text{CO}_{2(g)}$ zur Signatur der Karbonate hin verschoben.

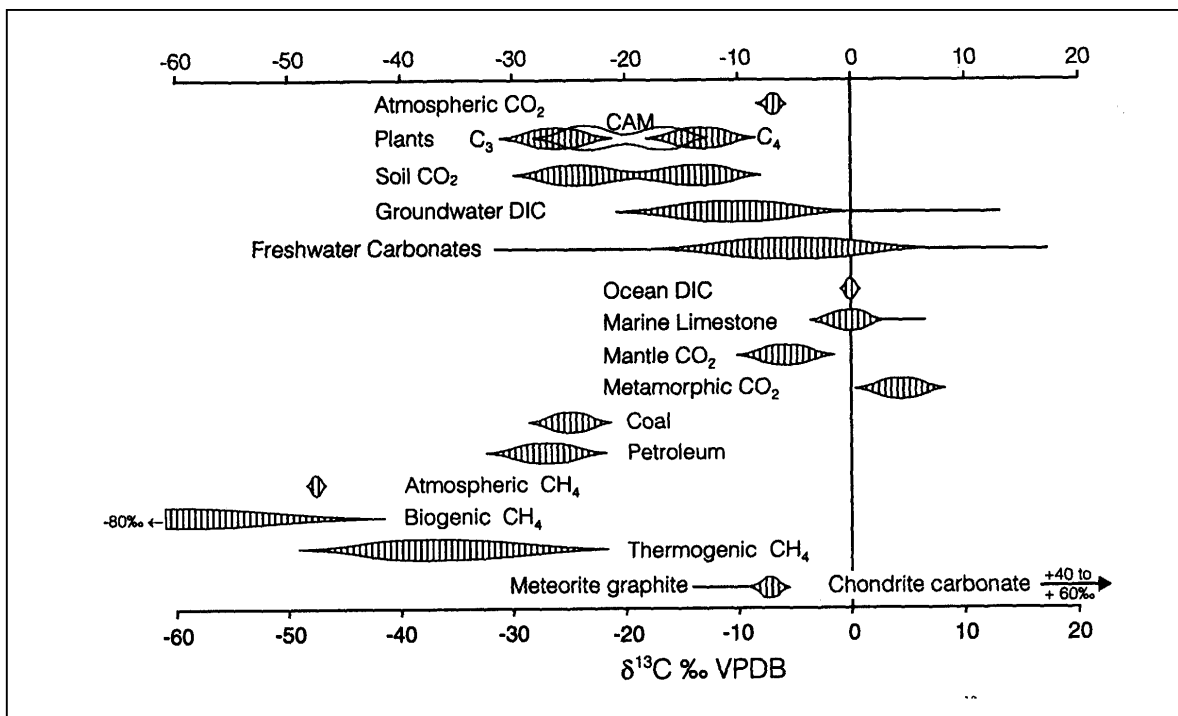


Abb.2.4.7: $\delta^{13}\text{C}$ -Isotopiewerte von natürlich gebildetem CO_2 und CH_4 . (aus CLARK & FRITZ [1997])

2.5 Migrationsprozess

Ein unterirdischer wassergesättigter Strömungsraum lässt sich bezüglich der Modellierung von Transportprozessen wie folgt untergliedern:

- feste Phase (Gesteinsmatrix, die den Aquifer aufbaut)
- fluide Phase (Grundwasser), welche sich aufteilt in:
 - mobile fluide Phase (Grundwasser, welches am konvektiven Strömungsvorgang teilnimmt)
 - immobile fluide Phase (stagnierendes Grundwasser, welches nicht am konvektiven Strömungsvorgang teilnimmt und über Diffusion mit der mobilen fluiden Phase verbunden ist).

Unter dem Begriff „Migration“ ist im Grundwasser nach LUCKNER & SCHESTAKOW [1986] die Gesamtheit aller Transport-, Speicher-, Austausch- und Umwandlungsprozesse von Stoffkomponenten zu verstehen. Um die zeitliche Entwicklung der Grundwasserbeschaffenheit zu beschreiben, bedarf es also der Erfassung:

- der physikalischen Transportprozesse (Konvektion, hydrodynamische Dispersion)
- der homogenen chemischen Reaktionen innerhalb der fluiden Phase (Dissoziations- und Assoziationsreaktionen z.B. Komplexbildung)
- der heterogenen chemischen Reaktionen zwischen fluider und fester Phase (z.B. Mineralfällung und -lösung, Sorptions- und Desorptionsprozesse, Ionenaustausch).

2.5.1 Herkömmliche Transportmodellierung

Die herkömmliche Transportmodellierung bedient sich zur Abbildung der oben genannten Prozesse Gl. 2.5.1:

$$\text{div}(D \cdot \text{grad } c - v_a \cdot c) - \lambda \cdot c \cdot R = R \cdot \frac{\partial c}{\partial t} - q$$

dispersiver
Transport

konvektiver
Transport

Abbau

Quellen,
Senken

(Gl.2.5.1)

- | | | |
|-----|-----------|---|
| mit | D | hydrodynamischer Dispersionskoeffizient |
| | c | Konzentration des Stoffes |
| | v_a | Abstands- Geschwindigkeit |
| | λ | Abbaukoeffizient |
| | R | Retardationskoeffizient ⁹ = 1 + k_d |
| | | mit $k_d [-] = k_d^* \cdot \rho_{tr} / n$ (siehe z.B. APPELO & POSTMA [1996]) |
| | | wobei $k_d^* = \text{Stoff in Festphase} / \text{Stoff in Wasserphase} [\text{ml/g}]$ |
| | q | Quell-/ Senkenterm |

⁹ Dies gilt für die einfachste Art der Isotherme, die Henry-Verteilung.

Dabei werden die oben angeführten homogenen und heterogenen chemischen Prozesse lediglich durch einen irreversiblen Abbau bzw. durch Sorptionsisothermen¹⁰ abgebildet. Für hydrogeochemisch komplexe Systeme ergeben sich daraus deutliche Unzulänglichkeiten. Die Modellierungen stellen Einstoffbetrachtungen dar. Eine fundierte Abbildung der heterogenen und homogenen chemischen Wechselwirkungen ist damit nur schwer möglich. Dazu bedarf es einer reaktiven Transportmodellierung (vgl. APPELO & POSTMA [1996], WALTER [1993]).

2.5.2 Reaktive Transportmodellierung

In reaktiven Stofftransportmodellen werden die homogenen und heterogenen Wechselwirkungen mit einem thermodynamischen Ansatz abgebildet. Dabei werden mehrere Stoffkomponenten gleichzeitig betrachtet. Es ist zwischen dem „1 Schrittverfahren“ („global implicit method“) und dem „2 Schrittverfahren“ („operator splitting method“) zu unterscheiden (MAYER [1999]). Beim „1 Schrittverfahren“ werden die den physikalischen Transportprozess beschreibenden Gleichungen mit denen die hydrogeochemischen Wechselwirkungen beschreibenden Gleichungen simultan gelöst. Beim „2 Schrittverfahren“ erfolgt eine getrennte sequentielle Lösung. YEH & TRIPATHI [1989] diskutieren eingehend die Vor- und Nachteile der verschiedenen Kopplungsmöglichkeiten. MAYER [1999] führt diese Diskussion intensiv fort. Als Vorteil des „1 Schrittverfahrens“ ergibt sich die exaktere numerische Lösung des Problems. Innerhalb des „2 Schrittverfahrens“ treten Oszillationen und Massenbilanzfehler auf, die aus dem Splitting der Prozesse resultieren. Um dem zu begegnen sind deutlich kürzere Zeitschrittweiten als beim „1 Schrittverfahren“ notwendig. Ein wesentlicher Nachteil des „1 Schrittverfahrens“ ist zum einen die Anforderung an Memory- und CPU-Bedarf, auf Grund des wesentlich komplexeren Gleichungssystems. Zum anderen sind die Modelle relativ starr bei der Anwendung auf verschiedenste Fragestellungen. Die Einbindung vorhandener, sehr komplexer und verifizierter hydrogeochemischer Teilmodelle ist nicht möglich. Hierin liegt demgegenüber der Vorteil des „2 Schrittverfahrens“. MAYER [1999] entwickelt mit MIN3P das wohl zur Zeit leistungsfähigste Programm auf Basis des „1 Schrittverfahrens“. Er stellt allerdings ebenfalls die Bedeutung der Programme mit „2 Schrittverfahren“ heraus. Wie in WALTER ET AL. [1994B] wird, im Gegensatz zu YEH & TRIPATHI [1989], betont, dass ein iteratives Vorgehen bei der sequentiellen Kopplung die Probleme nicht löst. Beispiele aus der Literatur zum „2 Schrittverfahren“ sind zahlreich - MINTRAN (WALTER [1993], [1994A],[1994B]), MULTRA (BRAND [1996]) bzw. TreAC (NITZSCHE [1997]).

Die Transportgleichung für jede betrachtete Komponente k bei stationärer Strömung stellt Gl. 2.5.2 dar.

$$\operatorname{div}(D \cdot \operatorname{grad} c_k - v_a \cdot c_k) + q_k = \frac{\partial c_k}{\partial t} \quad (\text{Gl } 2.5.2)$$

Dabei ist q_k der chemische Quell-/ Senkenterm bezüglich der Komponente k. Er verkörpert die sich aus dem chemischen Gleichgewichtsmodell ergebende Konzentrationsänderung.

¹⁰Es werden Henry-, Freundlich- oder Langmuir Isothermen (siehe z.B. LUCKNER & SCHESTAKOW [1986], HÄFNER ET AL. [1992], APPELO & POSTMA [1996]) verwendet.

Die Modellierung der chemischen Wechselwirkungen bedarf der Quantifizierung des Anfangszustandes bezüglich der betrachteten gelösten Komponenten sowie der relevanten reaktiven Festphasen (z.B. Mineralphasen, Belegung des Kationen-Austauschers).

2.5.3 Hydrogeochemische Gleichgewichtsmodelle

Die am meisten verwendeten hydrogeochemischen Gleichgewichtsmodelle beruhen auf dem Ionen-Dissoziationsmodell der wässrigen Phase (PHREEQC - PARKHURST [1995] bzw. PARKHURST & APPELO [1999], MINTEQA2- ALLISON ET AL. [1991]). Dabei erfolgt die Berechnung der Aktivitäten der gelösten Komponenten in Abhängigkeit von der Ionenstärke (Gl. 2.5.10). Hierzu werden Gleichungen verwendet, die auf der DEBEYE-HÜCKEL-Theorie basieren (DEBEYE & HÜCKEL [1923]). Dabei ist zu beachten, dass die als Beispiel aufgezeigte DAVIES-Gleichung (Gl. 2.5.11) nur bis zu einer Ionenstärke von ca. $I = 0,5$ mol anwendbar ist (siehe DVWK [1992] – S. 28). Für Lösungen mit deutlich höheren Ionenstärken bedarf es der Anwendung von Ionenwechselwirkungs- (z.B. PITZER [1991]) oder Ionenassoziationsmodellen (GARRELS & THOMPSON [1962]). Die Überschreitung von $I = 0,5$ mol ist zumeist nur für Meerwasser bzw. tiefe Salzwässer relevant.

Bezüglich der Mineral- und Gasphasen-Gleichgewichtszustände der Lösung erfolgt die Berechnung von Sättigungsindizes (SI) nach Gl. 2.5.8. Hierbei kennzeichnet $SI > 0$ eine Übersättigung, $SI < 0$ eine Untersättigung und $SI = 0$ einen Gleichgewichtszustand gegenüber der betrachteten Phase. Die hydrogeochemischen Gleichgewichtsmodelle ermöglichen weiterhin z.B. die Berücksichtigung von Lösungs- und Fällungsprozessen, Oberflächenkomplexierung und Ionen-Austausch-Reaktionen.

Das resultierende hydrogeochemische Gleichungssystem besteht aus einer Vielzahl von nichtlinearen Gleichungen. Für jede betrachtete Komponente i (Masterspezies) ergibt sich eine Massenbilanz-Gleichung (Gl. 2.5.3), wobei wiederum für jeden Komplex, in dem die Komponente i enthalten ist, eine Gleichung zu lösen ist (Gl. 2.5.9). Weiterhin ergeben sich Gleichungen für die Bedingung der Elektroneutralität der Lösung (Gl. 2.5.4) und die Elektronenbilanz (Gl. 2.5.5). Aus der Lösung dieser beiden Gleichungen resultieren der pH-Wert bzw. der pE-Wert des Systems. Die Berücksichtigung von Mineral- und Gasphasen-Gleichgewichten führt zu einer weiteren Gleichung je betrachteter Phase (Gl. 2.5.6). Das Residuum R_4 ist dabei der einzustellende SI bezüglich der Phase k .

Wesentliche Grundlage der Berechnungen sind die thermodynamischen Gleichgewichtskonstanten der einzelnen Reaktionen sowie die Festlegung ihrer Temperaturabhängigkeit. Zuerst erfolgt die Bestimmung der Aktivitäten der einzelnen betrachteten Spezies (Masterspezies und Komplexe). Diese sind, wie oben bereits erwähnt, abhängig von der Ionenstärke der Lösung.

Das sich ergebende Gleichungssystem wird mit der NEWTON-RAPHSON Methode iterativ gelöst. Die Gleichungen 2.5.3 bis 2.5.6 zeigen dabei die zu minimierenden Residuen (R_{1-4}) (Schreibweise nach APPELO & POSTMA [1996]). Eine detailliertere Darstellung des Modellierungs-Algorithmus ist PARKHURST & APPELO [1999] zu entnehmen.

$$\sum_i (R_1)_i = Tot_i - m_i - \sum_j cplx_j \cdot c_{j,i} \quad (Gl\ 2.5.3)$$

$$R_2 = \sum (cplx_j \cdot z_j) + \sum (m_i \cdot z_i) \quad (Gl\ 2.5.4)$$

$$R_3 = Tot\ e - \sum (m_i \cdot e_i) - \sum (cplx_j \cdot e_j) \quad (Gl\ 2.5.5)$$

$$(R_4)_k = \log (IAP)_k - \log K_k \quad (Gl\ 2.5.6)$$

$$(IAP)_k = \prod_i (m_i \cdot \gamma_i)^{c_{k,i}} \quad (Gl\ 2.5.7)$$

$$SI_k = \log \left(\frac{IAP_k}{K_k} \right) \quad (Gl\ 2.5.8)$$

$$cplx_j = \frac{K_j}{\gamma_j} \prod_i (m_i \cdot \gamma_i)^{c_{j,i}} \quad (Gl\ 2.5.9)$$

$$a_i = \gamma_i \cdot c_i \quad (Gl\ 2.5.10)$$

$$\log \gamma_i = -A \cdot z_i^2 \left(\frac{\sqrt{\mu}}{1 + \sqrt{\mu}} - 0,31 \mu \right) \quad (Gl\ 2.5.11)$$

$$\mu = 0,5 \sum_i (c_i \cdot z_i) \quad (Gl\ 2.5.12)$$

- R = Residuum
 Tot_i = Gesamte Molmenge der Komponente i im System
 m_i = Molmenge der freien unkomplexierten Spezies der Komponente i
 cplx_j = Molmenge der komplexierten Spezies j
 c_{j,i} = stöchiometrischer Koeffizient der Komponente i in der komplexierten Spezies j
 z_i = Ladung der Komponente i
 z_j = Ladung des Komplexes j
 Tot e = Redoxstatus des Gesamtsystems
 e_i = Redoxstatus der Komponente i
 e_j = Redoxstatus des Komplexes j
 IAP_k = Ionenaktivitätsprodukt der Lösung bezüglich Mineral k
 K_k, K_j = Gleichgewichtskonstante (Löslichkeitsprodukt) des Minerals k bzw. Komplex j
 γ_i, γ_j = Aktivitätskoeffizient der Komponente i bzw. des Komplex j
 c_{k,i} = stöchiometrischer Koeffizient der Komponente i im Mineral k
 SI_k = Sättigungsindex der Lösung bezüglich Phase k
 μ = Ionenstärke der Lösung
 c_i = Konzentration der Komponente i in der Lösung
 a_i = Aktivität der Komponente i in der Lösung
 A = temperaturabhängige Konstante

2.6 Abgeleitete Untersuchungsschwerpunkte

Die in Kap. 1 formulierte Zielstellung wird, basierend auf den dargestellten theoretischen Grundlagen, durch Untersuchungsschwerpunkte untersetzt. Diese lassen sich durch nachfolgende Fragen umreißen:

Geogener Ausgangszustand

- Wird für die tertiären Einheiten der Untersuchungsgebiete der Zusammenhang zwischen den faziellen Verhältnissen und den Schwefelgehalten nach dem Modell von BERNER [1984] bestätigt?

Hydraulisches System „Kippe“

- Durch welche Prozesse/ Phänomene ist die Diskrepanz zwischen gemessenen Versickerungsraten und Anstiegen in Kippengrundwassermessstellen begründbar?

Geochemisches System „Kippe“

- Welche grundlegenden hydrogeochemischen Prozesse laufen innerhalb der betrachteten Kippenkörper ab?
- Welche Stoffpotentiale werden bei idealer Verwitterung mobilisiert?
- Liefert eine flächenhafte Bilanzierung des Kippenkörpers, an Hand der Vorfeldbeschaffenheit, belastbare Ergebnisse zur Prognose der sich entwickelnden Kippengrundwasserbeschaffenheit? Sind dabei aus dem Vergleich der Aciditäts- und Alkalinitätspotentiale Problemzonen der Kippenkörper erkennbar?
- Welche Bedeutung haben reduktive Prozesse für die Kippenkörper?
- Welche typischen strukturell bedingten hydrogeochemischen Zonierungen ergeben sich für die betrachteten Kippenkörper? Wie sind diese Phänomene mit geochemischen und technologischen Gegebenheiten verknüpft?

Migrationsprozess

- Kann das in den ostdeutschen Braunkohlerevieren vielfach verwendete Modellierungsprogramm PCGEOFIM für Fragestellungen des reaktiven Stofftransportes qualifiziert und verifiziert werden?
- Welche Phänomene weist die prognostische Modellierung des Abstroms der Kippengrundwässer nach Einstellung stationärer Strömungsverhältnisse aus?
- Welche Ergebnisse liefert die Nachbildung des Abstromprozesses im Labormaßstab? Sind in der Modellierung aufgezeigte Puffersysteme auch effektiv wirksam?

Insgesamt lässt sich die Fragestellung der Gefährdungsabschätzung von Schutzgütern im Abstrom von Braunkohleabraumkippen in zwei Teilfragen gliedern:

- a) Welche Beschaffenheit hat das Kippengrundwasser zum Abstromzeitpunkt?
- b) Wie kann der Abstromprozess modellhaft abgebildet werden? Welche reale Gefährdung der Kippenumgebung wird durch die prognostische Modellierung begründet?

3 Charakteristik der Untersuchungsgebiete

3.1 Untersuchungsgebiet Espenhain

3.1.1 Geographische Lage und klimatische Verhältnisse

Die Flurkuppe des ehemaligen Braunkohlentagebaues Espenhain liegt südlich der Stadt Leipzig. Das Untersuchungsgebiet ist somit dem Naturraum „Leipziger Land“ zuzuordnen. Die Leipziger Tieflandsbucht gehört zum Klimabezirk „Ostdeutsches Binnenland“. Aus der Klimastatistik gehen der kontinentale Einfluss und die im Bundesdurchschnitt vergleichsweise geringen Niederschläge für diesen Klimabezirk hervor. Es wird eine mittlere Niederschlagshöhe von 460-600 mm angegeben. Die mittleren Temperaturen liegen bei 8,0-9,5 °C. Eine Auswertung der Daten der direkt südlich des Tagebaus gelegenen Wetterstation Rötha, zeigt für die Beobachtungsjahre 1969-1997 eine mittlere jährliche Niederschlagssumme von 552 mm. Dabei entfallen ca. 60 % der Gesamtniederschläge auf April – September (TU BAF [2000], RINKER [2001]).

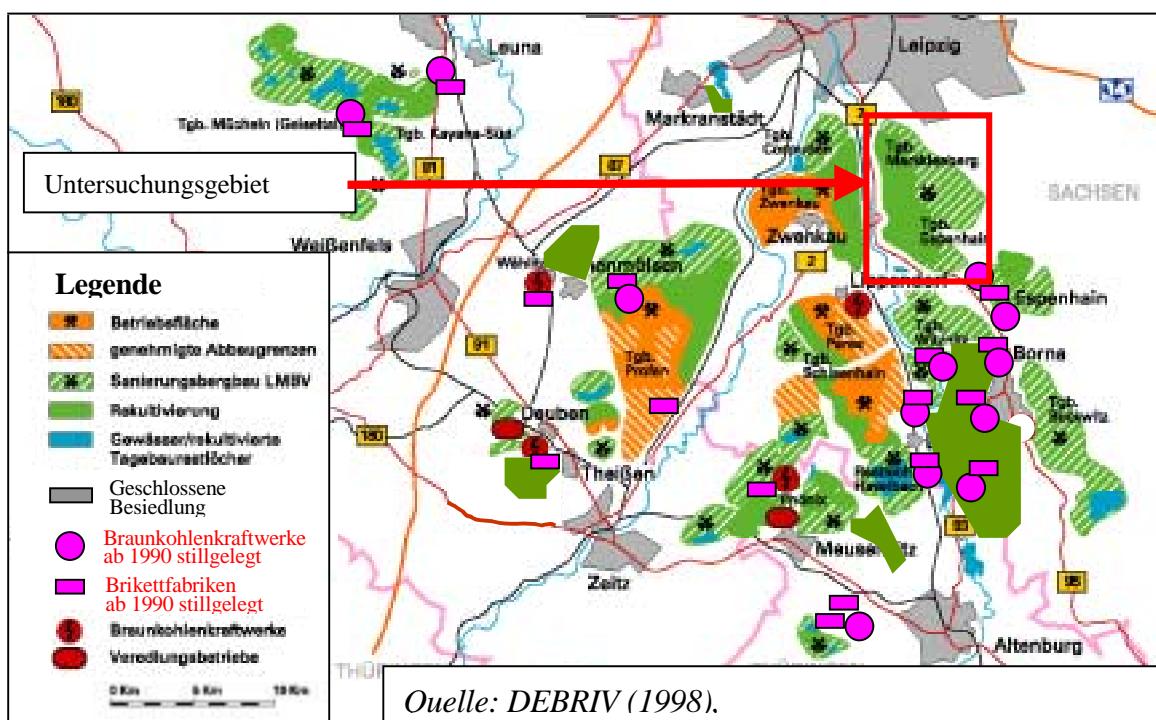


Abb. 3.1.1 Lage des Untersuchungsgebiets Espenhain

3.1.2 Geologische Verhältnisse

3.1.2.1 Überblick

Das Untersuchungsgebiet gehört dem zentralen Teil des „Weißelster Beckens“ an. Die Vorstellungen zu diesem Becken als einer Binnensenke für den Zeitraum Miozän bis Mitteloligozän resultieren aus den Arbeiten von MEYER [1950], PIETZSCH [1963] und vor allem EISSMANN [1968], [1994]. Erst die mitteloligozäne Rupeltransgression führt, diesen Arbeiten zufolge, zur Vereinigung dieser Binnensenke mit dem häufig marinen Nordwesteuropäischen Tertiärbecken. Der Raum wird dann als Leipziger Bucht bezeichnet.

STANDKE ET AL. [1998] zeigen allerdings auf, dass die Abfolge der abgelagerten Sedimente faziell wesentlich differenzierter ist. Danach sind schon für den Zeitraum Mittel-/Obereozän marin beeinflusste Bildungen nachweisbar sind. Der prätertiäre Untergrund wird für das direkte Untersuchungsgebiet von proterozoischen Gesteinen der „Nordwestsächsischen Hochscholle“ gebildet und ist zu großen Teilen durch eine kaolinische Verwitterungsdecke gekennzeichnet (EISSMANN [1968]).

3.1.2.2 Normalprofil

Die Schichtenfolge des Tagebaufeldes Espenhain ist vereinfacht und unmaßstäblich aus Abb. 3.1.2 ersichtlich. Die grundlegenden Literaturquellen zu den geologischen Verhältnissen des Kohlefeldes Espenhain stellen EISSMANN [1968] und BELLMANN [1976] dar.

Tertiär

Bornaer Schichten

Es wurden das „Bornaer Hauptflöz“ (Flöz II/III) und das „Böhlener Oberflöz“ (Flöz IV) gebaut. Die Mittel zwischen diesen beiden Flözen werden durch eine untere und eine obere Sandfolge (graue, graubraune Feinsande) sowie ein eingeschaltetes bindiges, teilweise kohliges Mittel gebildet. Der sandige Teil stellt dabei den GWL 3 dar. Die Mächtigkeit der gesamten Einheit schwankt um 10 m.

Böhlener Schichten

Die oligozänen „Unteren Meeressande“ („Untere Böhlener Schichten“) im Hangenden des Flözes IV stellen eine bis zu ca.15 m mächtige Abfolge von marinen Feinsanden dar¹¹. Diese Abfolge wird durch das etwa 0,5 – 1 m mächtige „Flöz y“¹², in die „Braunen Sande“ (GWL 2.7) im Liegenden und die „Graubraunen Sande“ (GWL 2.6) im Hangenden gegliedert. Es folgen die „Oberen Meeressande“ („Obere Böhlener Schichten“). Diese Sedimente erreichen Mächtigkeiten bis zu 20 m. Den liegenden Teil bildet der „Muschelschluffhorizont“, den hangenden Teil die Muschel- und Formsande. Es erfolgt dabei ein fließender Übergang von den Muschelsanden (W-NW) hin zu den Formsanden (E-SE). BELLMANN [1976] benennt dies als Kennzeichen des Übergangs von der Becken- zur Randfazies. Die Muschel- und Formsande werden zum GWL 2.5 zusammengefasst.

Thierbacher Schichten

Diese fluviatilen Sedimente treten im äußersten Ostteil des Baufeldes Espenhain auf. Nach EISSMANN [1968] werden sie als ein oberoligozänes Flusstal gedeutet, welches durch intensiven Sedimenttransport gekennzeichnet war. Die Sedimente zeichnen sich durch eine Wechsellagerung aus tonig-schluffigen und rolligen Substraten aus. Die Einheit lässt sich in drei Teile gliedern. Diese Teile werden als GWL 2.2 – 2.4 bezeichnet. Die Kippenrelevanz dieser Einheit ist gering.

Quartär

Mit regionaler Diskordanz und beträchtlicher zeitlicher Lücke folgt über dem Tertiärteil des Profils das Quartär. Dies wird vor allem durch elster- und saalezeitliche Sedimente gebildet. Die weichselzeitlichen und holozänen Bildungen treten in den Hintergrund.

¹¹ Von geringer Bedeutung sind die an der Basis lokal verbreiteten geringmächtigen „Weißen Sande“ und ein „Kieshorizont“.

¹² Dieses Flöz ist lokal verbreitet oder durch ein Flözäquivalent vertreten.

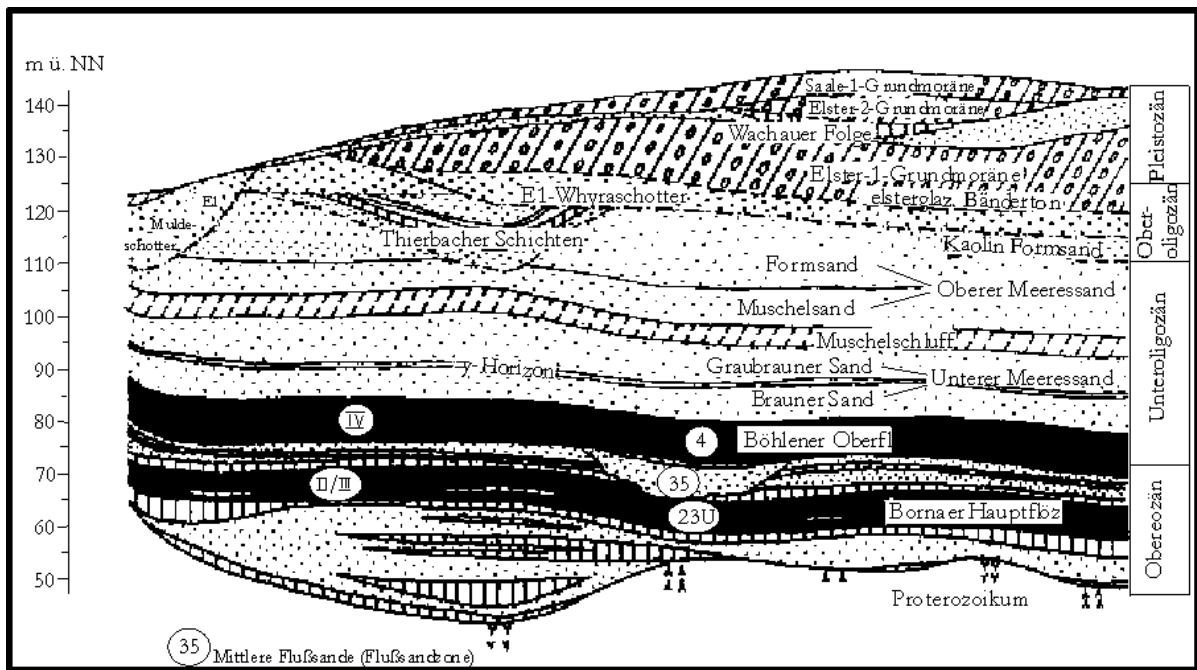


Abb. 3.1.2 Normalprofil des Tagebaufeldes Espenhain (nach MIBRAG / LMBV – aus STANDKE ET AL. [1998] - bearbeitet)

Elsterzeitliche Bildungen

Das Liegende stellen grobkörnige, frühelsterzeitliche Terrassenschotter der Wyhra dar. Die folgende, mächtige E1 Grundmoräne (bis 15m) wird durch den etwa 0,5-1m mächtigen Leipziger Bänderton eingeleitet. Die E2-Grundmoräne ist etwas geringmächtiger (bis ca.10 m). Sie wird meist durch die sandige „Wachauer Folge“ von der E1 Grundmoräne getrennt. Die elsterzeitlichen Bildungen beinhalten die GWL 1.6 bis 1.8.

Saalezeitliche Bildungen

Die grobsandige Hauptterrasse ist nur lokal verbreitet. Im Liegenden der S1-Grundmoräne tritt der etwa 0,5 m mächtige „Böhlener Bänderton“ als markante Schicht auf. Die S1-Grundmoräne weist Mächtigkeiten von etwa 3-6 m auf. Die saalezeitlichen Bildungen beinhalten die GWL 1.4 und 1.5.

Weichselzeitliche und holozäne Bildungen

Es treten nur vereinzelt weichselzeitliche Sande auf. Relikte alter Flussläufe sind lokal begrenzte „Auenkiese“ und „Auenlehme“. Die weichselzeitlichen Bildungen beinhalten die GWL 1.0 und 1.1.

3.1.3 Tagebauentwicklung, Abbautechnologie und Kippenaufbau

Die Angaben zur Tagebauentwicklung und Abbautechnologie stützen sich im wesentlichen auf den Sanierungsrahmenplan für den Tagebau Espenhain (RPW [1996]) sowie auf WÜNSCHE [1974].

3.1.3.1 Tagebauentwicklung

Der Tagebau Espenhain wurde 1937 aufgeschlossen. Die aktive Kohleförderung begann in den Jahren 1940/41. Ab 1944 kam eine Abraumförderbrücke zur Gewinnung und zum Verstoß der Abraummassen zum Einsatz. Die Vorschnittgewinnung erfolgte ab 1957. Erst ab

den 60iger und 70iger Jahren erforderten die Vorfeldverhältnisse eine wesentliche Gewinnung von vornehmlich quartärem Vorschnittmaterial. Im Zeitraum 1969- 1976 erfolgte auch der Versturz von Aufschlussmassen des Tagebaues Peres in die Absetzerkippe. Die aktive Kohleförderung endete 1994, wobei die Restauskohlung noch bis zum Juni 1996 andauerte.

3.1.3.2 Abbautechnologie

Die Gewinnung des Abraumes im Hangenden des Böhlener Oberflözes erfolgte mittels eines Abraumförderbrückenverbandes. Im gesamten überbaggerten Kohlefeld wurden sowohl das „Böhlener Oberflöz“ als auch das „Bornaer Hauptflöz“ gebaut. Eine selektive Gewinnung anderer Rohstoffe (Tone, Kiese) erfolgte nur sporadisch. Der Tagebau wurde im Parallel- und im Schwenkabbaubetrieb gefahren. Die maximale Abraumschritthöhe betrug ca. 45 m. Der Mittelabraum (zwischen den beiden gebauten Flözen) wurde mittels Zugbetrieb transportiert und in die Absetzerkippe verkippt. Eine Vorschnittgewinnung (Abraummächtigkeit > 45 m) erfolgte erst im nördlichen Bereich des überbaggerten Kohlefeldes.

3.1.3.3 Kippenaufbau

Die entstehende Abraumkippe lässt sich in eine aus zwei Abwürfen resultierende Abraumförderbrückenkippe (AFBK) und in die Absetzerkippe (ASK) gliedern. Das Kippenliegende wird durch die Restkohle des gebauten Bornaer Hauptflözes sowie dessen Liegendenschluff gebildet. Die AFBK ist vornehmlich durch die unteroligozänen Sande und Schluffe der „Oberen- und Unteren Meeressande“ gekennzeichnet. Der Anteil quartärer Substrate ist sehr begrenzt und eher lokal. Die ASK beinhaltet vor allem Mittelmassen und Vorschnittmaterial. Dabei wird die ASK im Südteil vornehmlich durch Mittelmassen gebildet, da zum Zeitpunkt der Verkipfung kein nennenswerter Vorschnitt gewonnen wurde. Der Anteil an quartärem Vorschnittmaterial nimmt nach Norden und vor allem bei jüngerem Verkipfungsalter deutlich zu. Die in Kap. 3.1.3.1 bereits erwähnten Aufschlussmassen des Tagebaus Peres wurden im Westteil der ASK, Höhe „Rückhaltebecken Stöhna“, verkippt. Den Abschluss der ASK bildet eine 1–2 m mächtige Rekultivierungsschicht (quartäres Material). Die örtliche Zuordnung der in die Absetzerkippe verkippten Massen ist, im Gegensatz zur Förderbrückenkippe, deutlich schwerer.

3.2 Untersuchungsgebiet Jänschwalde

3.2.1 Geographische Lage und klimatische Verhältnisse

Das Untersuchungsgebiet befindet sich östlich der Stadt Cottbus in unmittelbarer Nähe zur Neiße (Staatsgrenze zur Republik Polen). Es ist klimageographisch in die thermisch kontinentalen Bereiche der Klimaregion „Nordostdeutsches Tiefland“ einzuordnen. Die Jahresmitteltemperatur liegt bei 8,5 °C. Für den Zeitraum 1901 – 1950 wird für die Station Cottbus ein Niederschlagsmittel von 586 mm/a angegeben (GROßER [1998]).

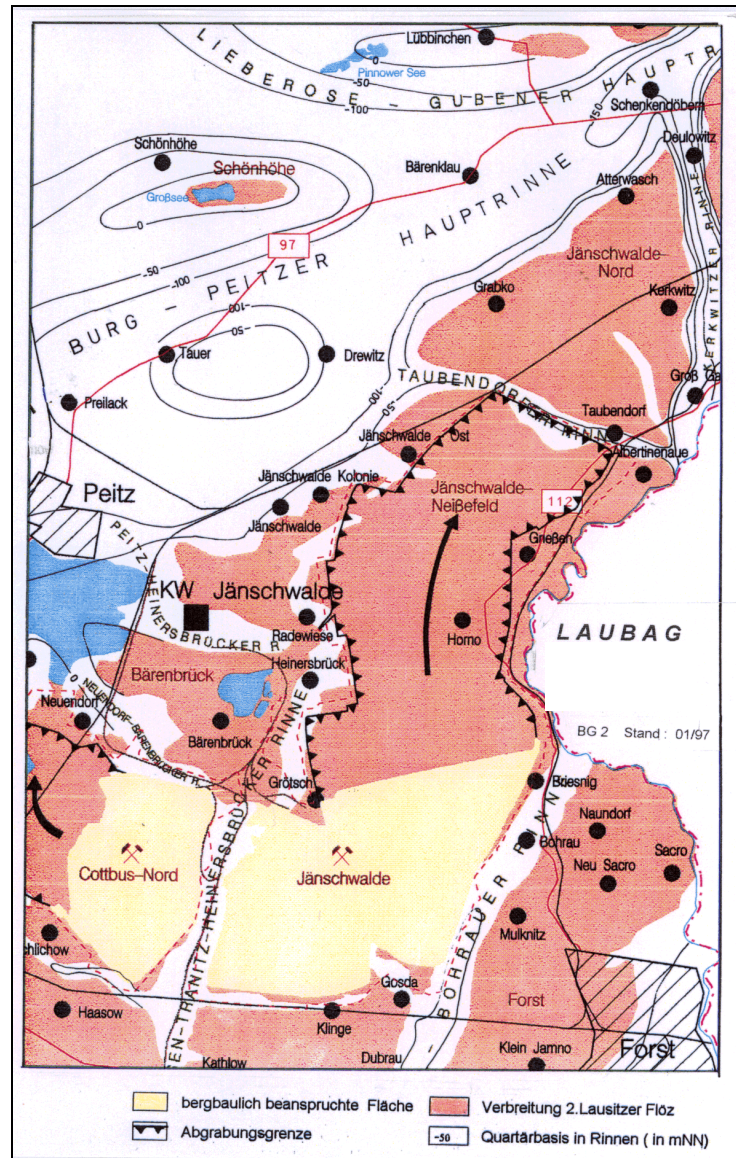


Abb. 3.2.1 Übersichtskarte des Kohlefeldes Jänschwalde (LAUBAG [1997])

3.2.2 Geologische Verhältnisse

3.2.2.1 Überblick

Der prätertiäre Unterbau des Untersuchungsgebietes wird durch den SE - Teil der Ostbrandenburgischen Kreidesenke gebildet. Das Kohlefeld ist durch tiefe pleistozäne Erosionsrinnen in einzelne Teilfelder gegliedert (siehe Abb. 3.2.1). Der Verlauf der Abgrabungsgrenze im Endzustand des Tagebaus Jänschwalde (voraussichtlich 2019) wird durch im Süden, Westen, Norden und Südosten vorhandene glazigene Rinnen vorgegeben. In diesen Rinnenstrukturen wurden die tertiären Sedimente bis weit unter das Niveau des gebauten 2. Lausitzer Flözhorizontes (2. LFH) erodiert. Die grundlegenden geologischen Arbeiten des Gebietes sind die detaillierten Erkundungsberichte der Kohlefelder aus den 60er bis 80er Jahren (LEOPOLD ET AL. [1964], GRUNERT ET AL. [1978] und SEIBEL ET AL. [1985]).

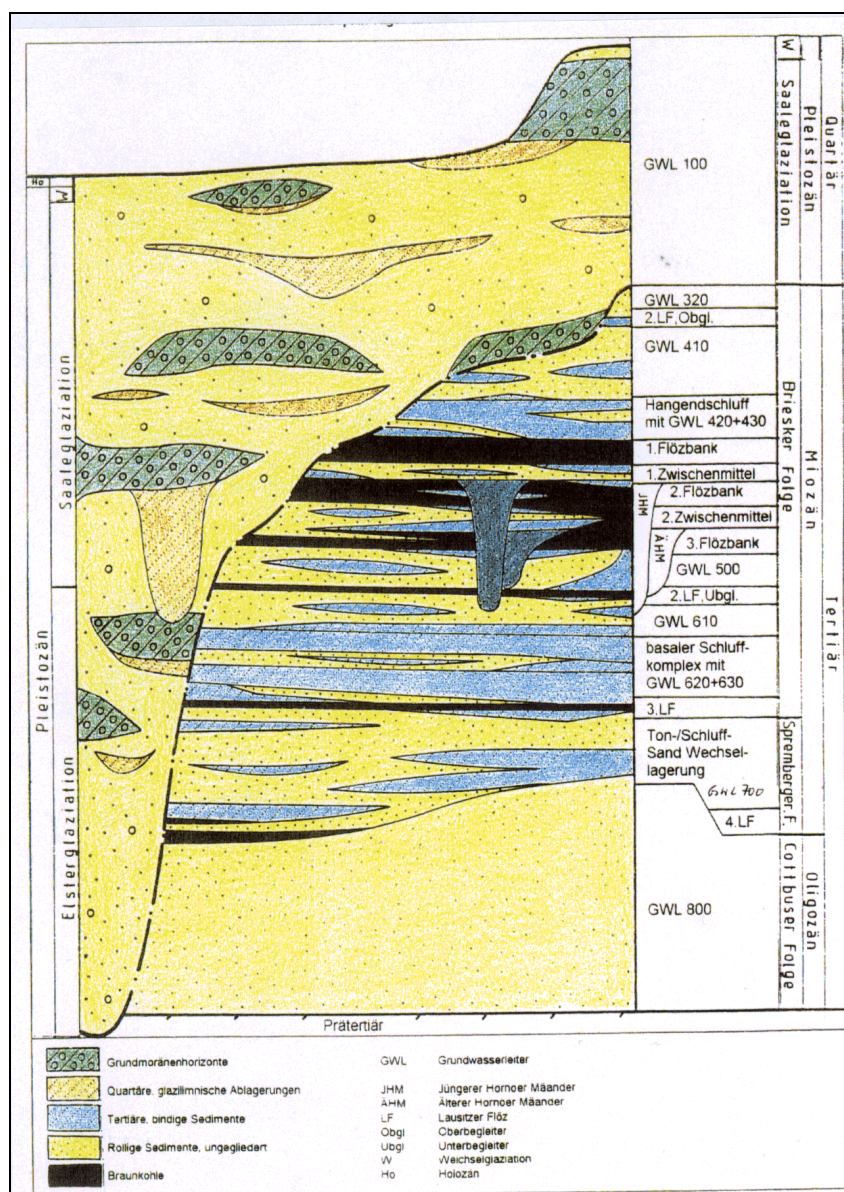


Abb. 3.2.2 Normalprofil des Kohlefeldes Jänschwalde unmaßstäblich (LAUBAG [1997])

3.2.2.2 Normalprofil

Es erfolgt die kurze Beschreibung der kippenrelevanten Schichtfolge im Hangenden des GWL 500. Die Abfolge ist unmaßstäblich in Abb. 3.2.2 dargestellt.

Tertiär

2. Lausitzer Flözhorizont

Im Gegensatz zum Südraum des Niederlausitzer Lagerstättenbezirkes ist das Flöz, durch Einschaltung von Zwischenmitteln, in 2 bzw. 3 Bänke gespalten. Die Mittel bestehen dabei jeweils aus einer gleichbleibenden Abfolge aus Hangendschluff der unteren Flözbank, sandigem Mittel und Liegendeschluff der oberen Bank.

Obere Briesker Schichten

Die hangenden tertiären Sedimente unterteilen sich grob in eine schluffige Folge unmittelbar oberhalb des 2. LFH (Hangendschluff- Komplex) sowie eine sich anschließende Feinsand-Folge (höchste tertiäre Sande). Der Hangendschluff- Komplex besteht dabei in seiner Normal-

ausbildung aus 3 Schluffbänken. Zwischen diesen ist jeweils ein sandiger, geringmächtiger GWL (GWL 430, 420) eingeschaltet. Im Norden des Kohlefeldes keilen die sandigen Zwischenlagen aus. Die höchsten tertiären Sande werden vor allem aus der Feinsandfolge des GWL 410 und lokal des GWL 320 gebildet. Als Trennung zwischen GWL 410 und 320 tritt, als Äquivalent für den im Kohlefeld nicht vorhandenen Oberbegleiter des 2. LFH, ein schwach kohlehaltiger Schluff auf. Jüngeres Tertiär ist im Untersuchungsgebiet nicht vorhanden. Als Besonderheit ist die Tertiärhochfläche in Höhe der Ortslage Horno hervorzuheben. Hier steilt die Quartär-/Tertiärgrenze bis auf 50 müNN auf. Dies wird für diesen Bereich einen stark erhöhten Anteil an tertiärem Material am AFBK-Substrat zur Folge haben.

Quartär

Innerhalb des Kohlefeldes sind sowohl elster-, als auch saale- und weichselglaziale Sedimente anzutreffen, dabei dominieren die saalezeitlichen Ablagerungen deutlich. Die Gesamtheit der quartären Sande bildet den mächtigen GWL 100. Der Anteil der quartären Sedimente am Gesamtabraum nimmt nach Norden hin, in Richtung Taubendorfer Rinne, zu.

Elsterzeitliche Bildungen

Es handelt sich um Geschiebemergel und Bänderschluflfe mit Feinsandeinlagen des E2-Stadials. Dabei besitzen die Sedimente nur eine lokale Verbreitung in Rinnennähe.

Saalezeitliche Bildungen

Die Mächtigkeiten der Sedimente der Saalestadiale nehmen von S1 zu S3 ab. Die petrographische Zusammensetzung der einzelnen Stadiale ist annähernd gleich: Die Vorschüttbildungen werden durch Fein- bis Grobsande, teilweise Schluffe gebildet. Die Grundmoränen sind durch Geschiebemergel geprägt, während die Nachschüttbildungen sich durch einen Wechsel zwischen Schluffen/Tonen und Fein- bis Grobsanden auszeichnen.

Weichselzeitliche Bildungen

Es handelt sich um Sande und Kiese, die an der Basis eine Geröllschicht aufweisen.

3.2.3 Tagebauentwicklung, Abbautechnologie und Kippenaufbau

3.2.3.1 Tagebauentwicklung

Die Aufschlussfigur für den Tagebau Jänschwalde wurde südwestlich der Ortschaft Grötsch in den Jahren 1974-76 aufgeföhren. Die Aufschlussmassen gelangten auf die Außenhalde Bärenbrück. Ab 1978 erfolgte der Einsatz eines Abraumförderbrückenverbandes „AFB 60“. Im Zeitraum 1983-86 wurde der Süddrandschlauch geschaffen, welcher als Aufschlussfigur für den Tagebau Jänschwalde- Süd geplant war. Bis 1992 erfolgte eine Schwenkbetriebsfahrweise, in etwa mit der Aufschlussfigur als Schwenkpunkt. Seit 1993 wird die Förderbrücke im Parallelbetrieb geföhren. Der Tagebau soll bis etwa 2019 betrieben werden und seinen Endstand in Höhe der Taubendorfer Rinne erreichen (siehe Abb. 3.2.1).

3.2.3.2 Abbautechnologie

Der Einsatz einer AFB 60 ermöglicht den Förderbrückenversturzung von Deckgebirgsmächtigkeiten bis 60 m. Abbildung 3.2.3 zeigt die 3 den Abraum fördernden Eimerkettenbagger (Es3750), die sowohl im Hochschnitt als auch im Tiefschnitt geföhren werden können. Die Versturzung des Abraumes auf der Kippenseite erfolgt durch 3 Abwürfe .



Abb. 3.2.3 Abraumförderbrückenverband im Tagebau Jänschwalde

Es wurden/ werden, mit Ausnahme des südwestlichsten Tagebauteils, alle 3 Bänke des 2.LFH gebaut.

3.2.3.3 Kippenaufbau

Die Abraumkippe lässt sich in eine Vorkippe mit Vorberme, eine AFB-Kippe und die AS-Kippe gliedern. Das Kippenliegende wird durch den Liegendenschluff der jeweils gebauten Flözbank gebildet. Dieser Liegendenschluff wurde/ wird während des Tagebaubetriebs teilweise aufgerissen, um den GWL 500 hydraulisch zu entspannen. Die Vorkippe gewährleistet die Standsicherheit des kippenseitigen Brückenfußes (vgl. Kap. 2.3.1). Hierzu erfolgt für den oberen Teil der Vorkippe eine ca. 4m mächtige „Bekiesung“ mit rollig-quartärem Material. Die AFB-Kippe wird zum einen durch die miozänen Sande und Schluffe der „Oberen Briesker Schichten“ gebildet, zum anderen durch die vornehmlich saalezeitlichen Quartärsubstrate. In Abb. 3.2.3 wird diese Unterteilung der anstehenden Sedimente (rechter Bildteil) gut sichtbar. Die Hauptarbeitsebene kennzeichnet in etwa die Quartär/ Tertiär-Grenze. Oberhalb dieser Ebene sind in Gelbtönen die Quartärsubstrate zu erkennen. Unterhalb der Hauptarbeitsebene werden die Tertiärsubstrate in den Farbtönen Grau, Braun, Schwarz ersichtlich. Auf der Kippenseite (linker Bildteil) wird die Vermengung der Substrate deutlich. Die Absetzerkippe wird nachfolgend aufgetragen und resultiert aus den im Vorschnitt gewonnenen Massen. Dabei handelt es sich um Quartärmaterial. Für diesen Kippenteil werden vor allem die Geschiebemergel- Substrate des Hornoer Berges verwendet.

4 Hydraulische Modellierungen zur Wiederaufsättigung von Kippen

4.1 Modellgrundlagen

Die Wiederaufsättigung der Kippenkörper mit Kippengrundwasser stellt ein 2 Fluidphasen-Problem dar. Die hydrologische Beschreibung der Wasserbewegung in der Aerationzone erfolgt üblicherweise mit der RICHARDS-Gleichung (Gl. 4.1.3). In dieser Gleichung wird der Strömungsprozess innerhalb der Gasphase vernachlässigt. Es wird somit ein teilgesättigtes 1 Fluidphasen-Problem betrachtet. Grundlage dafür ist die Annahme, dass die Fließvorgänge in der Gasphase für die Abbildung der Wasserbewegung keine wesentliche Rolle spielen. Die Druckunterschiede innerhalb der Gasphase werden auf Grund der hohen Kompressibilität des Gases als vernachlässigbar angesehen. Bei eindimensionaler Betrachtung in z-Richtung (mit $\rho_w = \text{const.}$) ergibt sich somit die Fließgeschwindigkeit der Wasserphase (DARCY-Gleichung) nach BUSCH & LUCKNER [1993] zu:

$$v_z = -k(\theta) \frac{\partial h}{\partial z} = -k(\theta) \left[1 + \frac{\partial h_p}{\partial z} \right] \quad (\text{Gl. 4.1.1})$$

wobei gilt $h_p = -h_c = -\psi = (p_w - p_G) / (\rho_w/g)$ für $p_G = 0$ gilt $h_c = -p/\rho g$

v_z Fließgeschwindigkeit in z-Richtung

$k(\theta)$ Durchlässigkeitsbeiwert, Funktion des volumetrischen Wassergehalts

h_p Druckhöhe

h_c Kapillardruckhöhe $\hat{=}$ ψ Saugspannungshöhe

p_G Überdruck in der Gasphase gegenüber Atmosphärendruck

p_w Überdruck in der Wasserphase gegenüber Atmosphärendruck

ρ_w Dichte des Wassers

w_0 Quell-/ Senkenterm in Gl. 4.1.2 bzw. 4.1.3

$$\text{div } \vec{v} = -\frac{\partial \theta}{\partial t} + w_0 \quad (\text{Gl. 4.1.2})$$

BUSCH & LUCKNER [1993] leiten durch Einsetzen von Gl. 4.1.1 in die Bilanzgleichung Gl. 4.1.2 die RICHARDS-Gleichung (Gl. 4.1.3) her. Die Beschreibung der gegenseitigen Abhängigkeit zwischen h_c und θ erfolgt dabei durch die kapillare Speicherkapazität C . Dieser kapillaren Speicherkapazität liegt der funktionale Zusammenhang $h_c = f(\theta_w)$ zu Grunde, der als Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung (oder Saugspannungs-Sättigungs-Beziehung) bezeichnet wird. BUSCH & LUCKNER [1993] diskutieren eingehend die Unterschiede für die aus Messungen erhaltenen Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen auf Grund der Richtung des Prozesses (Wetting bzw. Drainage). Für die numerische Abbildung der Prozesse ist es demzufolge wesentlich, eine mittlere Kurve zu berücksichtigen.

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(k(\theta) \frac{\partial h}{\partial z} \right) = C \frac{\partial h}{\partial t} - w_0 \quad (\text{Gl. 4.1.3})$$

Wesentlichstes Kennzeichen der RICHARDS-Gleichung (Gl. 4.1.3) ist die Abhängigkeit des Durchlässigkeitsbeiwertes k vom volumetrischen Wassergehalt θ^{13} . Es ist für den jeweiligen Wassersättigungszustand der geltende Durchlässigkeitsbeiwert zu bestimmen.

Insgesamt ist ein Parametermodell notwendig, welches zum einen die für das durchströmte Medium geltende Kapillardruck–Sättigungs-Beziehung beschreibt und zum anderen die relativen Durchlässigkeitsbeiwerte ausweist.

Die gebräuchlichsten Modellansätze zum Fitting gemessener Kapillardruck-Kurven und gleichzeitiger Ausweisung relativer Durchlässigkeitsbeiwerte k stellen BROOKS & COREY [1964] sowie VAN GENUCHTEN [1980] dar. Nach VAN GENUCHTEN [1980] wird die Kapillardruck-Kurve durch Gl. 4.1.4 beschrieben.

$$\frac{(\theta_w - \theta_{wr})}{(\theta_{ws} - \theta_{wr})} = \left[1 + \left(\frac{h_c}{h_g} \right)^n \right]^{-m} \quad (\text{Gl. 4.1.4})$$

θ_w volumetrischer Wassergehalt

θ_{wr} volumetrischer Wassergehalt, bei Restsättigung

θ_{ws} volumetrischer Wassergehalt, bei Vollsättigung (= Restsättigung Luft)

h_g Kapillardruck „Scaling-Parameter“

n, m Fittingparameter

Setzt man für den linken Gleichungsausdruck s_e (effektive Sättigung), für $h_g = 1/A$ und für $h_c = \psi$ so erhält man Gl. 4.1.5

$$s_e = \left[\frac{1}{\left(1 + (A \cdot \psi)^n \right)^m} \right] \quad (\text{Gl. 4.1.5})$$

Nach VAN GENUCHTEN [1980] sind dabei n und m abhängige Parameter nach Gl. 4.1.6

$$m = 1 - k_m / n \quad \text{mit } n > k_m \quad (\text{Gl. 4.1.6})$$

Dabei gilt für die Theorie nach MUALEM [1976] $k_m = 1$ und für die Theorie nach BURDINE [1953] $k_m = 2$ (genauere Erläuterung siehe z.B. HAVERKAMP ET AL. [1999]).

Der relative Durchlässigkeitsbeiwert ergibt sich dann nach Gl. 4.1.7.

$$k_r = \frac{k}{k_s} = \left(s_e^{0.5} \cdot \left[1 - (1 - s_e)^{\frac{1}{m}} \right]^m \right)^2 \quad (\text{Gl. 4.1.7})$$

BUSCH & LUCKNER [1993] weisen darauf hin, dass die Parameter m und n , auf Grund fehlender physikalischer Bedeutung, als unabhängige Fitparameter zu verstehen sind. HAVERKAMP ET AL. [1999] führen in Bezug auf die Restsättigungen θ_{wr} aus, dass dieser Parameter innerhalb des VAN GENUCHTEN-Modells nicht in seinem eigentlichen physikalischen Sinn zu verstehen ist, sondern als Fitparameter. Deshalb sollte er nach KOOL, PARKER & VAN GENUCHTEN [1987] = 0 gesetzt werden.

¹³ Diese Abhängigkeit kann auch als $k(s)$ abgebildet werden. Dabei stellt s die Sättigung (Wassergehalt bezogen auf das Porenraumvolumen -Porosität) dar.

Die verbreitete Anwendung der Modellierung des Wasserflusses in der wasserteilgesättigten Aerationzone mittels der RICHARDS-Gleichung (Gl. 4.1.3) ist auf die wesentlich einfachere mathematisch - numerische Aufgabe zurückzuführen. Die Berücksichtigung beider fluider Phasen ist eine kompliziertere Fragestellung, da jeweils eine Strömungsgleichung für die Phase Wasser und Gas zu lösen ist. Für die ausgedehnten wasserteilgesättigten Zonen in Kippenkörpern ist festzuhalten, dass die Erfüllung der Voraussetzung für die Vereinfachungen der RICHARDS-Gleichung (keine Druckunterschiede innerhalb der Gasphase) fraglich ist. Dies begründet sich durch die großen Abmaße der ungesättigten Zonen.

Die Vorgehensweise zur Modellierung von Zwei- oder Mehrfluidphasen Systemen bezüglich der Grundwasserzone wird ebenfalls in BUSCH & LUCKNER [1993] aufgezeigt¹⁴. Bei Berücksichtigung beider Fluide ergibt sich die Notwendigkeit der Festlegung relativer Gas-Durchlässigkeitsbeiwerte. Für das VAN GENUCHTEN-Modell leitet sich dazu Gl. 4.1.8 ab, wobei nach BUSCH & LUCKNER [1993] γ zwischen 1/3 und 1/4 anzunehmen ist.

$$k_{Gr} = \frac{k_G}{k_{Gs}} = \left(s_{Ge}^\gamma \cdot \left[1 - (1 - s_{Ge})^{\frac{1}{m}} \right]^m \right)^2 \quad (\text{Gl. 4.1.8})$$

Bei der Modellierung von Zwei- und Mehrfluidphasen-Systemen spielen die Benetzungseigenschaften des Grundwasserleitermaterials (Festphase) und der Fluide eine wesentliche Rolle. Im Normalfall, silikatische Grundwasserleitermatrix, stellt die Wasserphase die benetzende Phase und die Gasphase die nicht benetzende Phase dar. Die Fragestellung, inwieweit die hohen Anteile an organischer Substanz in den Braunkohlenkippen dies relativiert, ist nicht Gegenstand der hier vorliegenden Untersuchungen¹⁵.

4.2 Modellansätze

4.2.1 Problemstellung

Wie bereits in Kap. 2.3.2 dargestellt, ergibt sich eine Diskrepanz zwischen ausgewiesenen Versickerungsraten aus der oberen Bodenzone der Kippen und den dokumentierten Anstiegen in KGWM. Im Folgenden werden die ebenfalls in Kap. 2.3.2 erwähnten prinzipiellen Modellbetrachtungen von CHRISTOPH [1999] und DOHRMANN [2000] kritisch diskutiert und mit eigenen Modellierungen untersetzt. CHRISTOPH und DOHRMANN treffen für den hier betrachteten Teil ihrer Modellierungen folgende Annahmen:

- Die Kippenmatrix der AFB-Kippe wird mit $k_f = 10^{-7}$ m/s angesetzt.
- Es werden geringmächtige Drainageschichten ($k_f = 10^{-5}$ m/s) angenommen, die ca. 45 ° geneigt sind und die gesamte Kippe durchziehen.
- Die Oberfläche der AFB-Kippe wird durch eine 3 m mächtige „Kolmationsschicht“ ($k_f = 10^{-8}$ m/s) gebildet.

¹⁴Die Fragestellung von Mehrfluidphasen-Systemen ist ebenfalls für Erdöl-/Erdgaslagerstätten von großer Bedeutung. Daraus resultiert eine umfangreiche Literatur zur Problematik (z.B. AZIZ & SETTARI [1979]).

¹⁵Organische Feststoffoberflächen sind durch andere Benetzungseigenschaften gekennzeichnet – Gas wird zur benetzenden und Wasser zur nicht benetzenden Phase (siehe z.B. BUSCH & LUCKNER [1993]).

- Die Formulierung der Kapillardruck–Sättigungs-Beziehung und der relativen Durchlässigkeitsbeiwerte erfolgt nach dem VAN GENUCHTEN-Modell. Es kommen dabei die Parameter $A = 1,2 \text{ m}^{-1}$ und $n = 3$ zum Ansatz.
- Für alle drei betrachteten Substrate sind lediglich die Durchlässigkeitsbeiwerte unterschiedlich. Sowohl die Anfangswassersättigung ($s = 0,5$) als auch die Porosität ($n = 0,55$) und die VAN GENUCHTEN-Parameter werden für alle drei Substrate gleich angesetzt.

Die Modellierungen liefern folgende wesentliche Ergebnisse:

Der Wassertransport erfolgt vor allem innerhalb der Drainageschichten. Es zeigt sich für die ersten 7 Jahre eine mittlere Anstiegsgeschwindigkeit des Kippengrundwassers von ca. 1,2 m/a. Eine Rechnung ohne Versickerung am oberen Modellrand zeigt immer noch eine Anstiegsgeschwindigkeit von 0,9 m/a. CHRISTOPH und DOHRMANN weisen damit die Entkopplung zwischen Versickerungsraten am oberen Modellrand und Wiederanstieg des Kippengrundwassers im initialen Stadium der Kippen nach. Die Autoren führen dabei den schnellen Anstiegsprozess auf die Drainageschichten und die k_f -Wertverteilung zwischen Kippenmatrix und Drainageschichten zurück.

Die eigenen Modellierungen werden jetzt folgende Aspekte berücksichtigen:

- Die Abbildung der Prozesse erfolgt mittels eines 2 Fluid-Phasen-Modells.
- Die Annahme gleicher Kapillardruck–Sättigungs-Beziehungen, relativer Durchlässigkeiten, Porositäten und Anfangssättigungen für die 3 unterschiedenen Substrate, bei deutlich unterschiedlichen Durchlässigkeitsbeiwerten, ist nicht realistisch. Dies wird auf Grundlage des VAN GENUCHTEN – Modells verändert.
- Die Ausprägung von „homogen strukturierten“ Drainagezonen ist für die betrachteten Kippenkörper strittig, da nicht in ausreichender Größenordnung grobkörnigere Vorfeld-sedimente vorhanden sind.
- Die Ausprägung von 3 m mächtigen Kolmationszonen im Oberteil der AFB-Kippe, mit sehr niedrigen k_f -Werten, bei gleichzeitiger Versickerung (obere Randbedingung) von 200 mm/a ist ebenfalls zu diskutieren.

4.2.2 Modellierungsprogramm und Modellvarianten

Die Modellierung erfolgt mit dem Programm MULTIF (NEKRASSOV ET AL. [2001], NEKRASSOV [2002]). Dieses Programm ist auf die Modellierung von Mehrfluidphasen-Systemen ausgerichtet. Sein konzeptionelles Augenmerk liegt dabei auf der 3D-Transportmodellierung von Mehrkomponenten-Systemen in Zusammenhang mit der Förderung aus Erdöl-/ Erdgas-Lagerstätten. Als vereinfachter Spezialfall kann damit auch ein Strömungsproblem für ein Zweifluidphasen-System modelliert werden. Als numerisches Lösungsschema wird ein Finites-Volumenverfahren benutzt. Neben der Vorgabe der Parameterfelder sind tabellarisch die Kapillardruck–Sättigungs-Beziehung der benetzenden Phase sowie die relativen Permeabilitäten für benetzende und nicht benetzende Phase zu definieren.

Es wurden 2 Modellvarianten berechnet. **Modellvariante 1** besitzt die gleichen strukturellen Elemente und Durchlässigkeitsbeiwerte wie das Modell von CHRISTOPH [1999] und DOHRMANN [2000]. Abb. 4.2.1 verdeutlicht den prinzipiellen Kippenmodellaufbau. Die grünen Gitterelemente stellen die Kippenmatrix dar. Rot sind die Drainagezonen, ockerfarbig die Kolmationsschicht und blau die Elemente mit Versickerung ausgewiesen.

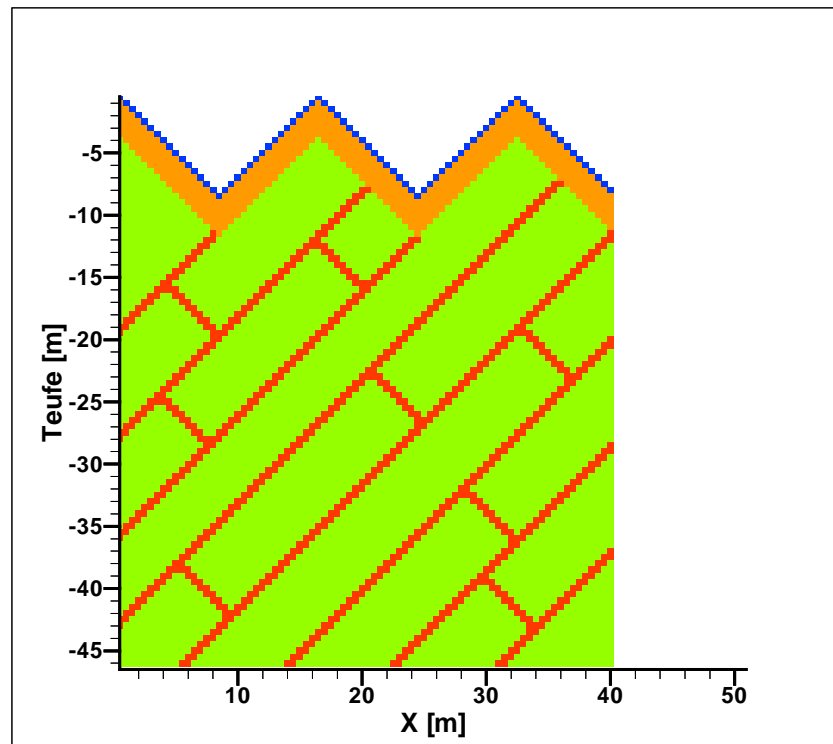


Abb. 4.2.1 Struktureller Modellaufbau der MULTIF Modellierungen – Modellvariante 1

Ziel der Modellvariante 1 ist der Vergleich zwischen Berechnungen mit und ohne Berücksichtigung von Drainagezonen. Folgende Berechnungen werden für Variante 1 durchgeführt:

- **Berechnung 1a)**: mit Drainagen; Versickerung = 200 mm/a
- **Berechnung 1b)**: ohne Drainagen; Versickerung = 200 mm/a

Modellvariante 2 untersucht den Einfluss der Versickerung auf den Kippengrundwasserwiederanstieg. Dafür wird für den gesamten Kippenausschnitt eine einheitliche Zusammensetzung berücksichtigt (keine Drainagen und keine Kolmationsschicht). Folgende Berechnungen werden für Variante 2 durchgeführt:

- **Berechnung 2a)** : Kippenzusammensetzung $\hat{=}$ „Matrix“ (vgl. Tab.4.2.1); Versickerung = 100 mm/a
- **Berechnung 2b)** : Kippenzusammensetzung $\hat{=}$ „Matrix“ (vgl. Tab.4.2.1); Versickerung = 0 mm/a (keine Versickerung)
- **Berechnung 2c)** : Kippenzusammensetzung $\hat{=}$ „Drainageschicht“ (vgl. Tab.4.2.1); Versickerung = 100 mm/a

Dabei soll Berechnung 2c) die grobkörnigeren Verhältnisse des Lausitzer Reviers modellhaft abbilden. Für alle Berechnungen (Modellvarianten 1 und 2) wurde die gleiche feine Diskretisierung von $0,5 * 0,5$ m Rasterlänge gewählt. Dies erfolgte, um die geringmächtigen Drainagezonen exakt abbilden zu können. Daraus resultieren stark erhöhte Rechenzeiten. Der linke, rechte und untere Rand des Modells werden wie in CHRISTOPH [1999] und DOHRMANN [2000] als RB 2. Art ($Q=0$) gehandhabt.

4.2.3 Modellparameter

Bezüglich der Kapillardruck-Sättigungsbeziehung und der relativen Durchlässigkeiten werden die Annahmen von CHRISTOPH und DOHRMANN auf Basis des VAN GENUCHTEN-Modells (mit MUALEM-Theorie) überarbeitet. Grundlage dafür sind die Messergebnisse zur Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung von RINKER [2001] (siehe auch RINKER in TUBAF [2000]). Diese Daten werden mit typischen Kurvenverläufen aus der Literatur untersetzt. Das Ziel besteht darin, für die durch DOHRMANN und CHRISTOPH angesetzten k_f -Werte der einzelnen Substrate sinnvolle, differenzierte VAN GENUCHTEN-Parameter abzuleiten.

Abb. 4.2.2 zeigt die verschiedenen Kurvenverläufe der Kapillardruck- Sättigungs-Beziehungen auf. Der von CHRISTOPH [1999] gewählte Kurvenverlauf spiegelt einen sehr gleichkörnigen Sand wider. Dessen Anwendung auf die betrachteten Substrate (k_f -Werte) ist kaum als realistisch anzusehen. Es werden jetzt Kurvenverläufe gewählt, die eine Abstufung der Substrate darstellen. Die zugehörigen VAN GENUCHTEN-Parameter sind Tab. 4.2.1 zu entnehmen. Beim Fitting der Kapillardruck-Sättigungs-Kurven wurden, im Gegensatz zu CHRISTOPH, die Parameter n und m als unabhängig betrachtet. Weiterhin wurde $\theta_{wr} = 0$ gesetzt. Diese beiden Vorgehensweisen begründen sich aus den in Kap. 4.1 näher erläuterten Aussagen von BUSCH & LUCKNER [1993], HAVERKAMP ET AL. [1999] und KOOL, PARKER & VAN GENUCHTEN [1987]. Es ist somit zu beachten, dass die in Abb. 4.2.2 dargestellte Wassersättigung eine für das VAN GENUCHTEN-Modell ausgewiesene absolute Wassersättigung ist.

In Abb. 4.2.2 bezeichnet „ KrW “ die relative Durchlässigkeit der jeweiligen Substrate bezüglich der Wasserphase und „ KrL “ die relative Durchlässigkeit bezüglich der Gasphase. Für die Wasserphase wird deutlich, dass die grobkörnigeren Substrate bei gleicher Wassersättigung höhere relative Durchlässigkeiten aufweisen. Die resultierenden relativen Durchlässigkeiten der Gasphase sind für alle Substrate nahezu gleich.

Die angesetzten Anfangssättigungen der Substrate resultieren aus der Vorstellung, dass beim Versturz ein Sättigungszustand in der Größenordnung der Feldkapazität ($pF = 1,8$ bis $2,3$) vorliegt. Für alle Substrate wurde ein $pF = 2$ ($h_c = 100$ cm WS $\hat{=}$ 10000 Pa) berücksichtigt. Die Durchlässigkeitsbeiwerte ergeben sich in MULTIF durch Festlegung der Permeabilität K [m^2] sowie der dynamischen Viskosität μ [$Pa \cdot s$] und der Dichte der betrachteten fluiden Phasen.

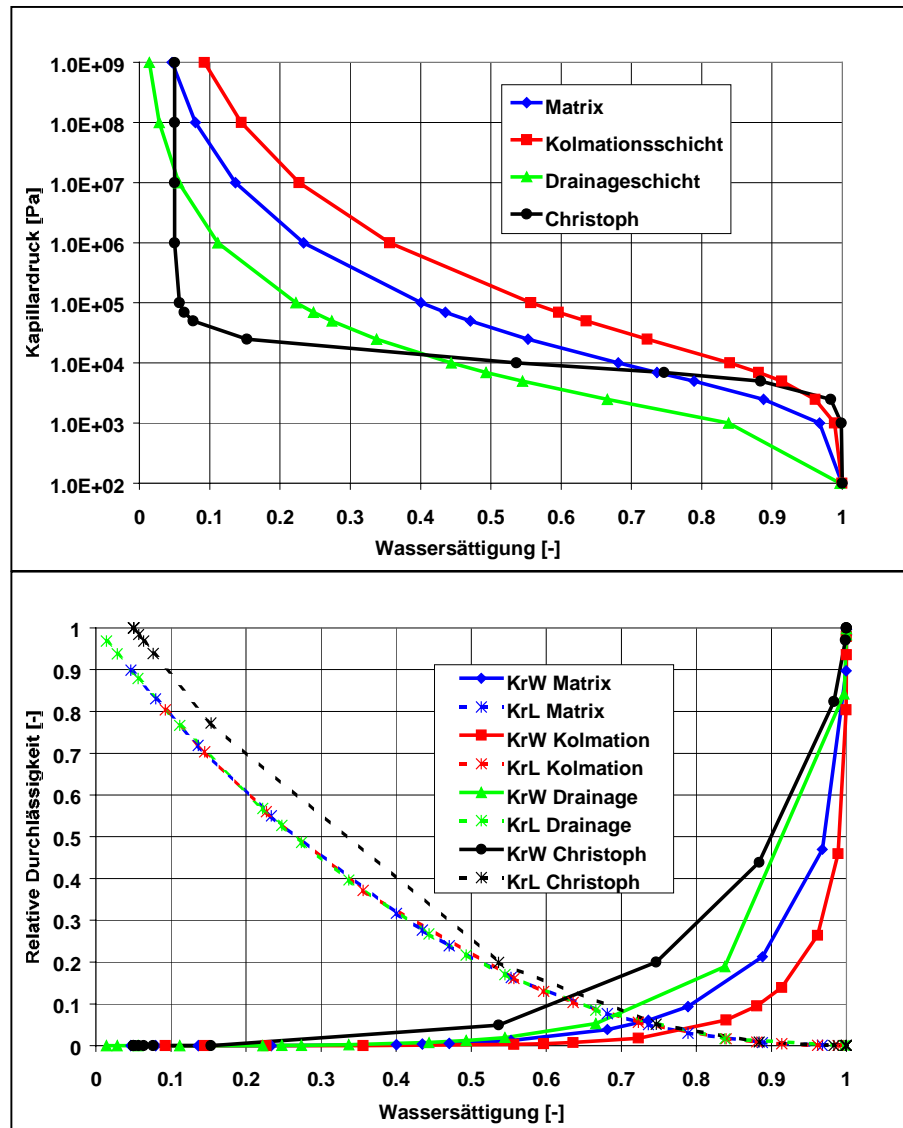


Abb. 4.2.2 Verwendete Kapillardruck-Sättigungs-Beziehungen und relative Durchlässigkeiten der betrachteten Substrate

Tab. 4.2.1 Zusammenstellung der wesentlichen Modellparameter

Parameter	Matrix	Kolmations- schicht	Drainage- schicht	CHRISTOPH [1999]
k_f [m/s]	10^{-7}	10^{-8}	10^{-5}	gleiche Werte
Porosität [-]	0,45	0,5	0,4	0,55
Anfangssättigung [-]	0,68	0,84	0,44	0,5
van Genuchten Parameter				
A [m^{-1}]	5	2	15	1,2
n [-]	1,8	1,5	2	3
m [-]	0,13	0,13	0,15	0,66
θ_{Wr} [-]	0	0	0	0,05

4.3 Modellergebnisse

4.3.1 Modellvariante 1

Die Sättigungsverteilungen für Modellvariante 1a (mit Drainage) und 1b (ohne Drainage) sind für ausgewählte Zeitpunkte in Abb. 4.3.1 dargestellt. Generell wird ersichtlich, dass es in beiden Berechnungen zur schrittweisen Entsättigung der oberen Kippenbereiche kommt. Dies ist verbunden mit einem Anstieg des Kippengrundwassers. Im Vergleich zu Berechnung 1b bewirken die Drainageschichten in Berechnung 1a eine stärkere Entsättigung, begleitet von demzufolge höheren Anstiegsraten des Kippengrundwassers. Nach 3 Jahren kommt es in Modell 1a zu einem Anstieg von 5 m, in Modell 1b von 3 m. Nach 7 Jahren beträgt der Anstieg in Modell 1a = 11m, in Modell 1b = 7m.

Diese Umverteilung des Anfangswassergehaltes beruht auf Kapillardruckphänomenen und der Schwerkraftwirkung. Durch diesen Wasseraufsättigungsprozess im Liegenden der Kippe kommt es zu einem Gasstrom in entgegengesetzte Richtung. Die in Modell 1a an den Rändern endenden Drainagezonen bewirken eine Entsättigung auch in tieferen Bereichen. Dies stellt allerdings einen Modelleffekt dar. Es wird jedoch daraus deutlich, dass grobkörnigere Bereiche auch im liegenden Kippenteil gering gesättigte Zonen hervorrufen können. Generell erhöhen sich die Gassättigungen in grobkörnigeren Bereichen schneller.

Die Ergebnisse beider Berechnungen verdeutlichen weiterhin, dass es zur Ausbildung von „Kapillarsprungsbarrieren“ am Übergang zwischen „Kolmationsschicht“ und „Matrix“ kommt. Auf Grund der Entsättigung im hangenden Teil der „Matrix“ werden die relativen Permeabilitäten am Übergang immer geringer, so dass die angesetzte Versickerungsmenge nicht in den eigentlichen Kippenkörper gelangen kann. Diese Eigendynamik muss erst mit sehr hohen Potentialen überwunden werden.

4.3.2 Modellvariante 2

Die Sättigungsverteilungen für Modellvariante 2a bis 2c sind für ausgewählte Zeitpunkte in Abb. 4.3.2 und 4.3.3 dargestellt. Für Variante 2b (keine Versickerung) wird eine erhöhte Entsättigung im hangenden Kippenteil deutlich. Jedoch zeigen sich für beide Varianten bis ca. 12 Jahre Berechnungszeit die gleichen Kippengrundwasseranstiege. Erst danach unterscheidet sich die Anstiegsgeschwindigkeit der beiden Modellvarianten. Dies wird durch die Ergebnisse für 15 Jahre Berechnungszeit in Abb. 4.3.3 dokumentiert. Von dem Zeitpunkt an, da die Umverteilung des Anfangswassergehaltes nahezu abgeschlossen ist, erhält die Versickerungsmenge aus der oberen Bodenzone eine größere Bedeutung bezüglich der Kippengrundwasserneubildung und damit des Kippengrundwasseranstiegs.

Die Modellvariante 2c bildet die grobkörnigeren Verhältnisse der Lausitzer Kippen modellhaft ab. Der Unterschied zwischen Variante 2a und 2c besteht somit in den verschiedenen hydraulischen Eigenschaften des Kippenmaterials (vgl. Tab. 4.2.1). In Variante 2c kommt es zu einer wesentlich schnelleren Umverteilung des Anfangswassergehaltes.¹⁶ Dies ist mit einem anfänglich sehr starken Anstieg des Kippengrundwassers verbunden.

¹⁶Beim Vergleich der Ergebnisse der Varianten 2a und 2c (Abb. 4.3.2 und 4.3.3) sind die unterschiedlichen Werteskalen zu beachten.

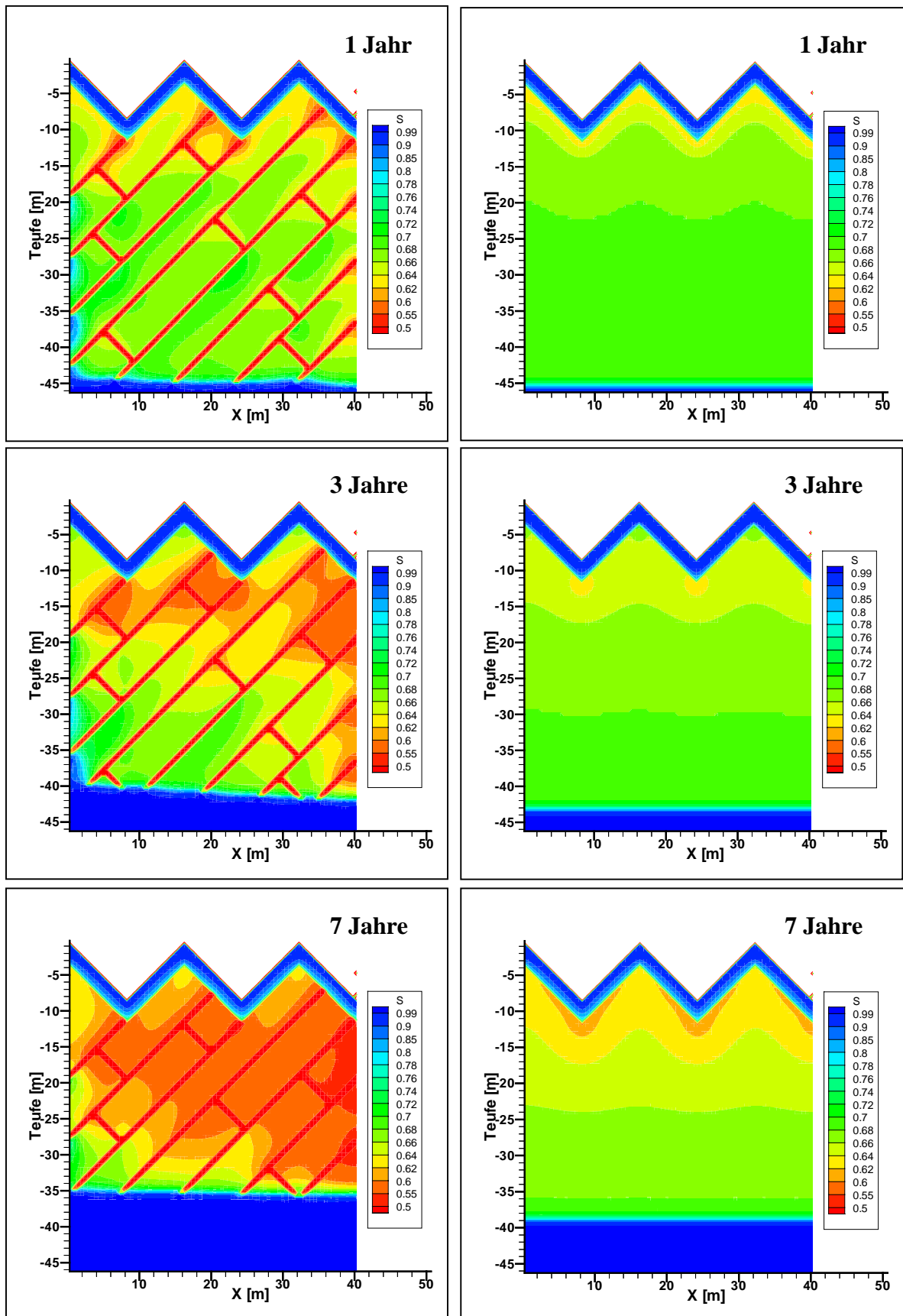


Abb. 4.3.1 Ergebnisvergleich Sättigungsverteilung für Modellvariante 1a (links) mit Modellvariante 1b (rechts) für die Berechnungszeitpunkte 1 Jahr, 3 Jahre, 7 Jahre

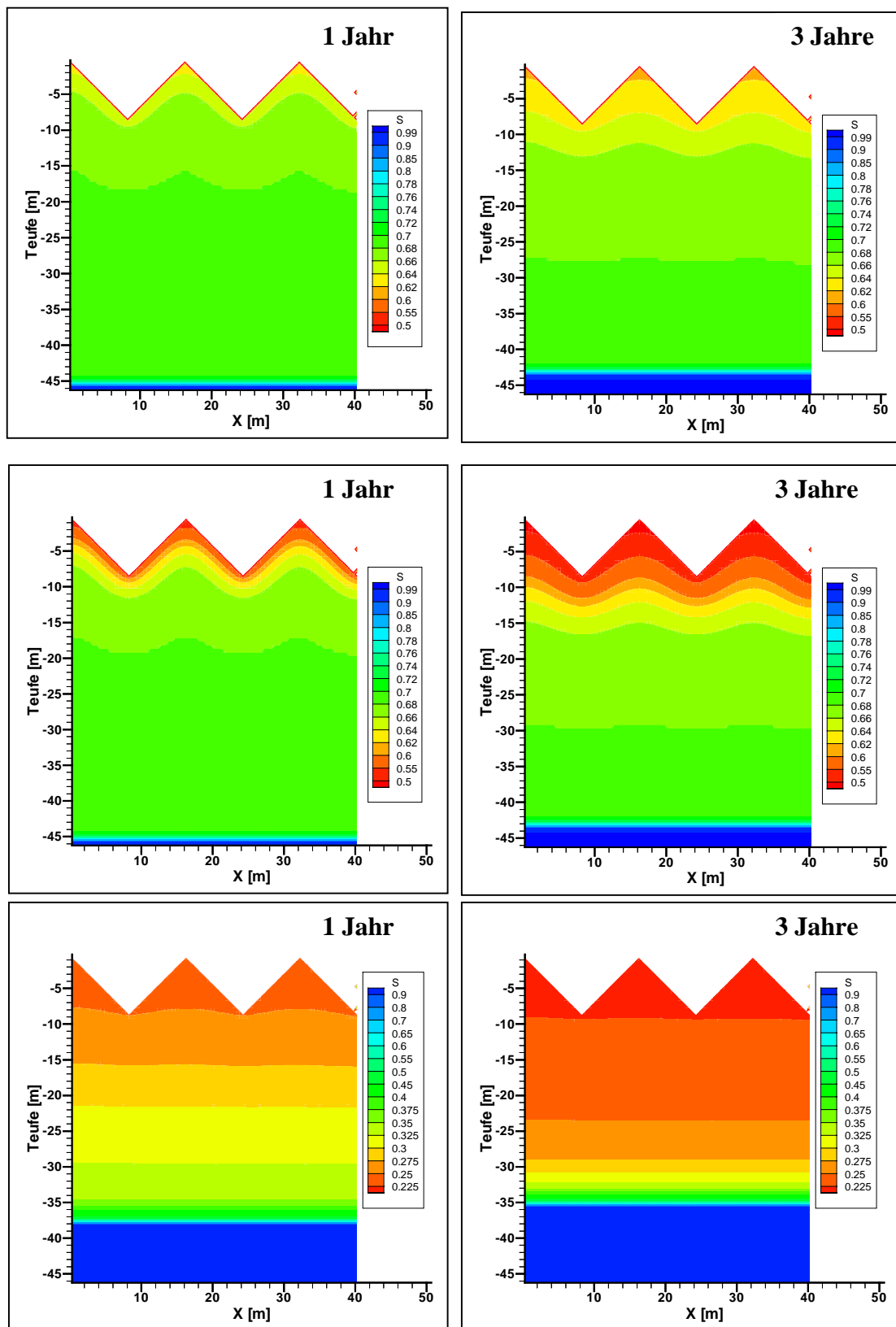


Abb. 4.3.2 Ergebnisvergleich Sättigungsverteilung für Modellvariante 2a (oben), 2b (Mitte) und 2c (unten) für die Berechnungszeitpunkte 1 Jahr und 3 Jahre

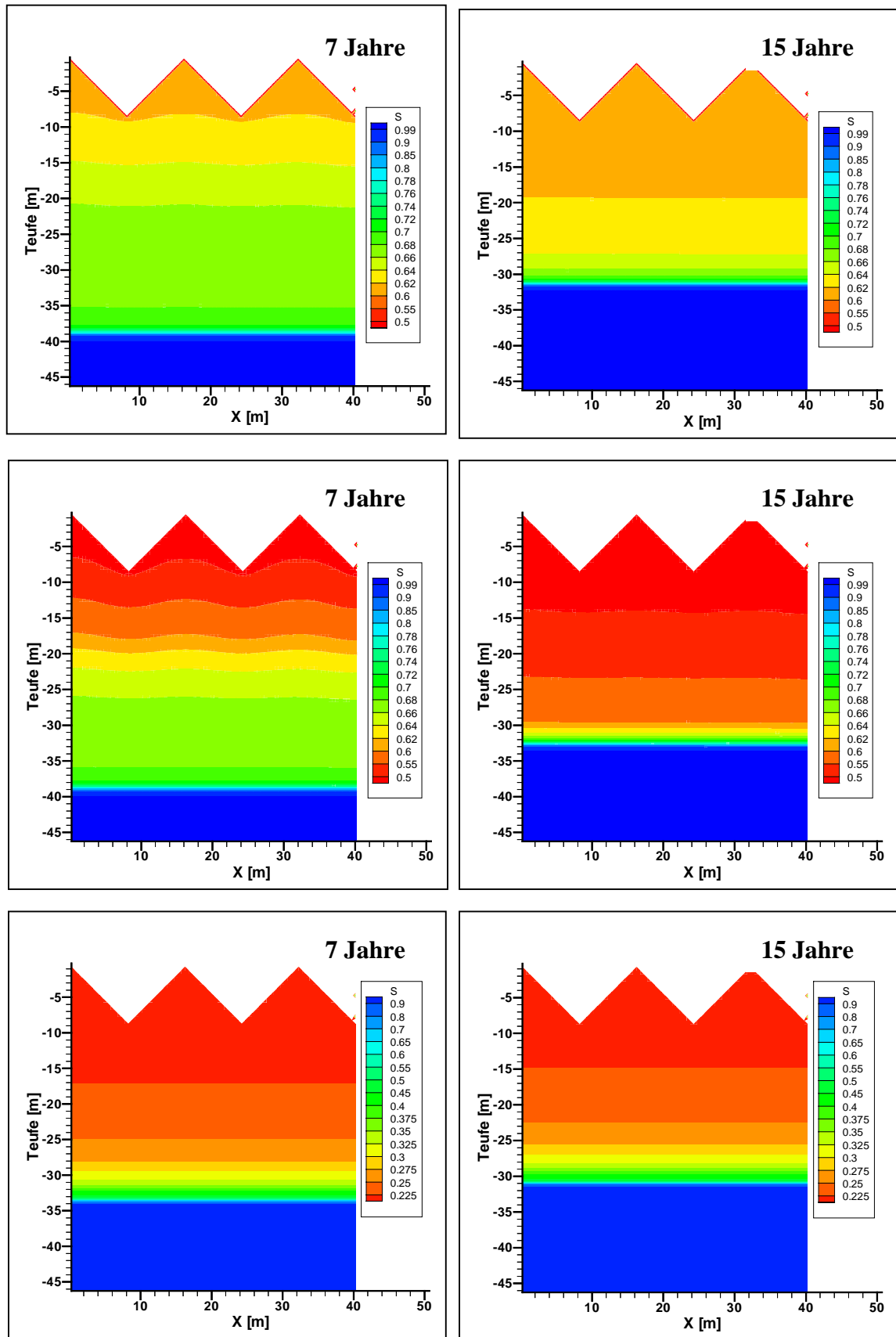


Abb. 4.3.3 Ergebnisvergleich Sättigungsverteilung für Modellvariante 2a (oben), 2b (Mitte) und 2c (unten) für Berechnungszeitpunkte 7 Jahre und 15 Jahre

Bereits nach 3 Jahren ist ein Großteil der Umverteilung abgeschlossen. Nach 6-7 Jahren entspricht die Grundwasserneubildung in etwa der Versickerungsrate aus der oberen Bodenzone.

4.4 Diskussion der Modellergebnisse

Die Berechnungen zeigen, dass der anfängliche Anstieg des Kippengrundwassers ausschließlich auf der Umverteilung des Anfangswassergehalts des verkippten Materials beruht. Dieser Prozess wird durch Schwerkraft- und Kapillardruckphänomene hervorgerufen. Somit ist auch in Bereichen, mit sehr geringen (Extremfall = 0) Versickerungsraten aus der oberen Bodenzone, ein Anstieg des Kippengrundwassers zu verzeichnen. Art und Dauer der „Umverteilungsphase“ hängt von den hydraulischen Eigenschaften des Kippenmaterials ab. Es bedarf zur Erklärung des Kippengrundwasser-Anstiegs nicht den in CHRISTOPH [1999] und DOHRMANN [2000] postulierten großräumig aushaltenden, homogen strukturierten Drainagezonen in den Kippenkörpern. Für grobkörnigere Kippen (Lausitzer Revier) dauert die „Umverteilungsphase“ deutlich kürzer, als für die bindigeren Kippen des Mitteldeutschen Reviers. Für reale Kippenkörper sind durch die im Detail heterogene Verteilung der Substrate sowie die Ausprägung von begrenzten präferentiellen Fließwegen verschiedenste vertikale Sättigungsmuster begründbar.

Insgesamt muss zwischen der Versickerung aus der oberen Bodenzone und der Kippengrundwasserneubildung unterschieden werden. Erst nach Abschluss der „Umverteilungsphase“ gleicht sich die Kippengrundwasserneubildung der Versickerung an. Die chemische Beschaffenheit dieser beiden Größen ist auf Grund der örtlichen Trennung allerdings immer noch verschieden. Weiterhin hat der Aufsättigungsprozess einen nach außen gerichteten Gasstrom zur Folge. Dieser ist somit der Ausbreitung der Verwitterungszone im hangenden Teil der Kippe, d.h. dem Sauerstofftransport in die Kippe, entgegen gerichtet.

Zu beachten ist, dass die angeführten Phänomene für reale Kippenstandorte durch den Effekt des seitlichen Wasserzutritts aus dem Gewachsenen überprägt werden. Dieser seitliche Zutritt erfolgt nach Einstellung der Sumpfung mittels Kippenrandriegeln.

Die Berechnungen machen weiterhin im Analogieschluss deutlich, dass sich an der Grenze „Rekultivierungsschicht/ ASK“ eine hydraulische Barriere ausprägen kann, die auf den Sprung in den Kapillardruck-Sättigungsverhältnissen zurückzuführen ist. Diese Phänomene sind auch am Übergang ASK/ AFBK wahrscheinlich.

5 Vorfeldebilanzierung und Kippenmodellerstellung

5.1 Vorgehensweise

Das Ziel dieses Kapitels ist die hydrogeochemische und bodenphysikalische Kennzeichnung der abraumrelevanten geologischen Einheiten. Darauf aufbauend sollen durch Verschnitt dieser Kenngrößen mit den Mächtigkeitsverhältnissen flächendifferenzierte, mittlere Verhältnisse für die resultierenden AFB-Kippen berechnet werden. Es bedarf dazu der Analyse des Vorfeldes in Bezug auf:

- die Mächtigkeitsverhältnisse der relevanten stratigraphischen Einheiten,
- die wesentlichen chemischen Eigenschaften dieser stratigraphischen Einheiten,
- die bodenphysikalischen Eigenschaften dieser stratigraphischen Einheiten.

Bezüglich der Mächtigkeitsverhältnisse wurde die umfangreiche Zahl von Vorfeldbohrungen der Erkundungsetappen genutzt. Zur chemischen und bodenphysikalischen Kennzeichnung wurde der Datenpool der bodengeologischen Vorfeldgutachten der Untersuchungsgebiete herangezogen. Die Bearbeitung erfolgte in folgenden Schritten:

- Untergliederung des abraumrelevanten geologischen Profils in handhabbare stratigraphische Einheiten, nachfolgend eventuelle Zusammenfassung in Auswerteeinheiten.
- Aufarbeitung des Datenpools der Mächtigkeitsverhältnisse, Stratifizierung von Vorfeldbohrungen für „Altkippenbereiche“.
- Überführung der Daten der bodengeologischen Vorfeldgutachten in EDV-Form, Zuordnung der Proben zu den ausgehaltenen stratigraphischen Auswerteeinheiten.
- Flächenhafte Interpolation der Ergebnisse innerhalb der einzelnen Einheiten mittels Kriging (Programm Surfer®) nach vorheriger Variogrammanalyse.
- Rasterung der interpolierten Ergebnisse in Bilanzelemente. Ausweisung der mittleren Kippenbeschaffenheiten an diesen Bilanzelementen durch Verschnitt der geochemischen bzw. bodenphysikalischen Eigenschaften. Dieser Verschnitt erfolgt über Wichtung an Hand der Mächtigkeitsverhältnisse der einzelnen Auswerteeinheiten im Bilanzelement.

Die Vorgehensweise zur Prognose der k_f -Werte an Hand der mittleren bodenphysikalischen Beschaffenheit ist bereits in Kap. 2.3.1 aufgezeigt worden. Für die geochemischen Parameter erfolgte die Berechnung nach Gl. 5.1.1. Weiterhin wird die Erstellung vereinfachter Aciditäts-/Alkalinitätsbilanzierungen des Abraums durchgeführt. Hierzu werden am Bilanzelement die verwitterten Disulfidgehalte mit den prognostizierten Karbonatgehalten bilanziert. Dabei ist 1 mol Karbonat notwendig, um 1 mol umgesetztes S_{diff} zu puffern (Gl. 2.4.4 und 2.4.12).

$$P_{Kipp;k} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{M_{Vo;j;k}}{M_{GAb;k}} \cdot P_{Vo;j;k} \right) \quad (\text{Gl. 5.1.1})$$

$P_{Kipp;k}$	=	prognostizierter Mischparameter der Kippe am Rasterelement k
$M_{Vo;j;k}$	=	Vorfeldmächtigkeit der Schicht j am Rasterelement k
$M_{GAb;k}$	=	Gesamtabraummächtigkeit am Rasterelement k
$P_{Vo;j;k}$	=	Vorfeldparameter der Schicht j am Rasterelement k

5.2 Datengrundlage Bodengeologische Vorfelddgutachten

Die bodengeologischen Vorfelddgutachten wurden in den 60er bis 80er Jahren für den Großteil der Kohlefelder der DDR erstellt. Ihr Ziel bestand in der Kennzeichnung der Rekultivierungsfreundlichkeit bzw. –feindlichkeit der einzelnen geologischen Einheiten. WÜNSCHE [1974] stellt die Vorgehensweise und Ergebnisse für den Südraum Leipzig umfassend dar. Innerhalb der Gutachten wurde ein umfangreiches geochemisches und bodenphysikalisches Beprobungsprogramm an Vorfelddbohrungen durchgeführt. Es erfolgte die Bearbeitung von Mischproben ausgewählter Teufenbereiche an einer Vielzahl von Trockenbohrungen. Neben der Körnungsanalyse wurden weiterhin folgende chemische Parameter an der Feinbodenfraktion (< 2mm) ermittelt:

- Boden-pH aus Elution
- Kationenaustauschverhältnisse (H- Wert, S- Wert, T- Wert, V- Wert)
- hydrolytische Acidität (Titration)
- Austauschacidität (Titration)
- C_t - Gehalt
- $CaCO_3$ - Gehalt
- CaO, MgO, P_2O_5 , K_2O - aus 10% Salzsäureaufschluss
- S_{ges} - nasschemisch
- S_{SO_4} – nasschemisch

Eine genauere Erklärung der einzelnen Analyseverfahren ist Anl. 5.2.1 zu entnehmen. Zumeist wurde die Auswertung der Gutachten nur auf das jeweilige Kohlefeld bezogen durchgeführt, wobei dies in arithmetischen Mittelwerten für die gebildeten Auswerteeinheiten mündete. Eine flächenhafte Auswertung erfolgte nicht. Die Auswertung war lithologisch orientiert. Genetische Betrachtungen zur Interpretation der Schwefelgehalte der tertiären Einheiten wurden nicht durchgeführt. Bei der Verwendung der Daten sind folgende Probleme zu beachten:

- Es ist davon auszugehen, dass die entnommenen Proben im luftgetrockneten Zustand längere Zeit lagerten, bevor sie zur Bestimmung gelangten.
- Die tertiären Sedimente weisen Versauerungserscheinungen auf, die sich im pH Wert (niedrig), H- Wert (hoch), V- Wert (niedrig), hydrolytische Acidität (hoch) und Sulfatgehalt (hoch) widerspiegeln. Diese Versauerung ist wahrscheinlich zu einem Teil den Probenlagerungsbedingungen geschuldet.
- Die Auswertung der Analysenergebnisse erfolgte oft begleitend oder sogar voreilend zur geologischen Auswertung der Bohrprogramme. Aus diesem Grund sind stellenweise falsche stratigraphische Zuordnungen möglich (Q/T Grenze, Mischproben etc.).

Daraus folgt: Auf jeden Fall sind die Einzelprobenwerte auf ihre stratigraphische Zuordnung und ihre generelle Tauglichkeit zu prüfen. Die Kennzeichnung der Schwefelspeziesverteilung, der Karbonatgehalte und der Austauscherbelegung ist teilweise überprägt. Die generellen Verhältnisse lassen sich jedoch damit kennzeichnen. Die Werte bezüglich der hydrolytischen Acidität charakterisieren die potentielle Acidität der Einheiten bei Verwitterung. Trotz dieser Schwierigkeiten liegt die Bedeutung der Vorfelddgutachten in ihrem unwiederbringbaren flächenhaften Datenpotential.

5.3 Ergebnisse Espenhain

5.3.1 Datengrundlage

Für die Kennzeichnung der Mächtigkeitsverhältnisse wurde aus der Bohrdatenbank des LfUG Sachsen der Teil des Untersuchungsgebietes freundlicherweise zur Verfügung gestellt. Aus der Vielzahl der Vorfeldbohrungen wurden die bereits stratifizierten Bohrungen berücksichtigt und im Altkippenbereich ausgewählte Bohrungen selbst stratifiziert. Anl. 5.3.1 zeigt die Anzahl und Lage der letztendlich verwendeten Bohrungen. Tab. 5.3.1 gibt die gewählte Einteilung der stratigraphischen Einheiten wieder. Die Zusammenfassung der Formsande mit der Einheit der Muschelsande/-schluffe war notwendig, da die Datenlage sowohl für die „Altkippenbereiche“, als auch für die bereits stratifizierten Bohrungen ein Auseinanderhalten dieser Einheiten nicht ermöglichte.

Tab. 5.3.1 Gewählte Einteilung der stratigraphischen Einheiten

Geologische Einheit	mittlere Mächtigkeiten	Bemerkungen
Holozäne Sedimente	2 – 8 m	Auenlehm, -kies ; nur lokal mit größerer Bedeutung
Pleistozäne Sande	1 – 3m	
Geschiebemergel, Bändertone	2 - 15 m	Zusammenfassung der bindigen quartären Schichten; nur im NE von Bedeutung
Frühpleistozäne Schotter	3 – 6 m	Sehr grobkörnige Materialien, elsterzeitlich
Thierbacher Schichten		Nur sehr lokales Vorkommen im überbaggerten Bereich
Obere Meeressande	10 – 30 m	Zusammenfassung der hangenden tertiären Sedimente (Formsand, Muschelsand, Muschelschluff)
Untere Meeressande	5 – 20 m	Zusammenfassung der Sande im Hangenden des Oberflözes bis zum Muschelschluff (vor allem Graubraune, Braune Sande)
Oberflöz	8 – 12 m	
Bindiges Mittel zwischen Oberflöz/ Hauptflöz	1 – 5 m	Zusammenfassung der bindigen Sedimente des Mittels; zugehörig zum Absetzerkippenmaterialien
Rolliges Mittel zwischen Oberflöz/ Hauptflöz	1 – 10 m	Zusammenfassung der rolligen Sedimente des Mittels; zugehörig zum Absetzerkippenmaterialien
Hauptflöz	4 – 12 m	

Bezüglich der geochemischen und bodenphysikalischen Kennzeichnung des Vorfeldes wurden die 4 für das Untersuchungsgebiet vorliegenden Bodengeologischen Vorfeldgutachten verwendet (OEHME [1964] ,[1974], HAUBOLD [1979], WÜNSCHE [1987]). Weiterhin wurden Gutachten benachbarter Kohlefelder mit einbezogen (SCHUBERT [1970], [1977], OEHME [1975], MAUTZSCHKE [1984], [1986], [1988]).

5.3.2 Vorfeldebilanzierung - Ergebnisse an ausgewählten Einzelbohrungen

An den Bohrungen 49/64, 32/72 und 66/71 der Vorfeldegutachten sollen die grundlegenden Verhältnisse im überbaggerten Feld Espenhain gekennzeichnet werden. Die Bohrungen beschreiben einen „NW/ SE – Schnitt“, ihre Lage geht aus Anl. 5.3.1 hervor. In Abb. 5.3.1 werden wesentliche Parameter dieser Bohrungen teufenorientiert aufgezeigt. Es wird eine Abnahme der Mächtigkeiten der Einheit „Obere Meeressande/ Muschelschluff“ deutlich. In Bhr. 49/64 sind die Oberen Meeressande nur durch Muschelsande, in Bhr. 66/71 nur durch Formsande vertreten (vgl. Kap. 3.1.2 und 5.3.1).

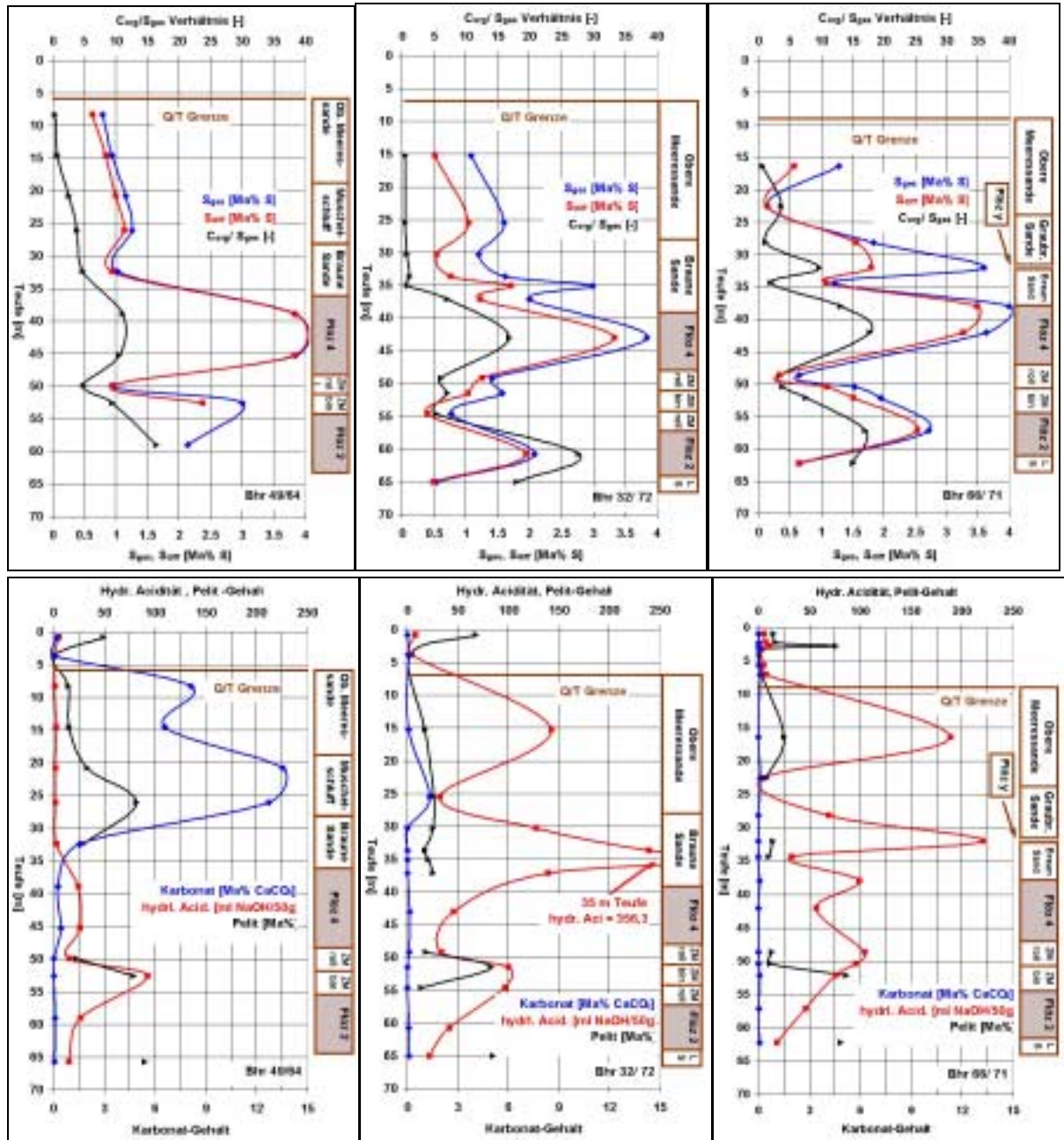


Abb. 5.3.1 Teufenorientierte Darstellung von S_{ges} , S_{diff} – Gehalt, C_{org}/S_{ges} – Verhältnis (obere Reihe) und Karbonat-, Pelit- Gehalt, hydrolytische Acidität (untere Reihe) für die Vorfeldeb Bohrungen 49/64, 32/72, 66/71(NW – SE Schnitt)

Die Mächtigkeit der „Unteren Meeressande“ (Graubraune / Braune Sande) nimmt nach SE zu. Für alle 3 Bohrungen werden, bezüglich der S_{ges} - und S_{diff}^{17} -Gehalte, ähnliche Tendenzen innerhalb des Vertikalprofils deutlich. Im unmittelbar Hangenden der Flöze steigen die Gehalte deutlich an. Der AFBK relevante Abraum besitzt mittlere S_{ges} Gehalte um 1 Ma%. Die bindigen Zwischenmittel (ASK relevant) zeichnen sich durch höhere Gehalte aus (1-2 Ma%). Die C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse¹⁸ spiegeln sehr gut die paläogeographische Entwicklung wider. Die geringmächtigen Liegendenschluffe des „Flöz 2“ (in Bhr. 32/72 und 66/71 beprobt) besitzen Werte um 15 und werden damit als terrestrische Bildungen ausgewiesen. Die Flöze zeichnen sich durch Werte zumeist deutlich > 10 aus (paralisch/terrestrische Bildung). Innerhalb des „Flöz 4“ ist eine Erhöhung der Werte von NW nach SE erkennbar. Die Werte des „Flöz 2“ liegen höher als die des „Flöz 4“. Im Hangenden des „Flöz 4“ kommt es zur deutlichen Abnahme der C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse auf Werte $< 3,5$, was die Bildungen als marine Substrate ausweist. Es wird sehr gut die Entwicklung von den Flözen hin zu den marinen „Oberen Meeressanden“ deutlich. In Bhr. 66/71 wird auch der paralische Einfluss bei Bildung des geringmächtigen „Flöz y“ gut durch das C_{org}/S_{ges} -Verhältnis widerspiegelt. Es bestätigen sich insgesamt die in Kap. 2.2 aufgezeigten Aussagen des Modells von BERNER [1984]. Die Schwefelgehalte und vor allem die C/S Verhältnisse sind eng mit der Genese der einzelnen geologischen Einheiten verknüpft.

Für die Karbonat- und Pelitgehalte¹⁹ zeigt sich im gesamten hangenden Tertiär des „Flöz 4“ eine deutliche Abnahme von NW nach SE. Dies wird bereits durch BELLMANN [1976] beschrieben und als wesentliches Kennzeichen des Übergangs von der Becken- zur Randfazies des betrachteten Leipziger Raums benannt (siehe auch Kap. 3.1.2.2). In Bhr. 49/64 werden erhebliche Karbonatgehalte ersichtlich (6 – 14 Ma% $CaCO_3$), wobei diese nicht nur in dem durch hohen Pelitgehalt gekennzeichneten Muschelschluff vorliegen. In Bhr. 66/71 ist das hangende Tertiär dagegen im Prinzip karbonatfrei. Die Zwischenmittel zwischen „Flöz 2“ und „Flöz 4“ zeichnen sich zum Teil durch hohe Pelitgehalte aus und sind dabei nahezu karbonatfrei ($< 0,1$ Ma% $CaCO_3$). Die Werte der Gutachten bezüglich der hydrolytischen Acidität sind vor allem qualitativ zu betrachten²⁰. Es wird ebenfalls ein NW-SE Trend deutlich, der den Karbonatgehalts-Verhältnissen verständlicherweise entgegenläuft. Während in den karbonatgepufferten Bereichen der Bhr. 49/64 sehr geringe Werte gemessen werden, zeigen sich in den karbonatfreien Bereichen der Bhr. 32/72 und 66/71 (Braune Sande, Formsande als Vertreter der Oberen Meeressande-) erheblich höhere Werte. Die Zwischenmittel weisen im Vergleich zu den Flözproben höhere Aciditätswerte auf.

Insgesamt wird deutlich, dass es im überbaggerten Vorfeld erhebliche flächenhafte Unterschiede bezüglich der Mächtigkeits- und der bodenphysikalisch/ geochemischen Verhältnisse der anstehenden Sedimente gab. Eine Vorfeldbilanzierung ist deshalb zur Einordnung von Kippen-Punktmessungen und zur Erstellung eines Kippenmodells unbedingt notwendig.

¹⁷ S_{diff} stellt die berechnete Differenz zwischen dem gemessenen Gesamtschwefel (S_{ges}) und Sulfatschwefelanteil (S_{SO_4}) dar. Diese Größe dokumentiert in guter Näherung den disulfidisch gebundenen Schwefel (siehe Anl. 5.2.1).

¹⁸ Auf Grund der in Kap. 5.2 diskutierten Überprägung der Schwefelspeziesgehalte durch Verwitterung bei der Lagerung wurden C_{org}/S_{ges} Verhältnisse betrachtet.

¹⁹ Für die Flöze erfolgte keine Körnungsanalyse.

²⁰ Der Parameter stellt eine Titrationsgröße dar (siehe Anl. 5.2.1). Bei extremen Proben ist der Wert durch Titration der Eisenhydroxidbildung überprägt.

5.3.3 Vorfelddanalyse – Flächenhafte Ergebnisse

Die entscheidenden Auswerteeinheiten werden Im Folgenden diskutiert. In den Anl. 5.3.2 und 5.3.3 sind dafür die Ergebnisse der flächenhaften Interpolationen bezüglich der Mächtigkeiten und der wesentlichen bodenphysikalisch/ geochemischen Parameter aufgezeigt²¹. Die Ergebnisse bekräftigen die in Kap. 5.3.2 getroffenen Hauptaussagen.

5.3.3.1 Obere Meeressande

Im überbaggerten Feldesteil wird eine NW-SE gerichtete Mächtigkeitsabnahme offenbar. Weiterhin ist die Einheit nach E/SE durch eine deutliche Erhöhung des Anteils der Formsande geprägt. Dies bewirkt eine Verringerung des Pelitgehalts und eine deutliche Karbonatverarmung. Die S_{diff} -Gehalte weisen eine abnehmende Tendenz von W nach E auf. Dennoch finden sich die höchsten mobilisierbaren Aciditäten im östlichen Feldesteil (Werte „hydrolytische Acidität“, vgl. auch Kap. 6.2). Dies ist auf die bessere „Verwitterbarkeit“ (geringerer Pelitgehalte) und die geringeren Karbonatgehalte zurückzuführen.

5.3.3.2 Untere Meeressande

Für diese Einheit kommt es zu einer den „Oberen Meeressanden“ entgegengesetzten Mächtigkeitszunahme. Der Südteil des überbaggerten Bereichs ist karbonatfrei, dies geht mit der deutlichen Erhöhung der „hydrolytischen Acidität“ einher. Die Pelitgehalte liegen im überbaggerten Bereich etwa in einem Niveau von 12 – 30 Ma%. Es ergibt sich ein S_{diff} -Gehaltsniveau zwischen 1 – 2 Ma%, welches oberhalb der Gehalte der „Oberen Meeressande“ liegt.

5.3.4 Ergebnisse Kippenmodell

Die wesentlichsten berechneten Ergebnisse für das AFB-Kippenmodell nach der in Kap. 5.1 beschriebenen Vorgehensweise werden in Abb. 5.3.2 ersichtlich. Für die S_{diff} Gehalte zeigt sich ein Niveau von 0,6 bis 1,0 Ma %, wobei es zu einer leichten Zunahme von NE nach SW kommt. Die berechneten Karbonatgehalte zeigen einen, durch die in den Kap. 5.3.2 und 5.3.3 gemachten Aussagen verständlichen, NW-SE Trend auf. Dabei werden im NW Teil Maximalgehalte von 6 Ma% CaCO_3 ($\approx 0,7$ Ma% TIC) ersichtlich. In diesem Bereich ist somit ein wesentlich besseres Pufferpotential als im SE-Teil der Kippe vorhanden. Diese Aussage wird durch die flächenhafte Prognose der „hydrolytischen Acidität“ und die vereinfachte „Alkalinitätsbilanzierung“²² untermauert. Es zeigt sich für beide Größen, dass die E/SE Bereiche der AFB-Kippe Espenhain durch erhöhte Aciditäten gekennzeichnet sein werden. Die Bilanzierung der C_{org} -Gehalte zeigt für die AFB-Kippe ein mittleres Niveau von 1 bis 2 Ma% auf. Die höchsten Gehalte befinden sich dabei im SE, im ältesten Kippenteil. Für die prognostizierten k_f -Werteverhältnisse wird eine Abnahme der Werte von E nach W deutlich. Dies beruht auf der Erhöhung des Pelitanteils. Für die Bereiche in Richtung Pleißepfeiler (W) ergeben sich somit mittlere k_f -Werte von $< 1 \cdot 10^{-7}$ m/s. Im Bereich des RL Störnthal (SE) liegen die prognostizierten k_f -Werte dagegen höher, bei 1 bis $3 \cdot 10^{-6}$ m/s.

²¹Die Darstellungen beinhalten keine Verbreitungsgrenzen. Die Interpolation erfolgt somit über eventuelle Verbreitungsgrenzen hinweg.

²²Für die Alkalinitätsbilanzierung wurde, auf Grund konservativer Betrachtung, von der doppelten Umsatzrate aus TUBAF [2000] = 10 % des S_{diff} -Gehaltes ausgegangen.

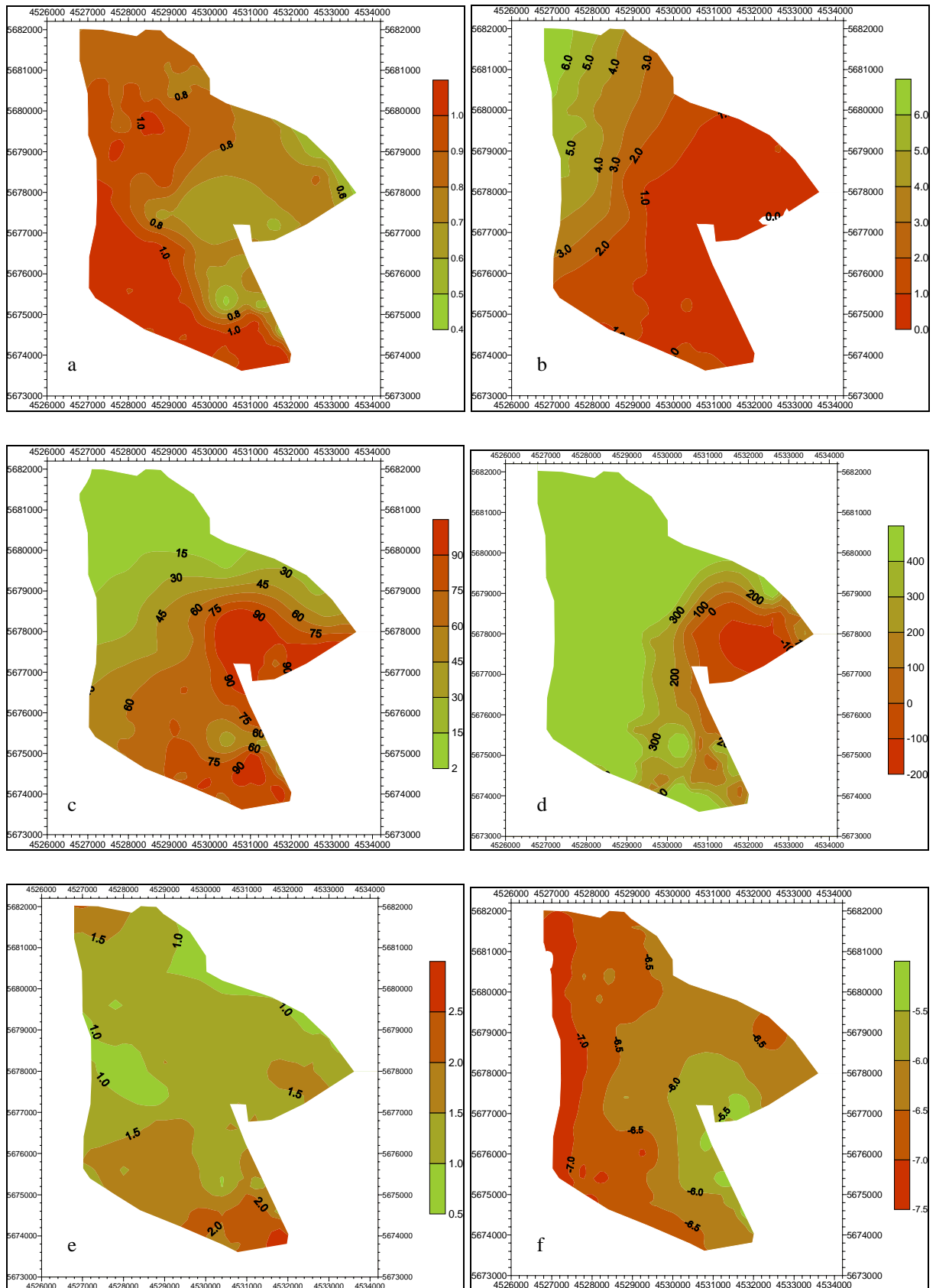


Abb. 5.3.2 Prognostizierte a) S_{diff} Gehalte [Ma% S], b) Karbonatgehalt [Ma% $CaCO_3$], c) hydrolyt. Acidität [ml 0,1N NaOH/ 50g Substrat], d) Alkalinitätsbilanz [mmol/l PW], e) C_{org} [Ma%], f) „log k_f -Werte“ [m/s] der AFB Kippe Espenhain, Datengrundlage Vorfeldgutachten

5.4 Ergebnisse Jänschwalde

5.4.1 Datengrundlage

Die Kennzeichnung der Mächtigkeitsverhältnisse erfolgte an Hand der Bohrdatenbank „Jänschwalde“ der LAUBAG. Freundlicherweise wurden Dateien mit den interpolierten Werten für die einzelnen Auswerteeinheiten zur Verfügung gestellt. Die Interpolation basiert dabei auf der immensen Anzahl an Vorfeldeb Bohrungen der Erkundungsetappen. Für den nicht in der Datenbank erfassten Altkippenbereich wurde eine begrenzte Anzahl von Vorfeldeb Bohrungen genutzt. Anl. 5.4.1 zeigt die Lage der verwendeten Punktinformationen auf. In Tab. 5.4.1 wird die gewählte Einteilung der stratigraphischen Einheiten ausgewiesen. Zu beachten sind teilweise erhebliche Unterschiede in der Abraumzusammensetzung innerhalb des Kohlefeldes. Es erfolgte eine Zusammenfassung der „Höchsten tertiären Sande“ (GWL 4.1 und Hangendes), weil der GWL 3.2 nicht sicher ausgehalten werden konnte. Diese Einheit enthält auch die lokal in den GWL 4.1 eingeschalteten Schluffe. Für die genetischen Untersuchungen (siehe HOTH ET AL. [1997]) wurde eine detailliertere Untergliederung des Hangendschluffkomplexes vorgenommen. Für die Durchführung der Kippenbilanzierung erfolgten weitere Zusammenfassungen: Aus den „glazilimnischen Bildungen“ und den „Grundmoränen“-Substraten wurde die Auswerteeinheit „Quartär bindig“ gebildet. Weiterhin erfolgte die Ausweisung der Einheiten „Tertiär rollig“ (GWL 3.2, 4.1, 4.2, 4.3) und „Tertiär bindig“ (Hangendschluffe, Äquivalent Oberbegleiter).

Tab. 5.4.1 Gewählte Einteilung der abraumrelevanten stratigraphischen Einheiten oberhalb des 2. Lausitzer Flöz Horizontes (2. LFH)

Geologische Einheit	Mittlere Mächtigkeiten	Bemerkungen
Glaziofluviatile/ (fluviatile) Sande (Quartär)	10 – 50 m	Vor allem saalezeitliche Bildungen; in Tertiärhochfläche auch Mächtigkeiten < 10 m.
Glazilimnische Bildungen	0 – 10m	Nur lokales Vorkommen
Grundmoränen Material	0 - 15 m	Im Süd- und Mittelteil des Kohlefeldes nur lokales Vorkommen
GWL 4.1 und Hangendes Tertiär	2 - 10 m	Stellenweise mit eingeschalteten Schluffen; für Tertiärhochfläche Gesamtmächtigkeit > 10 m
Hangendschluffe der 1. Flözbank des 2. LFH	0 – 6 m	Im Südteil 3 aushaltbare Bänke, im Nordteil Vereinigung der 3 Bänke und gänzliche Ausräumung
GWL des Hangendschluffkomplexes	0 – 3 m	Geringmächtige GWL, die in Hangendschluffe eingeschalten sind.

Bezüglich der geochemischen und bodenphysikalischen Kennzeichnung des Vorfeldes wurden die 3 für das Untersuchungsgebiet vorliegenden Bodengeologischen Vorfelddgutachten verwendet (SCHMIDT [1965], FROBENIUS [1977], [1986]). Weiterhin wurden Gutachten benachbarter Kohlefelder mit einbezogen (SCHMIDT [1973], FROBENIUS [1979], [1984a], [1984b]). Anl. 5.4.1 zeigt die berücksichtigten Vorfeldeb Bohrungen auf.

5.4.2 Vorfelddanalyse - Ergebnisse an ausgewählten Einzelbohrungen

An den Bohrungen 6482, 1652 und 2263 der Vorfelddgutachten sollen die grundlegenden Verhältnisse im überbaggerten Feld Jänschwalde gekennzeichnet werden. Die Bohrungen beschreiben einen „NE/ SW – Schnitt“, ihre Lage ist in Anl. 5.4.1 ersichtlich. In Abb. 5.4.1 werden wesentliche Parameter dieser Bohrungen teufenorientiert aufgezeigt. Für die Bereiche der Bohrungen, in denen nur ein Teil der ausgehaltenen stratigraphischen Einheiten beprobt wurde, erfolgt die Darstellung der Ergebnisse durch Punkte und nicht durch Linienzüge.²³

Die Mächtigkeitsverhältnisse an allen 3 Bohrungen zeigen, dass ein erheblicher Anteil des Abraumes quartäres Substrat ist. Die Ausbildung der einzelnen Einheiten ist als komplex anzusehen und bedarf einer flächenhaften Analyse (siehe Kap. 5.4.3). Innerhalb des Quartärs traf die Bhr. 6482 glazilimnische Bildungen und Bhr. 1652 Grundmoränensubstrate an. Der Großteil des Quartärsubstrate besteht allerdings aus glaziofluviatilen Sanden. Diese sind zumeist saalezeitlich, im Feldessüdteil jedoch auch weichselzeitlich. Im hangenden Teil des Tertiärs der Bohrungen 6482 und 1652 wird auch der Oberbegleiterkomplex erfasst.

Die S_{ges}/S_{diff} -Gehalte der Hangendschluffe erreichen Werte bis zu 4,5/ 3 Ma% S. Der bedeutende GWL 4.1 zeigt S_{ges}/S_{diff} -Gehalte von 0,1 bis 0,5 Ma%, wobei die höheren Gehalte an erhöhte Pelitgehalte gebunden sind. Der stark pelithaltige Oberbegleiterkomplex ist durch deutlich geringere Gehalte als die Hangendschluffe gekennzeichnet. Die Schwefelgehalte der glaziofluviatilen Quartärsubstrate sind sehr gering. Im Gegensatz dazu ergeben sich in den glazilimnischen Bildungen und im Grundmoränenmaterial²⁴ S_{ges} -Gehalte bis zu 0,4 Ma% S.

Die C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse der Hangendschluffe zeigen Werte um 4 bis 6, was sie als brackische Bildungen ausweist (vgl. Kap. 2.2). Der hangende GWL 4.1 ist durch kleinere Werte um 3 gekennzeichnet, was marinen Bildungen entspricht. Im Gegensatz dazu zeichnen sich die Proben, die dem Oberbegleiterkomplex zuzurechnen sind, durch „terrestrische“ Werte von > 15 aus.

Die detaillierten Gegebenheiten des Hangendschluffkomplexes werden an Hand der Bhr. 1511 und 1571²⁵ in Abb. 5.4.2 deutlich. Die C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse der GWL 4.2 und 4.3 verdeutlichen mit Werten von 1 bis 3, dass es sich um marine Einschaltungen in den Hangendschluff handelt. Dies ist mit der Abnahme der Schwefelgehalte verbunden. Generell veranschaulicht Abb. 5.4.2 den Zusammenhang zwischen Feinkorn („Pelitgehalt“), Schwefelgehalten und potentieller Acidität („hydrolytische Acidität“).

Die tertiären Substrate sind karbonatfrei. Eine Ausnahme bilden die Proben im Oberbegleiterkomplex der Bohrung 6482. In den Quartärsubstraten sind hohe Karbonatgehalte innerhalb der Grundmoränen und glazilimnischen Bildungen zu verzeichnen. Hierbei ist aber nicht von einem einheitlichen Niveau auszugehen (siehe Kap. 5.4.3). Die quartären Sande weisen in der Bhr. 6482 Gehalte um 0,2 Ma% auf. In Bhr. 1652 sind sie nur zum Teil karbonathaltig und in Bhr. 2263 als karbonatfrei anzusehen.

²³Die einzelnen Hangendschluffbänke sind mit „HS“, die GWL mit „G“, die Zwischenmittel mit „ZM“ und die Liegendeschluffe mit „LS“ bezeichnet.

²⁴Die Untersuchungen in TUBAF [1997] zeigten dabei für die ältesten Grundmoränen (elsterzeitlich) die höchsten Gehalte auf. Dies ist mit der Aufarbeitung des Tertiärs durch die Eisbewegung zu begründen.

²⁵An diesen Bohrungen erfolgte sowohl die Beprobung der Hangendschluffbänke, als auch der eingeschalteten GWL (Lage der Bhr. siehe Anl. 5.4.1)

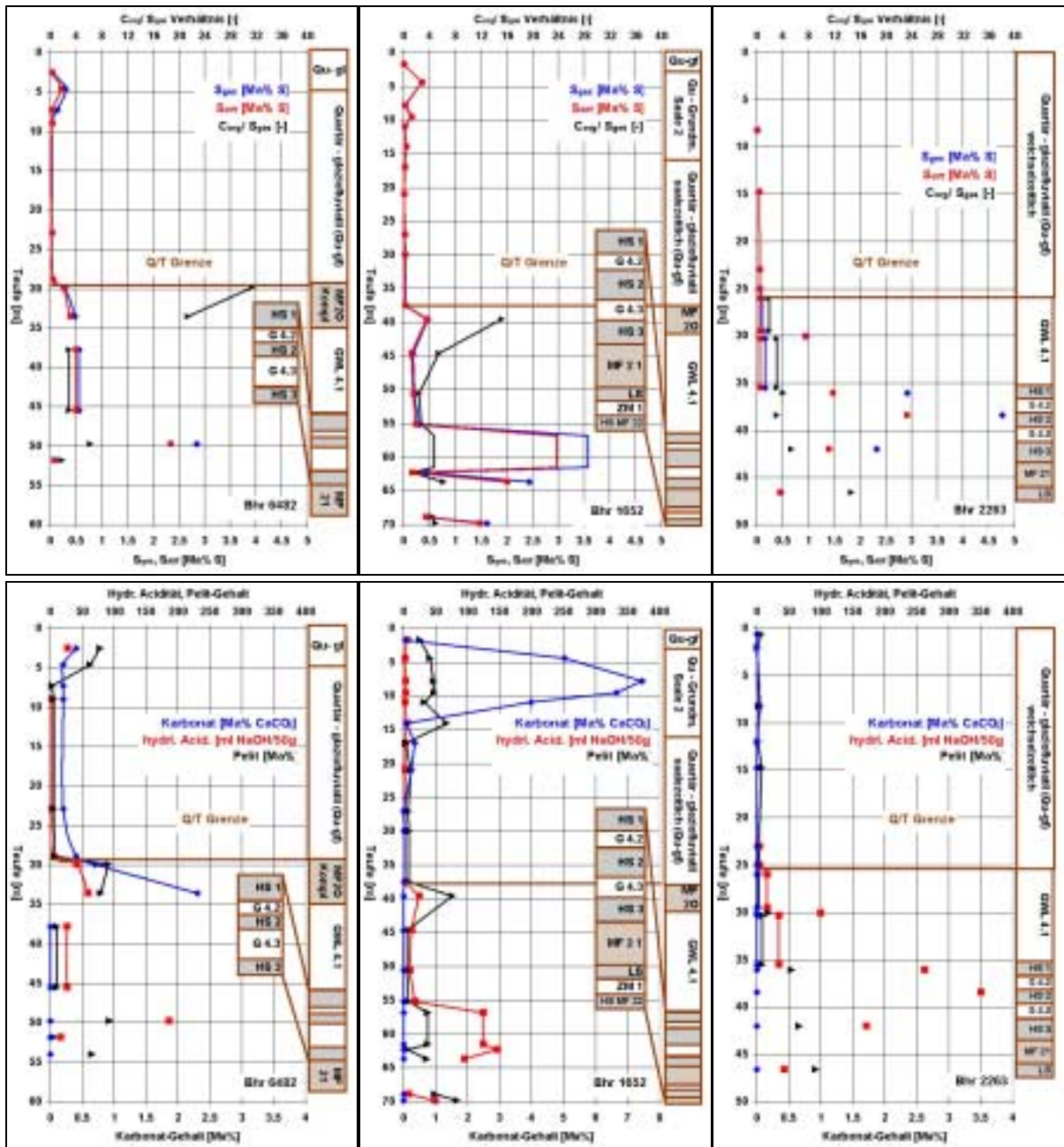


Abb. 5.4.1 Teufenorientierte Darstellung von S_{ges} , S_{diff} – Gehalt, C_{org} / S_{ges} -Verhältnis (obere Reihe) und Karbonat-, Pelit Gehalt, hydrolytische Acidität (untere Reihe) für die Bohrungen 6482, 1652, 2263 (NE – SW Schnitt)

In der Bestimmungsgröße „hydrolytische Acidität“ kommt das Zusammenwirken von Aciditätspotential (S_{diff}) und mangelnder Karbonatpufferung zum Ausdruck. Die Hangendschluffe weisen somit die mit Abstand höchsten Werte auf. Die Quartärsubstrate bilden nahezu überhaupt keine Acidität aus, da sie entweder nahezu keine Disulfidminerale beinhalten oder einen guten Karbonatpuffer aufweisen.

Es wird deutlich, dass die Ergebnisse der ausgewählten Bohrungen einer Untersetzung durch flächenhafte Interpretation der gesamten vorliegenden Daten bedürfen. Die generellen Feststellungen bezüglich der Schwefel- und Karbonatgehalte decken sich mit den Untersuchungen am Stoß von ROLLAND ET AL. [1998] und BTUC [1998] (siehe Kap. 7.2).

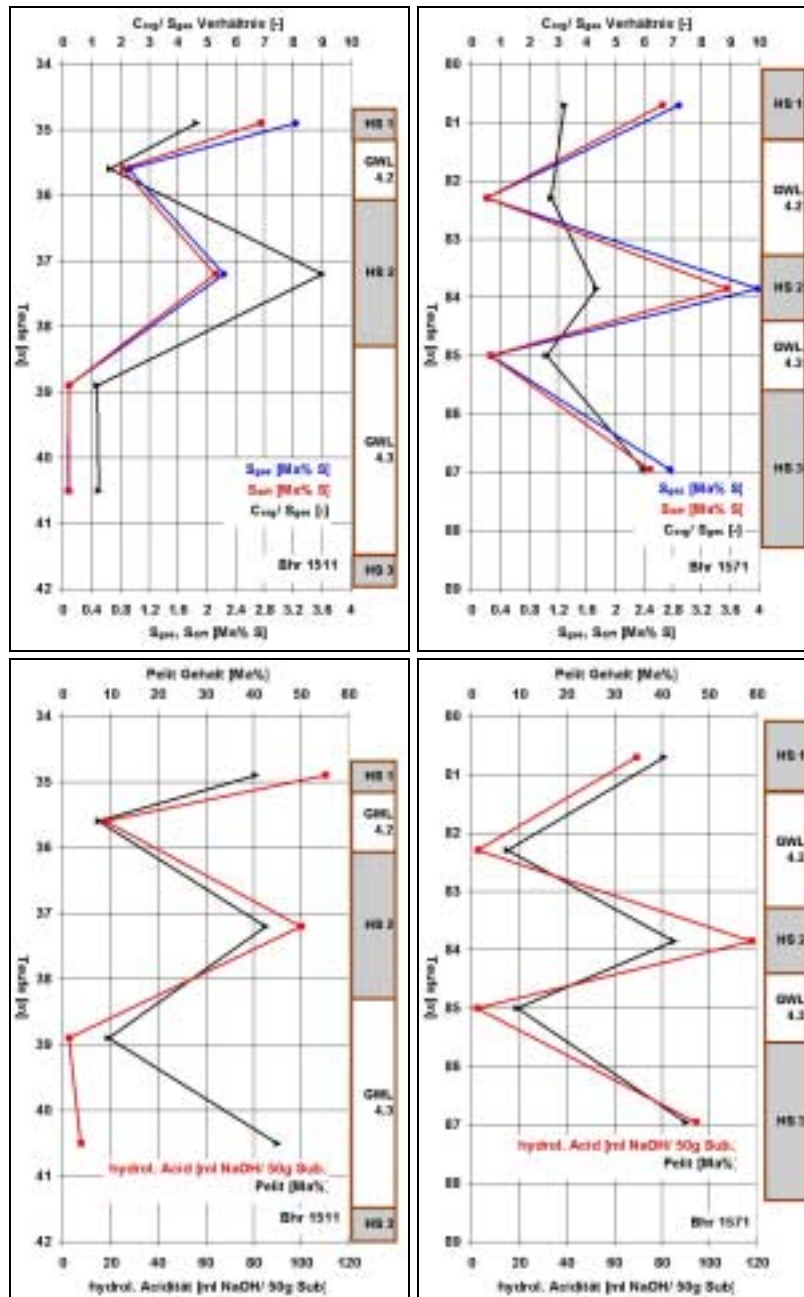


Abb. 5.4.2 Teufenorientierte Darstellung von S_{ges} , S_{diff} – Gehalt, C_{org}/S_{ges} -Verhältnis (oben) und Pelit Gehalt, hydrolytische Acidität (unten) für die Bohrungen 1511 (links), 1571 (rechts)

5.4.3 Vorfelddanalyse – Flächenhafte Ergebnisse

An zwei speziellen stratigraphischen Einheiten erfolgt die Diskussion der schwefelgenetischen Ergebnisse (Anl. 5.4.2- 5.4.3). Weiterhin werden für die 4 gebildeten Auswerteeinheiten die Mächtigkeitsverhältnisse (Anl. 5.4.4) und die wesentlichen bodenphysikalisch/ geochemischen Parameter (Anl. 5.4.5) aufgezeigt.

5.4.3.1 Hangendschluff 1 der 1. Flözbank (FB) des 2. LFH

Die S_{ges} -Gehalte nehmen in einem SE – NW Trend von 2 auf 4 Ma% zu. Dies geht einher mit der umgekehrten Änderung der C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse von 5 auf 2,5. Die Ergebnisse weisen somit sehr gut die in Richtung NW zunehmende marine Beeinflussung aus.

5.4.3.2 Liegendsschluffe der 1. und 2. Flözbank (FB) des 2. LFH

In Anl. 5.4.3 sind die C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse und die S_{ges} -Gehalte dieser beiden Einheiten dargestellt. Auf eine Interpolation der Werte wurde verzichtet. An Hand der C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse, zumeist zwischen 20 bis 30, lassen sich die beiden geringmächtigen Einheiten klar als terrestrische Bildungen einzustufen. Die S_{ges} -Gehalte liegen mit 0,1 bis 0,6 Ma% deutlich unterhalb der Werte für die Hangendschluffe.

5.4.3.3 Mächtigkeitsverhältnisse der Auswerteeinheiten

Die Mächtigkeiten der 4 Auswerteeinheiten bezüglich des AFB-Kippen relevanten Abraums werden in Anl. 5.4.4 dargestellt.²⁶

Einheit „Quartär bindig“

Es zeigt sich eine Erhöhung der Mächtigkeiten in Richtung der das Kohlefeld begrenzenden quartären Rinnen und allgemein im Nordteil. Die überbaggerte Gosdaer Rinne tritt mit Mächtigkeiten bis zu 20 m hervor. Im Süd- und Mittelteil fehlt diese Einheit stellenweise.

Einheit „Quartär rollig“

Diese Einheit verkörpert den Hauptteil des AFB-Abraums. Im Kippensüdteil kommt es zu einer Zunahme von West nach Ost. Es tritt ebenfalls die überbaggerte Gosdaer Rinne ($M > 30$ m) hervor. Der Nordteil, in Nähe des zukünftigen RS Taubendorf, besitzt Mächtigkeiten zwischen 30 – 50 m. Für die Tertiärhochfläche Horno werden die geringsten Mächtigkeiten (< 10 m) offenbar.

Einheit „Tertiär bindig“

Für den Großteil des Kohlefeldes liegen die Mächtigkeiten zwischen 3 und 6 m²⁷. Die Erhöhung der Mächtigkeiten im Bereich der Tertiärhochfläche Horno beruht auf dem Auftreten des Oberbegleiterkomplexes. Im Norden werden Bereiche offenbar, in denen diese Einheit fehlt. Hier stehen im unmittelbar Hangenden des Flözes quartäre Substrate an.

Einheit „Tertiär rollig“

Im Südteil der Kippe ist nordöstlich der überbaggerten Gosdaer Rinne eine Erhöhung der Mächtigkeiten vorhanden („Weißagker Berg“). Die größten Werte zeigen sich im Bereich der Tertiärhochfläche Horno. Am SW-Ende des künftigen RS Taubendorf fehlt diese Einheit.

Es ist zusammenzufassen, dass deutliche Unterschiede innerhalb des Feldes bezüglich der AFB-Kippenzusammensetzung auftreten. Der Bereich der Tertiärhochfläche Horno zeichnet sich durch deutlich erhöhte Tertiäranteile aus. Im Bereich des zukünftigen RS Taubendorf besteht der Abraum hingegen nahezu ausschließlich aus Quartärmaterial. Dies trifft im Südteil auch auf die überbaggerte „Gosdaer Rinne“ zu.

²⁶Es handelt sich um den Abraum bis 60 m oberhalb des gebauten Flözes. Die Vorschnittsubstrate im Nordteil des Kohlefeldes sind darin nicht enthalten. Deren Beschaffenheit wurde in HOTH ET AL. [1998] ebenfalls ausgewiesen.

²⁷Die stellenweise Zunahme im Südteil ist nicht abschließend zu klären und kritisch zu betrachten. Weiterhin ist zu beachten, dass die Schluffe innerhalb des GWL 4.1 nicht in dieser Einheit, sondern in der Einheit „Tertiär rollig“ erfasst sind.

5.4.3.4 Einheit „Quartär bindig“ - bodenphysikalisch/ geochemische Parameter

Die Pelitgehalte variieren stark und liegen zwischen 20 – 50 Ma % und darüber. Für die Schwefelgehalte wird ein Wertenniveau von $< 0,2 \text{ Ma\% } S_{\text{ges}}$ offenbart. In Annäherung an die Kohlefeldgrenzen steigen die Werte bis auf $0,4 \text{ Ma\%}$ an. Die mittleren C_{org} -Gehalte liegen zwischen 0 und $0,5 \text{ Ma\%}$. Im zukünftigen Kippenabstrombereich Heinersbrück–Jänschwalde erhöhen sich diese Werte auf $1\text{--}3 \text{ Ma\%}$. Die Karbonatgehalte zeigen flächenhafte Unterschiede. Für den Nordteil ergibt sich ein Niveau zwischen $1\text{--}4 \text{ Ma\%}$, im Süden sind die Gehalte, bei Auftreten der Einheit, höher. Die Werte der „hydrolytischen Acidität“ sind gering.

5.4.3.5 Einheit „Quartär rollig“ - bodenphysikalisch/ geochemische Parameter

Der Pelitgehalt dieser Einheit zeigt flächenhafte Unterschiede. Im Nordteil liegen die Gehalte bei $6\text{--}10 \text{ Ma\%}$, der Mittelteil ist nahezu pelitfrei, während im Südteil die Werte wieder auf $3\text{--}8 \text{ Ma\%}$ ansteigen. Die Schwefelgehalte sind für den Großteil des überbaggerten Bereiches sehr gering ($< 0,05 \text{ Ma\%}$). Ein gleichlaufender Trend zeigt sich für die C_{org} -Gehalte (zumeist deutlich $< 0,2 \text{ Ma\%}$). Im zentralen Kippensüdteil werden demgegenüber an der Quartärbasis Proben mit erheblichen C_{org} - und S_{ges} -Gehalten ausgewiesen. Dies ist vermutlich auf die Aufarbeitung der tertiären Basis zurückzuführen. Für die Auswerteeinheit resultieren Gehalte von $S_{\text{ges}} \approx 0,1 \text{ Ma\%}$ und $C_{\text{org}} 0,4\text{--}1 \text{ Ma\%}$. Die Karbonatgehalte der Einheit liegen im Durchschnitt bei $0,1\text{--}0,3 \text{ Ma\%}$. Im Nordteil des Kohlefeldes nehmen die Gehalte in Richtung der quartären Rinnen deutlich zu. Diese kalkhaltigen Sande zeichnen sich durch Gehalte von $0,6$ bis $> 1 \text{ Ma\% } \text{CaCO}_3$ aus. Die hydrolytischen Aciditäten der Einheit sind sehr gering.

5.4.3.6 Einheit „Tertiär bindig“ - bodenphysikalisch/ geochemische Parameter

Der Pelitgehalt dieser Einheit schwankt zumeist zwischen 40 und 70 Ma\% , wobei sich ein flächendifferenziertes Bild zeigt. Der Mittelteil des Kohlefeldes ist durch die geringsten Pelitgehalte gekennzeichnet. Für den überbaggerten Bereich offenbart sich ein relativ einheitliches Niveau der S_{ges} -Gehalte von $2,5\text{--}3 \text{ Ma\%}$. Im südlichsten Teil der Kippe ist ein Bereich mit niedrigeren Gehalten zu verzeichnen, der sich nach Westen in Richtung Kohlefeld „Cottbus Nord“ fortsetzt. Die $C_{\text{org}}/ S_{\text{ges}}$ -Verhältnisse für diese Auswerteeinheit weisen ein schlüssiges, gut interpretierbares Bild auf. Im Nordteil wird die marine Beeinflussung durch Werte zwischen 3 und 5 deutlich. Der Anstieg der Werte im Kippensüdteil begründet sich durch die Zunahme tertiärer Schluffe im Hangenden des GWL 4.1. Diese besitzen, wie oben angesprochen, geringere Schwefelgehalte. Diese Bereiche sind als „Halligen“ interpretierbar. Die Auswerteeinheit zeichnet sich durch C_{org} -Gehalte zwischen $10\text{--}20 \text{ Ma\%}$ aus, wobei innerhalb des Kohlefeldes eine Zunahme von NW nach SE ersichtlich wird. Die Auswerteeinheit ist als karbonatfrei anzusehen. Es gibt nur lokal vereinzelte Proben, die Karbonatgehalte aufweisen. Daraus resultieren generell die höchsten hydrolytischen Aciditäten des Abraums. Der Bereich der Maximalwerte von $> 200 \text{ ml NaOH/ } 50 \text{ g Substrat}$ tangiert den Westteil des Kohlefeldes.

5.4.3.7 Einheit „Tertiär rollig“ - bodenphysikalisch/ geochemische Parameter

Die flächenhaften Verteilungen sind durch das teilweise Auftreten von Schluffen innerhalb des GWL 4.1 geprägt. Für diese Bereiche im Nordteil sowie im äußersten SE-Teil des Kohlefeldes erhöhen sich damit die Pelitgehalte deutlich. Demgegenüber sind die anderen Bereiche durch Pelitgehalte zwischen <1 bis 10 Ma% gekennzeichnet. Die Schwefelgehalte liegen für den Großteil des Kohlefeldes zwischen 0,1 – 0,3 Ma%. Für die angesprochenen schluffigeren Bereiche erhöhen sich die Gehalte auf ca. 0,6 – >1 Ma%. Die C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse, mit Werten zwischen 1 und 3, spiegeln den marinen Charakter dieser Einheit wider. Völlig anders verhält es sich in den angesprochenen Bereichen mit Schluffen innerhalb des GWL 4.1. Hier zeigen sich C_{org}/S_{ges} -Werte im Bereich > 7. Die Schluffe sind ihren C_{org}/S_{ges} -Werten nach terrestrische Bildungen. Sie weisen dabei C_{org} -Gehalte von 4 – 6 Ma% auf. Das mittlere Niveau für die anderen Bereiche liegt zwischen 0,1 – 1 Ma%. Die ausgewiesenen hydrolytischen Aciditäten liegen deutlich unter den Werten der Einheit „Tertiär bindig“. Es zeigt sich ein E – W Trend bezüglich der Zunahme der Werte. Ebenfalls wird im Südteil des Kohlefeldes ein Bereich mit Werten im Niveau > 40 ml NaOH/ 50 g Substrat ersichtlich.

5.4.4 Ergebnisse Kippenmodell

Abb. 5.4.3 stellt die prognostizierten Verteilungen für das AFB-Kippenmodell dar. Die S_{diff} -Gehalte liegen für den Großteil des Kippenmodells zwischen 0,2 – 0,4 Ma%. Im Westteil sowie für den Bereich der Tertiärhochfläche Horno ergeben sich Gehalte von 0,4 bis > 0,6 Ma%. Der durch Quartärsubstrate geprägte Nordteil ist durch Werte deutlich < 0,2 Ma% geprägt. Bezüglich der Karbonatverhältnisse zeigen sich nur sehr lokale Bereiche mit Werten < 0,05 Ma% $CaCO_3$. Diese Bereiche sind durch niedrige Abraumanteile der Einheit „Quartär bindig“ gekennzeichnet (vgl. Anl. 5.4.4) bzw. der Tertiärhochfläche zuzuordnen. Für den nördlichsten Teil in Nähe des zukünftigen „Restsee Taubendorf“, den östlichen Bereich des Mittelfeldes sowie für die überbaggerte „Gosdaer Rinne“ ergeben sich Gehalte > 0,5 Ma% $CaCO_3$. Dies beruht auf dem geringen Tertiäranteil des Abraums bzw. den anstehenden kalkhaltigen Sanden (vgl. Kap. 5.4.3.5). Die Größe „hydrolytische Acidität“ und die vereinfachte „Alkalinitätsbilanzierung“²⁸ (angenommener S_{diff} Umsatz = 8 %) zeigen somit in den „karbonatarmen“ Bereichen erhöhte Aciditäten auf. Für den Bereich der Tertiärhochfläche werden zwischen den beiden Größen tendenzielle Unterschiede offenbar. Diese sind nicht abschließend zu klären. Die C_{org} -Gehalte liegen für den Großteil der AFB-Kippe zwischen 1 und 3 Ma %. Für den Nordteil ist das Gehaltsniveau deutlich kleiner. Die prognostizierten k_f -Werte besitzen zumeist ein Niveau zwischen $1 \cdot 10^{-5}$ und $1 \cdot 10^{-6}$ m/s. Der Mittelteil der Kippe ist durch größere k_f -Werte gekennzeichnet. Für den Bereich der Tertiärhochfläche Horno werden, auf Grund der erhöhten Pelitgehalte, kleinere k_f -Werte im Niveau $1 \cdot 10^{-6}$ bis $1 \cdot 10^{-7}$ m/s ermittelt.

²⁸Für die Alkalinitätsbilanzierung wurde, aus konservativer Betrachtung heraus, vom doppelten Umsatz nach BTUC [1998] = 8 % der Bilanzgröße S_{diff} ausgegangen.

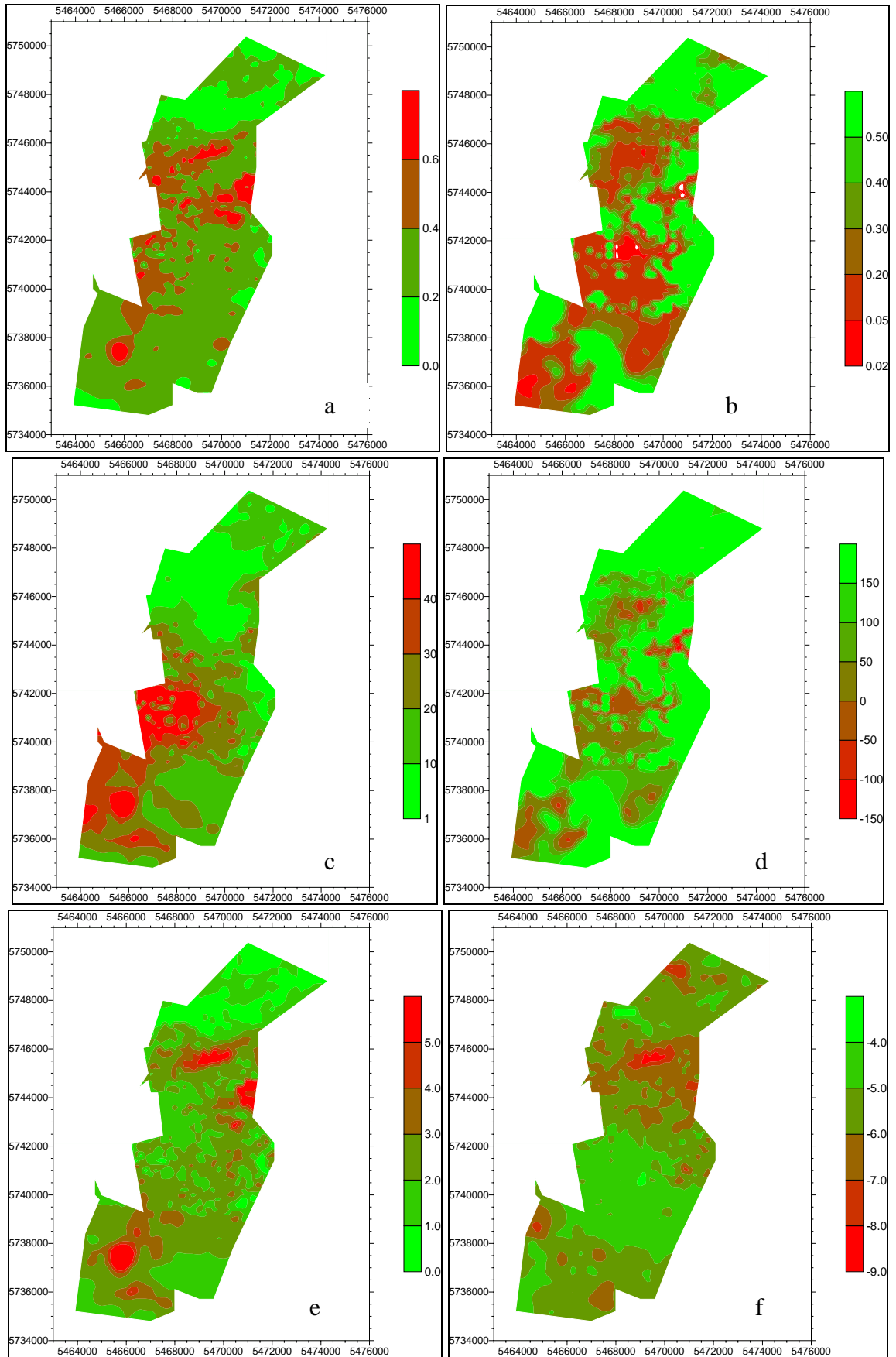


Abb. 5.4.3 Prognostizierte a) S_{diff} -Gehalt [Ma% S], b) Karbonatgehalt [Ma% $CaCO_3$], c) hydrolyt. Acidität [ml 0,1N NaOH/ 50g Substrat], d) Alkalinitätsbilanz [mmol/ l PW], e) C_{org} [Ma%], f) „log k_f -Werte“ [m/s] der AFB Kippe, Datengrundlage Vorfeldgutachten

6 Kennzeichnung der hydrogeochemischen Prozesse – Kippe Espenhain

6.1 Vorgehensweise und Untersuchungsmethoden

Ziel der Untersuchungen war, den hydrogeochemischen Systemzustand des Kippenkörpers zu charakterisieren. Dabei sollte die Relevanz der einzelnen Prozesse und ihre Verknüpfung aufgezeigt werden. Zum einen ist eine Aussage zu mobilisierbaren Stoffpotentialen bei nichtlimitierter Verwitterung zu treffen, zum anderen sind die tatsächlich mobilisierten Stoffpotentiale zu kennzeichnen. Dies erfolgte sowohl für die vorhandenen Verwitterungszonen (Absetzer-, Förderbrückenkippe, Restlochböschungen), als auch für den tieferen Kippenkörper (an tiefen Kippenbohrungen). In den wasserteilgesättigten Bereichen wurde ebenfalls die Beschaffenheit der Gasphase untersucht. Zur Fragestellung der Versickerungsraten erfolgten Tritiummessungen. Die Ergebnisse zum hydrogeochemischen Systemzustand werden für eine flächendifferenzierte Prognose der Beschaffenheit des aufgehenden Kippengrundwassers verwendet.

In den folgenden Kapiteln werden die angewandten Untersuchungsmethoden kurz dargelegt. Eine nähere Erläuterung der Verfahren findet sich in Anl. 6.1.1.

6.1.1 Festphase - Probenahme und Untersuchungsmethoden

Feststoffproben wurden durch 3 Arten von Bohrungen gewonnen: Rammkernsondierungen (RKS), tiefere Bohrungen (TB) und Horizontalbohrungen (HB). An einem Teil der entnommenen Feststoffproben erfolgte die Bestimmung der Gesamtschwefel- (S_{ges}) und der Schwefelspezies-Gehalte sowie der TC/ TIC-Gehalte. Zur mineralogischen Kennzeichnung wurden REM/ EDX-Untersuchungen an einzelnen Proben durchgeführt. An 2 RKS erfolgte die Bestimmung der selektiven Sulfatreduzierer-Keimzahlen nach der MPN Methode (in Zusammenarbeit mit AG Dr. Glombitza - G.E.O.S. Freiberg).

6.1.2 Wasserphase – Probenahme und Untersuchungsmethoden

Zur Charakterisierung der Milieuverhältnisse vor Ort wurden bei RKS, TB und HB „Feldelutionen“ durchgeführt. Dabei erfolgte die Messung von elektrischer Leitfähigkeit (ELF) und pH-Wert in einem Extrakt mit deionisiertem Wasser. Zur Kennzeichnung der Porenwasserbeschaffenheit wurde an ausgewählten Proben der RKS und der HB eine Bodenwassersättigungsextraktion (BSE) nach VWV [1993] bzw. ABEL ET AL. [1998] durchgeführt. Für einen Teil der Liner der TB erfolgte eine Porenwassergewinnung (PWG) mittels Stickstoff-Druckfiltration. Zur Kennzeichnung des Elutionsverhaltens von Material der Verwitterungszone der ASK wurden gesättigte Durchströmungsversuche durchgeführt. Kippengrundwasserbeprobungen erfolgten an ausgewählten Grundwassergütemessstellen. Dabei dienen NITZSCHE ET AL. [1999] bzw. LMBV [1999] als Leitfaden. Für die aus BS-Extraktionen, PW-Gewinnung, Säulenversuchen und Grundwasserprobenahmen resultierenden Wasserproben wurden Vollanalysen angestrebt. Die angewandten Analyseverfahren sind aus Anl. 6.1.1 ersichtlich. An ausgewählten Kernen der TB wurden die

Tritiumgehalte des Porenwassers bestimmt (in Zusammenarbeit mit AG Prof. Hebert – TU BAF). Die Kennzeichnung der qualitativen Aktivierbarkeit von Sulfatreduzierern im Kippengrundwasser erfolgte durch einfache Flaschenversuche.

6.1.3 Gasphase – Probenahme und Untersuchungsmethoden

Die Beprobung der Kippengasphase erfolgte mittels selbst entwickelter Sonden. Diese ermöglichten eine teufenorientierte Beprobung, begleitend zum Bohrprozess. Vor Ort wurden mittels des transportablen Gasmessgerätes der Fa. Meta die Gehalte an CO₂, O₂, CH₄ und H₂S gemessen. Im Labor erfolgte an einem Großteil der Proben eine Gasanalyse unter Einbeziehung der leichten Kohlenwasserstoffe und eine ¹³C- Isotopieuntersuchung am CO₂ (in Zusammenarbeit mit AG Dr. Nitzsche – INC Leipzig).

6.1.4 Charakterisierung von Wasseranalysen

Zur Plausibilitätsprüfung der Wasseranalysen erfolgte für Vollanalysen eine Berechnung der Ionenbilanzfehler mittels PHREEQC 2 (PARKHURST & APPELO [1999]) nach Gl. 6.1.1.

$$IBF [\%] = \frac{(\sum K(eq) - \sum A(eq))}{(\sum K(eq) + \sum A(eq))} \cdot 100\% \quad (Gl. 6.1.1)$$

Durch die Berechnung der Speziation der Lösungen wurde gleichzeitig der Sättigungszustand der Lösungen gegenüber relevanten Mineralphasen ausgewiesen. In Anl. 6.1.2 sind die berechneten Ionenbilanzfehler für die Porenwasseranalysen der tiefen Bohrungen, die Säulenversuche SVE 2 und 3, Horizontalbohrungen und KGGM-Beprobungen abgebildet. Die Darstellung des IBF erfolgt zum einen in Häufigkeitsklassen, zum anderen in Abhängigkeit von der Ionenstärke. Es wird deutlich, dass nur ca. 40 % der Analysen den von der LAWA (siehe z.B. HÖLTING [1992]) geforderten Bilanzfehler < 5 % aufweisen. Das an Braunkohlenbergbauwässer andere Qualitätsschwellen angesetzt werden müssen unterstreichen die Arbeiten von NITZSCHE ET AL. [1999], SCHÖPKE [1999], UHLMANN [2000] und DOHRMANN [2000]. NITZSCHE ET AL. [1999] leitet als Qualitätsschwelle für Bergbauwässer einen IBF nach Gl. 6.1.1 von < 10 % ab. UHLMANN [2000] benennt als „allgemeines Gütekriterium“ < 15 % nach Gl. 6.1.1, als „gehobenes Gütekriterium“ < 5 %. Als Gründe für erhöhte Ionenbilanzfehler wird von NITZSCHE ET AL. [1999] der Trübungsgrad verbunden mit der notwendigen Probenteilung genannt. Es ist die Redoxsensitivität der Wässer und deren Matrixbelastung zu ergänzen.

Von den in Anl. 6.1.2 dargestellten 157 Proben liegen lediglich 8 Proben außerhalb des „allgemeinen Gütekriteriums“ nach UHLMANN [2000]. Allerdings wird deutlich, dass die 157 Proben nicht exakt normalverteilt sind. Es überwiegt die Anzahl von positiven IBF, was als Unterbestimmung der Anionen oder Überbestimmung der Kationen zu verstehen ist. Eine Abhängigkeit der IBF von der Ionenstärke ist nicht ersichtlich. Ausgleichsrechnungen der Analysen zur Einstellung eines IBF = 0, an Hand der ELF-Werte etc., wie in DOHRMANN [2000], wurden nicht durchgeführt.

6.2 Kennzeichnung der mobilisierbaren Stoffpotentiale

Um die zeitliche Entwicklung der mobilisierbaren Stoffpotentiale zu charakterisieren, erfolgt eine Neubearbeitung der Daten der Verwitterungsversuche von FELDMANN in TUBAF [2000]. Weiterhin werden Ergebnisse von Elutionsversuchen und zur Kennzeichnung der eluierbaren Stoffmengen aus Restlochböschungen diskutiert.

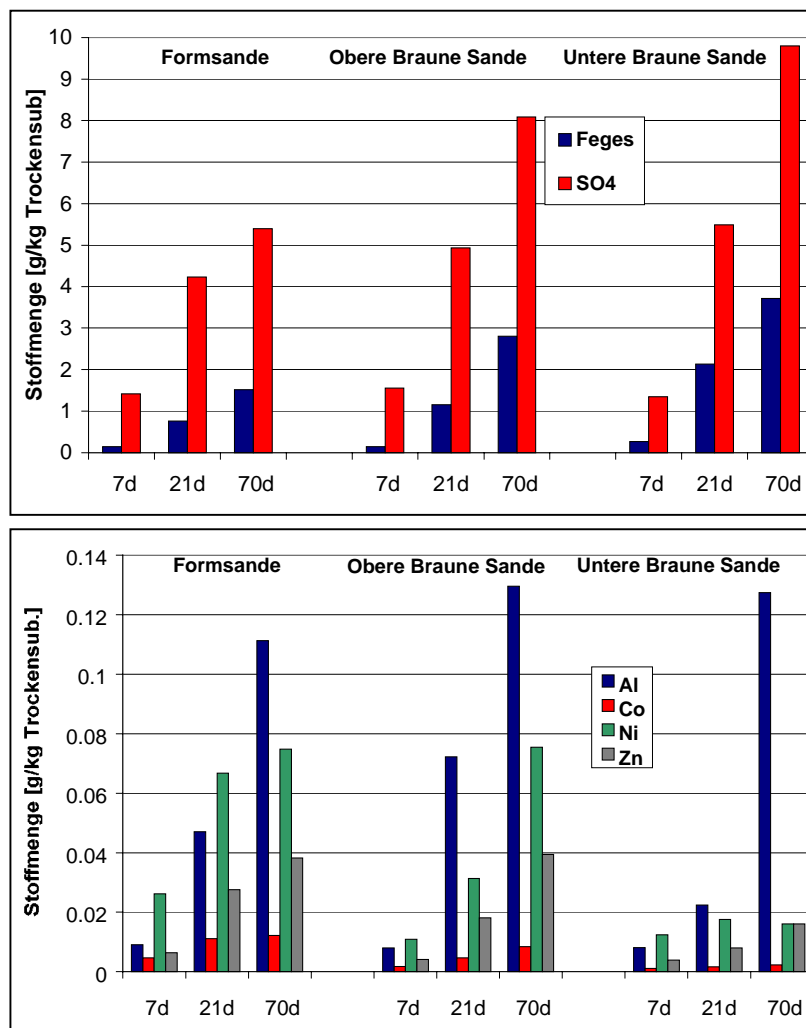


Abb. 6.2.1 Mittlere mobilisierte Stoffmengen [g/kg Trockensubstanz] für verschiedene anstehende stratigraphische Einheiten im östlichen Vorfeld des Tagebaus Espenhain nach 7, 21, 70 Tagen Sauerstoffexposition – Datengrundlage Verwitterungsversuche von FELDMANN in TU BAF [2000]

6.2.1 Verwitterungsversuche

Die in TUBAF [2000] dokumentierten Verwitterungsversuche von FELDMANN wurden am Material von 4 Vorfeldbohrungen durchgeführt. Die Bohrungen lagen alle östlich des Restloches Störmthal. Die Feldeluatkurven der Bohrungen zeigten für alle Bereiche geringe Mineralisationen und neutrale pH-Werte (siehe TU BAF [2000]).

Für die Einheiten „Obere Meeressande“, „Obere Braune Sande“ und „Untere Braune Sande“ wurden 8, 4 bzw. 3 Mischproben erstellt, die 70 Tage lang im Labor einer Verwitterung

unterzogen wurden²⁹. Nach 7, 21 und 70 Tagen wurde jeweils ein Teil der Mischproben mittels BSE-Aufschluss analysiert. Die „Oberen Meeressande“ waren in den Bohrungen durch karbonatarme/-freie Formsande vertreten, was nicht das gesamte Feld repräsentiert (vgl. Kap. 5.3). Gegenüber TUBAF [2000] erfolgt eine weitere Auswertung der Grunddaten. Ziel ist die Ausweisung von mittleren mobilisierbaren Stoffmengen pro kg Substrat für die betrachteten Einheiten. Abb. 6.2.1 zeigt die erhaltenen Ergebnisse auf. Für alle 3 Einheiten wird eine schnelle, deutliche Zunahme der Fe- und SO₄-Gehalte ersichtlich. Zum Versuchsende liegen die höchsten Gehalte in den „Braunen Sanden“ vor. Die Pastenkonzentrationen erreichen Werte bis zu >10 g/l Sulfat und >4 g/l Eisen (siehe Tab. 6.2.1). Die Ergebnisse für die Spurenelemente (Tab. 6.2.1) zeigen, dass es in Folge des absinkenden pH-Wertes zu erheblichen Mobilisierungen kommt. Zum Teil werden innerhalb der „Formsande“ größere Stoffmengen mobilisiert als bei den „Braunen Sanden“. Die Spurenmetalle Ni, Zn und Co erreichen ein Wertenniveau von bis zu 10 –100 mg/l!³⁰ Für alle Messergebnisse wird aus den hohen Variationskoeffizienten eine breite Streuung deutlich. Dieses Maß der Heterogenität der Substrate sinkt allerdings bei längerem Versuchszeitraum deutlich ab (siehe Werte für t = 70 d). Insgesamt zeigen die Untersuchungen, dass bereits im Maßstab von Wochen bei nicht Sauerstoff-limitierter Verwitterung erhebliche Stoffpotentiale mobil werden.

6.2.2 Porenwasserbeschaffenheit der Restlochböschungen

Zur Kennzeichnung der leicht eluierbaren Stoffpotentiale in den Materialien der Restlochböschungen wurden Horizontalbohrungen durchgeführt. Die Bohrungen erfolgten sowohl im Gewachsenen als auch in die Kippe bis in 2 m Teufe (TU BAF [2000]). Die erbohrten Substrate wurden mittels Feldelutionen vor Ort charakterisiert. Für nahezu alle Bohrungen zeigt sich, dass bis in 2 m Teufe eine erhebliche Verwitterung (pH- und ELF-Werte) vorlag. In WENZEL [1999] erfolgten BS-Extraktionen für die Substrate der relevanten stratigraphischen Einheiten des Gewachsenen bis 50 cm Teufe. Ausgewählte mittlere Beschaffenheitswerte dieser Untersuchungen sowie zugehörige Variationskoeffizienten sind in Tab. 6.2.2 zusammengestellt. Die Extrakte der „Oberen-“ und „Unteren Braunen Sande“ sind durch sehr niedrige pH-Werte gekennzeichnet. Die pH-Werte der „Formsande“ liegen unterhalb von 3,5. Im Gegensatz dazu bewegen sich die Substrate des „Muschelsand/-schluff“ im schwach sauren bis neutralen Bereich. Die Unteren Braunen Sande zeigen die höchsten Fe_{ges}- und Sulfatgehalte. Die vergleichsweise geringen Eisengehalte der Oberen Braunen Sande sind bei den zugehörigen pH-Werten schwer verständlich³¹. Für die Einheiten mit niedrigen pH-Werten spiegelt sich der Ablauf der Verwitterung von Silikatphasen in den stark erhöhten Aluminiumgehalten wider. In der durch Karbonatpufferung geprägten Einheit „Muschelsand/-schluff“ sind die Gehalte bezüglich Fe, Al, Cu und Zn deutlich geringer. Die „Formsande“ weisen bezüglich der Ni- und Zn-Gehalte die höchsten Werte auf.

²⁹ Für die „Oberen Meeressande“ jeweils 2 Mischproben pro Bohrung. Nur 3 Mischproben für die „Unteren Braunen Sande“, da eine Bohrung diese Einheit nicht erreichte. Während der Versuche wurden die Proben ständig mit Aqua dest. befeuchtet.

³⁰ Auf Grund des Kalibrationsbereiches bei den ICP-Messungen sind Ni-Messwerte, die größer als 100 mg/l sind, exakt als > 100 mg/l anzugeben. Die Werte wurden zur Vergleichbarkeit dennoch mit ihren extrapolierten Messwerten aufgeführt.

³¹ Ein Analysenfehler liegt nahe. Die Ionenbilanzfehler dieser Analysen sind allerdings gering (0,5 – 3,5 %). Weiterhin ist für die lange exponierten Substrate eine Auswaschung der mobilen Eisengehalte (pH < 3) zu diskutieren.

Tab. 6.2.1 Mittlere Konzentrationen (mit Variationskoeffizienten - V) der BS- Extrakte der Verwitterungsversuche für verschiedene anstehende stratigraphische Einheiten im Bereich des östlichen Vorfelds des Tagebaus Espenhain – Datengrundlage Verwitterungsversuche von FELDMANN in TU BAF [2000]

Stratigr. Einheit	Zeit [d]	Fe _{ges} [mg/l]	SO ₄ [mg/l]	Al [mg/l]	Co [mg/l]	Ni [mg/l]	Cu [mg/l]	Zn [mg/l]
Form-sande	7	216.25	2087.50	14.50	6.40	39.43	0.22	10.13
	V [%]	112.6	21.0	94.7	50.4	46.7	39.6	68.5
	21	1224.13	6968.75	78.53	17.37	109.09	0.87	46.52
	V [%]	91.2	83.3	95.9	67.9	78.7	108.8	90.1
	70	2407.25	8650.00	177.17	18.67	121.66	1.56	59.44
V [%]	62.6	43.4	43.1	43.2	23.3	28.0	48.4	
Obere Braune Sande	7	271.00	2587.50	15.12	3.23	19.86	0.26	7.84
	V [%]	137.9	31.0	110.7	90.4	78.3	7.4	99.6
	21	2313.00	9937.50	147.14	10.11	68.97	0.66	37.80
	V [%]	93.1	68.0	93.2	74.7	73.3	60.4	73.1
	70	4120.00	12012.50	195.83	12.39	106.58	1.53	57.52
V [%]	78.5	51.2	37.4	11.4	36.3	53.4	29.9	
Untere Braune Sande	7	381.67	2216.67	12.08	1.73	17.15	0.25	6.01
	V [%]	81.1	5.6	53.1	60.2	98.8	32.3	43.0
	21	4046.67	10416.67	87.34	4.60	37.21	0.55	25.17
	V [%]	51.4	54.4	57.1	51.9	52.3	54.9	53.2
	70	7593.33	19966.67	258.07	4.71	32.67	1.31	32.83
V [%]	48.6	33.2	20.5	36.5	34.6	30.7	18.8	

Tab. 6.2.2 Kennzeichnung Beschaffenheit exponierter Restlochböschungen- mittlere Konzentrationen der BS- Extrakte (mit Variationskoeffizienten V) für verschiedene anstehende stratigraphische Einheiten im Bereich des Tagebau Espenhain — Datengrundlage WENZEL [1999]

Einheit		pH [-]	SO ₄ [mg/l]	Fe _{ges} [mg/l]	Al [mg/l]	Ni [µg/l]	Cu [µg/l]	Zn [mg/l]
Muschelsand /-schluff	Mittlw.	5.69	2653.33	11.33	0.99	203.51	23.64	0.62
	V [%]	14.98	4.7	97.81	83.88	11.88	77.73	75.81
Form-sande	Mittlw.	3.37	3766.67	42.17	222.08	13400.54	167.74	5.53
	V [%]	18.47	23.04	167.72	25.58	38.61	68.85	89.46
Obere Braune Sande	Mittlw.	2.16	2490	7.67	98.15	193.59	122.74	3.98
	V [%]	0.95	5.09	60.56	30.93	73.95	140	99.86
Untere Braune Sande	Mittlw.	2.2	4478.33	281.5	210.87	350.66	280.74	3.51
	V [%]	18.67	43.93	60.83	59	61.4	49.02	163.56

Insgesamt ist festzuhalten, dass in den Restlochböschungen hohe Stoffpotentiale eluierbar sind. Dabei liegen die Extraktgehalte aber zumeist deutlich unterhalb derer der beschriebenen idealen Verwitterungsversuche (vgl. Kap. 6.2.1).

Für Betrachtungen zum Stoffeintrag aus den Gewachsenen GWL in entstehende Restseen besteht die Frage, ob sich die GW-Beschaffenheiten im Anstrom auf Grund des Durchströmens der „Verwitterungszone“ erheblich verändern.

6.2.3 Elutionsversuche

Es wurden mehrere Säulenversuche an Material der Verwitterungszone der Absetzerkippe durchgeführt, um das Elutionsverhalten dieser Materialien zu charakterisieren. Im Folgenden werden exemplarisch die Versuche „SVE 2“ und „SVE 3“ dargestellt. Bei Versuch „SVE 2“ erfolgte eine Durchströmung mit synthetischem Regenwasser. Für Versuch „SVE 3“ wurde ein synthetisches Infiltrat genutzt, welches sich an der Beschaffenheit der überdeckenden Rekultivierungsschicht orientierte.³² Tab. 6.2.3 weist die Beschaffenheiten der Infiltrate aus. Die Substrate wurden kontinuierlich durchströmt.

Tab. 6.2.3 Infiltratbeschaffenheiten der Säulenversuche SVE 2 und SVE 3

Parameter	Infiltrat SVE 2 [mmol/l]	Infiltrat SVE 3 [mmol/l]
Na ⁺	9.53E-03	0.724
K ⁺	3.11E-03	
Mg ²⁺	3.42E-03	
Ca ²⁺	1.85E-03	1.761
Cl ⁻	1.19E-02	1.014
NO ₃ ⁻	3.11E-03	0.804
SO ₄ ²⁻	4.29E-03	0.852
TIC		0.362
pH	5.5	7.8

6.2.3.1 Versuch SVE 2

In Abb. 6.2.2 ist die zeitliche Entwicklung der Beschaffenheit des Säulenauslaufs dargestellt. Dabei werden die Milieuparameter, die wesentlichen Hauptkomponenten sowie Nickel und Zink als relevanteste Spurenmetalle aufgezeigt. Über den Zeitraum des Versuches (6 ausgetauschte effektive Porenvolumen) kommt es zu keiner Veränderung des pH-Wertes. Die pE-Werte stellen sich nach 2 effk. PV auf 6,8 ein. Die ELF sinkt über den Versuchszeitraum um 1000 µS/cm ab. Sie wird hauptsächlich durch die Sulfatgehalte geprägt. Dies kommt in der Ähnlichkeit der Kurven zum Ausdruck. Die Fe_{ges}-Gehalte steigen an, wobei nach 3 effk. PV ein Niveau von ca. 60 mg/l erreicht wird. Bis 1,5 effk. PV liegt ein geringer Teil als Fe³⁺ vor. Die TIC-Gehalte liegen auf Grund des pH-Wertniveaus als gelöstes CO₂ vor und sinken zum Versuchsende auf Werte um 3 mmol/l ab.

³² Die Beschaffenheit des Regenwassers lehnt sich an dokumentierte sächsische Regenwässer nach LFUG [1994] an. Die Beschaffenheit des Infiltrates in Versuch SVE 3 orientiert sich an Daten von RINKER (TUBAF [2000] bzw. RINKER [2001]).

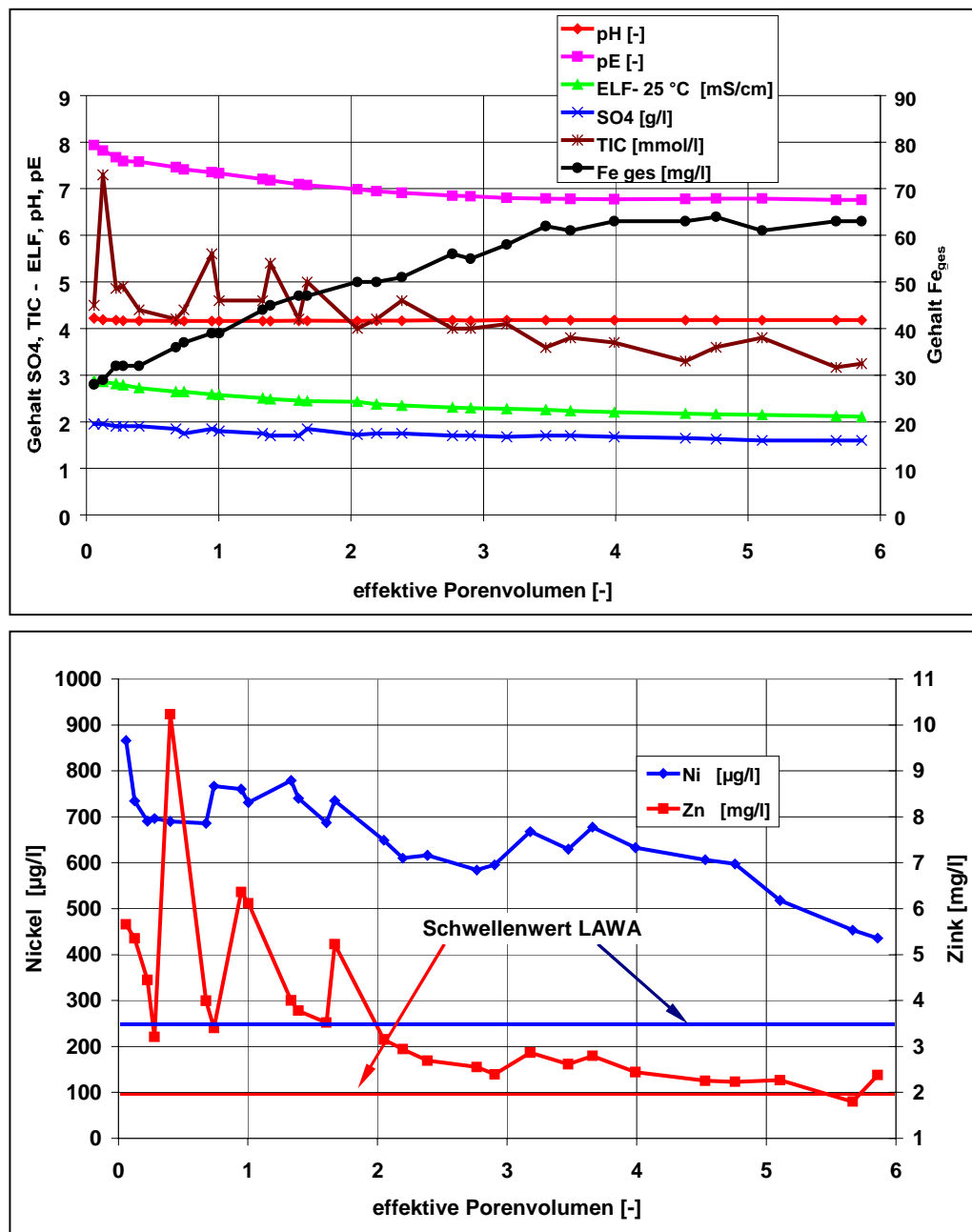


Abb. 6.2.2 Versuch SVE 2 (ASK-Material Espenhain) - Zeitliche Entwicklung der Beschaffenheit des Säulenauslaufs

Die berechneten Sättigungsindizes (SI) zeigen für den gesamten Versuchszeitraum ein Gleichgewicht gegenüber Gips auf. Gegenüber karbonatischen Phasen besteht eine deutliche Untersättigung. Als weitere relevante Mineralphase ist Jurbanit zu benennen. Die SI bezüglich dieser Phase sind für den gesamten Zeitraum zumeist zwischen 0,3 und 0,1. Das System befindet sich im Pufferbereich der Silikatphasen, was in erhöhten Al- (25 – 7 mg/l) und SiO₂ – Gehalten (50 – 5 mg/l) zum Ausdruck kommt. Diese Verwitterung bewirkt ebenfalls eine Mobilisierung der Spurenmetalle. Für Nickel wird auch nach 6 effk. PV eine deutliche Überschreitung des Maßnahmschwellenwertes nach LAWA [1994] ersichtlich. Bezogen auf Zink wird der Maßnahmschwellenwert zum Versuchsende erreicht.

6.2.3.2 Versuch SVE 3

Abb. 6.2.3 zeigt die zeitliche Entwicklung am Säulenauslauf. Es werden die gleichen Parameter wie für Versuch SVE 2 dargestellt. Der Versuch SVE 3 erfolgte im Vergleich zu SVE 2 über einen deutlich längeren Zeitraum (bis 15,5 effektive PV).

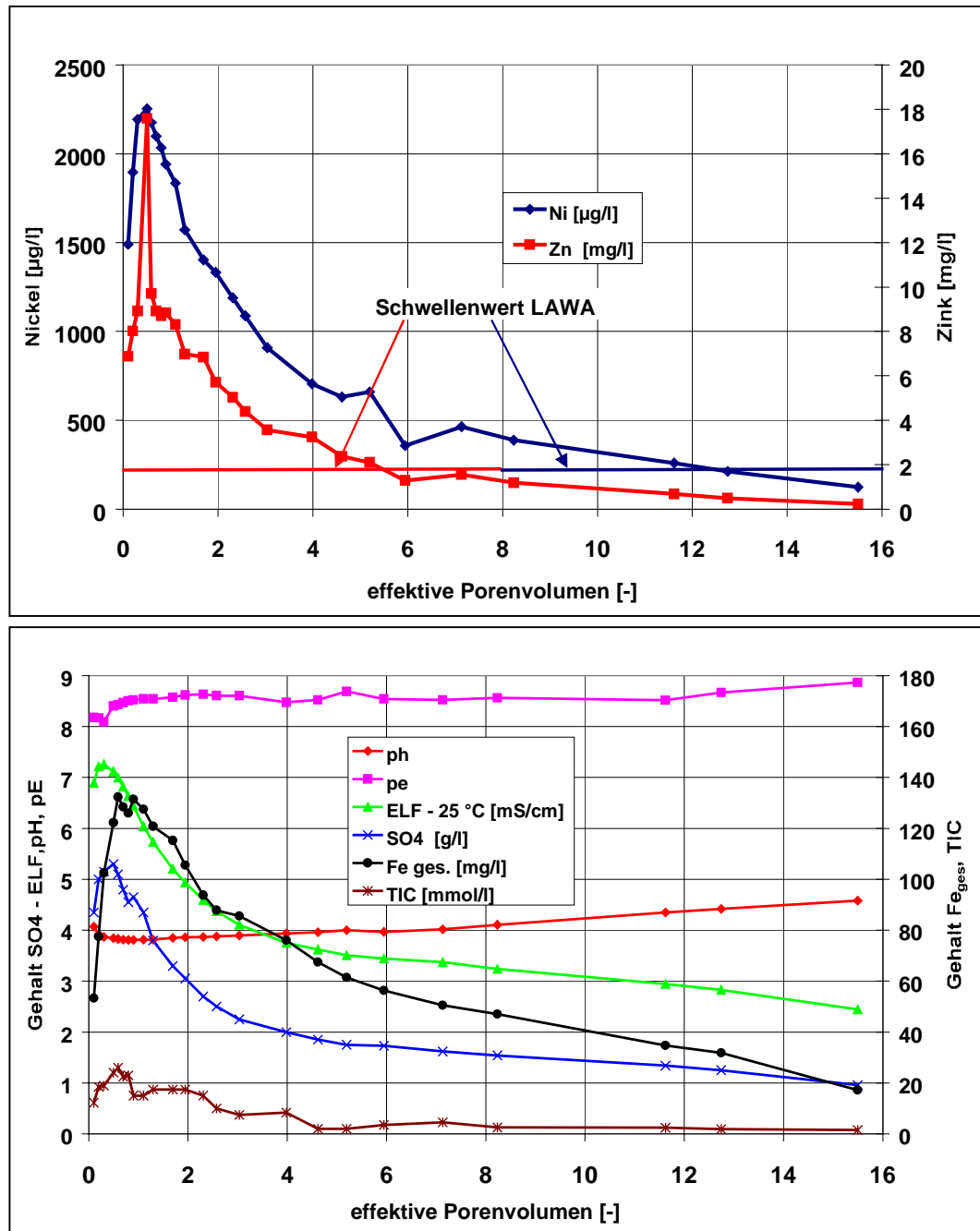


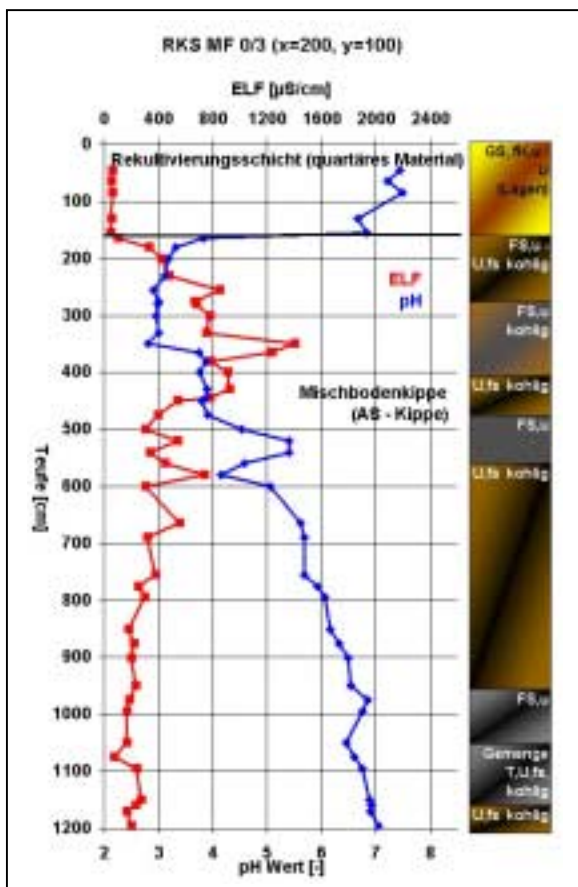
Abb. 6.2.3 Versuch SVE 3 (ASK-Material Espenhain) - Zeitliche Entwicklung der Beschaffenheit des Säulenauslaufs

Auf Grund des Infiltrates kommt es ab ca. 4 effk. PV, zu einer sehr langsamen Anhebung des pH-Wertes. Zum Versuchsende liegt der pH-Wert um 0,7 Einheiten höher als zu Versuchsanfang. Die pE-Werte nehmen im Gegensatz zu Versuch SVE 3 nicht ab. Die Kurven bezüglich ELF, Sulfat, Fe_{ges} und TIC verdeutlichen den Prozess der Stoffelution. Nach etwa 1 effk. PV treten die Maximalwerte auf. Diese haben ein höheres Niveau als bei Versuch SVE 2. Danach kommt es zu einer deutlichen Abnahme der Gehalte. Die Berechnungen der SI weisen ein Gleichgewicht gegenüber Gips aus. Die SI für Jurbanit liegen etwas höher (1,3 – 0,8) als bei Versuch SVE 2. Das System befindet sich ebenfalls im Pufferbereich der Silikat-Phasen. Die Kurven für Al (350 – 10 mg/l) und SiO₂ (140 – 10 mg/l) zeigen das gleiche Verhalten wie die oben besprochenen Elutionskurven. Die Maximalwerte für Nickel und Zink nach 1 effk. PV liegen deutlich höher als bei Versuch SVE 2. Nach 6 effk. PV werden allerdings die selben Gehaltsniveaus von 2 mg/l (Zink) bzw. 500 µg/l (Nickel) erreicht. Die Unterschreitung des Maßnahmenschwellenwertes für Nickel (LAWA [1994]) erfolgt nach ca. 11,5 effk. PV.

6.3 Untersuchung der sekundären Verwitterungszone der Absetzerkippe

6.3.1 Wesentliche Ergebnisse der Untersuchungen der Wasser- und Festphase

Die Kennzeichnung der sekundären Verwitterungszone der Absetzerkippe (ASK) erfolgte an Hand einer Vielzahl von abgeteufte Rammkernsondierungen (RKS). Abb. 6.3.1 zeigt am Beispiel der RKS „MF 0/3“ die Ergebnisse der Feldelutionen exemplarisch auf.



Diese tiefste Sondierung spiegelt die Verhältnisse für den Großteil der Sondierungen im Südtail der Kippe Espenhain gut wider. Der Unterschied zwischen der Beschaffenheit des quartären Rekultivierungsmaterials (pH = neutral, niedrige ELF- Werte) und den tertiären Kippenmischsubstraten wird deutlich. In der Mischbodenkippe zeichnet sich eine Verwitterungszone zwischen 2 und 6 m Teufe ab. Für 4 m Teufe sind die pH-Werte im Eluat < 3 und die zugehörigen ELF-Werte > 1000 µS/ cm. Zum Liegenden der RKS hin kehren sich die Verhältnisse deutlich um. Bereits ab 5 m Teufe kommt es zum Anstieg der pH-Werte und zum Absinken der zugehörigen ELF-Werte. Die Substratwechsel innerhalb des Teufenprofils sind dabei geringfügig und spielen keine wesentliche Rolle. Bei 12 m Teufe wird ein pH-Wert von 7 erreicht. Für diesen Standort mit ca. 40–50 Jahren Verkippungsalter reicht die Verwitterungszone

Abb. 6.3.1 Feldeluatkennwerte der RKS MF 0/3

kaum tiefer als 4 m unterhalb der Grenze zur Rekultivierungsschicht.

Im Südteil der Kippe wurde weiterhin ein Messfeld mit insgesamt 12 RKS bearbeitet. Ziel war es, die geophysikalische Arbeitshypothese – erhöhte gemessene geophysikalische Leitfähigkeiten³³ sind stärker durch die erhöhte Mineralisation des Porenwassers bedingt, als durch den Wassersättigungszustand der Substrate - zu überprüfen. Zonen mit niedrigen elektrischen Widerständen sollten demzufolge auf stärker verwitterte Substrate hinweisen. Das Untersuchungsgebiet der Größe 300 * 300 m wurde sowohl geoelektrisch als auch elektromagnetisch durch den Projektpartner HGN Torgau (siehe HGN [2000] als auch HOTH in TUBAF [2000]) untersucht. Abb. 6.3.2 zeigt die von HGN interpretierte geophysikalische Leitfähigkeitsverteilung nach inverser Modellierung. Dargestellt sind die Profile 100E, 150E, 200E³⁴. Es bildet sich eine relativ oberflächennahe, wenig leitfähige Zone ab (Rekultivierungsschicht). Ein Leitfähigkeitsmaximum wird bei etwa 120 m im Profil 200 E deutlich. Ein deutliches Leitfähigkeitsminimum ist im Profil 100E bei etwa 75 m sichtbar. In die sich ergebenden „Leitfähigkeitsanomalien“ wurden die RKS „Gy 2“ (Maximum) und „Gy 3“ (Minimum) niedergebracht, um die Arbeitshypothese an Hand von hydrogeochemischen Untersuchungen zu überprüfen. Abb. 6.3.3 zeigt die Feldeluatkennwerte dieser beiden Sondierungen.

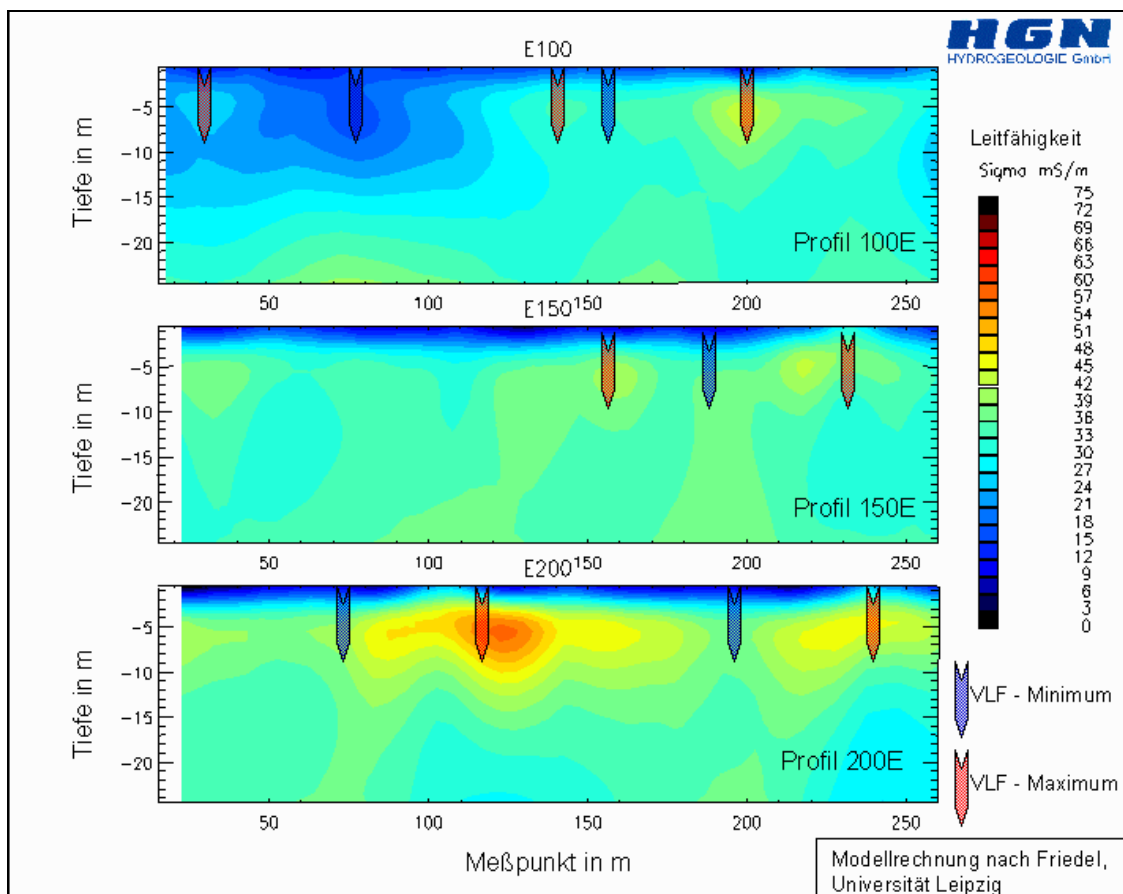


Abb. 6.3.2 Messfeld ASK Espenhain - Geophysikalisches Leitfähigkeitsmodell nach inverser Modellierung (HGN [2000])

³³ entspricht Abnahme der scheinbaren elektrischen Widerstände

³⁴ Die Profillnummern stellen die x- Koordinate innerhalb des geophy. Untersuchungsgebiets dar.

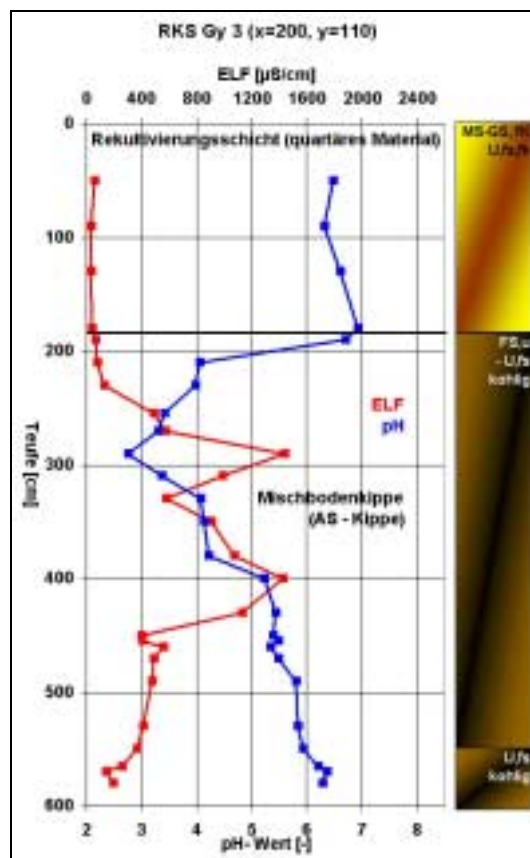
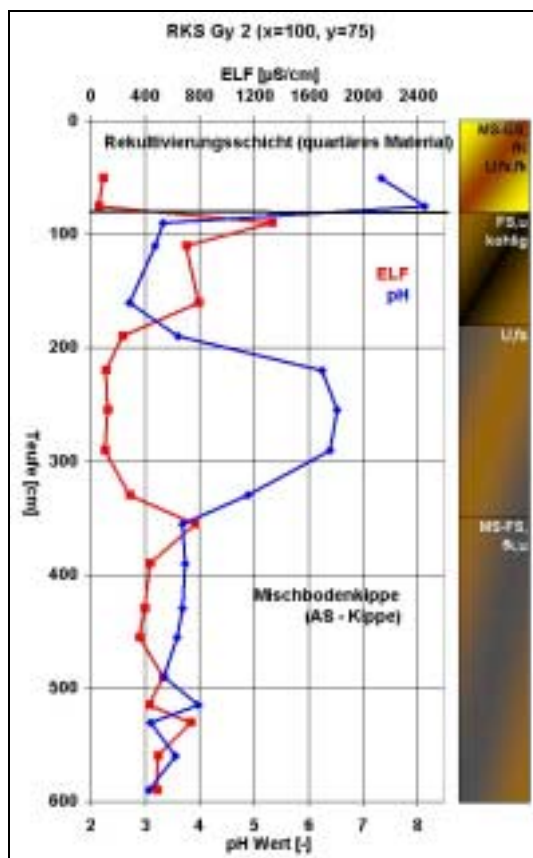


Abb. 6.3.3 Eluatkennwerte – RKS „Gy 2“ (geophy. Minimum), „Gy 3“ (geophy. Maximum)

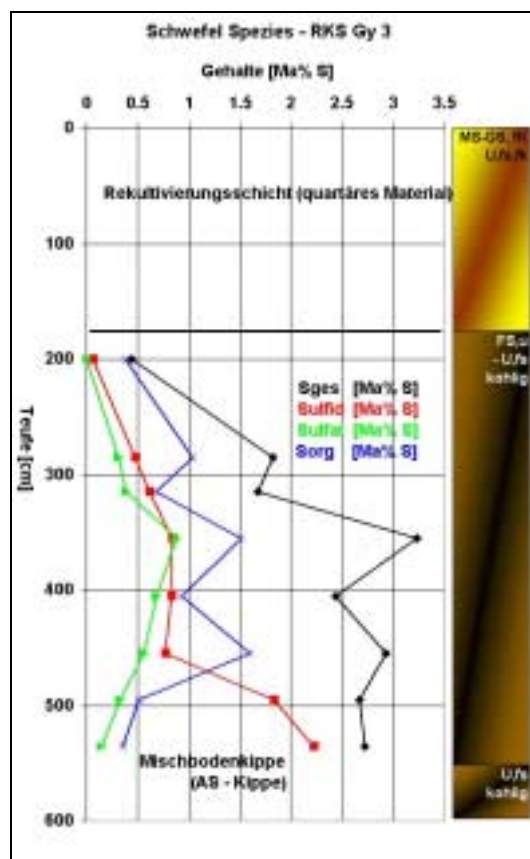
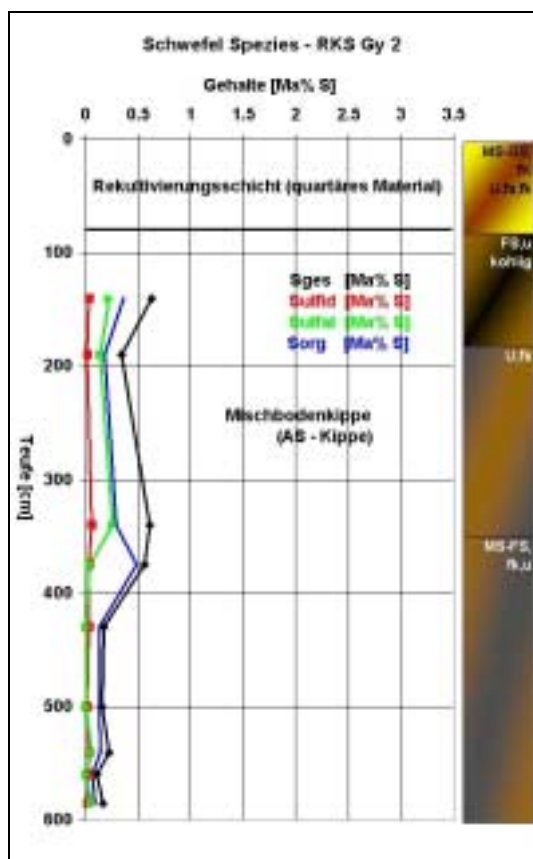


Abb. 6.3.4 Schwefel Spezies - RKS „Gy 2“ (geophy. Minimum), „Gy 3“ (geophy. Maximum)

An beiden wird wiederum die unterschiedliche Beschaffenheit der quartären Abdeckung und der Absetzermischkippe deutlich. Innerhalb der Mischbodenkippe ist Sondierung „Gy 3“ im Vergleich zu „Gy 2“ durch „höher mineralisierte“ Feldeluate gekennzeichnet. Dies beruht vor allem auf Substratunterschieden zwischen diesen beiden Sondierungen.

Die Ergebnisse der teufenorientierten Analyse der Schwefelspezies am Feststoff (Abb. 6.3.4) bekräftigen die mittels der Feldeluate getroffenen Aussagen.³⁵ Das generelle Niveau der Gesamtschwefelgehalte (S_{ges}) ist im Material der RKS „Gy3“ wesentlich höher als in der RKS „Gy2“. Dies gilt ebenso für die Sulfatgehalte des Feststoffes, die ein Maß für den Verwitterungszustand der Substrate darstellen. Die höchsten Sulfatgehalte der RKS „Gy3“ wurden im Teufenbereich 3,5 – 4 m angetroffen.

In beiden Sondierungen ist unterhalb der „Verwitterungszone“ eine Abnahme der Sulfatgehalte zum Liegenden der Sondierung hin zu erkennen. Dies geht in RKS „Gy3“ mit einem deutlichen Anstieg der Sulfidgehalte einher. In Abb. 6.3.5 sind die Schwefelspezies-Verhältnisse der RKS „Gy3“ über den Gesamtschwefelgehalt normiert dargestellt. Die oben getroffenen Aussagen treten in dieser Darstellung deutlich hervor. Der Sulfatgehalt des Feststoffes nimmt im Teufenbereich 3,5 – 4 m auf bis zu 30 % zu.

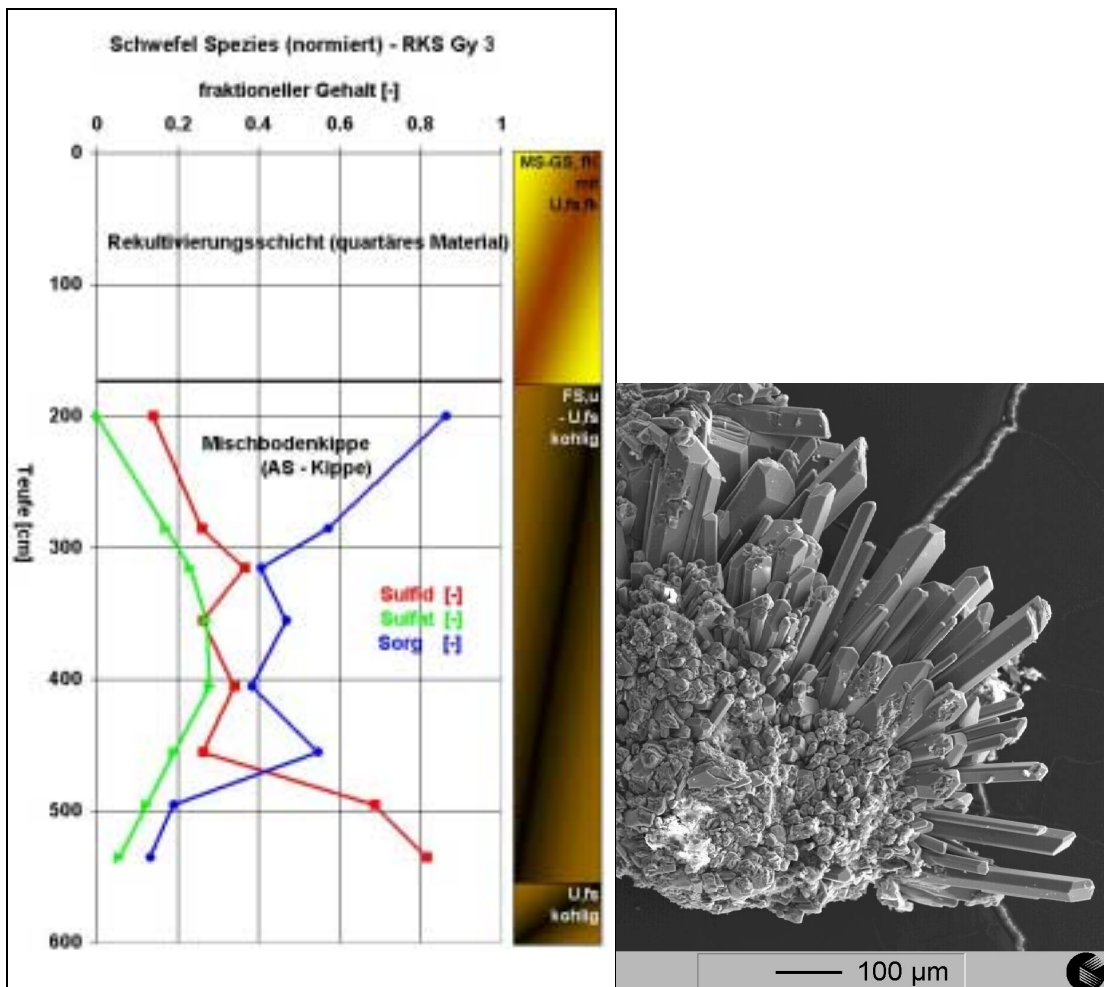


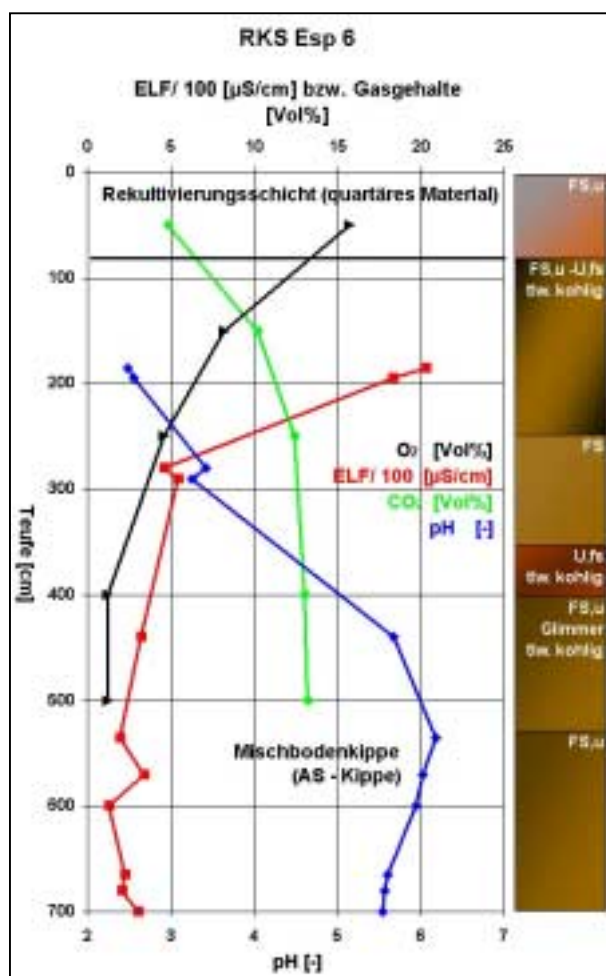
Abb. 6.3.5 Schwefel Spezies (normiert) - RKS „Gy 3“ (geophysikalisches Maximum), mit REM-Aufnahme Mineralphase Gips (3,5 m Teufe)

³⁵ Die Substrate der quartären Überdeckung wurden nicht untersucht.

Die REM-Untersuchungen untermauern diese Ergebnisse mit dem Nachweis der in Abb. 6.3.5 dargestellten Gips Sekundärmineralbildungen.

Für das im Südteil der Kippe bearbeitete Messfeld bestätigte sich somit die oben genannte geophysikalische Arbeitshypothese. Ein zweites bearbeitetes Messfeld im Nordwestteil der Kippe, in Nähe des zukünftigen Restsees Markleeberg, offenbarte aber die notwendige Absicherung der Interpretation geophysikalischer Messungen durch Untersuchungen an Punktaufschlüssen. Die in diesem „Messfeld 2“ auf Grund von geophysikalischen Messungen ausgewiesenen Leitfähigkeitsmaxima und –minima ließen sich nicht auf den Verwitterungszustand zurückführen. Die Sondierungen zeigten, dass im gesamten „Messfeld 2“ die obere Absetzerkippe durch Geschiebemergel ausgebildet ist. Die Substrate zeichneten sich durch neutrale bis schwach basische pH Werte und niedrige ELF Werte im Feldeluat aus. Die Unterschiede in den geophysikalisch vermessenen spezifischen Widerständen resultierten aus den Unterschieden im Wassersättigungszustand der Substrate.

6.3.2 Wesentliche Ergebnisse der Untersuchungen der Gasphase



An einer ausgewählten Anzahl von Sondierungen wurde, begleitend zum Bohrprozess, die Gasphase teufenorientiert beprobt und analysiert. Weiterhin wurden die Feldeluatkennwerte bestimmt.

Abb. 6.3.6 zeigt exemplarisch die Ergebnisse für die Sondierung RKS „Esp 6“ auf. Unterhalb des Übergangs „Rekultivierungsschicht – AS-Kippe“ nehmen die Sauerstoff-Gehalte auf nahe 0 Vol % ab. Dies geht einher mit dem Anstieg der CO₂-Gehalte auf Werte > 10 Vol %. Begleitet wird dies durch die bereits an den vorhergehenden Sondierungen diskutierten sinkenden ELF-Werte und steigenden pH-Werte im Feldeluat. Während für 2 m Teufe noch ELF-Werte = 2000 $\mu\text{S}/\text{cm}$ gemessen werden, sinken die Werte dann auf < 500 $\mu\text{S}/\text{cm}$ ³⁶ ab. Die pH-Werte steigen von < 3 auf >5,5 an.

Abb. 6.3.6 RKS „Esp 6“- Gasphasenbeschaffenheit und Milieukennwerte der Feldeluate

³⁶ In Abb. 6.3.6 ist die Skala der ELF Werte zu beachten (ELF/100), ein Diagrammwert von 10 $\hat{=}$ 1000 $\mu\text{S}/\text{cm}$.

6.4 Untersuchungen an tiefen Kippen-Bohrungen

Innerhalb des Forschungsprojektes (TU BAF [2000]) wurden 5 tiefe Bohrungen bis zum Kippenfuß niedergebracht. Die Bohransatzpunkte lagen dabei auf einem Nord – Südprofil innerhalb des rekultivierten bzw. zur Rekultivierung vorbereiteten Bereiches der Kippe Espenhain. Damit kennzeichnen die Bohrungen unterschiedliche Kippenalter. Weiterhin kann aus Kap. 5.3 abgeleitet werden, dass sie sich auch in Bezug auf die Vorfelddbeschaffenheit der verkippten Substrate unterscheiden. Neben diesen 5 Bohrungen konnte weiterhin an 2 Bohrungen des LMBV-Gütemessnetzes, begleitend zum Bohrprozess, die Beprobung der Gasphase erfolgen. Die Lage der untersuchten tiefen Kippen-Bohrungen ist aus Abb. 6.4.8 ersichtlich.

6.4.1 Ergebnisse Feldelutionen

In Abb. 6.4.1 sind die Feldeluatkurven für 3 Bohrungen in einem SW – NE Profil dargestellt. Die einzelnen Diagramme enthalten neben den pH- und ELF-Werten auch Angaben zur Mächtigkeit der einzelnen Kippenteile, zum Wasserstand des Kippengrundwassers und zur Lage des Filterbereiches der an den Bohrungen ausgebauten KGG-Messstellen.

Für die im südwestlichen Altteil der Kippe gelegene Bohrung „TB 6“ werden sowohl in der ASK als auch in der AFBK die deutlichsten Verwitterungszonen offenbar. Die erhöhten ELF-Werte ($> 1000 \mu\text{S}/\text{cm}$) sind mit pH-Werten im Eluat von 3 – 4,5 verbunden. Die Verwitterungszone der AFBK ist mit ca. 15 m sehr mächtig ausgeprägt. Im Gegensatz zu den Verwitterungszonen offenbart das Liegende der ASK neutrale pH-Werte und ELF-Werte um $200 \mu\text{S}/\text{cm}$.

Die Bohrung „TB 4“ ist innerhalb der ASK nicht durch stark erhöhte ELF- Werte gekennzeichnet. Demgegenüber erhöhen sich innerhalb der AFBK die ELF-Werte deutlich. Die pH Werte bleiben allerdings in einem Niveau von 6,5.

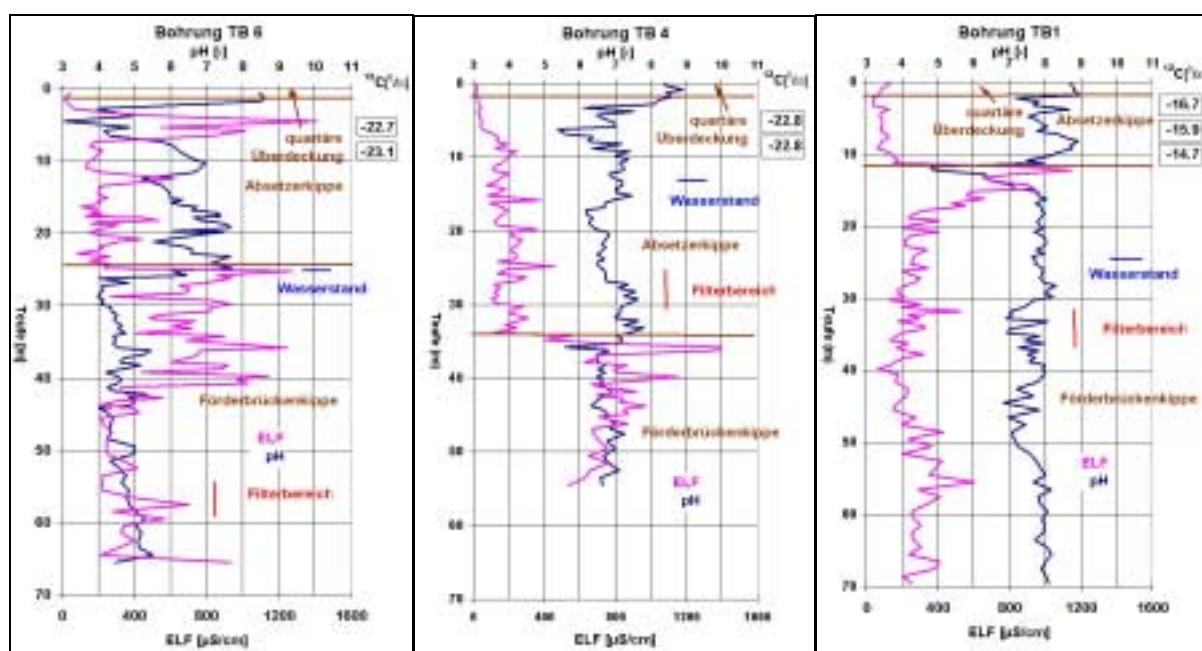


Abb. 6.4.1 Kippe Espenhain - Feldeluatkennwerte und $\delta^{13}\text{C}$ Werte (am CO_2 der Gasphase) der tiefen Bohrungen „TB 6“, „TB 4“ und „TB 1“ (von SW – NE)

Die Verhältnisse in Bohrung „TB 1“ unterscheiden sich deutlich von denen der Bohrungen „TB 6“ und „TB 4“. Die geringmächtigere ASK ist im Eluat durch eine niedrige Mineralisation (um 100 $\mu\text{S}/\text{cm}$) und pH Werte > 7 gekennzeichnet. Innerhalb der AFBK zeigt sich nur eine vergleichsweise geringe Verwitterungszone. Unterhalb dieser Zone sind die pH-Werte des Eluats durchgehend > 7 .

Die Ergebnisse der 3 Bohrungen bekräftigen den in Kap. 5.3 aufgezeigten SE – NW Trend bezüglich der Kippenbeschaffenheit. Der nördliche Teil ist durch höhere Anteile an Geschiebemergel in der ASK und karbonathaltigen Muschelsand/-schluff in der AFBK gekennzeichnet.

6.4.2 Ergebnisse Analytik Porenwasser

An einem Teil der erbohrten Kerne der tiefen Bohrungen wurde, wie in Kap. 6.1 erwähnt, eine Porenwasseranalyse durchgeführt. Für die Analysenergebnisse wurde keine Korrektur zur Minimierung der IBF vorgenommen (vgl. Kap. 6.1.4).

Es werden wiederum die Ergebnisse der Bohrungen „TB 6“, „TB 4“ und „TB 1“ diskutiert, die ein SW–NE Profil beschreiben³⁷. In Abb. 6.4.2 sind die teufenorientierten Analyseergebnisse für die Hauptparameter Sulfat, Eisen und pH-Wert dargestellt.³⁸ In Abb. 6.4.3 werden die Gehalte an Aluminium, Kieselsäure und Nickel aufgezeigt. Eine Erhöhung dieser Gehalte kennzeichnet den Ablauf der Silikatverwitterung (vgl. Kap. 2.4.2). Als Spurenelement wurde Nickel ausgewählt, weil dafür die höchsten Überschreitungen bezüglich der Maßnahmen-schwellenwerte nach LAWA [1994] auftraten.

In Bohrung „TB 6“ wird ein erheblicher Unterschied zwischen ASK und AFBK deutlich. Die Porenwässer des Liegenden der ASK³⁹ sind durch neutrale pH-Werte gekennzeichnet, verbunden mit Sulfat-Gehalten um 2 g/l. Auf Grund des pH-Wertniveaus ist die Metallmobilität gering ($\text{Fe} < 2 \text{ mg/l}$, $\text{Ni} < 0,1 \text{ mg/l}$, $\text{Al} < 0,4 \text{ mg/l}$). Im Gegensatz dazu ist die AFBK durch pH-Werte zwischen 2,5 und 3 gekennzeichnet. Es zeigen sich Fe_{ges} -Gehalte von 200 – 600 mg/l, die innerhalb der Verwitterungszone auch Werte $> 1 \text{ g/l}$ erreichen. Das Eisen liegt dabei nahezu vollständig als Fe^{2+} vor. Die Sulfat-Gehalte erreichen in der Verwitterungszone Werte deutlich $> 3 \text{ g/l}$. Dies ist verbunden mit extremen Aluminium-, Kieselsäure- und Spurenmetallgehalten. Die Nickel-Gehalte erreichen Werte $> 20 \text{ mg/l}$ ⁴⁰

Die ASK der Bohrung „TB 4“ ist, mit Ausnahme der Verwitterungszone, durch pH-Werte zwischen 5 und 6 gekennzeichnet. Dies ist verbunden mit Sulfat-Gehalten um 2 g/l und folgender Metallmobilität : $\text{Fe} < 8 \text{ mg/l}$, $\text{Ni} < 0,5 \text{ mg/l}$, $\text{Al} < 2 \text{ mg/l}$. Die Gehalte bezüglich der dargestellten Metalle liegen somit etwas höher gegenüber der ASK der Bohrung „TB 6“. Die Porenwässer der AFBK sind im Vergleich zu Bohrung „TB 6“ durch eine deutlich geringere Mineralisation gekennzeichnet. Die pH-Werte liegen im neutralen Bereich, verbunden mit Sulfat-Gehalten um 3 g/l und geringerer Metallmobilität ($\text{Fe} < 4 \text{ mg/l}$, $\text{Ni} < 0,3 \text{ mg/l}$, $\text{Al} < 0,6 \text{ mg/l}$).

³⁷ Für alle 3 Bohrungen wird der selbe Darstellungsmaßstab gewählt, um die extremen Unterschiede aufzuzeigen.

³⁸ Die Verbindung der einzelnen Analysenergebnisse zu einem Linienzug dient ausschließlich der Visualisierung der Trends.

³⁹ Eine Gewinnung von Porenwasser für die Verwitterungszone der ASK war auf Grund zu geringer Wassersättigung nicht möglich.

⁴⁰ Es ist anzumerken, dass alle Messwerte für Ni, die höher als 20 mg/l liegen, auf Grund der Kalibrierung, als „ $> 20 \text{ mg/l}$ “ auszuweisen sind. Die Probe bei 35 m Teufe stellt einen absoluten Extremwert dar, der als lokal anzusehen ist.

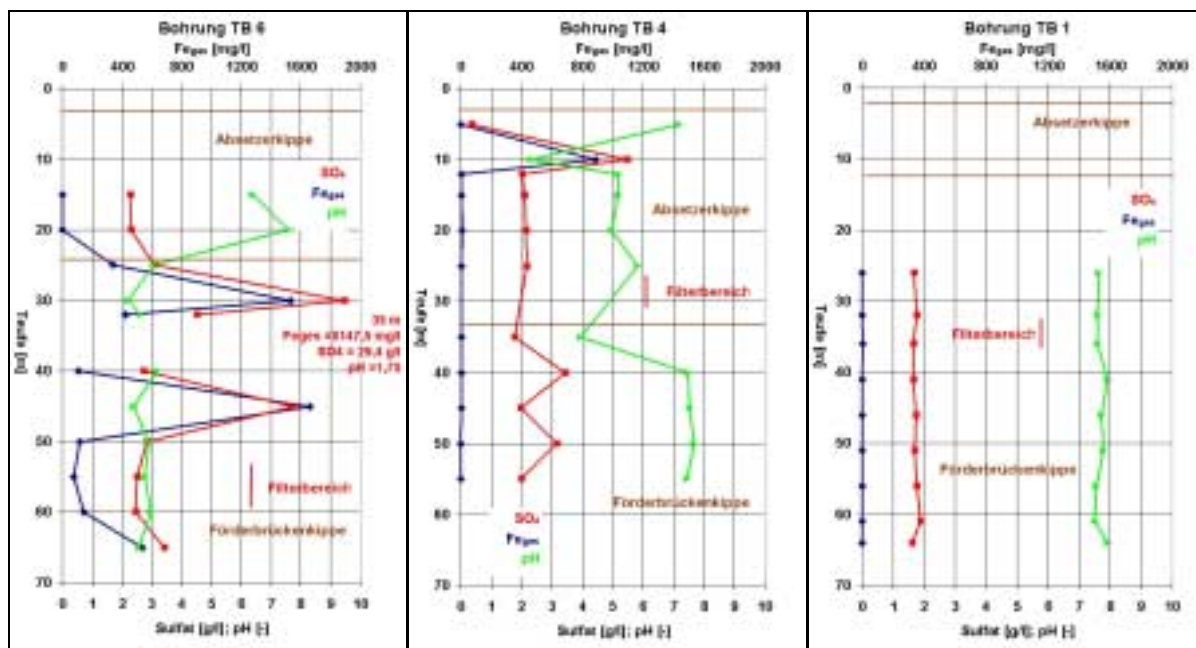


Abb. 6.4.2 Kippe Espenhain - Porenwasseranalytik der Tiefen Bohrungen „TB 6“, „TB 4“ und „TB 1“- Sulfat-, Fe_{ges} -Gehalt, pH-Wert

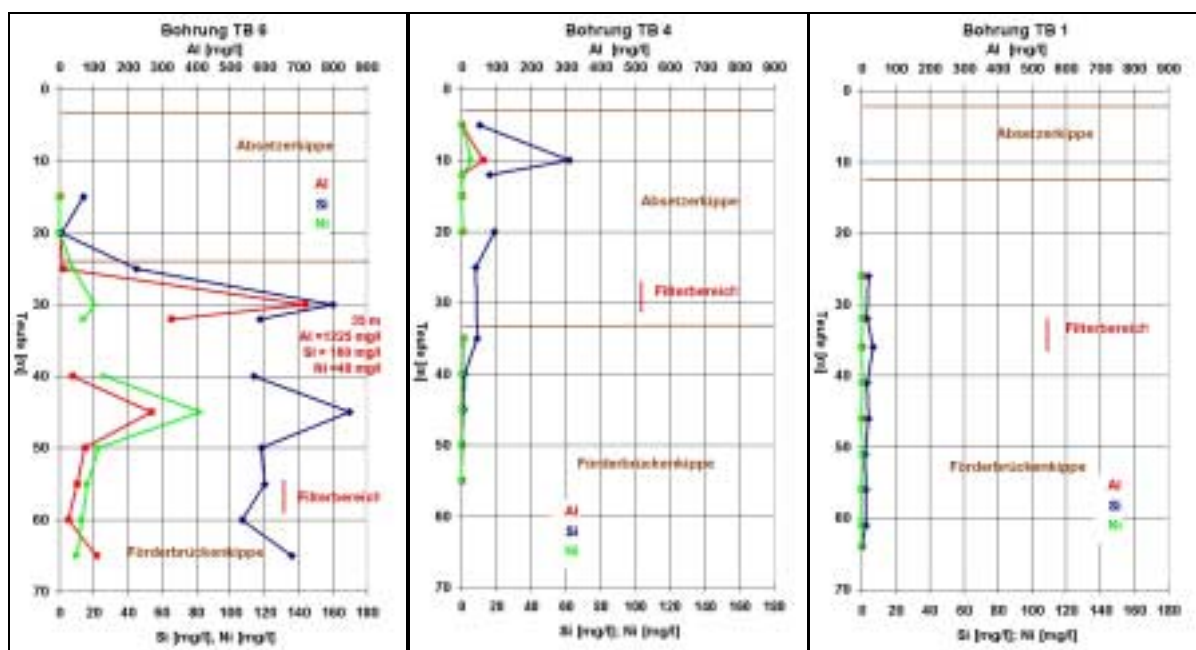


Abb. 6.4.3 Kippe Espenhain - Porenwasseranalytik der Tiefen Bohrungen „TB 6“, „TB 4“ und „TB 1“- Aluminium-, Kieselsäure- (als Si) und Nickel-Gehalte

Am Material der Bohrung „TB 1“ konnte das Porenwasser nur für den Bereich der AFBK gewonnen werden. Die ASK ist allerdings an dieser Bohrung nur sehr geringmächtig ausgebildet. Für die AFBK zeigen sich relativ homogene Verhältnisse. Die pH Werte liegen im Niveau von 7,5, bei gleichbleibenden Sulfatgehalten ($< 2\text{g/l}$) und geringen Metallmobilitäten ($Fe < 3\text{ mg/l}$, $Ni < 0,3\text{mg/l}$, $Al < 0,6\text{ mg/l}$).

Insgesamt untermauern die Ergebnisse der Porenwasseruntersuchungen die Trends und Aussagen der Feldelutionen.

6.4.3 Mineralphasen-Sättigungszustände der Porenwässer

Es erfolgte die Berechnung der Sättigungszustände der Porenwasseranalysen gegenüber ausgewählten Mineralphasen⁴¹ mittels PHREEQC 2 (PARKHURST & APELLO [1999]). Ziel ist es aufzuzeigen, welche Mineralphasen den Lösungsgehalt der Hauptkomponenten Ca^{2+} , Mg^{2+} , Fe^{2+} , Al^{3+} , DIC, SO_4^{2-} , SiO_2 bestimmen und begrenzen. Weiterhin sind Bereiche auszuhalten, für die ein Gleichgewicht gegenüber dem Karbonatpuffersystem vorhanden ist.

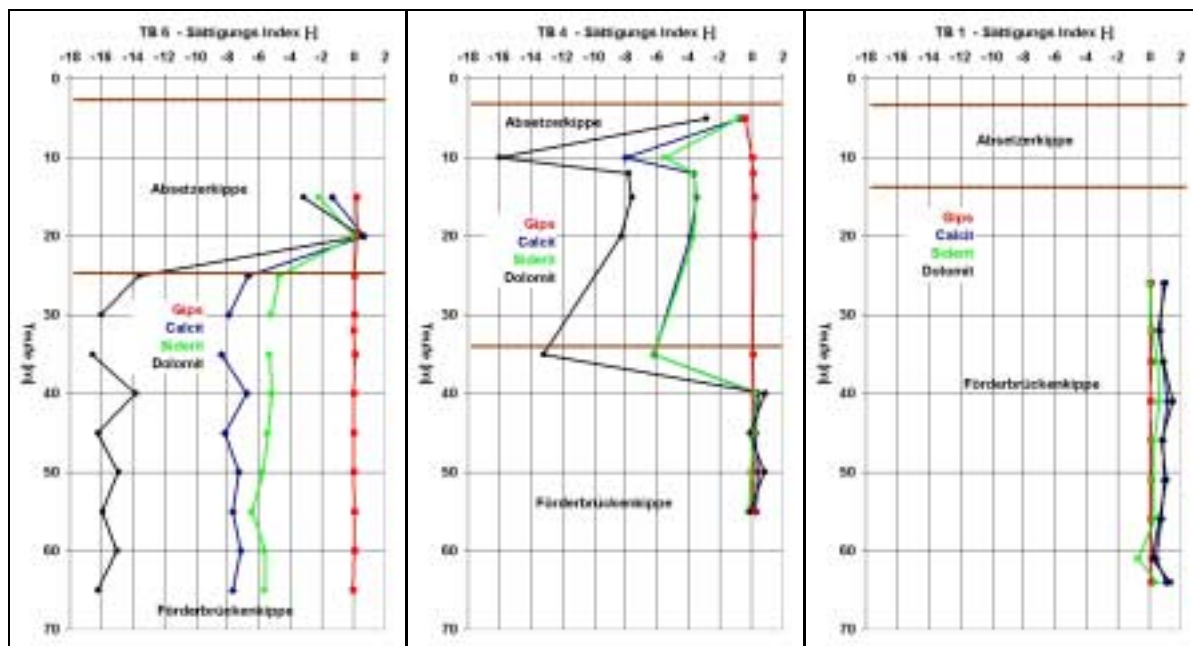


Abb. 6.4.4 Kippe Espenhain - Berechnete Sättigungsindizes für Gips, Calcit, Siderit, Dolomit der Tiefen Bohrungen „TB 6“, „TB 4“ und „TB 1“

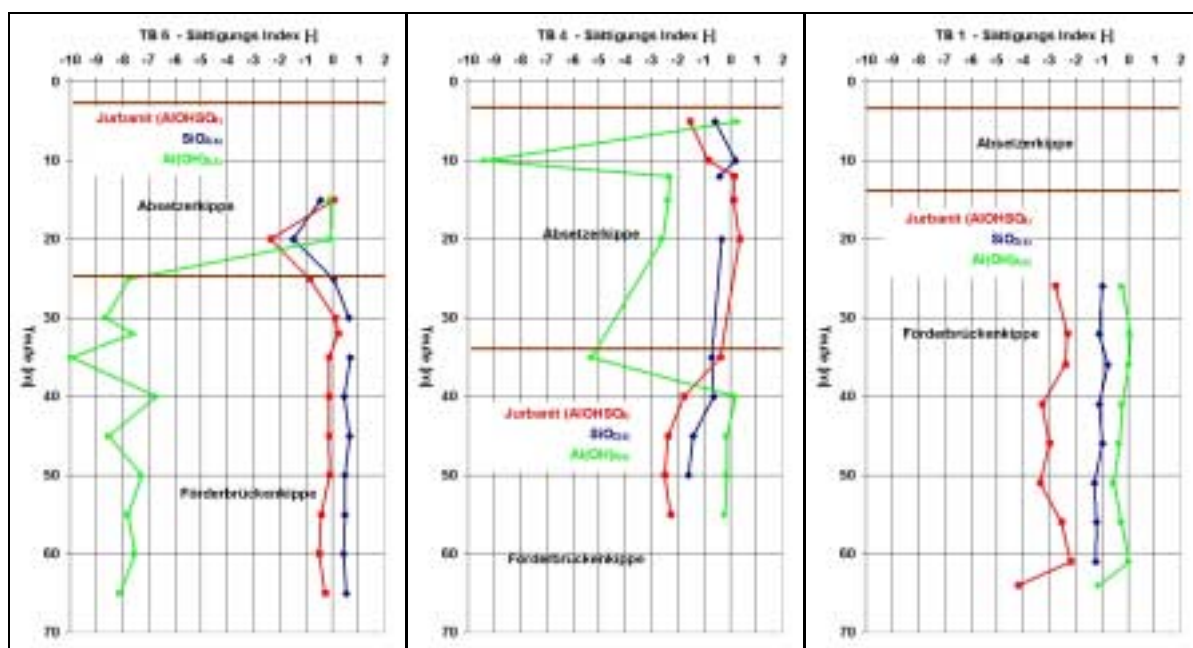


Abb. 6.4.5 Berechnete Sättigungsindizes der Tiefen Bohrungen „TB 6“, „TB 4“ und „TB 1“ - Jurbanit, $\text{SiO}_{2(a)}$, $\text{Al}(\text{OH})_{3(a)}$

⁴¹ Es wurde dazu die thermodynamische Datenbasis „wateq4f.dat“ verwendet.

Abb. 6.4.4 zeigt die Sättigungsindizes (SI) gegenüber den Phasen Gips, Calcit, Siderit und Dolomit auf. Es wird für alle Proben das Gleichgewicht gegenüber Gips deutlich. Mit Ausnahme der Probe TB 4 (5m) liegen die SI bei 0 bis 0,15. Die Porenwässer der untersuchten Kippenbereiche befinden sich im Gipsgleichgewicht. Gips stellt den wesentlichen Sekundärmineralspeicher dar. Die AFB-Kippe der Bohrung TB 1 und TB 4 weist gegenüber den Karbonatphasen Calcit, Dolomit und Siderit nahezu Gleichgewichtszustände auf. Diese Kippenbereiche liegen somit im Niveau des Karbonat-Puffersystems. Im Gegensatz dazu sind die Porenwässer der AFBK der TB 6 gegenüber diesen Karbonatphasen stark untersättigt. Die Absetzerkippe der Bohrung TB 4 weist ebenfalls eine deutliche Untersättigung auf. Die zwei bearbeiteten Proben des Liegenden der ASK der Bohrung TB 6 sind schwach untersättigt.

Abb. 6.4.5 zeigt die Sättigungsindizes (SI) gegenüber den Phasen $\text{Al}(\text{OH})_{3(a)}$, Jurbanit ($\text{AlOHSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$)⁴² und $\text{SiO}_2(a)$ auf. Die Porenwässer der AFBK der Bohrung TB 6 weisen gegenüber Jurbanit einen Gleichgewichtszustand auf. Dies gilt auch für die Proben aus der Verwitterungszone der AFBK der Bohrung TB4 sowie für die ASK dieser Bohrung. Es ist zu schlussfolgern, dass Alumohydroxosulfate als sekundäre Speicherminerale bezüglich Aluminium Bedeutung besitzen. Dies gilt vor allem für Kippenteile, die durch eine deutliche Sulfidverwitterung (Sulfatfreisetzung) verbunden mit nachfolgender Silikatphasenverwitterung gekennzeichnet sind. Sind diese lokal entstehenden Porenwässer allerdings in Karbonat gepuffertes Material eingebettet, so bewirkt die pH-Pufferung eine andere Art der Aluminium-Festlegung. So zeigen die Porenwässer der AFBK der Bohrungen TB 4 und TB 1 ein Gleichgewicht gegenüber $\text{Al}(\text{OH})_{3(a)}$ auf. Dieses wird bevorzugt unter neutralen pH Werten gebildet (vgl. z.B. APPELO & POSTMA [1996]). Weiterhin zeigt sich, dass die Bereiche, die durch ein Gleichgewicht gegenüber Aluminiumhydroxosulfaten gekennzeichnet sind, ebenfalls nahezu im Gleichgewicht gegenüber amorpher Kieselsäure ($\text{SiO}_2(a)$) stehen.

6.4.4 Tritiumuntersuchungen an den Porenwässern

An den Porenwässern der Bohrungen TB 3, TB 5 und TB 6 wurden Tritiumuntersuchungen durchgeführt. Diese Bohrungen repräsentieren unterschiedliche Verkippungsalter. Die Möglichkeit der Altersdatierung mittels Tritium (^3H) basiert auf der starken Erhöhung der Tritiumaktivität des Niederschlages auf Grund der Atombombenversuche der 50er und 60er Jahre. Abb. 6.4.6 zeigt die Tritiuminputfunktion der letzten 50 Jahre für Freiberg auf.⁴³ Vor den 50er Jahren betrug die natürliche spezifische Tritiumaktivität⁴⁴ des Niederschlages ca. 3-5 TU. Ab etwa 1953 war ein deutlicher Anstieg zu verzeichnen, mit dem Höhepunkt im Zeitraum 1962 – 1965 (Bombenpeak). Mit den gemessenen Tritiumgehalten lassen sich folgende zwei wesentliche Aussagen treffen: Wässer die im Jahr 2000 (Messzeitpunkt) Werte < 2 TU aufweisen, sind vor 1953 neugebildet worden. Höchstwerte in einem Profil mit > 20 TU sind dem Neubildungszeitraum 1958–1978 zuzuordnen, wobei Werte > 100 TU auf neugebildete Wässer während des Bombenpeaks (1962-1965) schließen lassen.

⁴² Hierbei soll Jurbanit als Vertreter der Alumohydroxosulfate verstanden werden.

⁴³ Detailliertere Angaben zum Tracer Tritium finden sich z.B. in CLARK & FRITZ [1997] und HEBERT [1997].

⁴⁴ Die Tritiumaktivität wird in TU (Tritium Units) angegeben. $1 \text{ TU} = 1 \text{ } ^3\text{H} \text{ Kern pro } 10^{18} \text{ } ^1\text{H} \text{ Kerne} = 0,118 \text{ Bq} \cdot \text{kg}^{-1}$

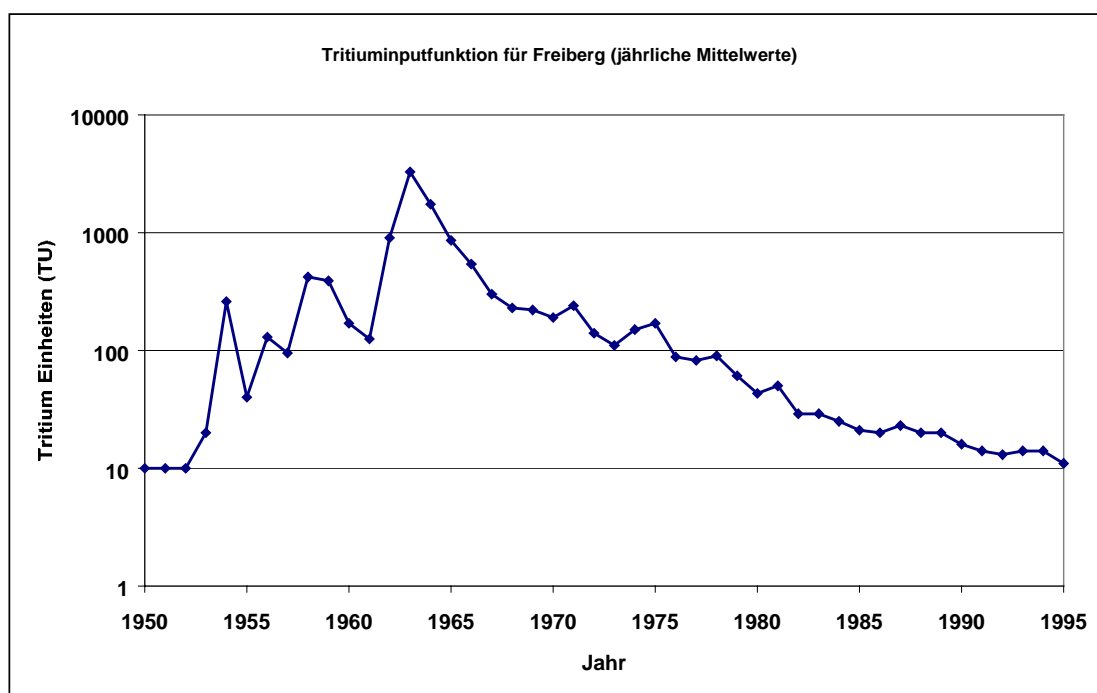


Abb. 6.4.6 Tritiuminputfunktion des Niederschlages für Freiberg (aus HEBERT [1997] nach RICHTER ET AL. [1993])

Abb. 6.4.7 zeigt die Messergebnisse⁴⁵ für die bearbeiteten Porenwässer der drei Bohrungen auf. Die Werte sind teufenorientiert dargestellt. Weiterhin sind die Bereiche der AFBK, der ASK und der Rekultivierungsschicht schematisch ausgehalten sowie die Kippen-Grundwasserstände (April 2000) in den zugehörigen Gütemessstellen aufgezeigt. Die Alter der AFB-Kippe und der Rekultivierungsschicht wurden aus vorhandenen Unterlagen abgeleitet.

Für den überwiegenden Teil der bearbeiteten Proben zeigen sich Werte von > 2 TU. Basierend auf den Ergebnissen dieser 3 Bohrungen spielt somit der Liegendwasserzutritt (0 TU) bei der Aufsättigung des AFBK-Körpers Espenhain keine wesentliche Rolle. Für die Bohrungen TB 3 und TB 5 zeigen sich innerhalb der AFBK kurvenartige Verläufe, mit Maximalwerten von ca. 20 TU. Diese Kennzeichen können, auf Grund des regionalen Strömungsfeldes der Kippe Espenhain (vgl. Kap. 9.2.1), als Grundwasserzutritte aus dem Gewachsenen Gebirge interpretiert werden. Die Interpretation des Kurven-Peaks als vertikal versickertes „Bombenpeak“-Wasser (TB 5) bzw. Wasser der frühen 70er Jahre (TB 3) mit Verdünnung durch das tritiumfreie Anfangs-Porenwasser ist ebenfalls möglich.

Zur Kennzeichnung der Verhältnisse im teilgesättigten Bereich der ASK ist vor allem Bohrung TB 6 interessant. Dort erfolgte sowohl die Verkippung der AFBK, der ASK als auch die Aufbringung der Rekultivierungsschicht vor dem Zeitraum des Bombenpeaks. Unter Einbeziehung des gesamten Messwertverlaufs der Bohrung TB 6, ist die Probe bei 20 m Tiefe als „Bombenpeak-Maximum“ zu interpretieren. Das Kurvenmaximum liegt mit < 30 TU allerdings deutlich unter den zu erwartenden Bombenpeak Maxima.

⁴⁵Den Messwerten sind die vom Labor ausgewiesenen Fehlerbereiche beigegefügt. Es handelt sich dabei um die doppelte Standardabweichung. Diese resultiert aus den Zählratenfehlern des Massenspektrometers. Messwerte < 0 TU sind durch den Abzug des Nulleffektes zu erklären und als Messwert innerhalb des positiven Bereiches der Standardabweichung zu verstehen.

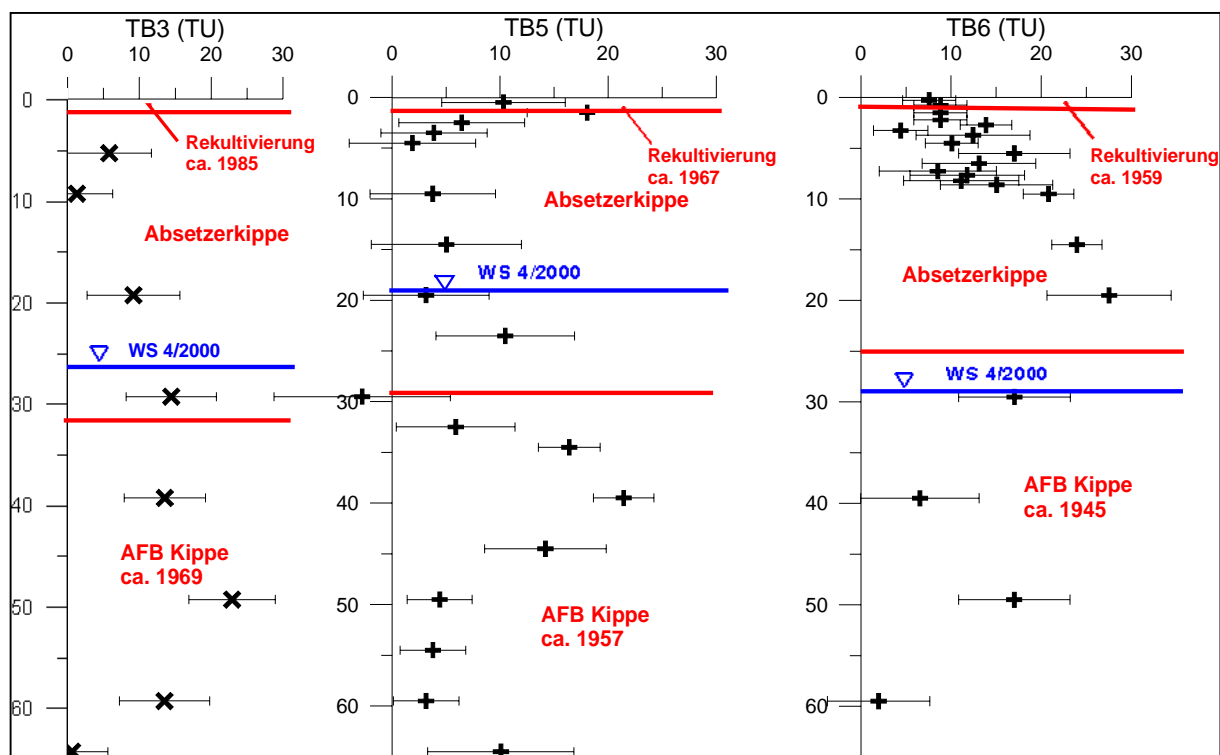


Abb. 6.4.7 Kippe Espenhain - Ergebnisse der Tritiummessungen an Porenwässern der Bohrungen TB 3, TB 5 und TB 6

Dies ist auf Grund der Betrachtungen in Kap. 4 auf eine Vermischung mit tritiumfreiem Anfangs-Porenwasser zurückzuführen. Basierend auf den Messdaten der Bohrung „TB 6“ erfolgte eine Abschätzung der Versickerungsraten (HOTH in TUBAF [2000]). Mittels eines „Piston Flow Modell“-Ansatzes (CLARK & FRITZ [1997], HEBERT [1997]), gekoppelt mit Parameteridentifikation, ergab sich eine mittlere Versickerungsrate von 80 mm/a. Auf Grund der wesentlich komplexeren Vorgänge bei der Wiederaufsättigung der Kippenkörper (vgl. Kap. 4) bedarf es allerdings einer erneuten Bearbeitung, die zum derzeitigen Zeitpunkt nicht erfolgte.

6.4.5 Ergebnisse Gasphasenuntersuchungen

An 7 tiefen Bohrungen wurde die Gasphase der wasserungesättigten Zone der Kippe Espenhain untersucht. Dabei konzentrierten sich die Untersuchungen auf Teufen unterhalb des durch die RKS erfassten Teufenbereiches (vgl. Kap. 6.3.2). Es erfolgte die Messung bis zu der Teufe, in der technisch keine Gewinnung von Gas mehr möglich war (erhöhte Wassersättigung). Tabelle 6.4.1 zeigt die Zusammenfassung der Ergebnisse. In Abbildung 6.4.6 sind die mittleren CO₂- und O₂-Gehalte sowie die δ¹³C-Signatur am CO₂⁴⁶ in ihrer flächenhaften Verteilung dargestellt. In dieser Abbildung wird ebenfalls schematisch die zeitliche Entwicklung des Tagebaus aufgezeigt. Die Gasmessungen an den Bohrungen TB 1 – TB 6 charakterisieren die Absetzerkippe, während die Bohrungen TB 7 und TB 8 (rot in Abbildung 6.4.6) die AFBK kennzeichnen⁴⁷.

⁴⁶Die δ¹³C-Einzelwerte des CO₂ der Gasphase für die Bohrungen TB 1, TB 4, TB 6 sind in Abb. 6.4.1 ersichtlich.

⁴⁷Hier wurde noch keine AS-Kippe aufgebracht, und auf Grund der Nähe zum RL Markleeberg (Absenkungstrichter) war der Kippengrundwasserflurabstand groß.

Tab. 6.4.1 Kippe Espenhain - Mittlere Gasphasenbeschaffenheit der tiefen Bohrungen

Bohrungsbezeichnung	Teufenbereich	Kippen- teil	Verkip- pungsalter	CO ₂ [Vol %] mit σ	O ₂ [Vol %] mit σ	$\delta^{13}\text{C}$ [‰] mit σ
TB 1	5 bis 11m	ASK	20 –25 a	15.3 ± 1.3	1.1 ± 0.2	-15.8 ± 0.8
TB 3	5 bis 16m	ASK	20 – 30 a	0.1 ± 0.1	1.0 ± 0.1	Keine Messung
TB 4	5 bis 8m	ASK	30 –35 a	20.3 ± 0.2	0.7 ± 0.4	-22.9 ± 0.0
TB 5	5 bis 14m	ASK	35 - 45 a	20.9 ± 2.7	1.1 ± 0.2	-20.5 ± 0.3
TB 6	5 bis 11m	ASK	50 – 60 a	27.6 ± 0.2	1.9 ± 0.2	-22.9 ± 0.2
TB 7	8 bis 29m	FBK	ca. 20 a	17.8 ± 0.6	2.3 ± 0.7	-9.9 ± 2.1
TB 8	8 bis 30m	FBK	ca. 20 a	31.7 ± 14.9	4.3 ± 2.7	-3.8 ± 0.8

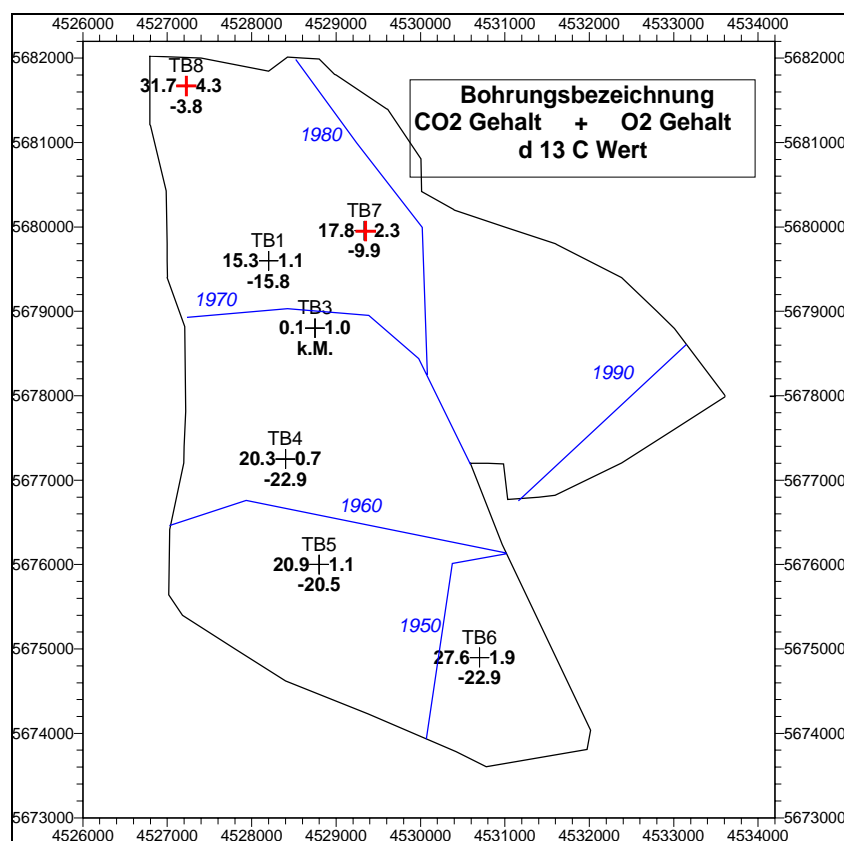


Abb. 6.4.6 Kippe Espenhain - Flächenhafte Darstellung der mittleren Gasphasenbeschaffenheit der tiefen Bohrungen (mit schematischer zeitlicher Entwicklung der AFB-Kippe)

Die AS-Kippe zeichnet sich durch hohe CO₂- Gehalte und geringe O₂ Gehalte aus⁴⁸. Insgesamt zeigen sich relativ homogene Gaszusammensetzungen (kleine Standardabweichungen). Die Herkunft des CO₂ ist zum großen Teil auf die Umsetzung organischer Substanz zurückzuführen. Dies ergibt sich aus der $\delta^{13}\text{C}$ -Isotopensignatur. Die $\delta^{13}\text{C}_{\text{PDB}}$ -Werte von -20,3 bis -27,6 ‰ der Bohrungen TB 4 bis TB 6 stimmen gut mit der Isotopensignatur kohligler

⁴⁸ Eine Ausnahme bildet lediglich Bohrung TB 3, in der nahezu reine Stickstoffzusammensetzung gemessen wurde.

Substrate überein (vgl. Abb. 2.4.7). Die Umsetzung von C_{org} zu $CO_{2(g)}$ stellt eine kinetische Fraktionierung dar. Hierfür sind die Fraktionierungsfaktoren sehr schwer zu kennzeichnen (CLARK & FRITZ [1997]). In die Messwerte der ASK kann man einen SE-NW Trend interpretieren. Die CO_2 -Gehalte nehmen ab, wobei das CO_2 isotopisch schwerer wird. Daraus wird geschlussfolgert, dass das CO_2 im Südteil wesentlich stärker durch die Umsetzung organischer Substanz geprägt ist. Dies bekräftigt den Ablauf einer reduktiven Prozesskette. In allen Bohrungen wurde CH_4 von Spuren bis zu 1 Vol % detektiert, begleitet von Spuren höherer Kohlenwasserstoffe. Der Nordteil der ASK (TB 1 mit $\delta^{13}C_{PDB} = -15.8 \text{ ‰}$) ist mehr durch die Einmischung quartärer Substrate (Geschiebemergel) geprägt.

Die AFB-Kippe ist ebenfalls durch hohe CO_2 -Gehalte gekennzeichnet, wobei das Gehaltsniveau heterogener ist. Die O_2 -Gehalte sind höher als in der AS-Kippe. Das CO_2 ist isotopisch deutlich schwerer ($\delta^{13}C_{PDB} = -3,8$ bis $-9,9 \text{ ‰}$) als das der ASK. Die Isotopensignatur zeigt somit den Ablauf der Karbonatpufferung sehr gut auf. Marine Karbonate sind nach Abb. 2.4.7 durch Werte von -2 bis $+2 \text{ ‰}$ gekennzeichnet. Bei Umsetzung der Karbonate zu $CO_{2(g)}$ ist für kippentypische Temperaturen von einer Fraktionierung von $< 12 \text{ ‰}$ auszugehen⁴⁹. Vor dem Hintergrund der geochemischen Vorfeldbilanzierung (Kap. 5.3) ist die aufgezeigte Gasphasencharakteristik im Nordteil der AFB-Kippe sehr gut erklärbar.

6.5 Untersuchung der Reduktiven Prozesskette

Durch die hydrogeochemischen Untersuchungen zur Kennzeichnung des Kippenkörpers wurde die Bedeutung des Ablaufs reduktiver Prozesse deutlich. In diesem Kap. werden die speziellen Untersuchungsergebnisse aufgezeigt und anschließend eingehend diskutiert (siehe auch HOTH ET AL. [1999 B], HOTH [2000]).

6.5.1 Untersuchungsergebnisse

In Kap. 6.3.2 wurde bereits die mittlere Beschaffenheit der Gasphase im Hangendbereich der Absetzerkippe charakterisiert. Neben diesen mittleren Verhältnissen zeigte sich an 2 Sondierungen das lokale Phänomen stark erhöhter CO_2 -Gehalte verbunden mit deutlichen CH_4 -Gehalten in der Kippengasphase. Für die erste Sondierung „Esp 1“ sind verschiedene teufenorientierte Messergebnisse in Abb. 6.5.1 dargestellt. Im linken Teil der Abbildung werden Messwerte an der eigentlichen Gassondierung aufgezeigt. Die Trends der Messwerte sind vergleichbar zur RKS „Esp 6“ (Abb. 6.3.6). Die O_2 -Gehalte nähern sich 0 Vol % an, während die CO_2 -Gehalte ansteigen. Dabei erreichen die CO_2 -Gehalte allerdings Werte von $> 40 \text{ Vol}\%$ ⁵⁰. Dies ist mit der Detektion von erheblichen CH_4 -Gehalten (10 - 20 Vol%) verbunden. Die Feldeluate dieser Sondierung zeigen für die Verwitterungszone eine relativ geringe Mineralisation ($< 600 \mu\text{S/cm}$)⁵¹ bei pH Werten $> 3,5$. Innerhalb der Zone mit den höchsten CO_2 -, CH_4 -Gehalten werden ELF-Werte von ca. $100 \mu\text{S/cm}$ und pH-Werte von 5 – 6,5 gemessen. Das Substratprofil zeigt auf, dass diese Teufenbereiche durch kohlehaltige FS

⁴⁹Fraktionierung (BOTTINGA [1968] in CLARK & FRITZ [1997]) $10^3 \ln \alpha^{13}C_{CO_2(g)-CaCO_3} = -2,988(10^6 T^{-2} [^\circ\text{K}]) + 7,663(10^3 T^{-1} [^\circ\text{K}]) - 2,4612$. Die genaue Temperatur des Calcitpufferungsprozesses ist nicht abschätzbar. Sie sollte größer als $15 \text{ }^\circ\text{C}$ sein.

⁵⁰Es wurde die Obergrenze des Kalibrierungsmessbereiches (40 Vol %) für CO_2 des Messgerätes der Fa. Meta erreicht.

⁵¹In Abb. 6.5.1 ist die Skala der ELF Werte zu beachten (ELF/100), ein Diagrammwert von 10 $\hat{=}$ $1000 \mu\text{S/cm}$. Für Sulfat*100 bzw. Sulfid* 100 entspricht ein Diagrammwert von 10 = 0,1 Ma%.

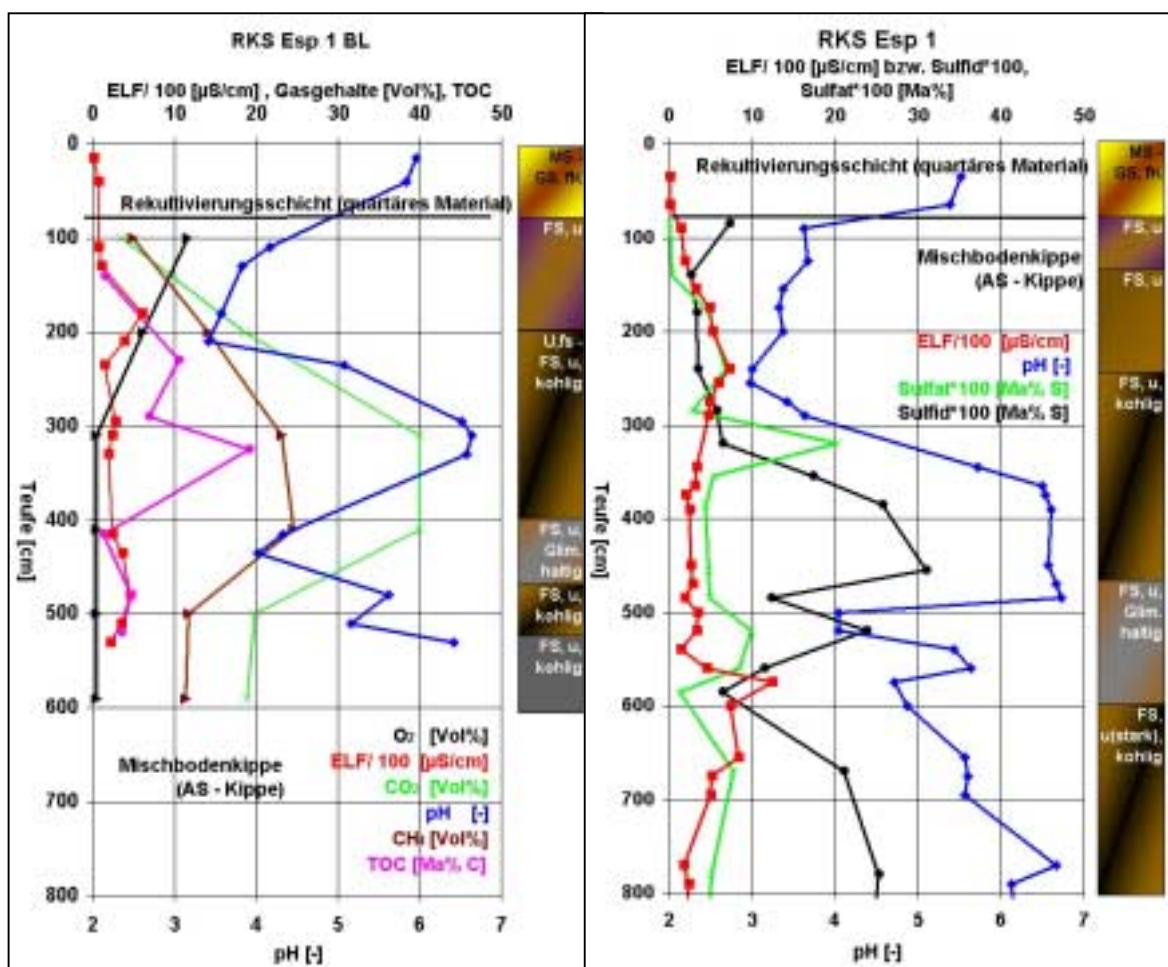


Abb. 6.5.1 RKS „ESP 1 BL“ und „ESP 1“- Gasphasenbeschaffenheit, Milieukennwerte der Feldeluate und TOC Gehalte

bis U gekennzeichnet sind. Die TOC-Kurve weist zugehörig Werte um 10 Ma% aus (Maximalwert = 19,6 Ma%). Der Abfall der pH-Werte im Teufenbereich 4 bis 4,5 m ist auf einen Substratwechsel zurückzuführen. Im rechten Diagramm der Abb. 6.5.1 sind teufenorientierte Kennwerte der ca. 1,5 m entfernten Vorsondierung dargestellt. Dies sind die Feldeluatkennwerte sowie die Schwefelspeziesverteilung am Feststoff. An Hand der Feldeluatkurven wird deutlich, dass zwischen beiden Sondierungen keine teufenmäßig exakte Übereinstimmung der Kurvenverläufe besteht. Ordnet man die Hauptmerkmale der Kurven allerdings den Substratbereichen zu, so werden gleiche Verhältnisse abgebildet. Die Ergebnisse der Schwefelspezies-Analytik zeigen einen deutlichen Anstieg der S_{sulfid} -Gehalte in den Bereichen der höchsten CO_2 -, CH_4 -Gasgehalte. Ob es sich dabei teilweise um sekundäre Monosulfide handelt, kann nicht beantwortet werden.⁵²

Nach diesen ersten Ergebnissen an der Sondierung „Esp 1“ erfolgten 2 weitere Sondierungen im unmittelbaren Umfeld (ca. 5 m Abstand) Diese konnten die Phänomene der Gasbeschaffenheit der RKS „Esp 1“ nicht bestätigen. Erst die 3. Sondierung („Esp 7“) zeigte ähnliche Resultate auf. Die Ergebnisse sind aus Abb. 6.5.2a ersichtlich.

⁵²Es erfolgte keine getrennte Analyse der Monosulfid- und Disulfid-Fraktion.

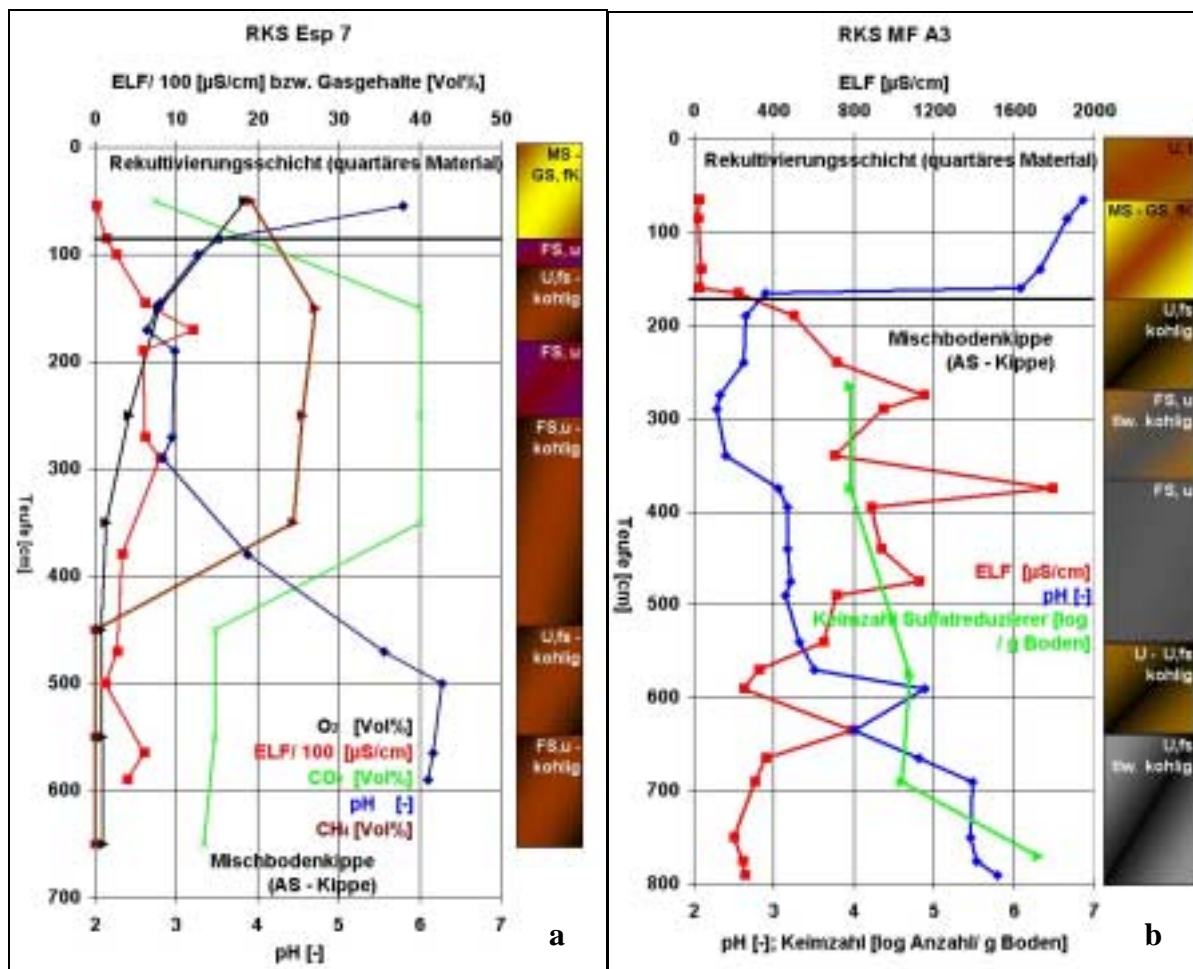


Abb. 6.5.2 a) RKS „Esp 7“ - Gasphasenbeschaffenheit und Milieukennwerte der Feldeluat
 b) RKS „MF A3“ - Milieukennwerte der Feldeluat, Sulfatreduzierer-Keimzahl

Die O_2 -Gehalte sinken mit zunehmender Tiefe auf Werte $< 0,5 \text{ Vol } \%$ ab. Die CO_2 - und CH_4 -Gehalte steigen auf das gleiche Niveau wie in RKS „Esp 1“ an. Zu beachten ist, dass innerhalb dieser Sondierung bereits oberhalb des Übergangs „Rekultivierungsschicht-Absetzerkippe“ deutliche CH_4 -Gehalte gemessen wurden. Unterhalb von 4 m Tiefe wurde kein CH_4 detektiert und die CO_2 -Gehalte fallen auf das für RKS „Esp 6“ (vgl. Abb. 6.3.6) beschriebene Niveau ab. Die Messung der CO_2 -Isotopensignatur ergab einen $\delta^{13}\text{C}$ -Wertebereich von -23 bis $-24,8\text{‰}_{\text{PDB}}$ und eine ^{14}C -Aktivität von $a = 7 \text{ pmC}$. Diese Werte zeigen die mikrobielle Umsetzung organischer Substanz als Quelle der CO_2 -Entstehung auf (vgl. Kap. 2.4.3 - Abb. 2.4.7). Das Material der Sondierung „Esp 7“ wurde durch Herrn Detmers (MPI Bremen) qualitativ auf Sulfatreduzierer untersucht. Es zeigte sich ein erhöhtes Vorkommen von Sulfatreduzierern im Tiefenbereich 4 – 5 m. Dies fällt zusammen mit dem Bereich der niedrigsten ELF-Werte im Feldeluat (vgl. Abb. 6.5.2a). Detailliertere mikrobiologische Untersuchungen erfolgten, in Zusammenarbeit mit der AG Glombitza (G.E.O.S. Freiberg), an zwei RKS in unmittelbarer Nachbarschaft des geophysikalischen Messfeldes im Südteil der Kippe. Abb. 6.5.2b stellt die Ergebnisse für die RKS „MF A3“ dar. Die typischen Feldeluat-Kurvenverläufe für pH und ELF werden begleitet durch eine Zunahme der Sulfatreduzierer-Keimzahlen. Gleichzeitig kommt es bei Eluat-pH-Werten > 5 zu einer deutlichen Erhöhung der Keimzahlen. Es werden Werte von $> 10^6$ pro 1 g Substrat erreicht.

Zur Kennzeichnung der Aktivierbarkeit der im Kippengrundwasser enthaltenen Sulfat-reduzierer wurden einfache Flaschenversuche mit Methanol und Lactat als Nährmedium durchgeführt (Vorgehensweise siehe Kap. 6.1.2 und Anl. 6.1.1). Die Versuchszeit bis zur deutlichen Eisensulfidbildung in den Septumsflaschen ist als qualitatives Maß der Aktivierbarkeit der Sulfat-reduzierer anzusehen. Abb. 6.5.4 zeigt die zeitliche Entwicklung für die Messstellen „5258“ und „TB 6“ auf.⁵³ Die Beprobung erfolgte am 4.4. 2000. Bereits nach 5 Tagen kommt es im Lactatansatz der Messstelle 5258 zur deutlichen Monosulfidbildung. Dieser Effekt ist im Methanolansatz der Messstelle TB 6 nach 8 Tagen zu beobachten. Alle bearbeiteten Proben zeichneten sich durch eine schnelle Reaktion der Sulfat-reduzierer aus. Zumeist wurde eine schnellere Adaption der Sulfat-reduzierer im Lactatansatz gegenüber dem Methanolansatz deutlich. Es lässt sich ableiten, dass in den Kippengrundwasserleitern ein deutliches aktivierbares Potential an Sulfat-reduzierern vorhanden ist.



Abb.6.5.4 GWGM 5258 und TB 6 - Zeitlicher Verlauf der Sulfat-reduziererversuche

6.5.2 Diskussion

Die auch nach längeren Liegezeiten geringe Teufenerstreckung der Verwitterungszonen in der ASK lässt sich, aufbauend auf den gezeigten Messergebnissen, durch eine der Oxidationsfront „entgegenlaufende“ Reduktionsfront erklären. Somit ist das Profil im Liegenden der Verwitterungszone von einer Abnahme der ELF-, Zunahme der pH-Werte sowie einer Abnahme der O₂- und Zunahme der CO₂-Gehalte innerhalb der Gasphase geprägt. Die ¹³C-

⁵³ Der anfängliche Bodensatz in den Flaschen wird durch das Nährmedium hervorgerufen.

Isotopie des CO₂ weist als Bildungsprozess die Umsetzung organischer Substanz aus. Die lokalen Gasphänomene (hohe CH₄-Gehalte) verdeutlichen, dass der Ablauf der Reduktionskette bis zur Methanogenese reichen kann. Somit ist die Sulfatreduktion, als wesentlicher Rückhaltprozess von Acidität und Metallen, für diese Systeme relevant. Die mikrobiologischen Untersuchungen zeigen die Sulfatreduktionspotentiale qualitativ auf.

Untersetzt man diese Aussagen mit den Untersuchungsergebnissen anderer Autoren, so ist vor allem KNÖLLER [2000] zu nennen. Innerhalb dieser Arbeit werden zur Kennzeichnung der Sulfatreduktion ³⁴S- und ¹⁸O-Isotopieuntersuchungen am Kippengrundwasser des Nachbargebäus Cospuden-Zwenkau ausgewertet. Eine ablaufende Sulfatreduktion ist durch eine Erhöhung der ³⁴S/³²S- und ¹⁸O/¹⁶O-Verhältnisse am verbleibenden Sulfat des Kippengrundwassers gekennzeichnet. Die Raten der Sulfatreduktion sind dabei zumeist umgekehrt proportional zur Isotopenfraktionierung (z.B. HABICHT [1997]). Die Ergebnisse von KNÖLLER lassen sich in sehr stark gekürzter Form durch die Diagramme in Abb. 6.5.5 zusammenfassen. Für die ASK zeigt sich eine Abnahme der Sulfatgehalte, verbunden mit der Zunahme der δ³⁴S-Werte, in Abhängigkeit vom Schüttungsalter. Für die AFBK ist diese Tendenz ebenfalls

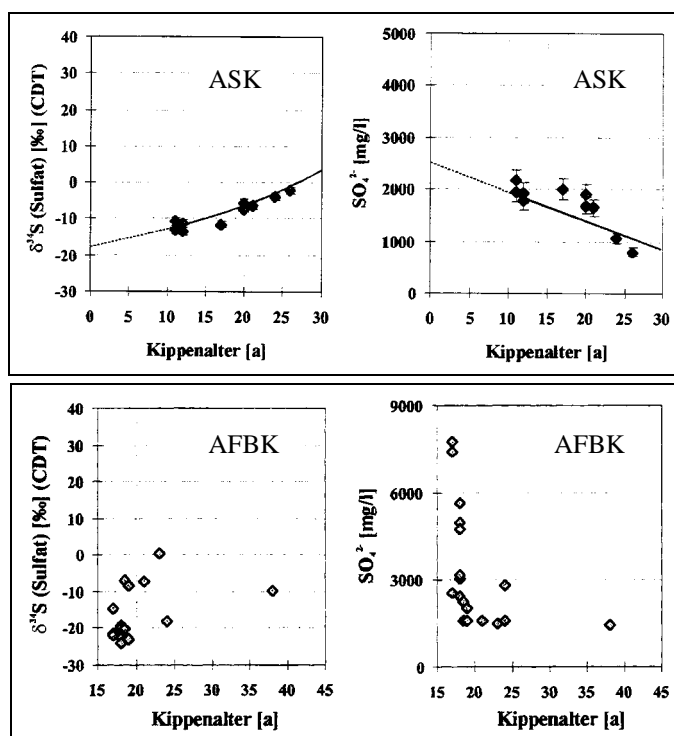


Abb. 6.5.5 δ³⁴S-Werte und Sulfatgehalte von Kippengrundwassermessstellen der ASK bzw. AFBK Zwenkau-Cospuden in Abhängigkeit vom Schüttungsalter (aus KNÖLLER [2000])

vorhanden, aber heterogener. Weiterhin wird für die AFBK, im Vergleich zur ASK, eine stärkere Isotopenfraktionierung deutlich. Dies ist als geringere Umsatzrate zu interpretieren. WÜNSCHE [1974] kennzeichnet mittels Stoffgruppenanalyse⁵⁴ nach KONONOVA [1966] die organische Substanz der im Weißelsterbecken anstehenden, kippenrelevanten Sedimente. Dabei wurden 20 Vorfeld-Proben untersucht.

⁵⁴Die Kennzeichen der Stoffgruppenanalyse und die Ergebnisse der geologischen Einheiten sind in Anl. 6.5.1 aufgeführt.

Für den AFBK-relevanten tertiären Abraum ergibt sich ein Fulvosäuren-Gehalt von 0,1 – 0,15 Ma% FA-C. Für den ASK relevanten tertiären Abraum (Mittel zwischen den Flözen) werden Gehalte von 0,15 - 0,2 Ma% FA-C dokumentiert. Die ausgewiesenen Werte für den rezenten Bodenumus (Auen-, Lößlehm) liegen nur etwas höher (0,25 – 0,4 Ma% FA-C). Für die tertiären Abraumsstrate sind die sehr hohen Huminrest (HR)-Gehalte (85 – 95 %) zu beachten. Jedoch zeigen die HA/ FA-Verhältnisse der Braunen Sande und der Mittel zwischen Flöz IV und II/II mit Werten um 0,4 einen vergleichsweise geringen Humifizierungsgrad auf. Die dokumentierten C:N-Verhältnisse dieser Einheiten weisen mit Werten zwischen 50 und 125 auf eine Stickstofflimitierung des Abbaus hin. WÜNSCHE [1974] stellt weiterhin fest, dass sich die organische Substanz der Kohlebegleitschichten und der Kohleflöze deutlich unterscheiden: „Während die Kohlenflöze fossile Waldmoore darstellen, sind die kohligen Beimengungen der mineralischen Abraumschichten hauptsächlich faulschlammartige Absätze ...“ LAVES ET AL. [1993] (vgl. auch LAVES [1998]) gehen einen Schritt weiter und untersuchen, gestützt auf Mineralisierungsversuche, die generelle Abbaubarkeit tertiärer organischer Substanz. Die Versuche erfolgten auch für eozäne und oligozäne Sande⁵⁵ des Feldes Espenhain. Die C-Mineralisationsergebnisse der Substrate waren mit denen von Schwarzerde vergleichbar! Dabei lagen die Umsetzungsraten für die eozänen Sande (ASK relevant) höher als die der oligozänen Sande (AFBK relevant). Im Zuge der C-Umsetzung kommt es zu einer deutlichen Erhöhung der HA/ FA-Verhältnisse. Die Einengung der C:N-Verhältnisse erhöht die Umsetzungsraten signifikant. Damit kann für die betrachteten Proben ein Anschlag der C-Umsetzung durch Nährstoffdüngung abgeleitet werden.

NITZSCHE, GLÄSER & SCHRECK [1999] dokumentieren für den Standort Zwenkau/ Cospuden Untersuchungen zur Kippengaszusammensetzung und zur ¹³C-Isotopie des CO₂. Sie weisen ebenfalls stellenweise sehr hohe CO₂-Gehalte (20 – 50 Vol%) in Verbindung mit CH₄-Gehalten bis zu 4,2 Vol % nach. Für einen Großteil der Proben liegen die δ¹³C-Werte zwischen –22 bis –24 ‰_{PDB}.

Für Lausitzer Kippen sind vor allem die Laborversuche von LIEBNER in FIB [1996] (siehe auch LIEBNER & KATZUR [1997]) zu nennen. Es wird der Ablauf reduktiver Prozesse für Tertiärkippenmaterial mit sehr niedrigen pH-Werten aufgezeigt. Dabei kommt es zur Bildung von CO₂-Gehalten bis > 40 Vol %. Die Versuche verharren allerdings im Stadium der Eisenreduktion. Die Felduntersuchungen von BERGER [2000] auf der Kippe Welzow kennzeichnen die zeitliche Entwicklung der CO₂-Gehalte an stationären Gassonden unmittelbar nach der Schüttung der Kippe. Der Autor kommt ebenfalls zum Schluss, dass die reduktive Umsetzung der organischen Substanz für einen Teil der CO₂-Bildung verantwortlich ist.

WISOTZKY [1998] führte für das Niederrheinische Revier Untersuchungen zur Sulfatreduktion in Kippen durch. Basierend auf wenigen Laborversuchen und thermodynamischen Gleichgewichtsbetrachtungen für Analysen von Kippengrundwässern kommt er zu dem Schluss, dass in den betrachteten Kippen die Sulfatreduktion keine größere Relevanz besitzt. Die Substrat-

⁵⁵Es handelt sich um eozäne Sande aus dem Mittel zwischen Oberflöz und Hauptflöz und um oligozäne Sande aus dem Hangenden des Oberflözes (5 m oberhalb, vermutlich Braune Sande). Die Proben hatten einen C_{org}-Gehalt von ≈ 2 Ma% (= C_{org}, da karbonatfrei) und wurden vor den Versuchen mit CaO melioriert.

verhältnisse der bearbeiteten Proben unterscheiden sich allerdings deutlich im Vergleich zum Mitteldeutschen Revier. Die verwendeten Substrate besitzen nur geringe C_r-Gehalte (0,1–0,2 Ma %).

Die Untersuchungen von SCHULTE ET AL. [1997] und BERGMANN [1999] charakterisieren anaerobe Redoxprozesse in den tiefen Porengrundwasserleitern (Umgegend der Großtagebaue) des Niederrheinischen Reviers. Dazu erfolgen hydrochemische und isotopegeochemische Untersuchungen. Die Ergebnisse verdeutlichen, dass in den abraumrelevanten Sedimenten eine Sulfatreduktion abläuft, die durch Abnahme der Sulfatgehalte, Zunahme der H₂S-Gehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Fraktionierung im Restsulfat gekennzeichnet ist.

Für das Mitteldeutschen Revier ist zusammenzufassen, dass die Gesamtheit der Untersuchungen den Ablauf der Redoxsequenz bis hin zur Sulfatreduktion aufzeigen. Eine wesentliche Fragestellung bleibt die Kinetik der Teilmoleküle der Prozesskette, die Kennzeichnung der Umsatzraten und der wesentlichen Randbedingungen. Hierzu sind weitergehende Untersuchungen notwendig. Diese Fortführung der Untersuchung der reduktiven Prozesskette ist für die langfristige Güteentwicklung sehr wesentlich, da die Sulfatreduktion/Sulfidbildung der entscheidende natürliche Selbsthilfeprozess ist, der zu einer nachhaltigen Wiederfestlegung von Sulfat und Metallen führt.

6.6 Beschaffenheitsprognose zum Abstromzeitpunkt

Ziel der Prognose ist es, flächenhafte Unterschiede in der Beschaffenheit des generierten Kippengrundwassers aufzuzeigen. An Hand der ermittelten Stoffcharakteristik der Kippe (Kap. 5.3) erfolgen hierzu PHREEQC-Modellrechnungen. Dies wird am Beispiel der AFB-Kippe demonstriert. Die erhaltenen Ergebnisse werden mit Analysen an den Kippengrundwassergütemessstellen verglichen, um die Sinnfälligkeit der Prognose zu prüfen. Generell ist die Frage zu beantworten, ob auf diesem Weg belastbare Voraussagen möglich sind. Auf Grund der Komplexität erfolgt keine Berücksichtigung der aufgezeigten hydraulischen Phänomene (Kap. 4) und der reduktiven Prozesskette (Kap. 6.5). Es muss somit die Modellhaftigkeit der Vorgehensweise bewusst bleiben.

6.6.1 Vorgehensweise

Die Berechnung erfolgte an jedem Rasterelement (vgl. Kap. 5.3). Folgende grundlegende Ideen und Vorgehensweisen wurden bei der Berechnung in PHREEQC berücksichtigt:

Ausgangspunkt ist die Definition eines destillierten Wassers (Keyword „SOLUTION“). Die Reaktionsprodukte (Fe, SO₄, H⁺) aus der Eisendisulfidverwitterung werden mittels des Keywords „REACTION“ „zugegeben“. Der Berechnung liegt dabei die Annahme zu Grunde, dass 5 % des am Rasterelement bilanzierten S_{diff}-Anteils umgesetzt werden. Für die Lösung erfolgte die Gleichgewichtseinstellung (Keyword „EQUILIBRIUM PHASES“) zu relevanten Mineralphasen. Die Phasen Calcit, K-Glimmer (K-mica) und Kaolinit werden bezüglich Auflösung und Fällung betrachtet. Demgegenüber können die Mineralphasen Siderit, Fe(OH)_{3(a)}, Al(OH)_{3(a)}, Kalium-Jarosit, SiO_{2(a)}, Gips und Alunit⁵⁶ sich nur bilden (Vorgabe Anfangsgehalt = 0). Der Karbonatgehalt resultiert aus der Bilanzierung in Kap. 5.3. und wird

⁵⁶ Es wurden die thermodynamischen Daten aus „phreeqc.dat“ (PARKHURST & APPELO [1999]) verwendet.

als Calcitgehalt⁵⁷ vorgegeben. Die Berücksichtigung von puffernden Silikatphasen kann nur stark vereinfacht erfolgen. Deren Verwitterung bzw. Umbildung ist ein kinetischer Prozess, der nur annähernd mit Gleichgewichtsvorstellungen beschrieben werden kann. Jedoch spielt die Berücksichtigung dieses Puffersystems für karbonatarme Substrate eine wesentliche Rolle. Es erfolgte eine Standardstoffmengenvorgabe für alle Rasterelemente an K-mica. Weiterhin erfolgte eine Gleichgewichtseinstellung zu einem CO₂-Partialdruck der Gasphase von 10 Vol% (Keyword „EQUILIBRIUM PHASES“). Kationenaustauschprozesse (Keyword „EXCHANGE“) wurden durch die Einbeziehung der bilanzierten Kationenaustauschkapazität⁵⁸ des prognostizierten Kippenkörpers berücksichtigt. Die Standard-Inputdatei für die durchgeführten PHREEQC-Berechnungen zeigt Anl. 6.6.1.

6.6.2 Ergebnisse

Die Prognoseergebnisse für die AFB-Kippe Espenhain sind in Abb. 6.6.1 für die Parameter pH-Wert, Eisen- und Sulfatgehalt dargestellt. Zum Vergleich sind in den Abbildungen die Messergebnisse an KGGM (siehe HOTH & FELDMANN in TUBAF [2000]) ausgewiesen.

Für die pH-Werte wird ein deutlicher NW–SE Trend ersichtlich. Dies steht in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Vorfeldbilanzierung (Kap. 5.3). Die prognostizierten pH-Werte des Nordteils der AFBK-Espenhain entsprechen dem Niveau des Karbonatpuffersystems und liegen in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Beprobungen der KGGM.

Für die prognostizierten Eisengehalte wird in Abb. 6.6.1b ebenfalls ein NW – SE Trend deutlich. Im südlichsten Bereich der Kippe sind die Gehalte dabei stark erhöht. Dies ist ob der niedrigeren pH-Werten verständlich. Der Großteil der Kippe ist an Hand der Messwerte durch Eisengehalte < 30 mg/l geprägt. Die prognostizierten Werte weisen für diesen Teil ein Niveau < 10 mg/l auf. Der NW – SE Trend spiegelt sich, mit Ausnahme der KGGM „TB1“, gut in den Messwerten wider.

Die in Abb. 6.6.1c dargestellten Sulfatgehalte weisen ebenfalls eine Zunahme von NW nach SE auf. Im Nordteil befindet sich der AFB-Körper stellenweise leicht unterhalb des Gipsgleichgewichtsniveaus, während die Sulfatgehalte im Süden dieses Gleichgewicht aufzeigen. Im Vergleich zu den Messergebnissen zeigt sich eine gute Übereinstimmung.

Insgesamt wird deutlich, dass die Kippengrundwasserprognose an Hand der Vorfeldbilanzierung belastbare Ergebnisse liefert.

⁵⁷ Die zweifelsohne vorhandenen Dolomitanteile im Karbonatgehalt wurden vereinfacht als Calcitgehalt vorgegeben.

⁵⁸ In Kap. 5.3 wurden die Bilanzierungsergebnisse für diese Größe nicht dargestellt.

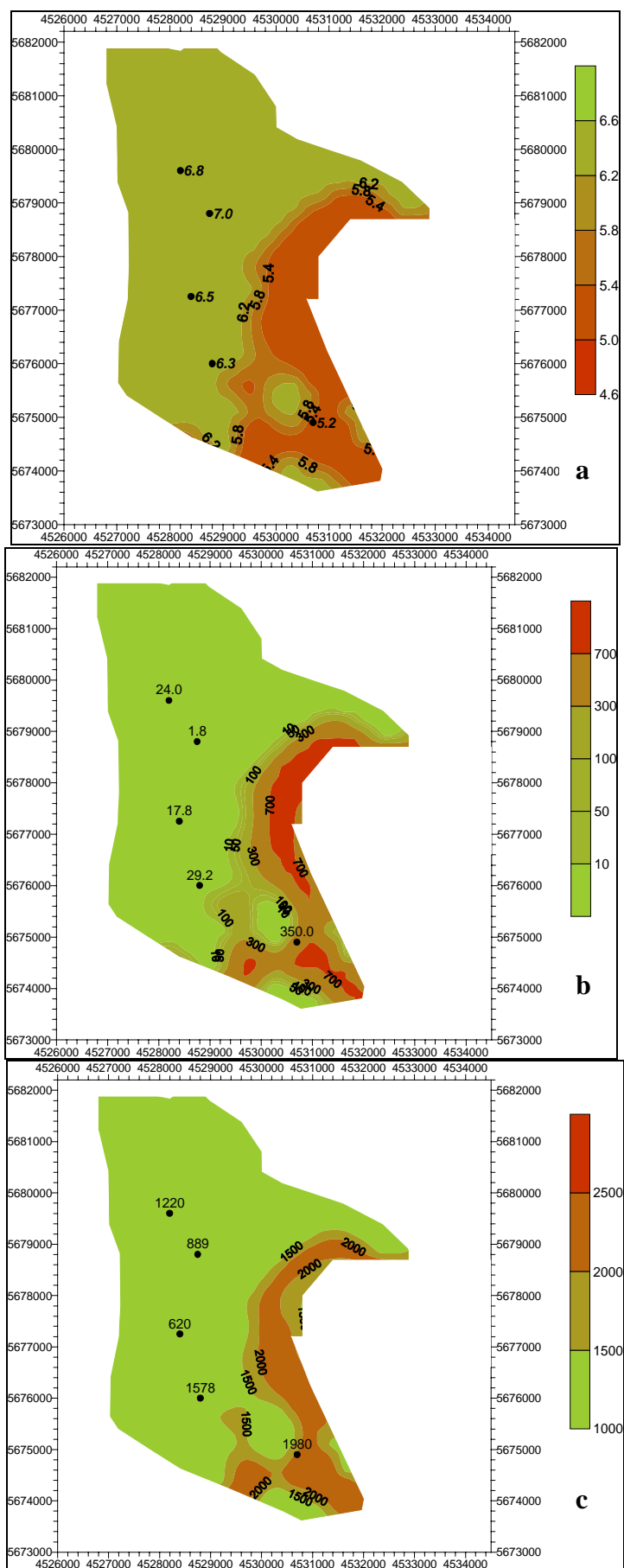


Abb. 6.6.1 Prognoseergebnisse für die AFB-Kippe Espenhain (Punkte = Messwerte an KGGM) – a) pH-Werte [-]; b) Fe_{ges} -Gehalte [mg/l]; c) Sulfat-Gehalte [mg/l]

7 Kennzeichnung der hydrogeochemischen Prozesse – Kippe Jänschwalde

Zur Kennzeichnung der hydrogeochemischen Prozesse wurden am Standort Jänschwalde keine eigenen Feld-/ Laboruntersuchungen durchgeführt. Deshalb werden kurz die grundlegenden Ergebnisse aus der Literatur aufgezeigt. Aufbauend auf den Ergebnissen aus Kap. 5.4 und den Literaturangaben erfolgt dann eine Beschaffenheitsprognose.

Die wesentliche Arbeit zur Kennzeichnung der hydrogeochemischen Prozesse der bestehenden Kippe Jänschwalde stellt das Forschungsprojekt von BTUC [1998] im Auftrag der LAUBAG dar. Die Hauptergebnisse sind ebenfalls in ROLLAND ET AL. [1998] bzw. [2001] dokumentiert.

7.1 Kennzeichnung der Stoffpotentiale und der Verwitterungsprozesse

Innerhalb des Forschungsprojektes BTUC [1998] wurde eine intensive Untersuchung der Schwefelgehalte und Bindungsformen an den tertiären geologischen Einheiten durchgeführt. Weiterhin wurde an einigen Proben der anstehenden quartären Substrate der Karbonatgehalt untersucht. Während des 3-monatigen Stillstandes des AFB-Verbandes (Revision) erfolgten Verwitterungsversuche im Tagebau. Alle Untersuchungen wurden generell am damaligen Stoß des Tagebaus⁵⁹ durchgeführt. Hieraus resultiert, dass es sich bezüglich der Stoffgehalte, im Gegensatz zu den Bodengeologischen Vorfeldgutachten nicht um flächenhafte Untersuchungen des gesamten Kohlefeldes handelte. Die Bestimmung der Karbonatgehalte der quartären Einheiten erfolgte an einer geringeren Probenanzahl als innerhalb der Vorfeldgutachten. In Tab. 7.1.1 ist ein Vergleich der am Stoß ermittelten Stoffgehalte mit denen der Vorfeldbilanzierung (Kap. 5.4) aufgezeigt⁶⁰. Bezüglich der Karbonatgehalte werden

Tab. 7.1.1 Anstehende Abraumsstrate Tagebau Jänschwalde - Vergleich zwischen mittleren Stoffgehalten aus BTUC [1998] und der Auswertung der Vorfeldgutachten (siehe Kap. 5.4) – Mittelwertangaben fett gedruckt

Geologische Einheit	BTUC Untersuchungen			Auswertung Vorfeldgutachten		
	S _{ges} [Ma%]	S _{diff} [Ma%]	CaCO ₃ [Ma%]	S _{ges} [Ma%]	S _{diff} [Ma%]	CaCO ₃ [Ma%]
Quartäre Sande			0,2 – 3,2 1,33			0,1 – 2,2
Grundmoränen			0,4 – 7,5			3 – 12,1
Glacilimn. Bildungen			12,68			2 - 7
Tertiär rollig	0,87	0,5		0,3 – 0,6	0,2 – 0,4	
Tertiär bindig (HS)	4,03	2,4		3 - 4	2 – 2,5	

⁵⁹Die Arbeiten erfolgten zwischen 1996-98. Der damalige Stand des Tagebaustoßes geht aus Abb. 3.2.1 hervor.

⁶⁰Die angegebenen Werte für die Auswertung der Vorfeldgutachten ergeben sich für den Bereich der Abraumscheiben 1996 – 98 (vgl. Anl. 5.4.5 – 5.4.8)

ähnliche Gehaltstendenzen ersichtlich. Der für die Einheit „quartäre Sande“ ausgewiesene gewichtete Karbonatgehalt von 1,33 Ma% resultiert aus dem Auftreten der kalkhaltigen Sande in diesen Jahresscheiben (vgl. Anl. 5.4.5). Daraus wird die Bedeutung der flächenhaften Betrachtung klar. Die Schwefelgehalte für die zusammengefassten Einheiten „Tertiär rollig“ und „Tertiär bindig“ liegen im gleichen Niveau. Nur für die rolligen Substrate zeigt sich bei der Vorfeldbilanzierung ein etwas geringerer S_{ges} -Gehalt. Der disulfidische Anteil am Gesamtschwefel ist allerdings nahezu gleich. Für die Hangendschluffe zeigen beide Untersuchungen, dass die Schwefelgehalte von HS 1 zu HS 3 abnehmen (nicht dargestellt). Zu dem in BTUC [1998] erstellten Vergleich mit den Vorfeldgutachten ist anzumerken, dass dazu die unaufbereiteten Mittelwerte der Vorfeldgutachten genutzt wurden (vgl. Kap. 5.2)⁶¹.

Die oben angesprochenen Verwitterungsversuche in BTUC [1998] erfolgten über 76 Tage am gewachsenen Stoß. Dabei zeigt sich, dass die tertiären Sande deutlich schnellere Verwitterungserscheinungen offenbaren als die tertiären Schluffe. Dies ist auf die geringere Wassersättigung und höhere Permeabilität der Sande zurückzuführen. In ROLLAND ET AL. [1998] werden diese Versuche an Material des GWL 4.1 und des HS 2 der 1.FB des 2.LFH dokumentiert. Zum Abschluss der Versuche im GWL 4.1 liegen die pH-Werte der Feldeluate bis in eine Tiefe von 2 m bei $< 3,5$ (Ausgangswert = 7), verbunden mit ELF-Werten > 1500 $\mu\text{S}/\text{cm}$. Für den Hangendschluff zeigen sich nur bis in 0,5 m Tiefe erhöhte ELF-Werte (bis 500 $\mu\text{S}/\text{cm}$), wobei die pH-Werte > 6 sind. Die Bilanzierung der Verwitterung durch die Veränderung der $S_{\text{diff}}/S_{\text{ges}}$ -Verhältnisse erweist sich als sehr schwierig. Die Untersuchungen der Verwitterungsprozesse am kurzzeitig exponierten Kippenstoß sind auf Grund der Heterogenität wesentlich komplizierter. Es ergeben sich quantitativ nicht interpretierbare Ergebnisse. In BTUC [1998] bzw. ROLLAND ET AL. [1998] wird davon ausgegangen, dass es zur gleichen Umsetzungsgeschwindigkeit kommt wie an der gewachsenen Böschung⁶². Diese Gleichsetzung ist auf Grund der Auflockerung des Materials kritisch zu bewerten.

Nach BTUC bzw. ROLLAND ET AL. nehmen die Verwitterungsraten vom Strossenende in Richtung Drehpunkt zu. Dies begründet sich durch die Technologie der Schwenkbetriebsweise der AFB und daraus resultierenden längeren Expositionszeiten im Drehpunktbereich. Für langfristig exponierte Böschungen (Randschläuche) wird das erhebliche mobile Stoffpotential sowohl in den tertiären Sanden, als auch in den tertiären Schluffen dokumentiert.

Zusammenfassend weisen ROLLAND ET AL. [2001] einen ca. 4 %-igen Umsatz der vorhandenen Disulfidgehalte durch den gesamten Tagebauprozess aus. 50 % des Umsatzes wird durch die sekundäre Verwitterung in Folge Sauerstoffdiffusion an langzeitigen Kippenoberflächen begründet. Der in ROLLAND ET AL. [2001] angeführte Vergleich zwischen gemessenen Sulfatgehalten an Kippengrundwassermessstellen und prognostizierten Werten ist deshalb kritisch zu bewerten. Die betrachteten Messstellen repräsentierten zum Beprobungszeitpunkt das Liegende der AFB-Kippe.⁶³ Sie sind also nicht vom Umsatz durch sekundäre

⁶¹Weiterhin wurden bezüglich der Schwefelgehalte fälschlicherweise die eigenen Werte in [Ma% S] mit denen der Vorfeldgutachten in [Ma% SO_3] verglichen.

⁶²Bei der gewählten Betrachtung besteht der Unterschied zwischen beiden Stoßseiten nur darin, dass das verwitterbare Tertiärmaterial auf der Kippenseite über den ganzen Stoß verteilt ist.

⁶³Die in ROLLAND ET AL. [2001] aufgeführten Messstellen 831 und 6205 sind nicht eindeutig der Kippe zuzuordnen, da sie nach BTUC [1998] sowohl in der Kippe als auch im GWL 5 verfiltert sind.

Verwitterung in Folge langzeitiger Exposition betroffen. Somit ist für diese Substrate nur von einem ca. 2%-igen Umsatz auszugehen. Dieser 2 %-ige Umsatz kann die auftretenden Kippenwasserbeschaffenheiten nicht begründen. Als Hauptfehlerquelle ist die Bilanzierung der Umsetzung an der Kippenböschung zu benennen.

ROLLAND ET AL. [1998] führen aus, dass vor allem die technologischen aber auch die geologischen Gegebenheiten des betrachteten Tagebaus geringere Umsätze im Vergleich zum Rheinischen Revier (WISOTZKY [1994]) zur Folge haben.

7.2 Beschaffenheitsprognose zum Abstromzeitpunkt

Zielstellung und Vorgehensweise bei der Beschaffenheitsprognose entsprechen der in Kap. 6.6 für den Standort Espenhain aufgezeigten. Für den Standort Jänschwalde wurde eine Verwitterung von 8% der bilanzierten S_{diff} -Gehalte angesetzt⁶⁴. Es erfolgte keine Berücksichtigung differenzierter Umsetzungsraten für den Bereich mit Schwenkbetriebsfahrweise⁶⁵.

Die Prognoseergebnisse für die AFB-Kippe sind in Abb. 7.2.1 für die Parameter pH-Wert, Sulfat- und Fe_{ges} -Gehalt dargestellt. Zum Vergleich sind die Messergebnisse an KGM aus BTUC [1998] (siehe auch ROLLAND ET AL. [2001]) angegeben.

Die Prognoseergebnisse verdeutlichen die bereits durch die Kippenbilanzierung (Kap. 5.4) aufgezeigten Problembereiche. Die Verteilungsmuster werden wesentlich durch die Karbonatgehalte geprägt (vgl. mit Abb. 5.4.3). Im SW-Teil der Altkippe, im Westteil des zukünftigen mittleren Kippenteils sowie im Bereich der Tertiärhochfläche Horno werden pH-Werte deutlich < 6, verbunden mit Eisengehalten > 100 mg/l und Sulfatgehalten > 2000 mg/l, prognostiziert. Im Gegensatz dazu liegen für die Bereiche der überbaggerten Gosader Rinne, des Ostteils der Kippe sowie des nördlichsten Kippenteils in Nachbarschaft zum zukünftigen RS Taubendorf die pH-Werte bei > 6,5, verbunden mit Fe_{ges} -Gehalten von < 10 mg/l und Sulfatgehalte zwischen 500 – 1500 mg/l. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zu den Messwerten an den KGM 1340, 1363, 1366 und 1393. Im Gegensatz dazu weisen die Messstellen 930, 954 und 6206 im Vergleich zur Prognose deutlich niedrigere Gehalte und höhere pH-Werte auf. Als Erklärung kann die Lage der Messstellen in Richtung Strossenende herangezogen werden, da für diese Bereiche keine geringeren Umsatzraten berücksichtigt wurden (siehe Kap. 7.1). Allerdings ist auch der Ablauf reduktiver Prozesse bis hin zur Sulfatreduktion zu diskutieren.

Abb. 7.3.2 zeigt für die in BTUC [1998] beprobten KGM den Zusammenhang zwischen den gemessenen pE-Werten sowie zugehörigen pH-Werten, Sulfat- und Eisengehalten auf. Es wird deutlich, dass niedrigere pE-Werte mit niedrigeren Sulfatgehalten und erhöhten pH-Werten korrelieren. Auch die Tendenz der niedrigeren Eisengehalte weist auf den Ablauf reduktiver Prozesse bis zur Sulfatreduktion/Eisensulfidbildung⁶⁶ hin.

⁶⁴Die im Vergleich zu BTUC [1998] bzw. ROLLAND ET AL. [2001] höhere Umsatzrate wurde gewählt, um zum einen die in Kap. 7.1 diskutierten Unsicherheiten bei den Umsetzungsraten an der Kippenböschung zu kompensieren und zum anderen, die gefährdeten Bereiche herauszustellen.

⁶⁵Auf eine weitere Differenzierung wurde auf Grund der aufgezeigten Schwierigkeiten bei der Bestimmung der Umsetzungsraten verzichtet.

⁶⁶Diese Feststellung gilt auch, wenn bei thermodynamischen Betrachtungen noch nicht das Stabilitätsfeld der Eisenmono- und -disulfide erreicht wird. Hierzu sind die Aussagen zu Redoxpotentialmessungen in Kap. 2.4.3 zu beachten. Eine Berechnung von rH-Werten (z.B. nach HÖLTING [1992]) weist für die Proben „schwach reduzierende“ Verhältnisse aus.

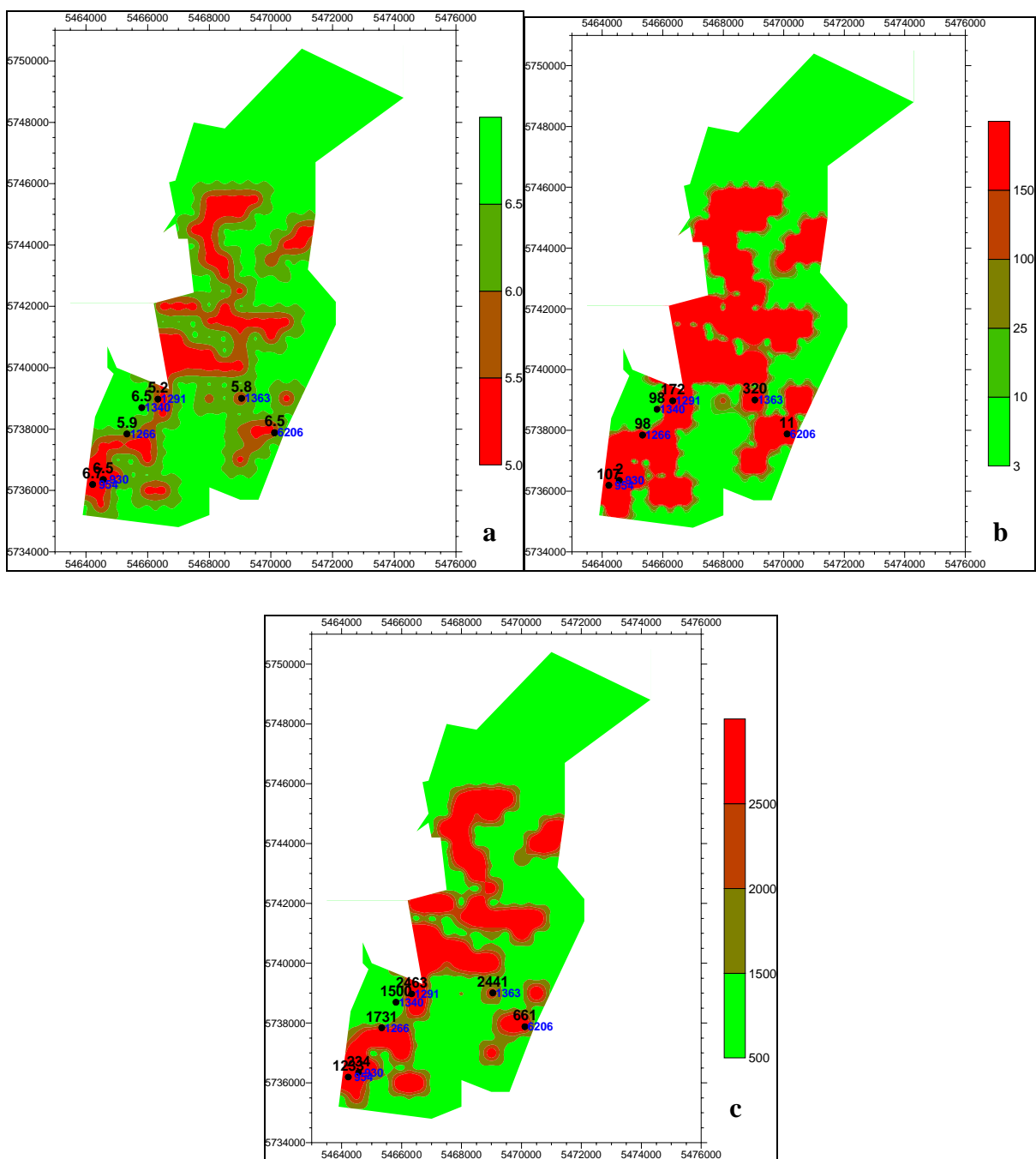


Abb. 7.3.1 Prognoseergebnisse für die AFB-Kippe Jänschwalde (Punkte = Messwerte an KGM aus BTUC [1998]- schwarz (Messwert), blau (Messstellennummer)) – a) pH-Werte [-]; b) Fe_{ox} -Gehalte [mg/l]; c) Sulfat-Gehalte [mg/l]

Für die Mehrzahl der Kippenmessstellen wird ein fauliger Geruch des gefördert Wasser dokumentiert. Die Wassertemperaturen sind gegenüber normalen Grundwasserverhältnissen mit 13 – 14,5°C (max. 17,3 °C) deutlich erhöht (BTUC [1998], UHLMANN [2000]).

In Abb. 7.3.5 sind die Ergebnisse von einfachen Versuchen zur Mobilisierbarkeit von Sulfat-reduzierern im Kippengrundwasser aufgezeigt (Methodik siehe Kap. 6.1.2).

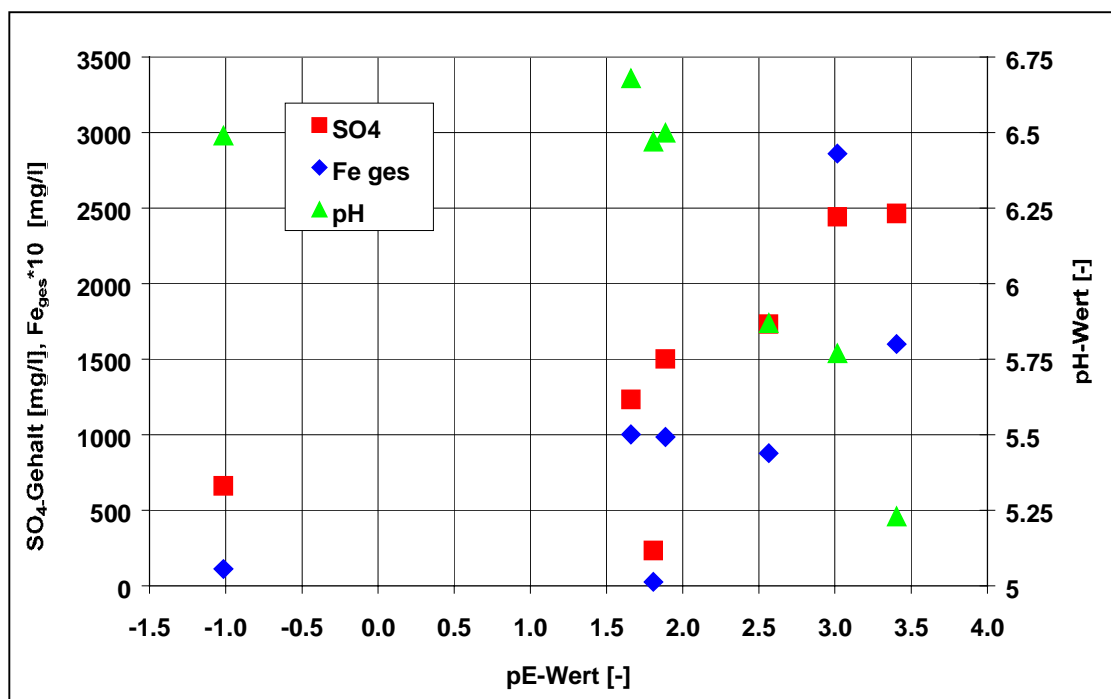


Abb. 7.3.2 Darstellung der SO_4^- , Fe_{ges} -Gehalte und pH-Werte in Abhängigkeit vom pE-Wert an KGWM (Daten aus BTUC [1998])



Abb. 7.3.3 Kippe Jänschwalde (GWGM 1340) - Zeitlicher Verlauf einfacher Flaschenversuche zur Aktivierbarkeit von Sulfatreduzierern

Die am 8.3.2000 begonnenen einfachen Versuche (siehe auch HOTH ET AL. [2001A]) offenbaren bereits nach 5 Tagen sowohl im Lactat- als auch im Methanolansatz eine Eisensulfidbildung. Nach 14 Tagen ist ein extremer Umsatz ersichtlich. Damit ist für diese KGGM der Nachweis einer guten Aktivierbarkeit der Sulfatreduzierer des Kippengrundwassers geführt.

8 Reaktives Stofftransportprogramm PCGEOFIM

8.1 Funktionsweise des gekoppelten Modells

Innerhalb eines BMBF/ LMBV geförderten Projekts (HOTH in TUBAF [2000], IBGW [2000]) erfolgte die Kopplung des für Grundwassermodellierungen in Braunkohlebergbaugebieten entwickelten Transportmodells PCGEOFIM (SAMES & BOY [1997]) mit PHREEQC (PARKHURST [1995], PARKHURST & APPELO [1999]). Die Konzeption zur Vorgehensweise der Kopplung beider Programme wurde durch den Autor in Zusammenarbeit mit Herrn Dr. Sames (IBGW) erstellt. Die programmtechnische Umsetzung erfolgte durch Herrn Dr. Sames. Das gekoppelte Programm beinhaltet eine nichtiterative 2 Schrittmethode (siehe Kap. 2.5.2). Zur Kopplung können sowohl die PHREEQC-Version 1.6, als auch Version 2 verwendet werden. Abb. 8.1.1 zeigt den programmtechnischen Ablauf der Kopplung.

	PCGEOFIM		Datenbasis		PHREEQC
↓ F Ü R A L L E Z E I T S C H R I T T E	Einlesen der Eingabedateien, Aufbau der internen GEOFIM- Strukturen	←	dBASE-Dateien in home\database		
	$t = t_{\text{Anfang}}$				
	Berechnung der Mengen- strömung für einen Zeitschritt				
	Berechnung des Transportes aller im Grundwasser gelösten Spezies				
	Aktualisierung der PHREEQC-Inputdatei für jedes finite Volumen	←	Muster der PHREEQC- Inputdatei home\input\{proj}phre.inp		
		→	PHREEQC-Inputdatei home\result\{proj}phre.inp für jedes finite Volumina	→	
	PHREEQC-Call		PHREEQC-Datenbasis home\input\{proj}phre.dat	→	Berechnung des hydrogeo- chemischen Gleichgewichts für jedes finite Volumina
	Auswertung der PHREEQC-Ergebnisdatei: • Bestimmung der Konzen- trationen aller im Grund- wasser gelösten chemi- schen Komponenten • Ausweis der Quellen und Senken	←	PHREEQC-Ergebnisdatei home\result\{proj}phre.pun	←	
	Ausgabe der Ergebnisse	→	home\save\{kz} datum		
	$t = t + \Delta t$				
Test: $t > t_{\text{Ende}}$					
↑↓	Ende der Berechnung				

Abb. 8.1.1 Programmtechnischer Ablauf der Kopplung PCGEOFIM-PHREEQC (aus IBGW [2000] bzw. HOTH in TUBAF [2000])

Die Berechnung des reaktiven Stofftransportes erfolgt somit in folgenden Schritten:

- Berechnung der Mengenströmung und anschließend des konvektiv-dispersiven Transportes mit PCGEOFIM für den Zeitschritt t . Ausweisung der Konzentrationen der transportierten Stoffkomponenten für jedes finite Volumenelement.
- Aufbau einer PHREEQC-Inputdatei für jedes finite Volumenelement, unter Verwendung der Konzentrationen der transportierten Stoffkomponenten und der Gehalte an Modellmineralphasen, Austauscherbelegungen etc. .
- Berechnung der hydrogeochemischen Gleichgewichtszustände. Ausweisung der veränderten Konzentrationen der transportierten Komponenten und der Veränderung bezüglich Modellmineralphasen-Gehalten und Austauscherbelegung für jedes Volumenelement
- Ausweisung der Quellen/ Senken bezüglich der transportierten Stoffkomponenten
- Berechnung des nächsten Zeitschrittes.

Nachfolgend wird die Verifizierung des reaktiven Stofftransportprogramms „PCGEOFIM“ an ausgewählten Benchmark-Beispielen aufgezeigt. Dabei wird die Funktionsweise der Kopplung zuerst an 1D-Beispielen überprüft. Dazu werden die Ergebnisse mit den Berechnungsergebnissen des 1D-Transportmodells von PHREEQC 2 verglichen (Kap. 8.2, 8.3). Die vom Autor betreute Diplomarbeit von GLÖCKNER [2001] diskutiert diese und weitere Benchmarktestungen des Programms eingehender. Hierbei wurde auch die Fragestellung des Einflusses der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung auf die Modellergebnisse untersucht. In den Kap. 8.4 und 8.5 wird untersucht, ob messtechnisch gut erfasste Säulenversuche mit dem gekoppelten Modell nachvollziehbar sind. Die dazu durchgeführten Modellierungen der diskutierten Säulenversuche sind in HOTH IN TUBAF [2000] ausführlicher dargestellt.

8.2 Benchmark-Beispiel 1 – Kationenaustauschprozesse

8.2.1 Problemstellung

Das synthetische Beispiel aus APPELO & POSTMA [1996] (Bsp. 10.13) beschreibt den Prozess des Kationenaustausches. Ein Sediment wird mit einer CaCl_2 -Lösung durchströmt. Die Austauschplätze sind im Anfangszustand jeweils zur Hälfte mit K und Na belegt. Es kommt zuerst zum Austausch von Natrium gegen Kalzium. Begründet durch die Austauschkoefizienten wird Kalium erst nachfolgend ausgetauscht. Dieses Beispiel wurde mit PHREEQC 2 in PARKHURST & APPELO [1999] (Bsp. 11) modelliert.

8.2.2 Modellgrundlagen

Die 80 cm lange Säule wird in 40 Zellen mit 2 cm Mächtigkeit diskretisiert⁶⁷. Innerhalb von PCGEOFIM wurden die Δx -, Δy -Abmaße auf 10 cm festgelegt. Um die gleichen Abstandsgeschwindigkeiten wie in Bsp. 11 aus PARKHURST & APPELO [1999] abzubilden, wurde in PCGEOFIM die Infiltrationsrate zu $Q = 2,1 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{h}$ und $n_e = 0,21$

⁶⁷Dieser Modellaufbau wurde für beide Programme (PCGEOFIM und PHREEQC 2) gewählt. PCGEOFIM wurde als regionales Modell konzipiert. Daraus resultiert das zum gegenwärtigen Zeitpunkt die feinste Diskretisierung 2cm beträgt. Aus diesem Grund mussten Abmaße und Diskretisierung des Beispiels aus APPELO & POSTMA [1996] angepasst werden.

Tab. 8.2.1 Benchmark-Bsp. 1 - Infiltrat- und Anfangskonzentrationen der flüssigen Phase

	Ca ²⁺	Cl ⁻	Na ⁺	K ⁺	NO ₃ ⁻
Infiltratkonzentration [mmol/l]	0.60	1.20	0	0	0
Anfangskonzentration [mmol/l]	0	0	1.00	0.20	1.20

festgelegt⁶⁸. Die angesetzte Dispersivität wurde beibehalten und beträgt $\delta = 2$ mm. Tab. 8.2.1 zeigt die Infiltrat- und Anfangskonzentrationen des Beispiels auf. Die Anfangsporenlösung der Säule wird durch eine Na,K-Nitratlösung gebildet. Diese Lösung steht im Gleichgewicht zu einem Kationenaustauscher von 1,1 [meq/l PW] Größe. Zur Berechnung wurden die Kationenaustauschkoeffizienten für NaX, KX und CaX₂ der thermodynamischen Datenbank „phreeqc.dat“ (PARKHURST & APPELO [1999]) verwendet. Die Redoxreaktionen des Stickstoffes und ein Ammonium-Ionenaustausch wurden, wie in APPELO & POSTMA [1996] angegeben, vernachlässigt.

8.2.3 Modellergebnisse

Abb. 8.2.1 zeigt den Vergleich der Ergebnisse zwischen PCGEOFIM und PHREEQC 2. Beide Modelle liefern nahezu die gleichen Ergebnisse. Für die nichtreaktive Komponente Chlorid wird in PCGEOFIM die Ausbildung einer schärferen Front im Vergleich zu PHREEQC 2 deutlich. Die Natrium-Kurve der PCGEOFIM Ergebnisse weist eine Schwingung auf. Dieses Phänomen konnte nicht abschließend geklärt werden. Auch eine Verringerung der Kopplungszeitschrittweite führte nicht zur Behebung des Phänomens.

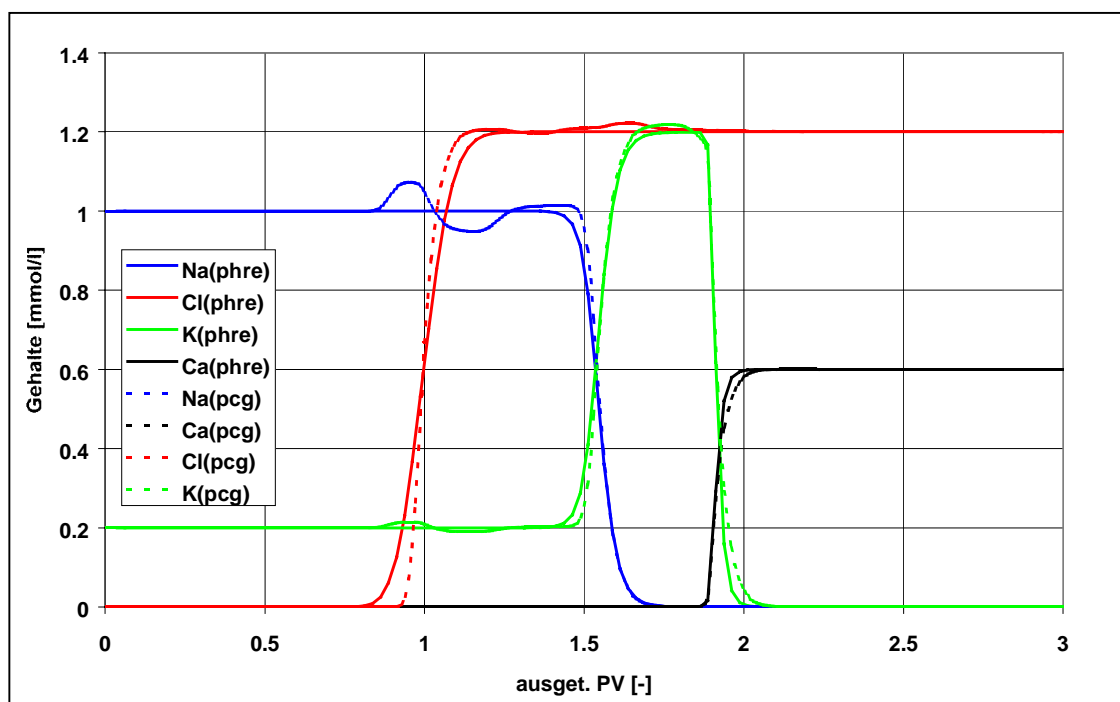


Abb. 8.2.1 Benchmark-Bsp. 1 - Vergleich der Modellergebnisse von PCGEOFIM (pcg) mit PHREEQC 2 (phre) am Säulenauslauf (Kopplungszeitschritt = 5 min)

⁶⁸ In GLÖCKNER [2001] ist fälschlicherweise $Q = 2,1 \cdot 10^{-5}$ m³/h angegeben.

8.3 Benchmark-Beispiel 2 – Abstrom von AMD-Wässern

8.3.1 Problemstellung

Es wird der Abstrom von AMD-Wässern eines Uranerztailings in einen karbonatgepufferten Aquifer betrachtet. Es kommt zum schrittweisen Aufbrauch der im Abstrom vorhandenen Puffersysteme. Die Fragestellung ist somit dem Abstrom aus Braunkohlekippen verwandt. Das 1D-Beispiel ist in WALTER [1993] bzw. WALTER ET AL. [1994 A,B]⁶⁹ dokumentiert. Es diente zur Verifikation des reaktiven Stofftransportmodells MINTRAN. Für dieses erfolgte eine Vergleichsrechnung mit PHREEQM (APPELO & WILLEMSSEN [1987] bzw. APPELO & POSTMA [1996]). Die geochemischen Bedingungen für den Standort „Nordic site“, nahe des Lake Elliot in Nordontario, sind aus MORIN & CHERRY [1988] abgeleitet.

8.3.2 Modellgrundlagen

Innerhalb der Programme PCGEOFIM und PHREEQC 2 wurde jeweils eine 80 cm lange Säule, diskretisiert in 40 Zellen, betrachtet. Die Δx -, Δy -Abmaße wurden für PCGEOFIM auf 10 cm festgelegt. Für einen vergleichbaren Porenwasseraustausch zum Beispiel in WALTER ET AL. [1994 A] betrug in PCGEOFIM die Infiltrationsrate⁷⁰ $Q = 5,83 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{h}$. Die Werte für Dispersivität ($\delta = 0,5 \text{ cm}$) und Porenraum ($n_e = 0,35$) wurden aus WALTER ET AL. [1994 A] übernommen. Die Anfangs- und Infiltratkonzentrationen sind in Tab. 8.3.1 aufgeführt. Hieraus werden auch die berücksichtigten Mineralphasen ersichtlich. Diese Angaben und die berücksichtigten thermodynamischen Konstanten sind aus WALTER ET AL. [1994] entnommen.

Tab. 8.3.1 Benchmark-Bsp. 2 – Anfangs- und Infiltratkonzentrationen

Gelöste Komponente	Anfangskonzentration [mmol/l]	Infiltratkonzentration [mmol/l]	Modellmineralphasen	Anfangskonzentration [mmol/l]
Ca	6,92	10,8	Kalzit	19,5
Mg	1,96	$9,69 \cdot 10^{-1}$	Siderit	4,22
Na	1,30	1,39	SiO ₂ (a)	407
K	$6,65 \cdot 10^{-2}$	$7,93 \cdot 10^{-1}$	Gibbsit	2,51
Cl	1,03	$1,19 \cdot 10^{-1}$	Fe(OH) ₃ (a)	1,86
CO ₃	3,94	$4,92 \cdot 10^{-1}$	Gips	0
SO ₄	7,48	50,0		
Mn	$4,73 \cdot 10^{-2}$	$9,83 \cdot 10^{-3}$		
H ₄ SiO ₄	1,94	2,08		
Fe(II)	$5,39 \cdot 10^{-2}$	30,6		
Fe(III)	$2,32 \cdot 10^{-5}$	$1,99 \cdot 10^{-4}$		
Al	$1,27 \cdot 10^{-4}$	4,3		
pH-Wert	6,96	3,99		
pE-Wert	1,67	7,69		

⁶⁹Neben dem 1D-Beispiel wird in WALTER [1993] bzw. WALTER ET AL. [1994] auch ein 2D-Beispiel betrachtet. Für das Modell PCGEOFIM erfolgen dazu Vergleichsrechnungen in GLÖCKNER [2001].

⁷⁰In GLÖCKNER [2001] ist fälschlicherweise $Q = 1,17 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{h}$ angegeben.

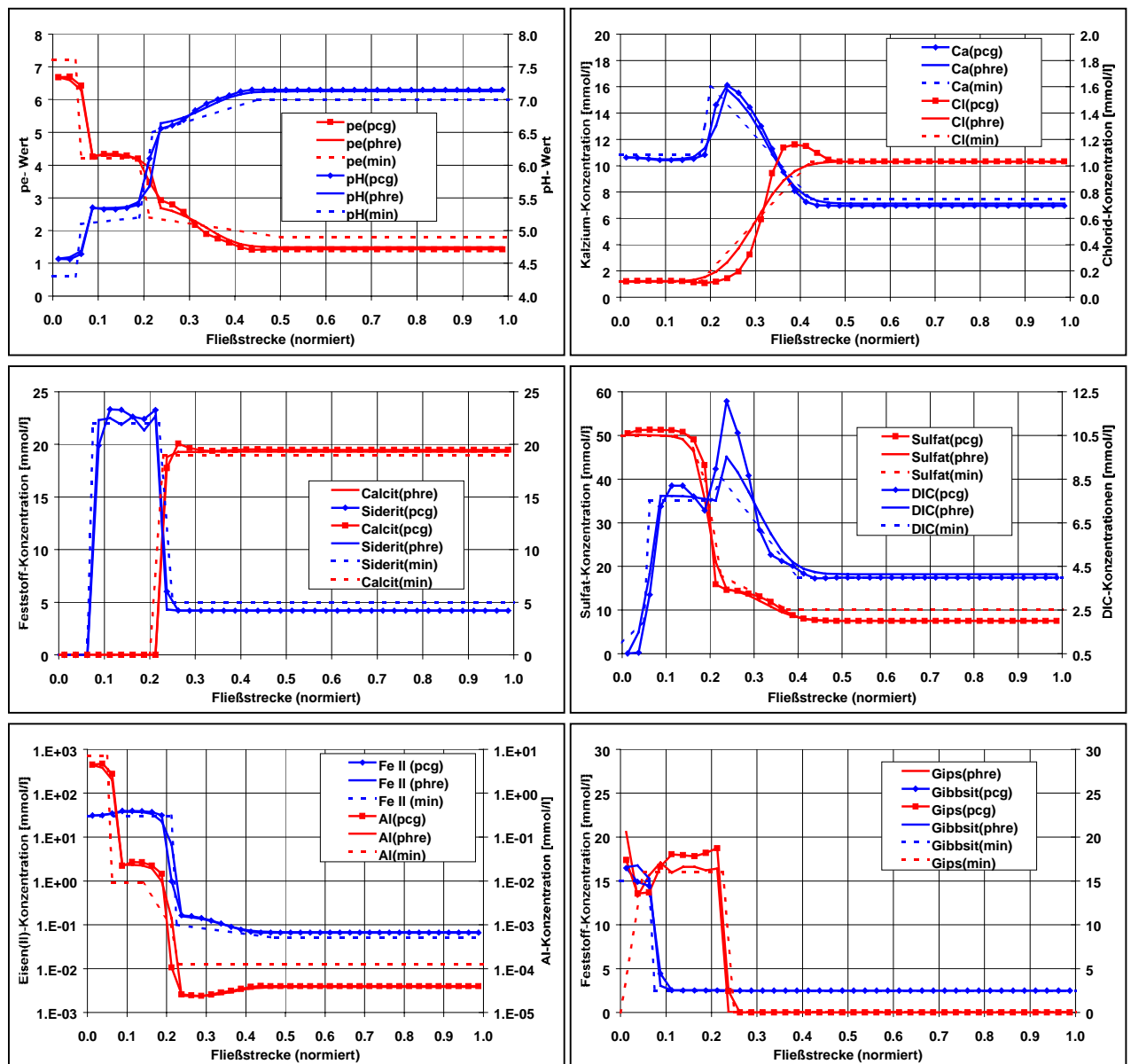


Abb. 8.3.1 Benchmark-Bsp. 2 - Vergleich der wesentlichen Modellergebnisse von PCGEOFIM (pcg) mit PHREEQC 2 (phre) und MINTRAN (min) für Berechnungszeitpunkt $t = 6d$

8.3.3 Modellergebnisse

In Abb. 8.3.1 sind die wesentlichen Modellergebnisse der PCGEOFIM Rechnung im Vergleich zu den Ergebnissen von PHREEQC 2 und MINTRAN⁷¹ für den Berechnungszeitpunkt $t = 6d$ dargestellt. Dabei werden die jeweiligen Gehalte über die normierte Fließstrecke verglichen. Die in WALTER et al. [1994 a] aufgeführten Werte des Anfangszustandes charakterisieren keinen exakten Gleichgewichtszustand. Daraus resultieren geringfügig veränderte Anfangswerte für pH-, pE-Wert sowie die Al-Gehalte. Für Chlorid (nichtreaktiv - Tracereigenschaften) wird in den Ergebnissen von PCGEOFIM eine schärfere

⁷¹Die Vergleichswerte von MINTRAN wurden aus den Darstellungen in WALTER et al. [1994] abgegriffen. Auf Grund der Ungenauigkeit dieser Darstellungen sind dies somit tendenzielle Näherungen und keine exakten Vergleichswerte.

Front im Vergleich zu den anderen Modellen ersichtlich (geringere numerische Dispersion), allerdings ist diese durch eine Schwingung gekennzeichnet.

Die Ergebnisse von PCGEOFIM und PHREEQC 2 zeigen bezüglich der pH- und pE-Werte eine sehr gute Übereinstimmung.⁷² Insgesamt wird das Hauptphänomen des Versuches, der Verbrauch der karbonatischen Pufferpotentiale, gut durch PCGEOFIM nachvollzogen. Im Bereich zwischen 20 und 25 % der Fließstrecke befindet sich bei $t=6d$ die Calcit-Auflösungsfront. Diese ist gekennzeichnet durch sinkende pH-Werte von $> 6,5$ auf $< 5,5$, verbunden mit der deutlichen Erhöhung der Fe-, Al-, Ca- und DIC-Gehalte. Weiterhin kommt es zur Siderit- und Gipsbildung. Eine zweite reaktive Front liegt zwischen 5 und 10 % der Fließstrecke. Hier kommt es zum Verbrauch des Sideritpuffersystems. Die pH-Werte fallen auf ca. 4,5, was mit einer weiteren Erhöhung der Al-Gehalte und einer Gipsbildung verbunden ist. Unterschiede zwischen den Ergebnissen der einzelnen Modelle werden, im Bereich der ersten reaktiven Front, bei den DIC-Gehalten und den Gips-Feststoffkonzentrationen deutlich. Hier werden von PCGEOFIM etwas zu hohe Gehalte ausgewiesen. Dieses Phänomen ist für die Berechnungszeitpunkte $t = 12d$ und $t = 24d$ verstärkt ausgeprägt (siehe Anl. 8.3.1).

8.4 Benchmark-Beispiel 3 – Abstrom-Säulenversuch von AMD-Wässern

8.4.1 Problemstellung

Die in BRAND [1996] zur Verifizierung des reaktiven Transportmodells MULTRA genutzten Säulenversuche von KRÄMER [1992] werden im Folgenden betrachtet. Es handelt sich dabei um den Abstrom stark mineralisierter, saurer Braunkohlenkippenwässer in einen karbonatgepufferten Aquifer des Rheinischen Reviers. In den Versuchen wurde erbohrtes Aquifermaterial mit synthetischem Kippenwasser durchströmt. Vergleichbar zu Benchmarkbeispiel 2 kommt es zum Verbrauch des Karbonatpuffersystems, verbunden mit dem Absinken des pH-Wertes und der Erhöhung der Gehalte am Auslauf der Säule. Der Karbonatpuffer ist durch die Mineralphase Kalziumsiderit ($Fe_{0,9}Ca_{0,1}CO_3$) vertreten. Zu Vergleichsrechnungen wird der Versuch „Säule 3“ ausgewählt.

8.4.2 Modellgrundlagen

Die Angaben zu geometrischen und hydraulischen Größen des Säulenversuches sind aus BRAND [1996] bzw. BRAND & KÖNIG [1994] entnommen. Die 93 cm lange Säule wird in 62 Zellen diskretisiert. Die Zellen haben eine Grundfläche von $12 * 12$ cm. Die zugehörige effektive Porosität ist $n_{eff} = 0,4$. Die Infiltrationsmenge⁷³ am unteren Rand der Säule beträgt $1,213 * 10^{-8}$ m³/s. Die Dispersivität wird mit $\delta = 1$ mm angegeben. Die Anfangs- und Infiltratkonzentrationen des Beispiels sind in Tab. 8.4.1 aufgeführt. Zu beachten ist, dass keine Angaben zu den Redoxverhältnissen des Beispiels vorhanden sind. Es wird ein pE-Wert = 4 festgelegt, der die Spezierung des Eisengehaltes bestimmt⁷⁴. Als reaktive Mineralphasen

⁷² Die geringfügigen Abweichungen von den MINTRAN-Ergebnissen sind durch die unterschiedlichen Anfangskonzentrationen zu erklären.

⁷³ Auf Grund der Beschränkung in PCGEOFIM bezüglich der Zellweiten (minimal 2cm) erfolgt ein Abgleich zwischen Säulenlänge und Infiltrationsmenge, so dass die gleiche Abstandsgeschwindigkeit wie in BRAND [1996] abgebildet wird.

⁷⁴ Der Redoxzustand des Systems wird über die Fe(II)/ Fe(III) – Verhältnisse charakterisiert.

Tab. 8.4.1 Benchmark 3 – Anfangs- und Infiltratkonzentrationen

Gelöste Komponente	C _{Anfang} [mg/l]	C _{Anfang} - Glgw. [mmol/l]	C _{Infiltrat} [mg/l]	Feststoffphasen	C _{Anfang} [mmol/l]
Ca	130	3,51	355	Kalziumsiderit	15
Fe (II)	9	0,097	2600	Fe(OH) ₃ (a)	0
DIC	400	9,297	1700	Gips	0
SO ₄ ²⁻	200	2,084	4200	KAK	95 [meq/l]
pH	6	6,1	4,5		
pE		4,3			

werden neben dem vorhandenen Kalziumsiderit auch Gips und Fe(OH)_{3(a)} (vgl. BRAND & KÖNIG [1994]) betrachtet. Der Kationenaustauscher ist im Anfangsstadium nahezu gänzlich mit Kalzium belegt. Zur Berechnung werden die thermodynamischen Konstanten der Datenbasis „phreeqc.dat“ (PARKHURST & APPELO [1999]) verwendet. Die intensive Bearbeitung des Beispiels (HOTH in TUBAF [2000]) führt zur Feststellung, dass für die Mineralphase Gips ein Sättigungsindex von ca. 0,2 zur Erklärung der Messwerte zu berücksichtigen ist. Dies begründet sich dadurch, dass erst eine deutliche Übersättigung der Lösung vorhanden sein muss, bevor es zur spontanen Mineralbildung kommt. Im Gegensatz dazu reichen schon geringe Übersättigungen aus, um ein Weiterwachsen vorhandener Phasen zu bewirken (APPELO & POSTMA [1996]- S. 72).

8.4.3 Modellergebnisse

Abb. 8.4.1 zeigt die Modellergebnisse im Vergleich zu den Messwerten aus BRAND [1996] auf. Der Durchbruch des Kippenwassers erfolgt nach ca. 130 h. Das Modell bildet gut das allmähliche Absinken des pH-Wertes von 6 auf ca. 4,7 ab. Die Austauscherpufferung hat zur Folge, dass es zuerst eine Erhöhung der Kalziumgehalte eintritt, bevor die Eisengehalte am Säulenauslauf ansteigen. Dieser Effekt wird durch das Modell ebenfalls gut widerspiegelt. Für die modellierten Sulfatgehalte besteht für den Zeitraum zwischen 170 – 250 h ein einheitliches Konzentrationsniveau. Dieses liegt, trotz des angesetzten SI = 0,2 für Gips, unterhalb der Messwerte. Im Gegensatz dazu werden ab dem Zeitpunkt 270 h etwas zu hohe Sulfatkonzentrationen berechnet. Hier sind die in Kap. 8.4.2 gemachten Aussagen zum Mineralbildungsprozess weiter zu untersetzen. Die Berücksichtigung eines SI = 0,3 für Gips erklärt zwar für den Zeitraum 170 – 250 h das Niveau von ca. 2500 mg/l, führt allerdings zu noch höheren Konzentrationen ab 270 h. Eine Berücksichtigung unterschiedlicher Sättigungsindizes, in Abhängigkeit vom Vorhandensein der Mineralphase, ist zum jetzigen Zeitpunkt in PCGEOFIM nicht möglich. Auf Grund des festgelegten SI_{Gips} = 0,2 zeigt sich für die Kalziumgehalte ebenfalls zum Versuchsende ein etwas zu hohes Austragsniveau. In Bezug auf die angesprochenen Schwierigkeiten sind jedoch auch eventuelle Heterogenitäten im Anfangszustand der Säule zu diskutieren. Generell werden die Versuchsphänomene durch das Modell gut nachvollzogen.

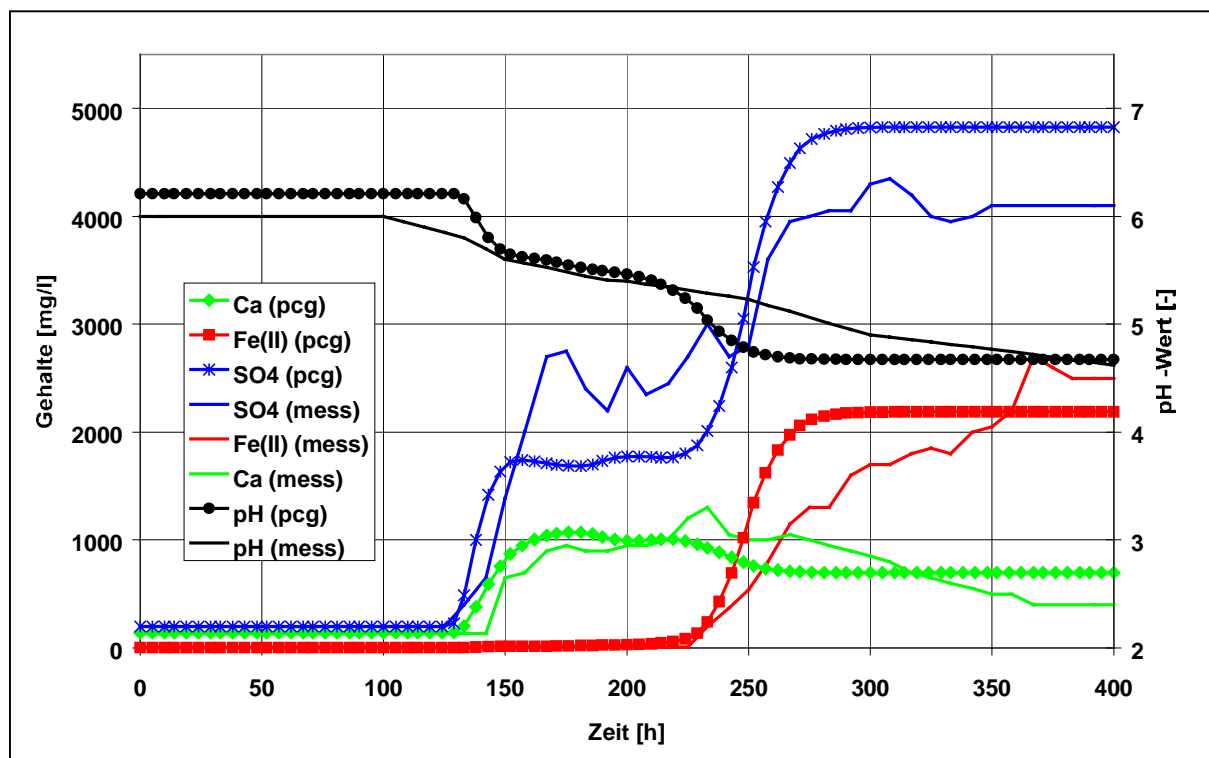


Abb. 8.4.1 Benchmark-Bsp.3 - Vergleich wesentlicher Modellergebnisse von PCGEOFIM (pcg) mit den Messwerten (mess) des Säulenversuchs 3 (aus BRAND [1996])

8.5 Säulenversuch zur Elution von Kippenwässern

8.5.1 Problemstellung

In Kap. 6.2.3 wurden Elutionsversuche für verwittertes Material der Absetzerkippe Espenhain aufgezeigt. Es erfolgt jetzt die Modellierung des Versuches „SVE 2“ mittels PCGEOFIM.

Der Versuch „SVE 2“ stellt eine Durchströmung des ASK-Materials mit synthetischem Regenwasser dar. Ziel des Versuches war es, Mobilisierbarkeit und Austrag der Verwitterungsprodukte zu charakterisieren (vgl. Kap. 6.2.3).

8.5.2 Modellgrundlagen

Die 20 cm lange Säule hat einen Innendurchmesser von 6,5 cm und wurde in 10 Zellen diskretisiert. Aus Tracerversuchen wurden $n_{\text{eff}} = 0,24$ und $\delta = 2$ cm abgeleitet. Die Gesamtporosität ergab sich zu $n = 0,47$. Die Infiltrationsmenge am unteren Säulenende schwankte auf Grund der Pumpensteuerung. Sie wird als RB 2. Art durch die in Tab. 8.5.1 aufgezeigte Stufenfunktion betrachtet⁷⁵. Die Beschaffenheit des Infiltrates wurde bereits in Kap. 6.2.3 beschrieben und geht aus Tab. 6.2.3 hervor. Der Anfangszustand des verwitterten Materials ist durch die in Tab. 8.5.2 aufgeführten Daten charakterisiert. Die Porenwasserbeschaffenheit wurde mittels BS-Extraktionen gekennzeichnet (vgl. Kap. 6.1.2).

⁷⁵ Nähere Erläuterungen zur Festlegung der hydraulischen Größen siehe HOTH in TUBAF [2000].

Tab. 8.5.1 Elutionsversuch „SVE 2“ – Stufenfunktion der RB 2. Art am Säuleneinlauf

Zeit [min]	Infiltrationsrate [ml/h]
0 -350	8,7
350 - 1950	3,8
1950 - 7300	4,7
7300 - 10000	7,7

Tab. 8.5.2 Elutionsversuch „SVE 2“ – Anfangsbedingungen

Bereich	pE [-]	pH [-]	Ca [mg/l]	Fe(2) [mg/l]	Fe(3) [mg/l]	TIC -HCO3 [mg/l]
1 (13-20 cm)	7.9	4.1	727.3	15.6	1.4	101.0
2 (6,5-13 cm)	8.3	3.8	607.0	24.2	1.9	213.0
3 (0,0-6,5 cm)	11.5	2.4	581.8	6.7	15.3	101.0
Bereich	SO4 [mg/l]	K [mg/l]	Al [mg/l]	Si [mg/l]	CaX2 [mmol/l]	FeX2 [mmol/l]
1 (13-20 cm)	1956.1	10.0	5.6	27.9	0.090	0.022
2 (6,5-13 cm)	2006.5	10.0	20.3	47.2	0.111	0.075
3 (0,0-6,5 cm)	1805.4	10.0	18.2	27.9	0.255	0.117
Bereich	Fe(OH) _{3(a)} [mmol/l]	Gips [mmol/l]	K-Glimmer [mmol/l]	Jarosit K [mmol/l]	Alunit [mmol/l]	Kaolinit [mmol/l]
1 (13-20 cm)	5	100	5	5	5	100
2 (6,5-13 cm)	5	100	5	5	5	100
3 (0,0-6,5 cm)	0	100	5	0	5	100

An Hand der Voruntersuchungen ergab sich, dass für die Betrachtung von Gleichgewichten zu Modellmineralphasen eine Anpassung der Sättigungsindizes notwendig ist. Diese Abweichungen von den Gleichgewichtskonstanten lassen sich mit der Diskrepanz zwischen tatsächlich vorhandenen Mineralphasen und den verwendeten Modellmineralphasen erklären⁷⁶. Es kamen folgende veränderte SI zum Ansatz: Gips= 0,05 ; Fe(OH)_{3(a)} = 0,2 ; Kaolinit = 1; Kalium-Jarosit = 3; Alunit = 1,5. Die zur Auflösung zur Verfügung stehenden Stoffmengen der einzelnen reaktiven Mineralphasen wurden nicht messtechnisch bestimmt und mussten deshalb festgelegt werden⁷⁷. Die Charakterisierung der Austauschkapazität und deren Belegung erfolgte mittels Lanthannitratextraktion nach ABEL [1998]. Aus der gemessenen Belegung wurden weiterhin die zur Modellierung notwendigen Austausch-koeffizienten abgeleitet.

8.5.3 Modellergebnisse

Abb. 8.5.1 zeigt für die wesentlichen chemischen Parameter die Berechnungsergebnisse der Modellvariante 1 am Säulenauslauf im Vergleich zu den Messwerten⁷⁸ auf.

⁷⁶Die tatsächlich vorhandenen reaktiven Mineralphasen entsprechen eher dem Konzept von „Solid Solutions“ (siehe PARKHURST & APPELO [1999]).

⁷⁷Zu den Schwierigkeiten bei der quantitativen Kennzeichnung der reaktiven Mineralphasen siehe Kap. 10.3.3 und HOTH ET AL. [2002]

⁷⁸Für die Eisengehalte in Abb. 8.5.1 und 8.5.2 ist die Skala zu beachten (Fe/ 10), ein Zahlenwert von 6 $\hat{=}$ 60 mg/l.

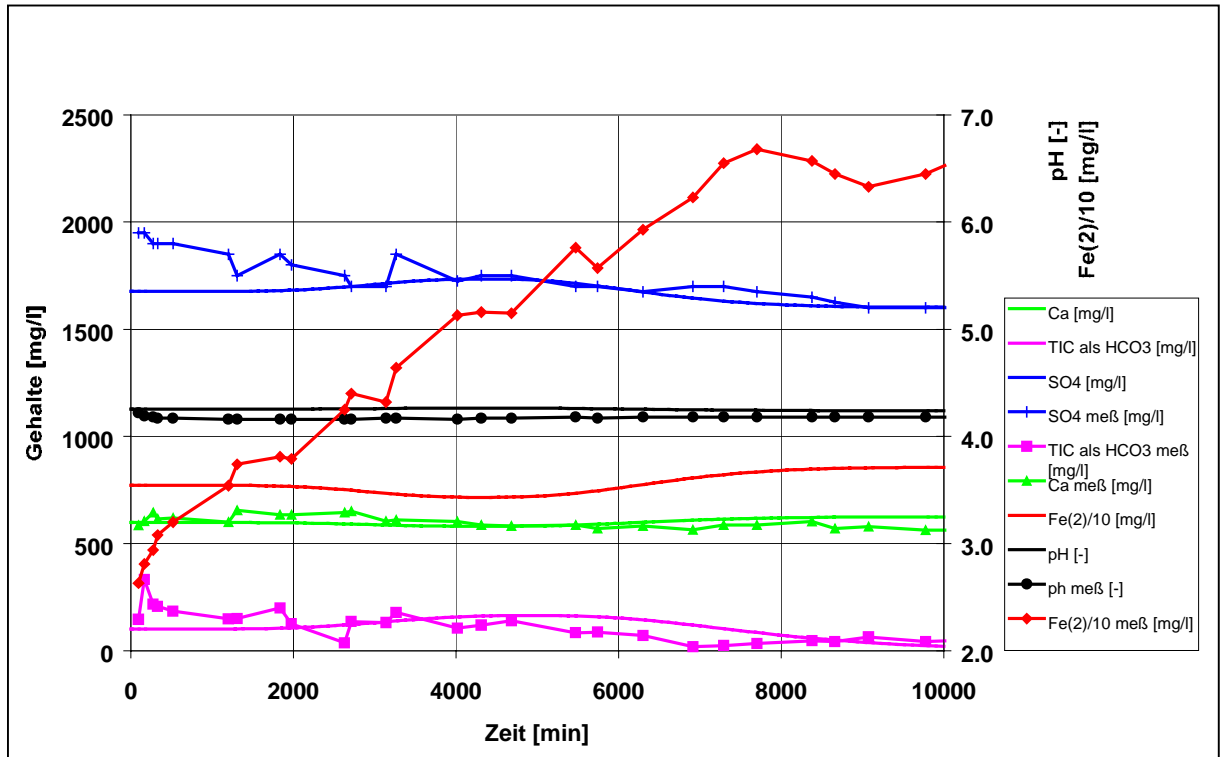


Abb. 8.5.1 Elutionsversuch „SVE 2“ Modellvariante 1– Vergleich wesentlicher Modell-
ergebnisse von PCGEOFIM mit den Messwerten (meß)

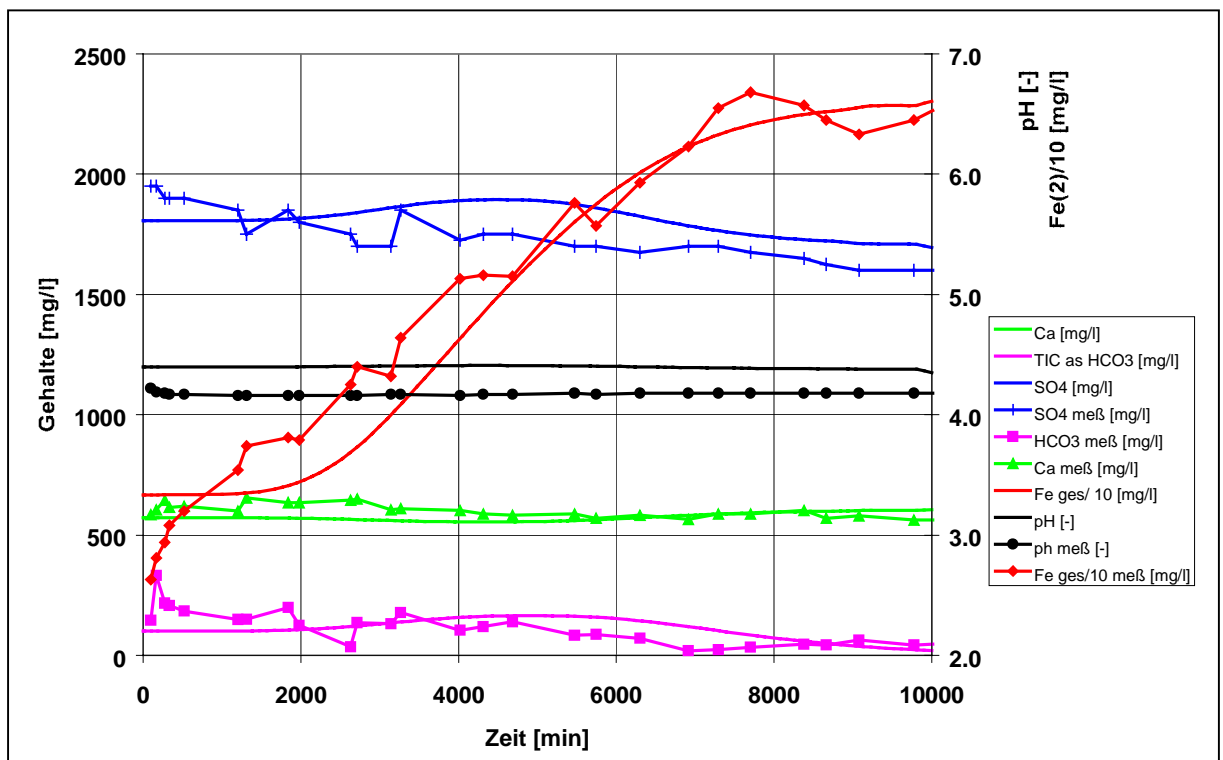


Abb. 8.5.2 Elutionsversuch „SVE 2“ Modellvariante 2– Vergleich wesentlicher Modell-
ergebnisse von PCGEOFIM mit den Messwerten (meß)

Die sich nur geringfügig ändernden Konzentrationsverläufe am Säulenauslauf (Ca-, SO₄, TIC-Gehalt, pH-Wert) werden gut durch das Modell abgebildet. Im Gegensatz dazu wird der Anstieg der Fe_{ges}-Konzentrationen, die nahezu vollständig als Fe²⁺ vorliegen, nicht wiedergegeben. Als Erklärung für die Eisen-Austräge sind 3 Begründungen denkbar:

- Die weitere Verwitterung von Sulfiden in Folge der Infiltratzugabe.
- Das Vorhandensein einer nicht berücksichtigten Eisenphase, die aufgelöst wird. Es liegt nahe, von einer Mischmineralphase mit hohem Fe(II)-Sulfat-Anteil auszugehen.
- Die nicht exakte Abbildung der Kationenaustauschprozesse.

Ausgehend von den Ergebnissen der Schwefelspeziesanalytik am Feststoff, vor und nach dem Versuch, ist die weitere Umsetzung von Sulfiden in Folge der Infiltratzugabe unwahrscheinlich. In einer 2. Berechnungsvariante wurde demgegenüber ein Anfangsgehalt = 10 mmol/l Melanterit im Bereich 2 berücksichtigt. Abgeleitet aus den Porenwasseruntersuchungen wurde der SI für diese Modellmineralphase auf –3,2 festgelegt. Weiterhin wurden bei dieser Berechnungsvariante die Austauscherbelegung und die Austauschkoeffizienten nicht aus der Lanthannitratextraktion abgeleitet. Die Belegung wurde als im Gleichgewicht zur Anfangslösung stehend betrachtet, wobei die Austauschkoeffizienten der thermodynamischen Datenbasis „phreeqc.dat“ angesetzt wurden. Die Ergebnisse dieser Berechnungsvariante 2 zeigt Abb. 8.5.2 auf. Mit den Veränderungen im Modell ist der Anstieg der Eisengehalte am Säulenauslauf gut erklärbar. Die Veränderungen der Ca-, SO₄-Gehalte und pH-Werte im Vergleich zur Berechnungsvariante 1 sind nur geringfügig.

8.6 Zusammenfassende Diskussion

Die PCGEOFIM-Version mit herkömmlicher Transportmodellierung (Isothermenansatz) wurde mittels analytischer Lösungen in SAMES & BOY [1997] verifiziert. Für die Verifizierung des reaktiven Stofftransportansatzes stehen demgegenüber keine analytischen Lösungen zur Verfügung. Dies muss deshalb an Benchmark-Beispielen erfolgen. Es ergibt sich, dass mit PCGEOFIM die thermodynamisch begründete Modellierung von homogenen Wechselwirkungen in der wässrigen Phase (Redoxreaktionen, Komplexbildung) als auch von heterogenen Wechselwirkungen (Kationenaustausch und Mineralphasengleichgewichten) plausible Ergebnisse liefert (siehe auch GLÖCKNER [2001]). Die Ergebnisse der Modellierungen offenbaren allerdings auch Schwingungen, die wahrscheinlich auf die sequentielle Kopplung von Transport und hydrogeochemischen Wechselwirkungen zurückzuführen sind. Diese Phänomene bedürfen einer weiteren Untersuchung. Die wesentlichen Merkmale der Benchmark-Beispiele werden jedoch gut abgebildet. Für zwei reaktive Säulenversuche wurde die Möglichkeit des Nachvollzugs der Messergebnisse mit dem Programm PCGEOFIM aufgezeigt. Es bedarf für solche Beispiele zum Teil einer Anpassung der Mineralphasen-Sättigungsindizes. Dies begründet sich vor allem durch die Betrachtung von Modellmineralphasen, während tatsächlich zumeist Mischmineralphasen vorliegen. Weiterhin ist auf die meßtechnischen Schwierigkeiten bei der Erfassung des Anfangszustandes bezüglich reaktiver Mineralphasen und der Kationenaustauscherbelegung hinzuweisen (vgl. Kap. 10.3).

9 Reaktive Stofftransportmodellierung – Beispiel Espenhain

Mit dem in Kap. 8 verifizierten reaktiven Stofftransportprogramm PCGEOFIM erfolgt für die Kippe Espenhain eine regionale 3D-Modellierung (siehe HOTH in TU BAF [2000])⁷⁹. Ziel ist es, die zeitliche Entwicklung der Massenströme zu den entstehenden Restseen „Markleeberg“ und „Störmthal“ sowie zu den Fließgewässern „Pleiß“ und „Gösel“ zu charakterisieren. Weiterhin soll die langzeitige Beeinflussung der gewachsenen GWL im „Restpfeiler“ zwischen den Tagebauen Espenhain und Zwenkau/ Cospuden aufgezeigt werden.

9.1 Modellgrundlagen

Im Folgenden werden die Grundlagen des verwendeten Strömungsmodells und des auf diesem basierenden reaktiven Transportmodells kurz dargestellt. Weitergehende Erläuterungen finden sich bei HOTH in TUBAF [2000] bzw. IBGW [2000].

9.1.1 Strömungsmodell

Das verwendete Strömungsmodell stellt eine Ausgliederung der Lupe „Kesse“ aus dem hydrogeologischen Großraummodell „Leipzig Süd“ (IBGW [1999]) dar. Die Rasterlänge beträgt 250 m. Als wesentliche Randbedingungen sind die entstehenden Restseen „Markleeberg“ (Norden) und „Störmthal“ (Osten) zu benennen. Sie werden im Modell als „Seerandbedingungen“⁸⁰ abgebildet. Im Süden befindet sich eine Wasserscheide (RB 2. Art, $Q=0$) zum ehemaligen Tagebaugebiet Witznitz (IBGW [2000]). Die westliche Modellberandung stellt die Kippe Zwenkau dar. Für diese, sowie für alle nicht näher benannten Ränder, wird ebenfalls ein geschlossener Rand (RB 2. Art, $Q=0$) angesetzt. Als innere Modellrandbedingungen werden die beiden Flüsse „Pleiß“ und „Gösel“ als RB 3. Art berücksichtigt. Dabei wird für die Pleiß im Verlauf auf dem sowie für die Gösel im Bereich der Kippe von einer funktionierenden künstlichen Abdichtung ausgegangen⁸¹.

Das 3D-Strömungsmodell besitzt 4 Schichten. Für die Kippenbereiche des Modells verkörpern die Schichten 1 und 2 die AS-Kippe, während die Schichten 3 und 4 die AFB-Kippe abbilden. Dabei beinhalten die Schichten 1 und 3 anteilig die jeweiligen Verwitterungszonen. Im Gewachsenen werden die quartären GWL in Schicht 1 zusammengefasst, während die tertiären GWL die Schichten 2 bis 4 umfassen. Die Bereiche der gewachsenen GWL nördlich und östlich der oben benannten Restseen sind nicht Modellbestandteil⁸². Es wurde die Parameterbelegung des kalibrierten Strömungsmodells von BOY in TUBAF [2000] benutzt. Diese Kalibrierung beruht auf den Messreihen der Standrohrspiegelhöhen einer Vielzahl von Kippenmessstellen für den Zeitraum 1989-1998. Bei dieser Kalibrierung erfolgte allerdings keine Untersuchung des hydraulischen Zustands der Kippe bezüglich der Ergebnisse von Kap. 4. Es bedarf weiterer Untersuchungen, ob der Umverteilungsprozess der

⁷⁹Die Bearbeitung wurde gemeinsam mit Herrn Dr. Sames durchgeführt (siehe auch IBGW [2000]).

⁸⁰Darunter ist eine komplexe Randbedingung 3. Art zu verstehen, wobei diese durch die Stufenfunktion der Füllstandshöhe charakterisiert ist (siehe SAMES & BOY [1997]).

⁸¹Der Grad der Funktionstüchtigkeit der Abdichtungen ist ein nicht geklärter Diskussionsgegenstand. Auch die von BOY in TUBAF [2000] durchgeführte Strömungsmodellkalibrierung konnte diese Frage nicht exakt beantworten. Weiterhin wurde die Fragestellung einer zukünftigen Aufwältigung der Pleißabdichtung durch technische Maßnahmen nicht betrachtet.

⁸²Die Modellberandung ist als schwarze Stufenlinie in Abb. 9.2.1 bis 9.2.3 ersichtlich.

Kippenwässer auch im jüngeren Nordteil der Kippe abgeschlossen ist. Die regionale Modellierung dieser Fragestellung mit dem Programm MULTIF (siehe Kap. 4) kann derzeit nur mit immensem Rechenzeitbedarf erfolgen. Es wird vereinfachend vom Abschluss des Umverteilungsprozesses der Kippenwässer ausgegangen. Damit ist die Möglichkeit der Strömungsmodellkalibrierung mittels gesättigter Einphasenströmung an Hand der Messreihen der Standrohrspiegelhöhen gegeben. Die Kalibrierung des Strömungsmodells bestätigte für den Kippenbereich die grundlegenden Verhältnisse der an Hand der KAUBISCH-Methode (vgl. Kap. 5.3.4) berechneten k_f -Werte. Die instationäre Strömungsmodellierung umfasst den Zeitraum 1998 bis 2100.

9.1.2 Transportmodell

Im Transportmodell werden 8 transportierte Spezies (Ca, Fe^{2+} , Fe^{3+} , SO_4 , DIC, K, Al und Si) betrachtet. Die Berechnung der Redoxverhältnisse erfolgt über das $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ -Redoxpaar. Als reaktive Mineralphasen werden Calcit, Siderit, $\text{Fe}(\text{OH})_{3(a)}$, Alunit ($\text{KAl}_3(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_6$) und Gips sowie die Silikatphasen Kaolinit, K-Glimmer und $\text{SiO}_{2(a)}$ berücksichtigt⁸³. Im Modell wird ein Kationenaustausch bezüglich CaX_2 , FeX_2 , KX und AlX_3 betrachtet. Für die Modellierung werden die thermodynamischen Konstanten und Kationenaustauschkoeffizienten der Datenbank „phreeqc.dat“ (PARKHURST & APPELO [1998]) benutzt.

Die Anfangsbeschaffenheiten für den Bereich der Kippengrundwasserleiter resultieren aus der in Kap. 6.6 aufgezeigten Vorgehensweise. Für die flächenhafte Berechnung der Anfangsbeschaffenheiten der ASK erfolgen dazu weitere Annahmen (siehe HOTH in TUBAF [2000]). Die Anfangsbeschaffenheiten der gewachsenen GWL werden aus der Grundwassergütedatenbank des LfUG Sachsen abgeleitet. Eine flächendifferenzierte Betrachtung der einzelnen GWL erfolgt nicht, da für den „Restpfeiler“ keine Gütemessdaten vorhanden sind. Es werden mittlere Beschaffenheiten für die einzelnen GWL berücksichtigt. Der Anfangszustand wird für die einzelnen GWL mit PHREEQC-Berechnungen durch Gleichgewichtseinstellung zu den aus der Vorfeldanalyse bilanzierten Calcitgehalten und Kationenaustauschkapazitäten charakterisiert. Tab. 9.1.1 zeigt die daraus resultierenden wesentlichen Werte auf. Sowohl die quartären, als auch die tertiären GWL besitzen mittlere pH-Werte zwischen 7,3 und 7,5. Die Fe_{ges} -Gehalte liegen bei $< 1 \text{ mg/l}$, verbunden mit SO_4 -Gehalten um 200 mg/l . Es ist von einer nahezu gänzlichen Belegung des Kationenaustauschers durch Erdalkalien/ Alkalien auszugehen. Im Modell wird eine vollständige Kalziumbelegung berücksichtigt. Die Beschaffenheiten der Flussrandbedingungen (Pleißer und Gösel) resultieren aus Messdaten des StUFA Leipzig. Die gewählten mittleren Werte sind ebenfalls in Tab. 9.1.1 dargestellt. Für die Gösel werden deutliche gelöste Eisengehalte⁸⁴ dokumentiert. Die angesetzten mittleren Sulfatgehalte der beiden Flüsse liegen zwischen $400 - 600 \text{ mg/l}$. Die Vorgehensweise zur Berechnung der Beschaffenheit der GWN in PCGEOFIM ist in IBGW [2000] eingehend erläutert. Die zutretende GWN befindet sich im Gleichgewicht zu den eventuell darüber liegenden Zellen. Die bei Generierung dieses Wassers ablaufenden Wechselwirkungen mit den betrachteten Festphasen und dem Kationenaustauscher werden bilanziert.

⁸³Zur Notwendigkeit, aber auch zu den damit verbundenen Schwierigkeiten bei der Berücksichtigung von Silikatphasen an Hand von Gleichgewichtsbetrachtungen, siehe Kap. 6.6.1 .

⁸⁴Es liegen keine Angabe zu Redoxpotentialen der Proben vor.

Tab. 9.1.1 Reaktives 3D-Transportmodell Espenhain - Anfangsbeschaffenheiten (wesentliche Parameter) der gewachsenen GWL und der Flussrandbedingungen

	pH	pE	Ca	Fe ges	DIC als HCO ₃	SO ₄ ²⁻	m_CaX ₂	m_FeX ₂	Calcit
	[-]	[-]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mol/l PW]	[mol/l PW]	[mol/l PW]
GWL 1	7.60	2.87	132.3	0.1	145.4	228.7	0.098	<0.001	0.399
GWL 2.1 - 2.5	7.38	1.24	126.0	0.8	199.1	168.1	0.298	0.001	1.189
GWL 2.6 - 2.7	7.49	0.94	116.5	0.8	162.2	169.7	0.397	0.001	0.070
GWL 3	7.60	0.91	118.0	0.8	158.2	177.8	0.495	0.001	0.027
Pleiß	7.3		215.0	1.7	152.6	399.7			
Gösel	6.7		300.0	40.0	275.0	619.6			

9.2 Modellergebnisse

Es werden die wesentlichen Ergebnisse der Modellierungen dargestellt. Weitergehende Erläuterungen finden sich bei HOTH in TUBAF [2000] bzw. IBGW [2000].

9.2.1 Strömungsmodell

Die prognostizierten Strömungsverhältnisse für den Modellbereich werden aus den Hydroisohypsenplänen in Abb. 9.2.1 bis 9.2.3 ersichtlich. Zum Zeitpunkt 2010 (Abb. 9.2.1) besitzt der RS Markkleeberg bereits seinen Endwasserspiegel von 113 m ü NN. Der RS Störmthal liegt mit ca. 110 m ü NN noch unter dem angestrebten Endspiegel von 117 m ü NN und erreicht diesen erst 2012. Auf der Kippe wird ein Depressionstrichter in Höhe der Deponie Gröbern deutlich. Die Strömung ist sowohl von den Restseen, als auch aus dem Westteil der Kippe auf diesen Depressionstrichter gerichtet. Der südliche Teil des RS Störmthal wird hingegen kippenseitig angeströmt. Ab ca. 2040 liegen quasi-stationäre Strömungsverhältnisse für die Kippe vor. Abb. 9.2.2 zeigt die Verhältnisse für den Zeitpunkt 2050 auf. Es wird im Kippenbereich die Einstellung einer SE – NW verlaufenden Wasserscheide deutlich. Auf Grund der niedrigen k_f -Werte sind die Strömungsgeschwindigkeiten im Nordteil der Kippe sehr gering (vgl. Kap. 5.4.3). Auch im quasi-stationären Zustand ist die ausgeprägte kippenseitige Anströmung des Südteiles des Restsees Störmthal ersichtlich. Am Hydroisohypsenplan für den Zeitpunkt 2100 (Abb. 9.2.3) werden nur marginale Veränderungen gegenüber 2050 deutlich.

9.2.2 Transportmodell

In den Abb. 9.2.4 – 9.2.6 werden für die Modellschicht 4 die Ergebnisse bezüglich der wesentlichen Parameter pH-Wert, SO₄- und Fe_{ges}-Gehalt dargestellt. Modellschicht 4 repräsentiert dabei auf dem Gebiet der Kippe den Hauptkörper der AFB-Kippe.

Abb. 9.2.4 zeigt die pH-Wertverhältnisse für den Zeitpunkt 2002 und den Berechnungsendpunkt 2100 auf. Der Zustand im Jahr 2002 ist für den Kippenkörper Espenhain durch pH-Werte zwischen 5 und 7 geprägt, wobei der mehrfach erwähnte SE – NW-Trend der Anfangswerte ersichtlich wird. Bis zum Endzeitpunkt der Berechnung verändern sich die Werte in den gewachsenen GWL des Restpfeilers nur um 0,5 bis max. 0,8 pH-Einheiten. Eine wesentliche Veränderung der Verhältnisse innerhalb der Kippe erfolgt nicht. Für die Sulfatgehalts-Verteilungen (Abb. 9.2.5) ergeben sich die selben grundlegenden Verhältnisse.

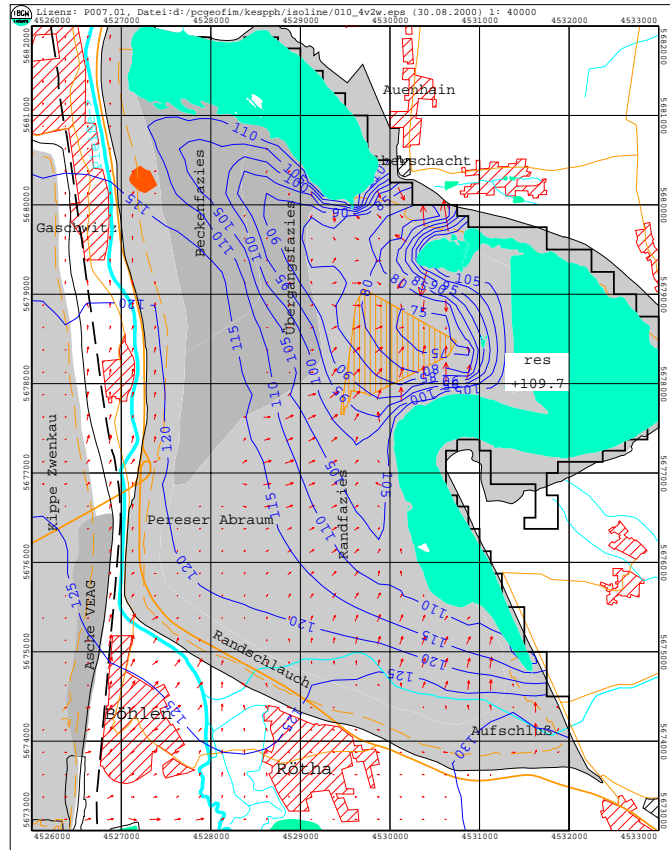


Abb. 9.2.1 Reaktives 3D-Transportmodell Espenhain – Hydroisohypsenplan Zeitpunkt 2010

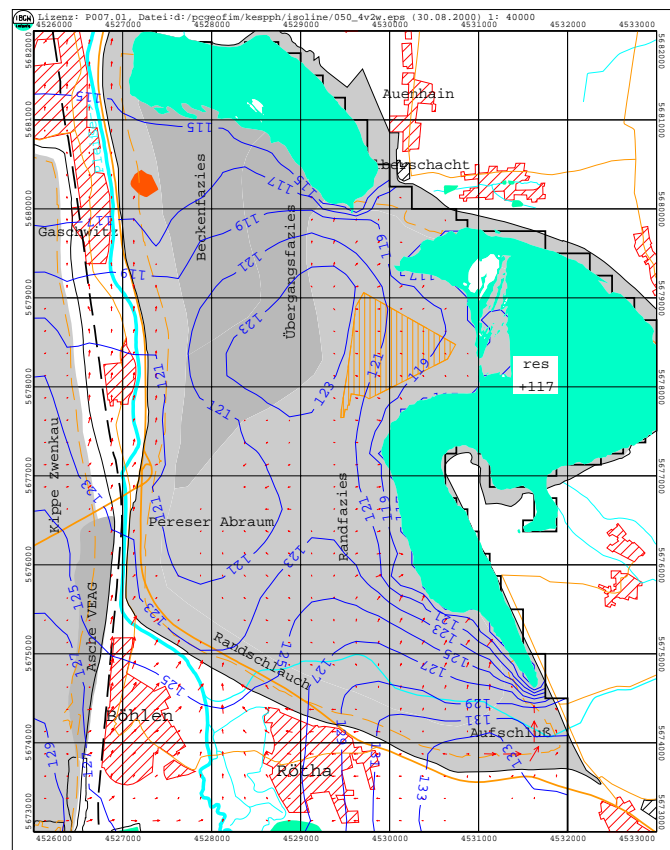


Abb. 9.2.2 Reaktives 3D-Transportmodell Espenhain – Hydroisohypsenplan Zeitpunkt 2050

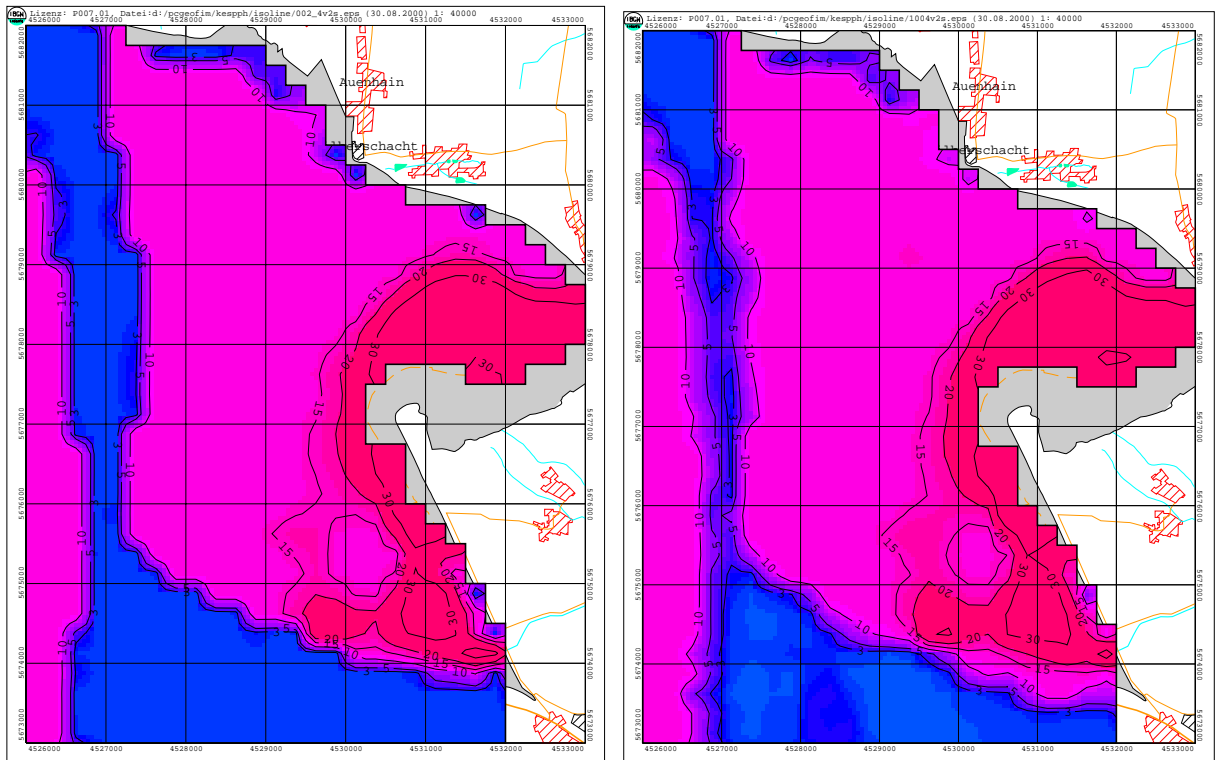


Abb. 9.2.5 Reaktives 3D-Transportmodell Espenhain – Sulfat-Gehalte (Schicht 4) für Zeitpunkt 2002 (links) und 2100 (rechts) [Isolinien: 3; 5; 10; 15; 20; 30 mmol/l]

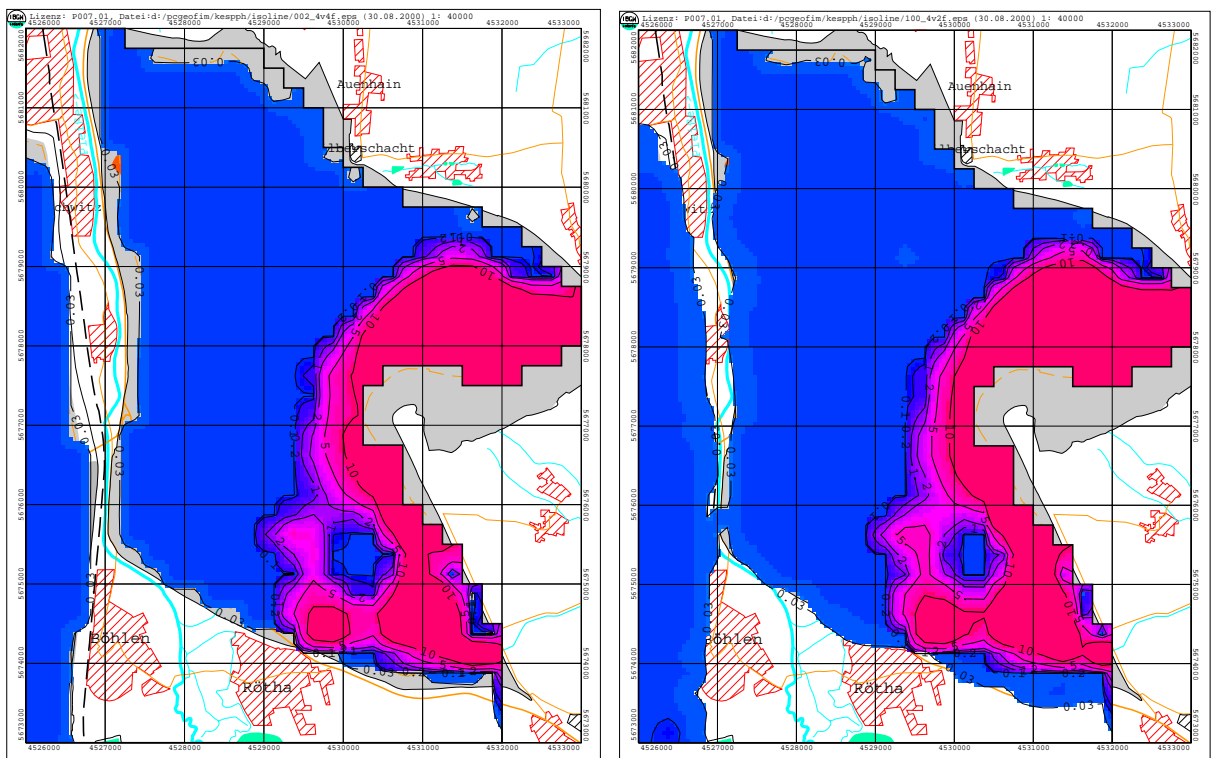


Abb. 9.2.6 Reaktives 3D-Transportmodell Espenhain – Fe_{ox} -Gehalte (Schicht 4) für Zeitpunkt 2002 (links) und 2100 (rechts) [Isolinien: 0,03; 0,1 ; 0,2; 1; 2; 5; 10 mmol/l]

Für den Zeitpunkt 2002 wird ebenfalls der SE – NW-Trend der Anfangswerte ersichtlich, mit Maximalwerten > 30 mmol/l. Die gewachsenen GWL besitzen das in Tab. 9.1.1 aufgezeigte Niveau von < 3 mmol/l. Bis zum Berechnungszeitpunkt 2100 kommt es zu keiner nennenswerten Veränderung des Gehaltsniveaus im Kippenkörper. Hingegen erhöhen sich in den gewachsenen GWL des Restpfeilers die Sulfatgehalte auf 5 –10 mmol/l (ca. 500 –1000 mg/l). Die kippenseitigen Zuströme zum RS Störmthal zeichnen sich durch ein Gehaltsniveau von 2000 – 3000 mg/l aus. In Abb. 9.2.6 sind die Fe_{ges} -Gehalte dargestellt. Dabei werden alle Werte $> 0,03$ mmol/l (ca. 1,7 mg/l) farblich hinterlegt. Für den Zeitpunkt 2100 erhöhen sich die Gehalte in den gewachsenen GWL nur geringfügig. Die Werte steigen auf Grund der Beschaffenheit der benachbarten Kippenbereiche maximal auf 0,05 mmol/l (ca. 2,8 mg/l) an. In einer 2. Berechnungsvariante wurde die Sensitivität hinsichtlich der Annahmen zu den wesentlichen hydrogeochemischen Puffersystemen geprüft. Die Herabsetzung der angesetzten Calcitgehalte und der Kationenaustauschkapazität in den gewachsenen GWL auf 10 % führte zu keinen nennenswerten Veränderungen in den prognostizierten Verteilungen (siehe HOTH in TUBAF [2000]).

Zusammenfassend ist von einer begrenzten Beeinflussung der Grundwasserbeschaffenheit des Restpfeilers auszugehen. Dies begründet sich zum einen durch das Strömungsregime des Modellgebietes. Bis zur Einstellung quasi-stationärer Verhältnisse liegt eine Durchströmung der Kippe von den gewachsenen GWL in Richtung Depressionstrichter bzw. Restseen vor. Erst danach kommt es, jedoch in geringem Umfang, zum Abstrom von Kippengrundwässern in den gewachsenen Restpfeiler. Dabei sind die auf Grund der k_f -Werte resultierenden, niedrigen Abstandsgeschwindigkeiten zu beachten. Zum anderen sind die gewachsenen GWL als gut gepuffert anzusehen (Calcitgehalt, Ca-belegte Kationenaustauscher⁸⁵). Die wesentlichste Beeinflussung stellt die Erhöhung der Sulfatgehalte dar.

Festzuhalten ist, dass das Modellgebiet nur in geringem Umfang der Fragestellung des Kippenabstroms ins gewachsene Gebirge entspricht. Auf Grund der prognostizierten hydraulischen Verhältnisse erfolgt im quasi-stationären Zustand der wesentliche Teil des Kippenabstroms in Richtung Restseen. Die Ergebnisse können deshalb nicht von vornherein auf andere Standorte im Mitteldeutschen Revier übertragen werden.

9.2.3 Stoffbilanzen für Oberflächengewässer

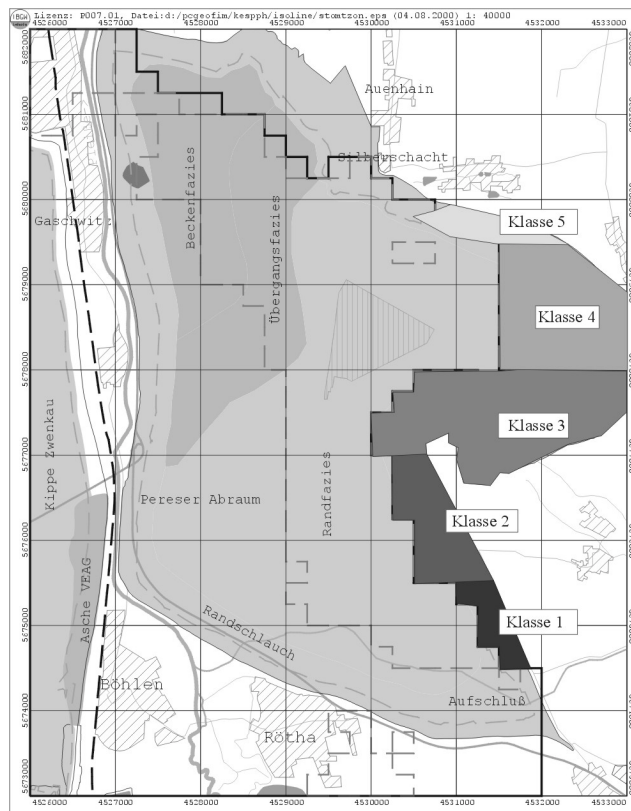
Es wurden Stofffrachtbilanzen bezüglich der Restseen „Markleeberg“ und „Störmthal“ und der Fließgewässer „Pleiße“ und „Gösel“ berechnet.

9.2.3.1 Ergebnisse Restseen

Die Einteilung der Bilanzklassen für die betrachteten Restseen geht aus Abb. 9.2.7 hervor. Für den RS Markleeberg wurde eine Teilung in geodätische Höhenscheiben vorgenommen. Für den durch eine größere N-S-Erstreckung gekennzeichneten RS Störmthal erfolgte eine Einteilung in Seebereiche. Die prognostizierten kippenseitigen Massenströme zu den Restseen sind für den RS Markleeberg in Anl. 9.2.1, für den RS Störmthal in Anl. 9.2.2 enthalten. Dabei werden die Bilanzen für die Zeitpunkte 2020, 2050 und 2100 dargestellt.

Abb. 9.2.7 Reaktives 3D-Transportmodell Espenhain - Bilanzklasseneinteilung für Restloch Markleeberg (Tabelle) und Restloch Störmthal (Bild)

Sohle in (m ü NN)	Bilanzklassen RS Markleeberg
<80	1
80 - 90	2
90-100	3
100 - 110	4
>110	5



Es sind die Volumenströme, die zugehörigen Konzentrationen sowie die resultierenden Massenströme für die einzelnen Bilanzklassen aufgeführt. Dies mündet in der Ausweisung von Gesamt-massenströmen zu den beiden betrachteten Restseen.

Für den RS Markleeberg zeigt sich ein, im Vergleich zum RS Störmthal, geringer Zulauf von Kippenwasser. Für 2020 wird die Exfiltration (Zulauf) und die Infiltration (Ablauf) des Restsees in gleicher Größenordnung, von ca. 200 l/ min prognostiziert. Im quasi-stationären Endzustand ergibt sich eine kippenseitige Exfiltration von 330 l/min, die Infiltration kann vernachlässigt werden. Der kippenseitige Zustrom ist durch neutrale pH-Werte zwischen 6,7 und 7,4 gekennzeichnet, verbunden mit 6 mmol/l SO_4^{2-} , 7 mmol/l Ca^{2+} und ca. 0,027 mmol/l Fe^{2+} . Die resultierenden Massenströme liegen in Summe bei ca. 2 mol/min SO_4^{2-} und ca. 10 mmol/min Fe^{2+} .

Für den RS Störmthal sind die südlichen Bilanzklassen 1 und 2 bereits zum Zeitpunkt 2020 durch Exfiltration geprägt. Für den quasi-stationären Zustand liegt die prognostizierte Restseeexfiltration bei ca. 3200 l/min, wobei fast 93 % den südlichen Bilanzklassen 1 und 2 zufließen. Die Infiltration ist mit prognostizierten 40 l/min vernachlässigbar. Der kippenseitige Zustrom ist für die wesentlichen Bilanzklassen 1 und 2 durch pH-Werte von 5,5 gekennzeichnet. Die Prognose zeigt für die aufgeführten Zeitstufen abnehmende mittlere Sulfat- (von 25 auf 19 mmol/l) und Eisen-Gehalte (von 13 auf 8 mmol/l) des Kippenzuflusses auf. Die resultierenden Massenströme besitzen ihr prognostiziertes Maximum mit 75 mol/min Sulfat und 37 mol/min Eisen. Die kippenseitigen Massenzuströme zum RS Störmthal sind im Vergleich zum RS Markleeberg für Sulfat bis zu 35-fach und bezüglich Eisen bis zu 370-fach höher! Somit ist von einer niedrigeren Gefährdung des RS Markleeberg im Vergleich zum RS Störmthal auszugehen.

Um die Güteentwicklung der Restseen zu bewerten, bedarf es unbedingt der Berücksichtigung weiterer Stoffströme. Dies sind der Grundwasserzutritt aus den gewachsenen GWL, die

⁸⁵Eventuelle Auswirkungen der langzeitigen GW-Absenkungen im Restpfeiler auf die Puffersysteme wurden nicht

Massenströme in Folge Wellen- und Winderosion und die Beschaffenheit von zugeführtem Fremd-/Oberflächenwasser (siehe z.B. ABEL ET AL. [1998], WERNER [1999], BREMSTAHLER & WERNER [1999], LEHMANN [2000]). Weiterhin spielt die Fragestellung der Etablierung von biologischen Prozessen im See eine wesentliche Rolle (siehe z.B. WENDT-POTTHOFF & NEU [1998], NIXDORF ET AL. [1998]).

In IBGW [2000] wird ein Vergleich der kippenseitigen Volumenströme zu den Restseen mit den Volumenströmen aus den östlich und nördlich der Restseen anstehenden GWL auf Basis des Großraummodells „Leipzig-Süd“ aufgezeigt. Danach beträgt der kippenseitige Anteil für beide Restseen jeweils nur maximal 14 %. Auf Basis des hier berechneten Modells „Kespe“ ergibt sich für den RS Störmthal⁸⁶ im quasi-stationären Zustand ein Anteil von ca. 25 %.

In den hier aufgeführten Modellierungen und Bilanzierungen sowie in den oben benannten Literaturquellen wird eine Fragestellung nicht berücksichtigt: Kommt es zur deutlichen Veränderung der Beschaffenheiten der zufließenden Kippen- und gewachsenen Grundwässern in Folge der Durchströmung der in Kap. 6.2.2 aufgezeigten „Restlochverwitterungszonen“? Diese Fragestellung soll in Kap. 9.3 näher untersucht werden.

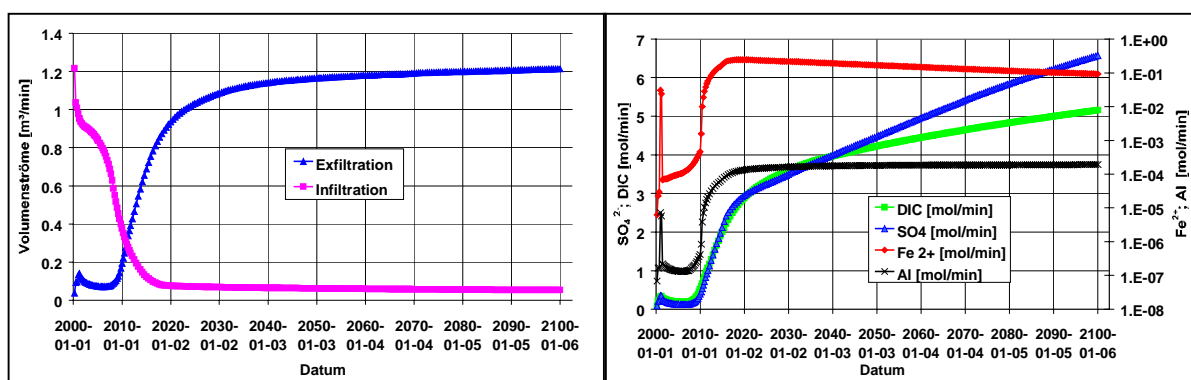


Abb. 9.2.8 Fließgewässer Pleiße – zeitlicher Verlauf der Exfiltration/ Infiltration (links) sowie exfiltrierende Stofffrachten (rechts)

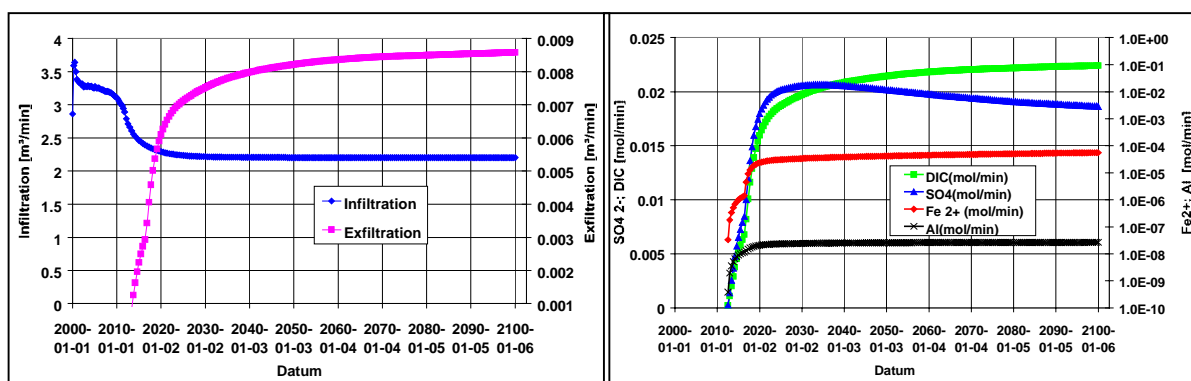


Abb. 9.2.9 Fließgewässer Gösel – zeitlicher Verlauf der Exfiltration/ Infiltration (links) sowie exfiltrierende Stofffrachten (rechts)

untersucht. und deshalb nicht berücksichtigt.

⁸⁶Grundlage des Vergleichs sind die in BREMSTAHLER & WERNER [1999] aufgeführten Werte der Gesamtvolumenströme aller GWL (Kippe und gewachsene GWL) des Großraummodells zum RS Störmthal.

9.2.3.2 Ergebnisse Fließgewässer

Die Bilanzen der Flüsse „Pleiße“ und „Gösel“ gehen aus den Abb. 9.2.8 und 9.2.9 hervor. Es werden der zeitliche Verlauf der Flusswasser-Infiltration/ Grundwasser-Exfiltration sowie die den Flüssen zugehenden exfiltrierenden Stofffrachten dargestellt. Für die Pleiße überwiegt ab ca. 2011 die Exfiltration gegenüber der Infiltration. Im quasi-stationären Zustand wird eine Exfiltration von ca. 1,2 m³/min prognostiziert. Es kommt zu einer kontinuierlichen Zunahme der exfiltrierenden Sulfatfracht. Zum Berechnungsendpunkt gehen im Modellgebiet ca. 6,5 mol/min Sulfat der Pleiße zu. Die exfiltrierenden Eisengehalte liegen bei ca. 0,1 mol/min. Der mittlere Durchfluss der Pleiße beträgt ca. 410 m³/min. Damit besitzt die Pleiße bei Erreichung des Untersuchungsgebietes eine Sulfatlast von ca. 1650 mol/min. Der Vergleich zeigt die Geringfügigkeit der im Modellgebiet exfiltrierenden Stofffracht auf. Zu beachten ist allerdings, dass das Modell von einer intakten künstlichen Dichtung der Pleiße ausgeht. Eine Auswirkung des Aufreißens dieser Dichtung wurde nicht untersucht. Die „Gösel“ wirkt nahezu über den gesamten Berechnungszeitraum nur infiltrierend. Dabei wird im quasi-stationären Zustand eine Infiltrationsrate von ca. 2,2 m³/min prognostiziert. Dies stellt einen deutlichen Anteil der Durchflussmenge dar. Es ist für die Gösel, abzüglich der Infiltration, von einem mittleren Durchfluss von 7-8 m³/min auszugehen. Im Vergleich dazu beträgt die prognostizierte quasi-stationäre Exfiltrationsrate von < 0,01 m³/min weniger als 0,13 %. Auf Grund dieses geringen Anteils sollen die abgebildeten exfiltrierenden Stofffrachten nicht näher diskutiert werden.

9.3 Durchströmung von Restlochverwitterungszonen

9.3.1 Modellansatz

In Kap. 6.2 wurden Verwitterungszonen für die Restlochböschungen aufgezeigt. Diese bilden sich bei langzeitiger Atmosphären-Exposition (Jahre - Jahrzehnte) sowohl an der Kippenseite als auch in den gewachsenen GWL aus. Mittels vereinfachter hydrogeochemischer Modellrechnungen soll, für stationäre hydraulische Verhältnisse, der Einfluss dieser Verwitterungszonen auf die den Restseen zugehenden Stofffrachten untersucht werden. Es wird mit PHREEQC ein 1D-Transportmodell betrachtet, welches sich an den Verhältnissen des GWL 2.6/2.7 orientiert. Das Modell (20 Zellen, $\Delta x = 0,5$ m) umfasst den Übergang vom unbeeinflussten gewachsenen Gebirge, über die Verwitterungszone hin zur Restseeböschung. Die Zellen 1-12 (bis $x = 6$ m) charakterisieren das nahezu unbeeinflusste Gebirge, während die Zellen 13-20 ($x = 6-10$ m) durch Verwitterung geprägt sind. In diesem Bereich wird eine sich erhöhende Verwitterungsumsetzung in Richtung Restseeböschung berücksichtigt. So werden für Zelle 13 die Verwitterungsprodukte aus der Umsetzung von 0,01 Ma% S_{di} ($\hat{=} 19$ mmol/l PW), für Zelle 20 schon aus 0,2 Ma% S_{di} ($\hat{=} 374$ mmol/l PW) dem „Ausgangswasser“ dieses GWL zu titriert.⁸⁷ Die unbeeinflusste Beschaffenheit der GWL 2.6/2.7 geht aus Tab. 9.1.1 hervor. Mit diesem Wasser wird das Modellgebiet durchströmt. Die Abstandsgeschwindigkeit wird mit $v_{ab}=10$ m/a und die Dispersivität mit $\delta = 5$ cm festgelegt. Sowohl bei der

Berechnung der Anfangsbedingungen, als auch bei der eigentlichen Simulation werden die gleichen Prozesse wie in Kap. 6.6 berücksichtigt. Die wesentlichen reaktiven Prozesse sind somit die Gleichgewichte zu den Phasen Calcit, Gips, Siderit, $\text{Fe}(\text{OH})_{3(a)}$, $\text{Al}(\text{OH})_{3(a)}$, den Silikatphasen Kalium-Glimmer (K-mica), Kaolinit⁸⁸ und $\text{SiO}_{2(a)}$ sowie der Kationenaustausch zwischen Ca^{2+} und Fe^{2+} . Weiterhin wird ein Gleichgewicht der Lösung zu einem CO_2 -Gaspartialdruck von 10 Vol% betrachtet. Eine Gleichgewichtseinstellung der anströmenden Grundwässer in Nähe der Restseeböschung zu einem O_2 -Gaspartialdruck erfolgt nicht.⁸⁹ Die gewählten Anfangsbedingungen fasst Anl. 9.3.1 zusammen.

9.3.2 Modellergebnisse und Diskussion

Die Konzentrationsverteilungen über das gesamte Modellgebiet sind für Modellvariante 1 für verschiedene Zeitpunkte in Anl. 9.3.2 dargestellt. Für den Anfangszustand wird deutlich, dass die bis 1,5 m von der Restseeböschung anstehenden Sedimente extreme Verwitterungserscheinungen aufweisen. Die gelösten Fe-Gehalte sind > 10 mmol/l, verbunden mit Sulfatgehalten von > 50 mmol/l. Es liegt weiterhin ein Sulfatstoffspeicher in Form von Gips vor. Der Kationenaustauscher ist zu großem Teil Fe^{2+} belegt. Die pH-Werte sind auf Grund des Silikatphasen-Puffers nicht unter ein Niveau von 4 bis 2,5 abgesunken. Abb. 9.3.1 zeigt für Modellvariante 1 die zeitliche Beschaffenheitsentwicklung des an der Restseeböschung austretenden Grundwassers⁹⁰. Für das gewählte Modell dauert es 14 Jahre, bis diese Beschaffenheit sich der in 10 m Entfernung dem Modellgebiet zuströmenden Grundwasserbeschaffenheit angleicht. In dieser Zeit wird der Porenraum des „Extremverwitterungsbereiches“ (bis 1,5 m Teufe) ca. 90 mal ausgetauscht. Vor allem bis $t = 3a$ besitzt das zutretende Grundwasser erhebliche Stoffgehalte und Aciditäten. Die „Spülwirkung“ wird für den Zeitraum 0,5 – 3 a durch Fe-Gehalte von 20 bis 3 mmol/l und Sulfat-Gehalte von 40 bis 17 mmol/l deutlich. Während sich der Sulfatgehalt bereits nach 4 Jahren dem Niveau des unbeeinflussten Grundwassers angleicht, dauert dies für den Fe-Gehalt und den pH-Wert deutlich länger. Der Grundwasserzustrom erreicht erst nach 10 Jahren den für die Ausleitung des Restseewassers⁹¹ relevanten pH-Wert von 6,5. Im Gegensatz zu den anderen Größen schwankt der DIC-Gehalt nur geringfügig und erreicht zwischen 6 und 8 Jahren mit ca. 7 mmol/l sein Maximum. Die Konzentrationsverteilungen der transportierten Spezies und der festen Phasen für das gesamte Modellgebiet (Anl. 9.3.1) zeigen, dass die Elution der gering verwitterten Bereiche sehr schnell erfolgt. Nach 3 Jahren liegen im Prinzip nur noch im unmittelbar Anstehenden der Restseeböschung (1m) stark erhöhte Gehalte vor.

Die Ergebnisse zeigen, dass auf Grund der Elution der Verwitterungszonen anfänglich erhebliche Diskrepanzen zwischen der Beschaffenheit im Restsee-Anstrom (z.B. eventuelle Messstelle 10m vom RS entfernt!) und der Beschaffenheit des an der Restseeböschung austretenden Grundwassers bestehen. Wesentlich für die realen Kurvenverläufe sind

⁸⁷ Die Berechnung des Anfangszustandes erfolgte nach der in Kap. 6.6 aufgezeigten Methodik. Für die Silikatphasen Kaolinit und K-Glimmer wurde dabei allerdings nur ein Stoffvorrat von 30 mmol/l vorgegeben. Für die Umrechnung der verwitterten Schwefelgehalte wird ein Feststoff/Porenraum-Verhältnis von 6 kg/l PW berücksichtigt.

⁸⁸ Die Silikatphasen werden dabei stark vereinfacht berücksichtigt (ohne Kinetiken zu deren Auflösung oder Bildung).

⁸⁹ Dieser Prozess findet erst an der unmittelbaren Grenze zum Restsee oder im Restsee selbst statt.

⁹⁰ Es ist die logarithmische Teilung der Konzentrationsachse zu beachten.

⁹¹ In LUCKNER ET AL. [1997] wird für die Anbindung der Restseen an die natürlichen Vorfluter ein pH-Wertbereich von 6-9 und gelöste Fe_{ges} -Gehalte < 1 mg/l angegeben. Im Folgenden wird daraus abgeleitet ein Ziel-pH-Wert von 6,5 betrachtet.

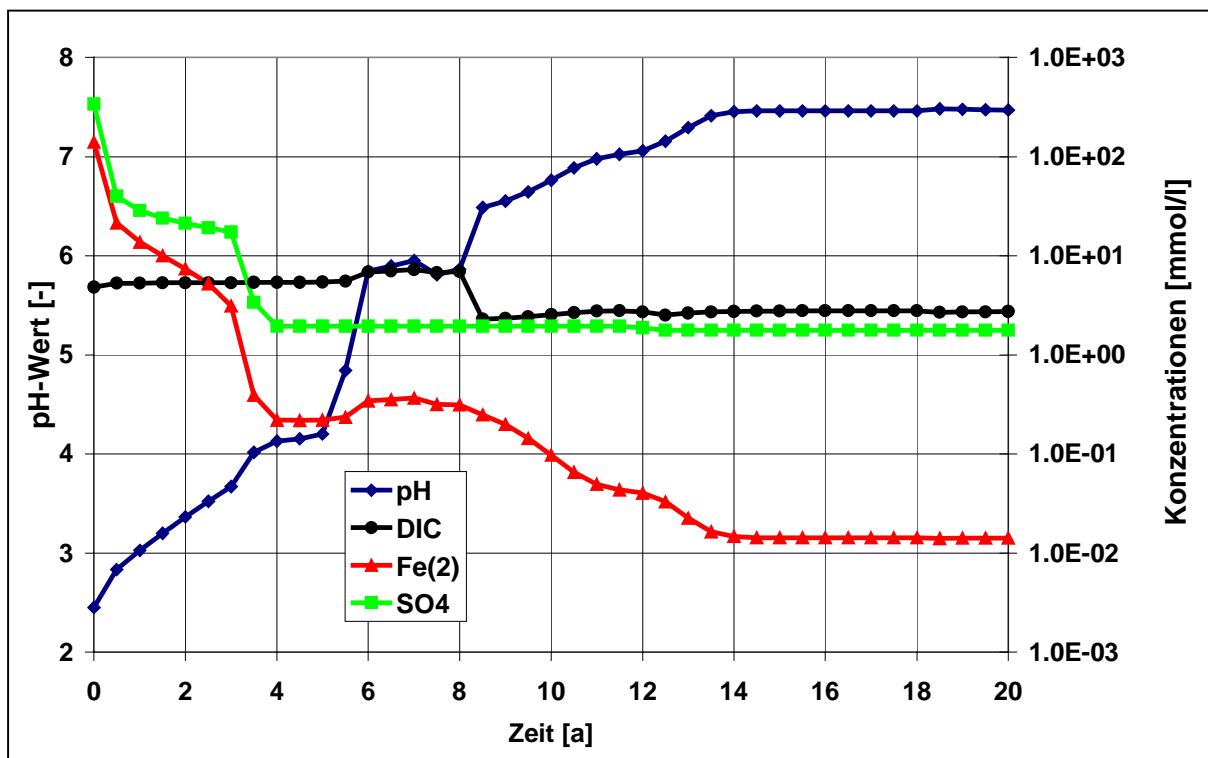


Abb. 9.3.1 Durchströmung Restlochverwitterungszonen, Modellvariante 1 – zeitliche Beschaffenheitsentwicklung des in den Restsee ausströmenden Grundwassers (wesentliche Parameter)

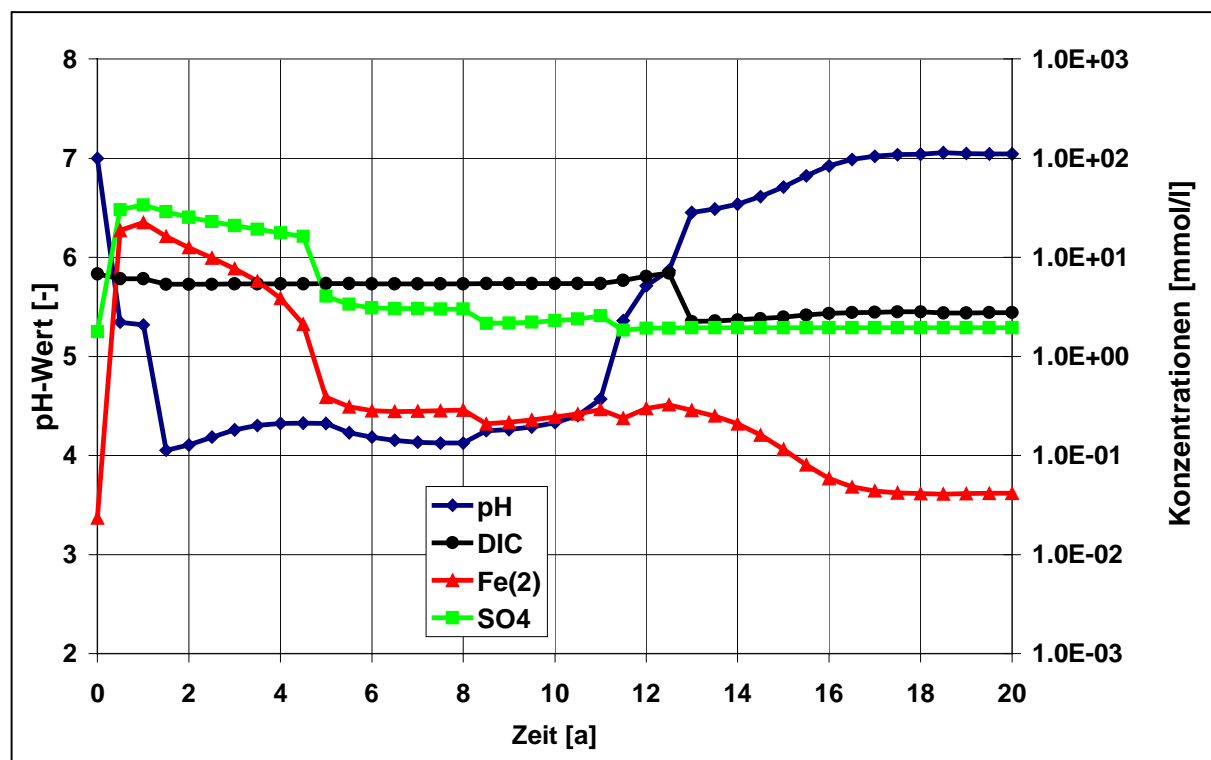


Abb. 9.3.2 Durchströmung Restlochverwitterungszonen, Modellvariante 2 – zeitliche Beschaffenheitsentwicklung des in den Restsee ausströmenden Grundwassers (wesentliche Parameter)

die Ausprägung der Verwitterungszonen (Stoffpool), die Durchströmungsgeschwindigkeiten sowie die tatsächliche Kinetik der Auswaschung des Stoffpools. Der Auswaschungsprozess prägt kurz- bis mittelfristig die Stoffanlieferung an die Restseen. Dies gilt sowohl für die gewachsenen GWL als auch für die Kippen. Somit bedarf es bei der Bilanzierung der dem RS zugehenden Stoffströme einer Untersuchung der unmittelbar an den RS-Böschungen anstehenden Sedimente. Außerdem wird deutlich, dass Maßnahmen zur kurz- bis mittelfristigen Minimierung der Aciditätsanlieferung zum RS in unmittelbarer Böschungsnähe erfolgen müssen.

In einer 2. Modellvariante wird deshalb eine Überdeckung der verwitterten Tertiärböschung mit Quartärmaterial betrachtet. Dazu wird das Modell um 2 Zellen (=1m) erweitert. Vereinfachend wird für diesen Bereich die Wasserbeschaffenheit und die Austauschergöße und -belegung der Zellen 1-12 sowie ein Calcit-Gehalt von 120 mmol/l angesetzt. Die Konzentrationsverteilungen über das gesamte Modellgebiet sind für diese Modellvariante in Anl. 9.3.3 dargestellt. Die zeitliche Beschaffenheitsentwicklung des an der Restseeböschung austretenden Grundwassers ist aus Abb. 9.3.2 ersichtlich. Im Vergleich zu Modellvariante 1 wird eine Kappung der extremen Anfangskonzentrationen offenbar. Die Maximalwerte liegen mit 33 mmol/l Sulfat und 22 mmol/l Fe^{2+} deutlich niedriger. Die pH-Werte sind durchgehend > 4 . Allerdings dauert der Abfall der Konzentrationen auf das unbeeinflusste GWL-Niveau länger. Dies resultiert aus der „Pufferwirkung“ des Quartärmaterials. Anl. 9.3.2 zeigt die erhöhte Stoffspeicherung als Gips bzw. FeX_2 auf.

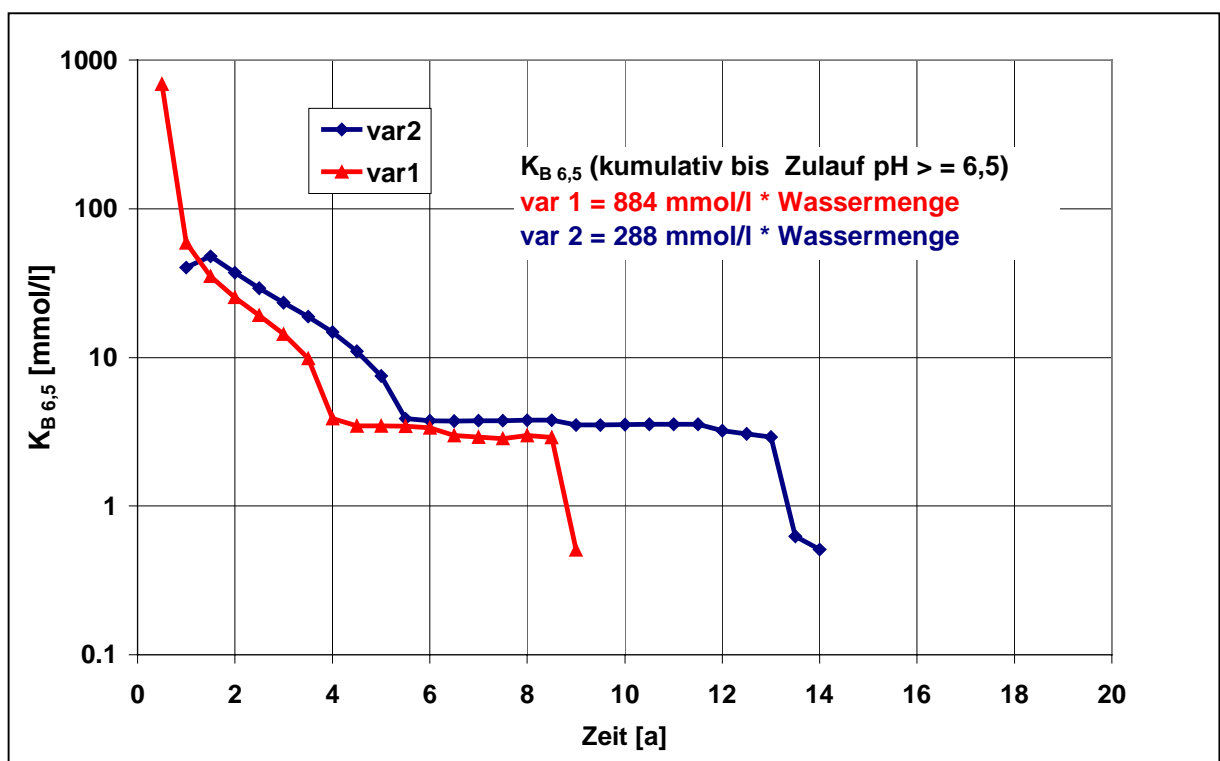


Abb. 9.3.3 Durchströmung Restlochverwitterungszonen, Vergleich Modellvarianten 1 und 2 – zeitliche Entwicklung der $K_{B,6,5}$ -Werte des in den Restsee ausströmenden Grundwassers

Es wurde ein Vergleich beider Varianten bezüglich der Acidität der austretenden Grundwässer durchgeführt. Dies erfolgt über die Bilanzierung der Basenverbräuchen um einen angestrebten pH-Wert zu erreichen. Es wurden demzufolge für die zeitdiskret benannten Grundwasserbeschaffenheiten $K_{B\ 6,5}$ – Werte berechnet. Für die Wässer wurde dazu eine Gleichgewichtseinstellung zu einem atmosphärischen O_2 -Gaspartialdruck und zu amorphen Eisen- und Aluminiumhydroxidphasen ($Fe(OH)_{3(a)}$ und $Al(OH)_{3(a)}$) berücksichtigt. In Abb. 9.3.3 ist die zeitliche Entwicklung der $K_{B\ 6,5}$ –Werte für beide Modellvarianten dargestellt. Dabei werden diese Werte natürlich nur ausgewiesen, wenn die pH-Werte $< 6,5$ liegen. Es wird deutlich, dass die in Variante 1 austretenden Wässer anfänglich erheblich höhere Werte aufweisen (beachte logarithmische Teilung). Nach 1,5 Jahren gleichen sich beide Varianten an, wobei Variante 2 etwas höhere Werte aufweist. Zwischen 9 und 14 Jahren werden nur noch für Variante 2 $K_{B\ 6,5}$ –Werte ausgewiesen. Vergleicht man die kumulativen Werte, wird auf Grund des anfänglich verminderten Auswaschungseffektes deutlich, dass eine Minimierung der angelieferten Acidität durch eine Überdeckung der Restseeböschung mit Quartärmaterial möglich ist. Die genaue Bewertung der Sinnhaftigkeit bedarf allerdings auch limnologischer Betrachtungen.

Zum gegenwärtigen Zeitpunkt sind die geringmächtigen Verwitterungszonen in regionalen 3D-Modellen auf Grund der dazu notwendigen Diskretisierung nicht handhabbar⁹². Somit bedarf es bei Ausweisung der an die Restseen angelieferten Stofffrachten der Untersuchung, ob Verwitterungszonen vorhanden sind und inwieweit sie diesen Prozess prägen. Hierbei sind auch weiterführende Überlegungen zur Kennzeichnung der Kinetik der Auswaschungsprozesse nötig (Versuche). Die aufgezeigte Minimierung der Aciditätsanlieferung durch Aufbringung karbonathaltiger Substrate muss natürlich verknüpft mit deren technischer und finanzieller Machbarkeit gesehen werden. Auch hierfür bedarf es weiterer detaillierter Versuche.

⁹²Zukünftig ist dafür die Verwendung von unstrukturierten Netzen (z.B. PALAGI [1992]) ein vorstellbarer Lösungsweg.

10 Reaktive Stofftransportmodellierung – Beispiel Jänschwalde

10.1 Modellgrundlagen

Die prognostische Gefährdungsabschätzung für die umgebenden Grundwasserleiter der zukünftigen Kippe Jänschwalde erfolgte in einem Stufenkonzept. Zuerst wurde das von der LAUBAG für den Standort betriebene Strömungsmodell⁹³ qualifiziert (HOTH ET AL. [1998]). Dazu wurde das 1-Schicht Modell in ein 5-Schicht 3D-Modell überführt. Die k_f -Wert-Belegung des Kippenbereichs erfolgte an Hand der in Kap. 2.3.1 bzw. 5.4.4 aufgezeigten Methodik nach KAUBISCH [1986]. Mit diesem 3D-Modell erfolgten Transportmodellierungen des Tracerfalls, um die zukünftigen Hauptabstrombereiche auszuweisen (HOTH ET AL. [1998], [1999]). Anschließend wurde für den wesentlichen Hauptabstrombereich eine reaktive 2D-Vertikalschnitt Modellierung durchgeführt. Die Grundlagen dieser reaktiven 2D-Modellierung sollen im Folgenden erläutert werden. Abb. 10.1.1 zeigt die gewählte Modellstruktur⁹⁴ auf. Es wird eine Profillänge von 3 km betrachtet. Die Gitterlänge beträgt $\Delta x=100$ m.

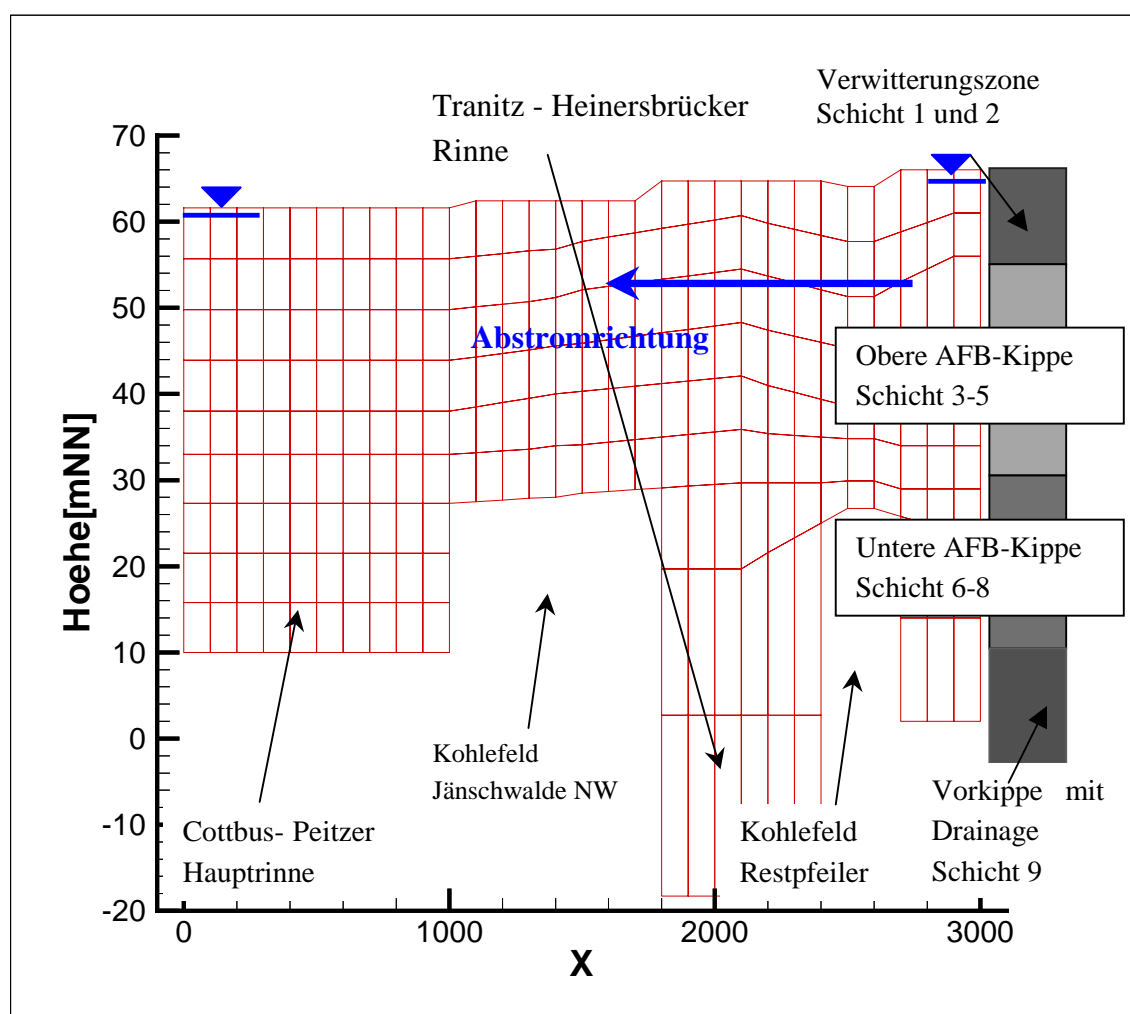


Abb. 10.1.1 Modellstruktur des reaktiven 2D-Vertikalschnittmodells Jänschwalde

⁹³ Es handelt sich dabei um ein PCGEOFIM-Modell.

⁹⁴ Diese Modellstruktur stellt eine Präzisierung der in HOTH ET AL. [2001B] gewählten Modellstruktur dar.

Es sind 5 strukturelle Modellbereiche zu unterscheiden. Zwischen $x=2700$ m und $x=3000$ m wird der Kippenkörper abgebildet. Weiterhin sind die Bereiche „Kohlefeld-Restpfeiler“, „Kohlefeld Jänschwalde-NW“ sowie die beiden Quartärrinnenstrukturen zu nennen. Die Unterkante des Modells wird in den Kohlefeldern und in der Kippe durch die anstehenden Flöze oder deren Liegendschluffe gebildet. In den quartären Rinnenstrukturen ist sie aus der Lage mächtiger Geschiebemergelbildungen abgeleitet. Generell charakterisiert das Modell den Abstrom der Kippenwässer in quartäre Grundwasserleiter⁹⁵. Es wird ein stationäres Strömungsmodell betrachtet. Abgeleitet aus dem 3D-Strömungsmodell (HOTH ET AL. [1998]) ergeben sich RB 1.Art mit 63,5 m ü NN am rechten Rand und 60,5 m ü NN am linken Rand. Für den Bereich der gewachsenen GWL kommt eine GWN von 150 mm/a, für die Kippe von 60 mm/a zum Ansatz. Die k_f -Wert-Verteilung des Modellgebietes ist aus Abb. 10.1.2 ersichtlich. Für die gewachsenen Grundwasserleiter sind dabei die Ergebnisse an den Bohrungen 6535/84 und 6517/84 aus FROBENIUS [1986]⁹⁶ Grundlage. Im Transportmodell werden Ca^{2+} , Fe^{2+} , Fe^{3+} , DIC und SO_4^{2-} als transportierte Spezies betrachtet. Die angesetzten Dispersivitäten⁹⁷ betragen $\delta_L=10$ m und $\delta_T=1$ m. Die Berechnung der Redoxverhältnisse erfolgt über das $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ -Redoxpaar. Als Mineralphasen werden Calcit, Gips, $\text{Fe}(\text{OH})_{3(a)}$ und Siderit berücksichtigt.

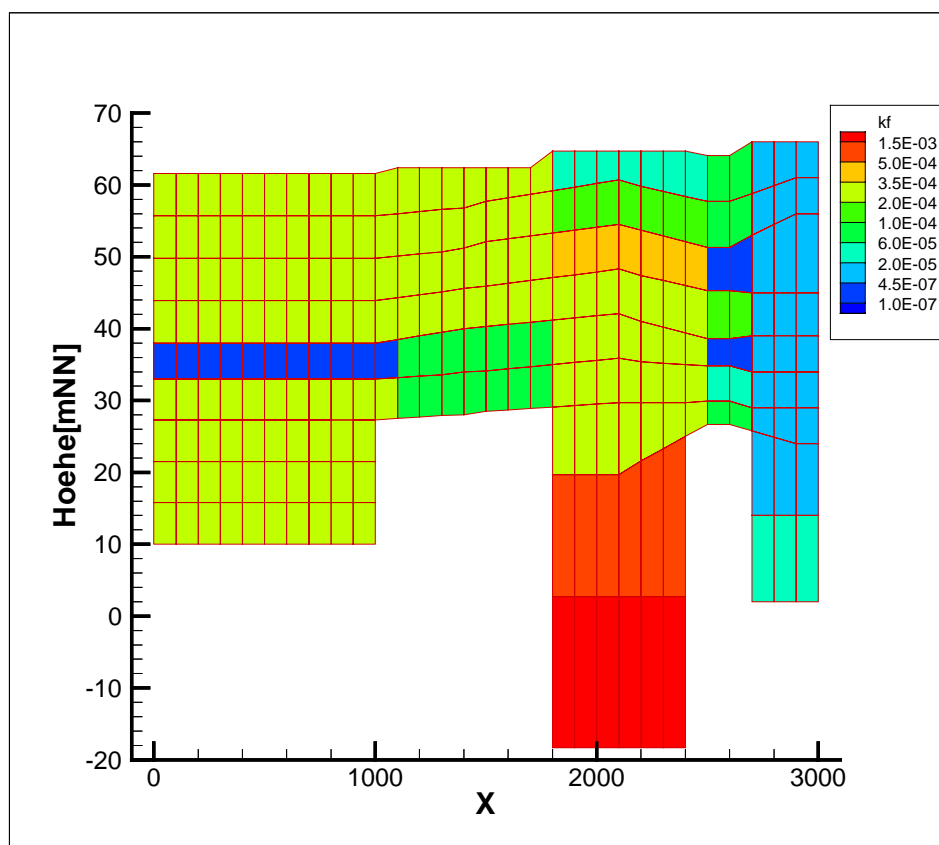


Abb. 10.1.2 Reaktives 2D-Vertikalschnittmodell Jänschwalde – k_f -Wertverteilung [m/s]

⁹⁵ In den Bereichen der Kohlefelder ist auch der tertiäre GWL 4.1 Bestandteil des Modells.

⁹⁶ Nähere Erläuterungen siehe HOTH ET AL. [1999 A].

⁹⁷ Für die betrachteten Strömungsgeschwindigkeiten ergeben sich Gitter-Peclet-Zahlen von ≈ 10 . Auf Grund des in PCGEOFIM implementierten „Front Limitation“-Algorithmus (HÄFNER ET AL. [1997]) ist dennoch eine exakte Lösung der Transportgleichung möglich.

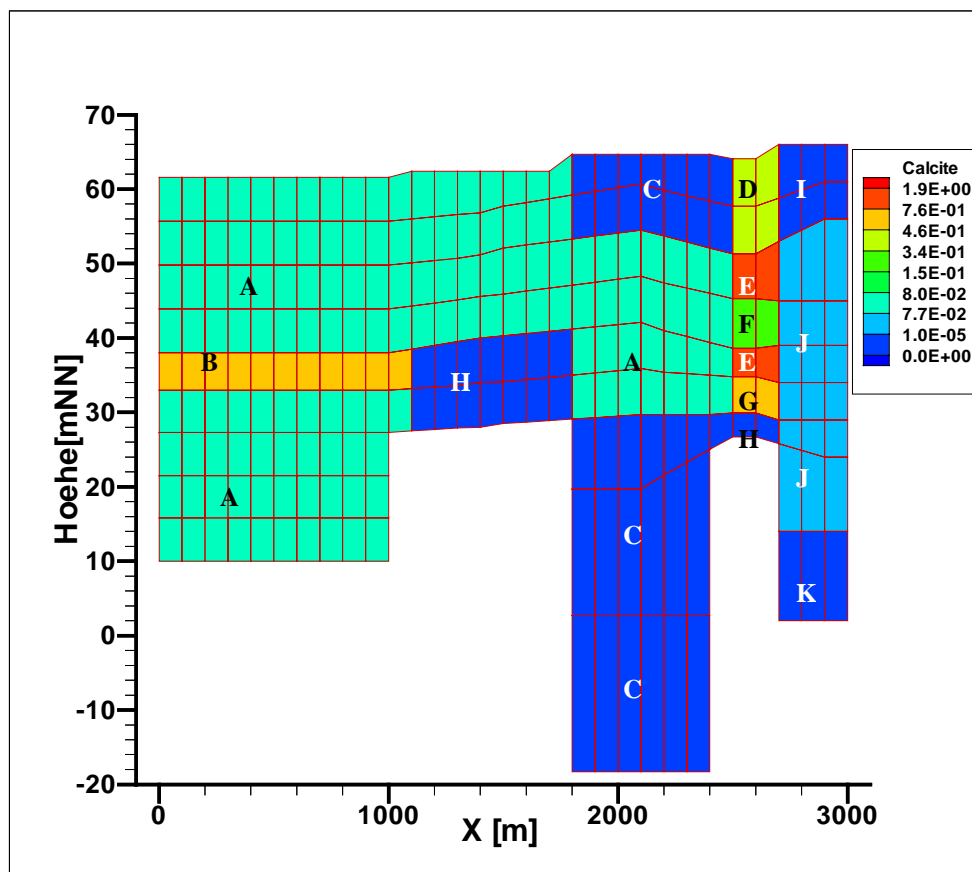


Abb. 10.1.3 Reaktives 2D-Vertikalschnittmodell Jänschwalde – Calcitgehalte [mol/l PW] und geochemische Zonierung des Modellgebietes

Abb. 10.1.3 weist die geochemische Zonierung des Modellgebietes aus (Buchstaben). Die Anfangsbedingungen der einzelnen Bereiche bezüglich der transportierten Spezies, der reaktiven Mineralphasengehalte und der Kationenaustauschergröße und -belegung gehen aus Anl. 10.1.1 hervor⁹⁸. Am rechten Modellrand (Kippe) werden konstante Konzentrationen für alle transportierten Spezies realisiert. Es erfolgt also keine Berücksichtigung der zeitlichen Verminderung der Quellstärke der Kippe in Folge Sulfatreduktion⁹⁹. Die Beschaffenheit der GWN (RB 2.Art - oberer Rand) entspricht konstant der Anfangsbeschaffenheit der quartären Sande (Bereich A). In Abb. 10.1.3 sind weiterhin die Calcitgehalte des Modellgebiets dargestellt. Der Großteil des Modells wird durch die quartären Sande des Bereichs A verkörpert. Diese sind durch k_f -Werte von $3,5 \cdot 10^{-4}$ [m/s] und Calcitgehalte von 0,13 Ma% ($\hat{=}$ ca. 0,08 mol/l PW) gekennzeichnet. Die rolligen Quartärsubstrate des Restpfeilers (D,F,G) zeichnen sich durch vergleichsweise hohe Gehalte aus (0,25 – 0,75 Ma% $\text{CaCO}_3 \hat{=}$ ca. 0,15 – 0,45 mol/l PW). Dies ist verbunden mit k_f -Werten von ca. $1 \cdot 10^{-4}$ [m/s]. Darin eingeschaltet sind weiterhin stark karbonathaltige Geschiebemergel (E), allerdings mit niedrigen k_f -Werten. Im Liegenden der Tranitz-Heinersbrücker Rinne stehen grobkörnige Materialien an ($k_f > 5 \cdot 10^{-4}$ [m/s]), die nahezu karbonatfrei sind. Die Bereiche der tertiären GWL (H) sind karbonatfrei.

⁹⁸Die Festlegung der Anfangsbedingungen resultiert aus den Ergebnissen des Kap. 5.4.4 (Kippe) und Messwerten aus UHLMANN [1997] und BTUC [1998] (gewachsene GWL) – nähere Erläuterungen siehe HOTH ET AL. [1998], [1999A].

⁹⁹Diese Vorgehensweise wurde gewählt, da noch keine gesicherten Erkenntnisse zu Raten des Sulfatreduktionsprozesses vorliegen.

10.2 Modellergebnisse

Es erfolgte die langfristige Berechnung der Beschaffenheitsentwicklung für einen Zeitraum von 200 Jahren. Ein wesentlicher Teil der Modellergebnisse ist in Abb. 10.2.1 und 10.2.2 zusammengefasst. Dabei wird die Entwicklung der pH-Werte sowie der Fe^{2+} - und SO_4^{2-} -Gehalte im Modellgebiet aufgezeigt. In den Abbildungen sind der Anfangszustand sowie die Ergebnisse nach 50, 100 und 200 Jahren Berechnungszeit dargestellt.

Den Anfangszustand der quartären GWL kennzeichnen pH-Werte von 7,6, verbunden mit Sulfatgehalten von ca. 120 mg/l und Eisengehalten < 1 mg/l. Diese durch die Analysen aus UHLMANN [1997] dokumentierten Verhältnisse wurden auch für die bindigen quartären Einheiten berücksichtigt. Für die Bereiche der tertiären GWL zeigen sich im Anfangszustand ebenfalls neutrale, gering mineralisierte Verhältnisse. Dabei ist der pH-Wert von 7 mit etwas höheren Sulfat- und Eisengehalten (200 mg/l bzw. 2,5 mg/l) verbunden. Die Verwitterungszone der AFB-Kippe und die Vorkippe besitzen pH-Werte um 5,5, verbunden mit Sulfatgehalten von ca. 2000 mg/l und deutlichen Eisenmobilitäten ($\text{Fe}^{2+} = 470$ bzw. 130 mg/l). Der Hauptteil der AFB-Kippe wird in diesem Feldesteil durch das vorhandene Karbonatpuffersystem geprägt sein. Daher liegen die pH-Werte bei 6,5, verbunden mit vergleichsweise geringen Sulfat- und Eisengehalten (1280 mg/l bzw. 5 mg/l).

Für die pH-Werte wird deutlich, dass auf Grund der Karbonatpufferung im gewachsenen Gebirge auch nach 200 Jahren Abstrom die Absenkung der Werte 0,9 pH-Einheiten nicht übersteigt. Nach 100 Jahren Berechnungszeit werden bis $x=1900$ m (800 m in Abstromrichtung der Kippe) pH-Werte < 7 ausgewiesen. Nach 200 Jahren hat sich diese Zone bis $x=1100$ m (1,6 km in Abstromrichtung der Kippe) ausgeweitet. Die Veränderung der Sulfatgehalte vollzieht sich im Gegensatz dazu schneller und deutlicher. Nach 50 a ist die Ausbildung einer Sulfatfront im Niveau von 400 – 1200 mg/l ersichtlich. Nach 100 Jahren liegt diese Front bei ca. $x=1800$ m (900 m in Abstromrichtung der Kippe). Zum Berechnungszeitpunkt 200 Jahre wird eine Aufweitung der Front deutlich. Sie befindet sich zwischen $x=300$ m und 1600 m (1,1 bis 2,4 km in Abstromrichtung der Kippe). Der Vergleich zur nichtreaktiven Tracerfallberechnung (Abb. 10.2.3) zeigt nur geringfügige Unterschiede auf. Lediglich in unmittelbarer Kippennähe hat der Rückhalt in Folge Gipsbildung einen marginalen Einfluss auf das Sulfatverteilungsmuster. Die Sulfatfront wird begleitet durch eine starke Erhöhung der DIC- und Ca-Gehalte¹⁰⁰. Dabei prognostizieren die Rechnungen für diese erste Front sogar eine geringfügige Calcitbildung. Die gelösten Eisengehalte¹⁰¹ der gewachsenen GWL steigen im Berechnungszeitraum nur auf ein Niveau von 2 bis 4 mg/l an. Diese geringe Erhöhung ist auf den Rückhalt durch Kationenaustausch und die Bildung von $\text{Fe}(\text{OH})_{3(a)}$ sowie in geringerem Umfang auf Sideritbildung zurückzuführen. Der Vergleich zu den Ergebnissen bei nichtreaktiver Betrachtung (Tracerfall – Abb. 10.2.3) zeigt diesen Rückhalt deutlich auf. Für die nichtreaktiven Berechnungen ergibt sich für die gewachsenen GWL zum Zeitpunkt $t=200$ a ein Fe^{2+} -Gehaltsniveau von 10-60 mg/l.

¹⁰⁰ Dies ist begründet durch die hohen Anfangsgehalte im AFB-Hauptkippensteil.

¹⁰¹ Das gelöste Eisen liegt nahezu vollständig als Fe^{2+} vor.

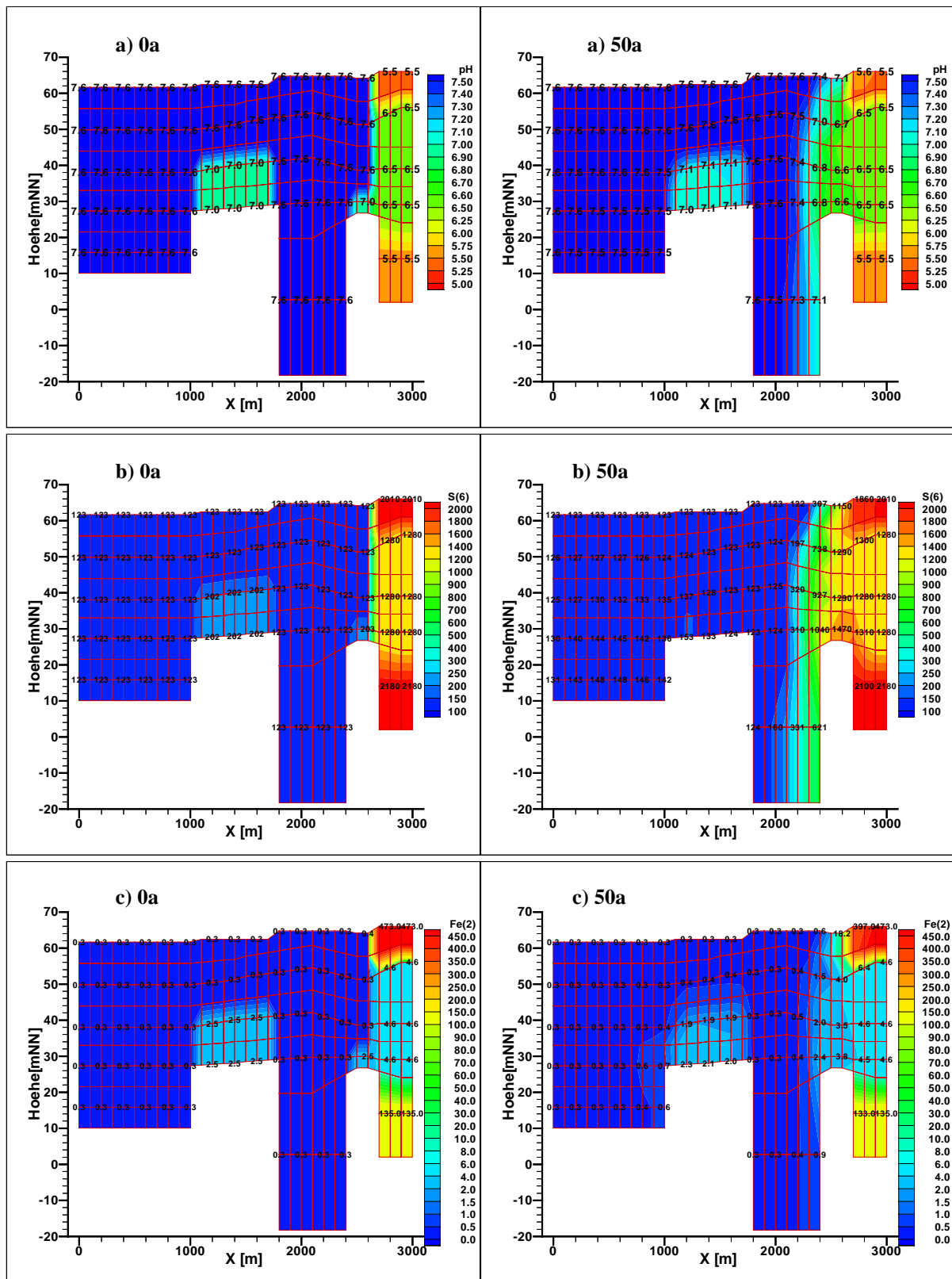


Abb. 10.2.1 Reaktives 2D-Vertikalschnittmodell Jänschwalde – Berechnungsergebnisse (t=0a; t=50a) a) pH-Wert [-] b) Sulfat-Gehalt [mg/l] c) Fe²⁺-Gehalt [mg/l]

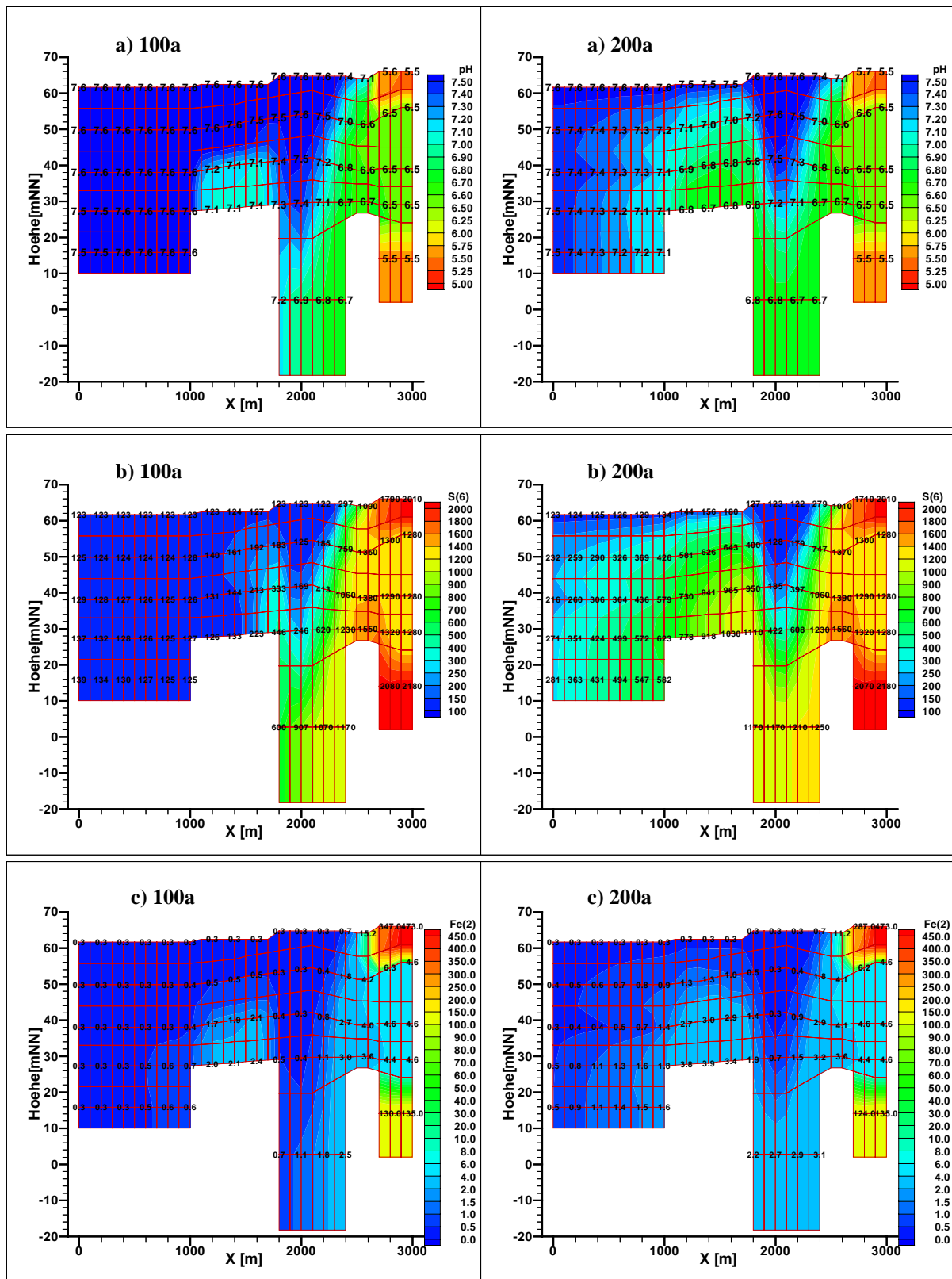


Abb. 10.2.2 Reaktives 2D-Vertikalschnittmodell Jänschwalde – Berechnungsergebnisse ($t=100a$; $t=200a$) a) pH-Wert [-] b) Sulfat-Gehalt [mg/l] c) Fe^{2+} -Gehalt [mg/l]

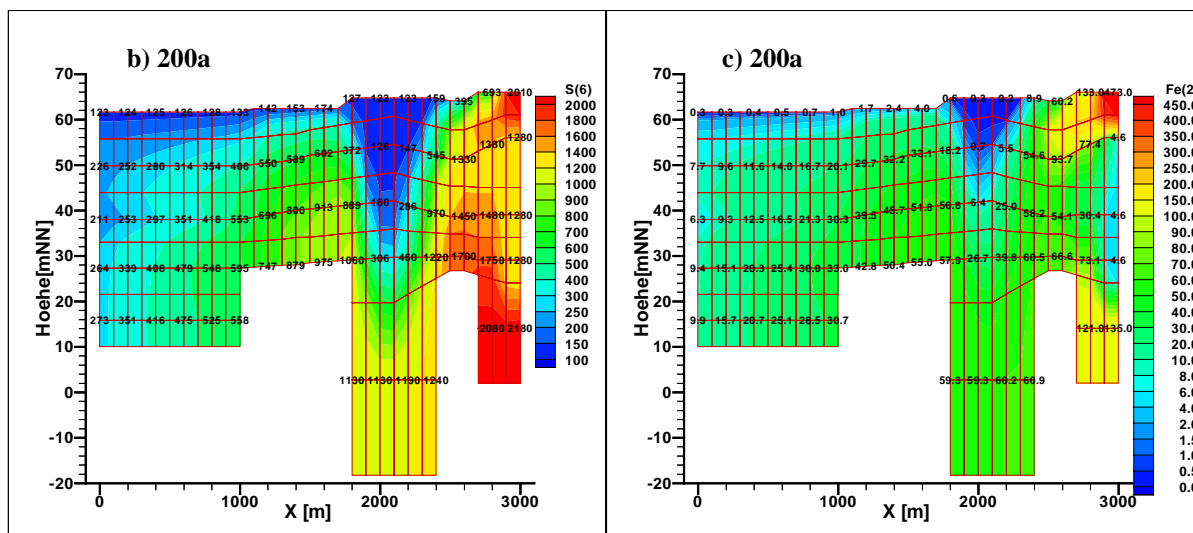


Abb. 10.2.3 Nichtreaktives 2D-Vertikalschnittmodell Jänschwalde – Berechnungsergebnisse ($t=200a$) b) Sulfat-Gehalt [mg/l] c) Fe^{2+} -Gehalt [mg/l]

Generell ist festzuhalten, dass der Migrationsprozess einem Maßstab von Jahrzehnten gehorcht. Die hohen k_f -Werte im liegenden Teil der Trinitz-Heinersbrücker Rinne zeichnen diesen Teil als Haupttransportweg vor. Weiterhin ist die Verdünnung des abströmenden Kippengrundwassers durch die „unbeeinflusste“ GWN des gewachsenen Gebirges zu beachten. Für die langzeitige Entwicklung ist von einer Etablierung quasi-stationärer Verhältnisse auszugehen. Es entstehen dabei „Beeinflussungssäume“ um die entstehenden Kippenkörper herum. Die Größe dieser Beeinflussungssäume resultiert aus den Faktoren: „Quellstärke Kippe“ (Stofffracht), „Verdünnung durch unbeeinflusste GWN“ und „Pufferpotential gewachsener GWL“.

Für den betrachteten Standort zeigt sich eine geringe Beeinflussung der pH-Werte und der Eisengehalte der gewachsenen GWL. Jedoch bildet sich eine Sulfatfront heraus, die nahezu Tracereigenschaften besitzt. Eine weiterführende wesentliche Fragestellung ist es, die effektive Wirksamkeit der benannten Puffersysteme aufzuzeigen. Untersuchungen dazu werden in Kap.10.3 dargestellt.

10.3 Abstrom-Säulenversuche

Auf Grund der in Kap. 10.2 aufgezeigten Modellergebnisse wurden nachfolgend Säulenversuche durchgeführt, um die Effizienz der im Abstrombereich enthaltenen Puffersysteme zu untersuchen (siehe HOTH ET AL. [2001A], [2002]).

10.3.1 Versuchs- und Auswertungsdurchführung

Die Grundidee der Versuche bestand darin, Kerne aus dem quartären GWL des Abstrombereichs mit Kippengrundwasser zu durchströmen. An einer Bohrung in unmittelbarer Nähe der Ortschaft Jänschwalde wurden 14 Kerne entnommen. Die Bohrung ist dem Beginn der Cottbus-Peitzer Hauptrinne zuzuordnen. An 3 ausgewählten Kernen (60 cm Länge, $\varnothing=11,5$ cm) erfolgten dann die Durchströmungsversuche SVJ 1 bis 3. Die notwendige geringfügige Wiederaufsättigung der Kerne wurde mit Grundwasser der quartären GM 11601 durchgeführt. Das Infiltrat für die Säulenversuche wurde aus KGGM 1340 entnommen. Die Vorgehens-

weise zur Konservierung des Infiltrates und der Kerne zeigt Anl. 10.3.1. Die Beschaffenheiten der verwendeten Fluide zur Wiederaufsättigung und zur Durchströmung gehen aus Anl. 10.3.2 hervor. Für das Kippengrundwasser ergibt sich ein pH-Wert um 6,5, verbunden mit Fe_{ges} (Fe^{2+})-Gehalten von ca. 100 mg/l und Sulfatgehalten um 1500 mg/l. Weiterhin sind die erhöhten Mg-, Ca- sowie TIC-¹⁰² und SiO_2 -Gehalte zu benennen.

Der Anfangszustand der Kernmaterialien wurde an Linerstücken, die an Kopf und Krone abgetrennt wurden, untersucht. Dabei wurde auch eine Körnungsanalyse vorgenommen, um die Durchströmungsraten festzulegen. Weiterhin erfolgte die Kennzeichnung des hydrogeochemischen Ausgangszustandes. Dazu wurden eine Porenwasserbeschaffenheitsanalyse mittels BS-Extraktion bzw. N_2 -Druckfiltration, die Bestimmung der TC/TIC-Feststoffgehalte, REM-EDX Untersuchungen sowie sequentielle Extraktionen nach ZEIN & BRÜMMER [1989], [1991] durchgeführt. Als sequentielle Extraktion kam ein verkürztes Verfahren zum Ansatz. Es wurden der Kationenaustauscher (1.Fraktion), die kinetisch nicht gehinderten Karbonate (2.Fraktion) sowie die Summe aus kinetisch gehinderten Karbonaten, Manganoxiden, organischer Substanz und schlecht kristallinen Eisenhydroxiden (3.Fraktion) gekennzeichnet¹⁰³. Die aufgeführten Untersuchungen erfolgten auch nach dem Durchströmungsversuch. Ziel war es dabei, den Endzustand zu kennzeichnen, um die Veränderungen durch den Versuch zu dokumentieren. Hierzu wurden die Kerne in jeweils 4 Teile geteilt.

Die Durchströmung der Kerne erfolgte mit konstantem Volumenstrom. Am Säulenauslauf wurden kontinuierlich die Milieuparameter gemessen sowie an 2h-Mischproben das in Anl. 6.1.1 angegebene Spektrum analysiert. Die Stoffein- und -austräge der Wasserphase wurden an Hand der Analysen nach Gl. 10.3.1 bilanziert¹⁰⁴.

$$\sum_{t=0}^{t=x} \left(\frac{c_t + c_{t+1}}{2} \cdot V_{(t+1)-t} \right) \quad (\text{Gl. 10.3.1})$$

t = Versuchszeitpunkt

c = Stoffkonzentration des betrachteten Stoffes [mmol/l]

$V_{(t+1)-t}$ = Durchlaufvolumen zwischen den Zeitpunkten t und (t+1) [l]

10.3.2 Versuchsergebnisse Säulenauslauf

In Abb. 10.3.1 sind die wesentlichen Ergebnisse für die Versuche SVJ 1 und SVJ 2 dargestellt. Der Beginn des Anstiegs der Gehalte wird nach einem ausgetauschten, effektivem Porenvolumen (eff. PV) deutlich. Nach 2 eff. PV erreicht die ELF ein gleichbleibendes Niveau von 3,5 mS/cm. Ein ähnliches Verhalten zeigt sich für die Parameter SO_4 , TIC und Ca. Das Sulfatniveau liegt ab 2,5 eff. PV beim Infiltratgehalt von ca. 1500 mg/l. Für die TIC-Gehalte zeigt sich ein Niveau von 16-18 mmol/l, welches etwas unter dem Infiltratgehalt (20 mmol/l) liegt. Für die Ca-Gehalte werden nach 2,5 eff. PV Maximalwerte von 700 – 800 mg/l gemessen, die somit über den Infiltratgehalten (570 mg/l) liegen. Bei Versuch SVJ 2 wird dann nach etwa 6 eff. PV wieder das Infiltratniveau erreicht. Für die pH-Werte vollzieht

¹⁰² Summe aus $\text{K}_{\text{S } 4,3}$ und $\text{K}_{\text{B } 8,2}$.

¹⁰³ Die genauere Vorgehensweise geht aus Anl. 6.1.1 hervor.

¹⁰⁴ Es ist zu beachten das in der Bilanz die Stofffracht des 1. ausgetauschten eff. PV der Anfangsbeschaffenheit entspricht und die Bilanzierung des Infiltrats nur bis x-1 eff. PV erfolgt.

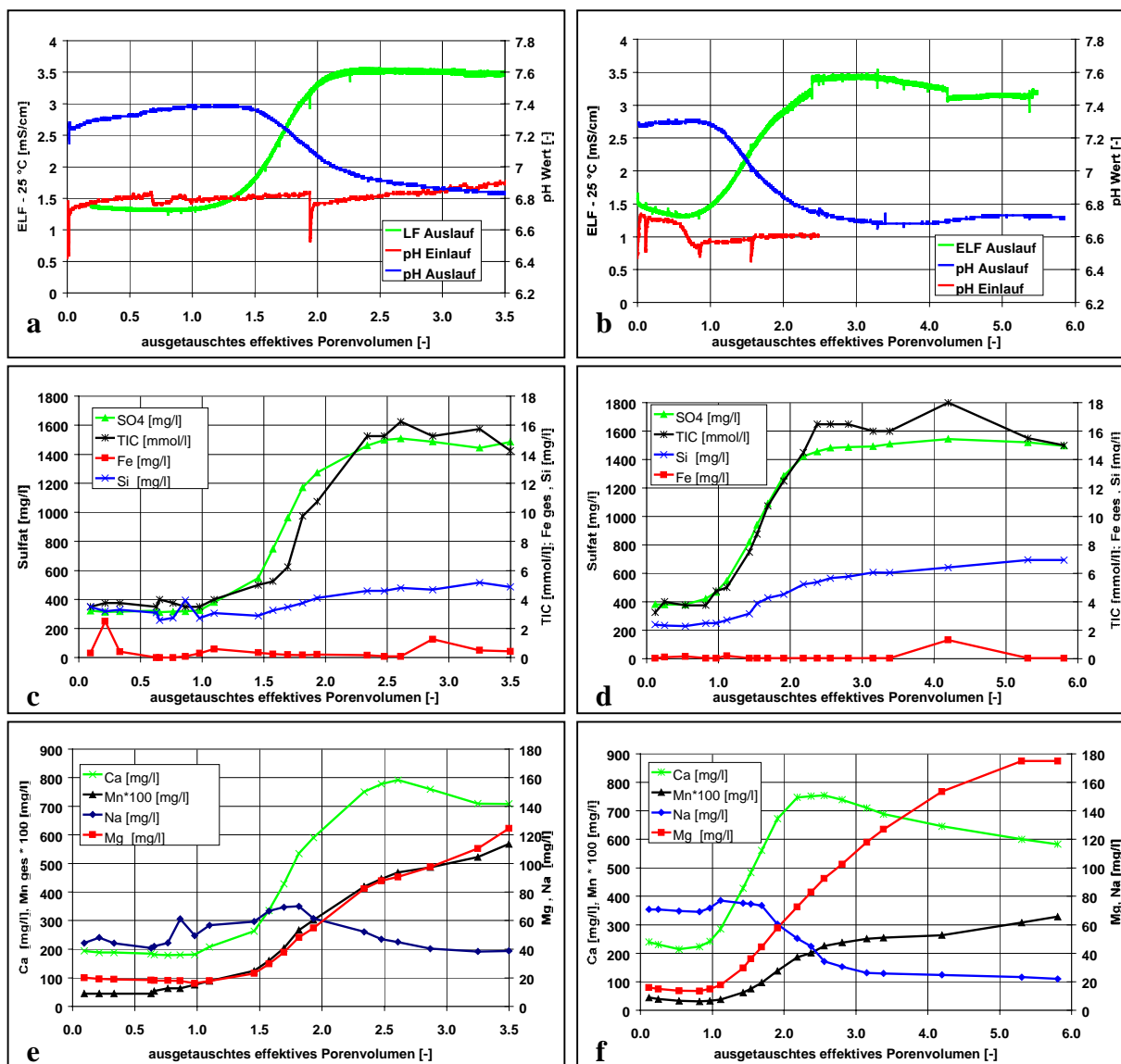


Abb. 10.3.1 Abstromssäulenversuche Jänschwalde – wesentliche Beschaffenheitsparameter des Säulenauslaufs, Versuche SVJ 1 (links) und SVJ 2 (rechts); ELF und pH (a,b); SO_4^{2-} , TIC, Si, Fe_{ges} (c,d); Ca^{2+} , Mn_{ges} , Na^+ , Mg^{2+} (e,f)

sich das Absinken vom Ausgangsniveau von ca. 7,4 auf Werte um 6,7 zwischen 1 und 3 eff. PV. Für die Kieselsäure¹⁰⁵ und Mg-Gehalte zeigt sich ein kontinuierlicher Anstieg. Dabei werden aber auch nach 6 eff. PV die Infiltratgehalte nicht erreicht. Die Fe_{ges} -Gehalte sind bei beiden Versuchen für nahezu alle Proben¹⁰⁶ $< 0,5$ mg/l, wobei das Eisen vollständig als Fe^{2+} vorliegt. Für alle gemessenen Spurenmetalle (Al, Ni, Zn, Cd, Pb, Cr, Co, Cu, As) liegen die Gehalte bereits im Infiltrat, als auch am Säulenauslauf unterhalb der Nachweisgrenzen. Im Gegensatz dazu steigen die Mn_{ges} -Gehalte¹⁰⁷ in allen 3 Versuchen über das Niveau des Infiltrates (2 mg/l) an. Dabei sind die Werte in den Versuchen SVJ 1 und SVJ 2 kontinuierlich steigend. Für den Versuch SVJ 3 (nicht dargestellt) wird nach 7 eff. PV ein

¹⁰⁵ Wird angegeben als Silizium (Si).

¹⁰⁶ Nur Einzelproben weisen Werte > 1 mg/l auf. Für den nicht dargestellten Versuch SVJ 3 zeigen sich die gleichen Ergebnisse. Zu Versuchsende (10 eff. PV) wird dort für eine Einzelprobe 4 mg/l gemessen.

¹⁰⁷ Bei den Mn-Gehalten in Abb. 10.3.1 ist der verwendete Maßstab ($\text{Mn} \cdot 100$) zu beachten. Ein Zahlenwert von 400 $\hat{=}$ 4 mg/l.

Maximalwert von 4 mg/l gemessen. Danach sinken die Gehalte auf 3 mg/l zum Versuchsende (10 eff. PV) ab.

Generell bestätigen sich die grundlegenden Aussagen der Modellierung in Kap. 10.2. Die Sulfatfront wird nur geringfügig durch Gipsbildung verzögert. Dabei ist diese Front mit der deutlichen Erhöhung der TIC- und Ca-Gehalte verknüpft. Abb. 10.3.2 zeigt für die Analysen¹⁰⁸ des Versuchs SVJ 2 die berechneten Sättigungsindizes für die Mineralphase Gips und verschiedene karbonatische Phasen auf. Es wird deutlich, dass es nach 2 eff. PV zur Einstellung des Gipsgleichgewichtes (SI=0) kommt. Gleiches zeigt sich bezüglich der Phase Dolomit. Für Calcit wird für das erste eff. PV ein SI ≈ 0,1 ausgewiesen, der als Gleichgewichtszustand zu interpretieren ist. Danach steigen die Werte auf ca. 0,4 an und fallen dann zum Versuchsende auf ca. 0,2 ab. Für Rhodochrosit (MnCO₃) liegt im Anfangszustand ein SI = -0,2 vor (Untersättigung). Es kommt zum deutlichen Anstieg des SI bis ca. 2 eff. PV, danach steigt der SI bezüglich dieser Phase nur noch geringfügig an. Es ist auf Grund der Entwicklung der SI der karbonatischen Phasen insgesamt von einer Karbonatbildung auszugehen. Die pH-Werte, die in Folge FeOH_{3(a)}-Bildung absinken, werden bis ca.3 eff. PV gepuffert. Die hohen Eisengehalte des Kippenwassers werden langfristig durch Austauscherpufferung und Eisenhydroxidbildung zurückgehalten. Der Kationenaustausch kommt in den, über das Infiltratniveau ansteigenden Ca-Gehalten zum Ausdruck. Zum Phänomen der ansteigenden Mn-Gehalte ist auf die Arbeiten von APPELO & POSTMA [1999] und POSTMA & APPELO [2000] zu verweisen. In diesen Arbeiten wird an Versuchen mit gepackten Säulen (Sande mit MnO₂-Krusten) die Verknüpfung zwischen Fe²⁺-Oxidation zu Fe(OH)_{3(a)} und MnO₂-Reduktion nach Gl. 10.3.2 aufgezeigt.

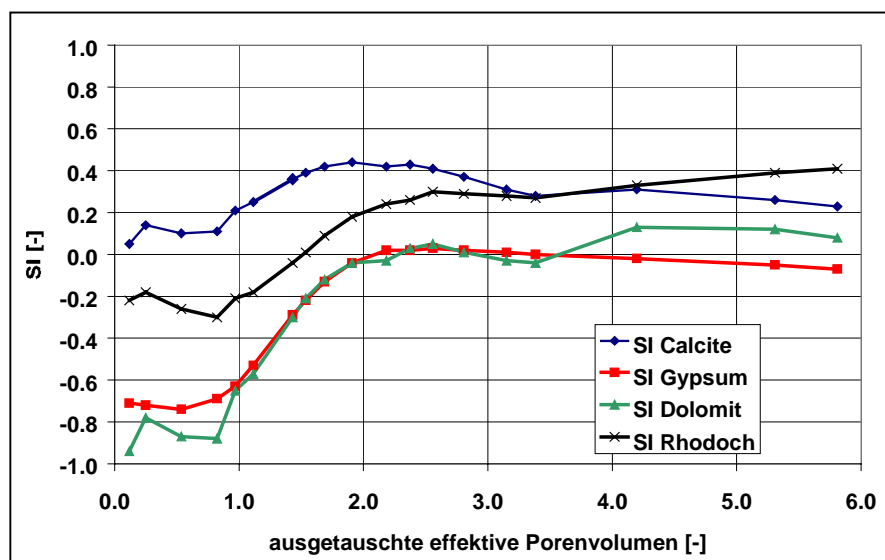


Abb. 10.3.2 Abstromsäulenversuche Jänschwalde (Versuch SVJ2) – Berechnete Sättigungsindizes der Auslaufproben bezüglich der Phasen Gips, Calcit, Dolomit und Rhodochrosit

¹⁰⁸Die Ionenbilanzfehler der Analysen aller 3 Versuche lagen im Durchschnitt bei 4,6 % (siehe Anl. 10.3.3). Alle Proben erfüllen das allgemeine Gütekriterium nach UHLMANN [2000], 96% der Proben das Gütekriterium nach NITZSCHE ET AL. [1999] (vgl. Kap. 6.1.4).

Die Bilanzierung der Stoffein- und -austräge für die Wasserphase nach Gl. 10.3.1 bekräftigt die oben getroffenen Aussagen. Für alle 3 Versuche kommt es am GWL-Material zur teilweisen Festlegung von Fe_{ges} -, Mg -, SO_4 -Ionen und DIC des Infiltrates. Im Gegensatz dazu werden Ca - und Mn_{ges} -Ionen aus dem GWL-Material freigesetzt.

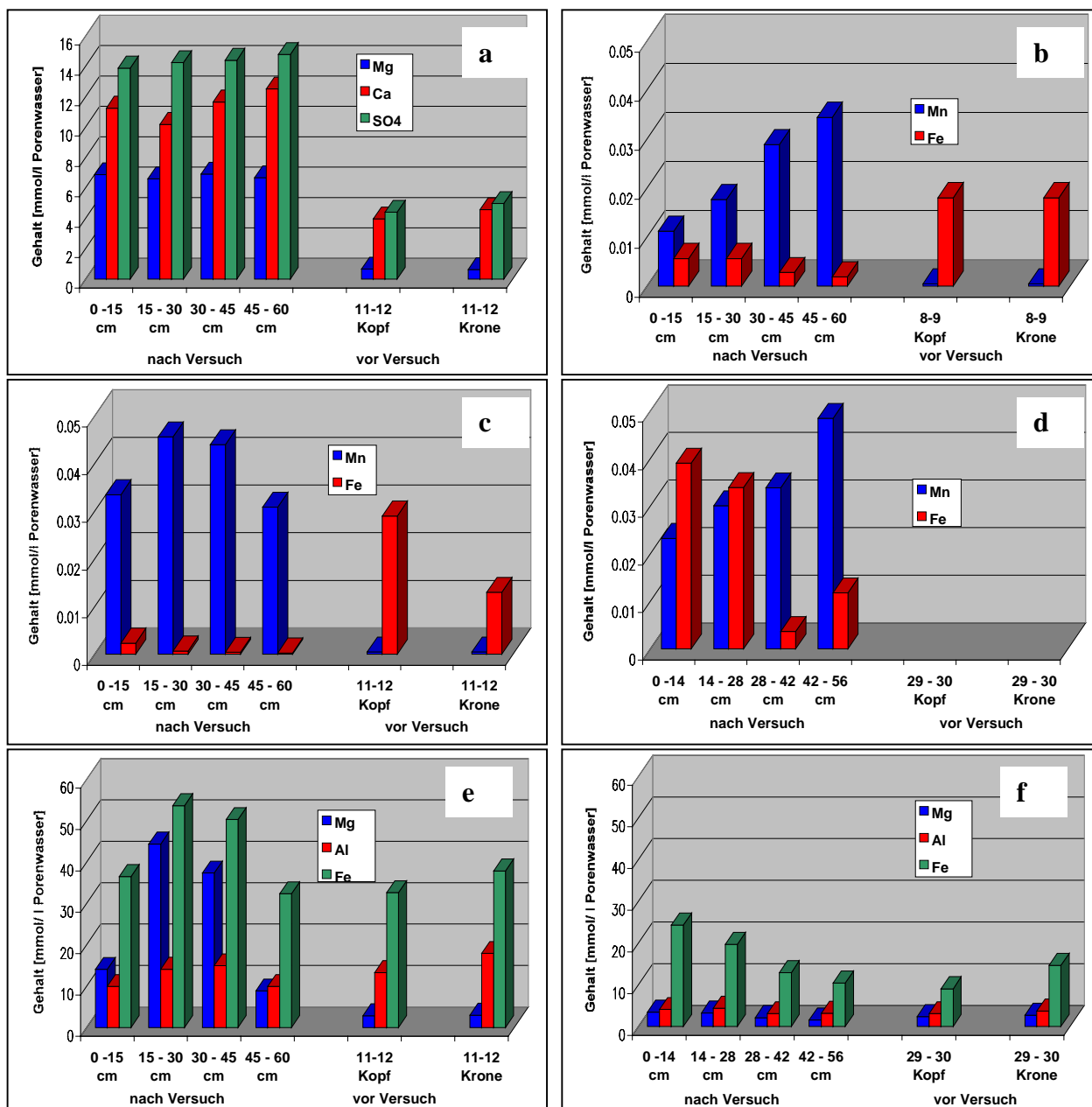


Abb. 10.3.3 Abstromssäulenversuche Jänschwalde Hauptergebnisse Beschaffenheit Porenwasser und sequentielle Extraktion a) SVJ2 – Porenwasser ($Mg^{2+}, Ca^{2+}, SO_4^{2-}$); b) SVJ1 – Porenwasser (Mn_{ges}, Fe_{ges}); c) SVJ2 – Porenwasser (Mn_{ges}, Fe_{ges}); d) SVJ3 – Porenwasser (Mn_{ges}, Fe_{ges}); e) SVJ2 – sequent. Extraktion – 3.Fraktion (Mg, Al, Fe); f) SVJ3 – sequent. Extraktion – 3.Fraktion (Mg, Al, Fe)

10.3.3 Auswertung der Vor- und Nachuntersuchungen

In Abb. 10.3.3 sind die wesentlichsten Ergebnisse zur Kennzeichnung des Ausgangs- und Endzustandes der Kernmaterialien bezüglich Porenwasseruntersuchungen und sequentieller Extraktionen zusammengefasst¹⁰⁹. Dabei wird in allen Diagrammen ein Vergleich zwischen dem Anfangs- und Endzustand vorgenommen¹¹⁰. In Abb. 10.3.3 a wird die Zunahme der Ca-, Mg- und SO₄-Gehalte des Porenwassers durch die Durchströmung deutlich.

Die Abb. 10.3.3 b–d zeigen in Durchströmungsrichtung die Fe_{ges}- und Mn_{ges}-Gehalte der Porenwässer für alle 3 Versuchskerne auf. Die Abnahme der Fe_{ges}-Gehalte, auch gegenüber dem Ausgangszustand, wird gut ersichtlich. Gleichzeitig kommt es zu einem gegenläufigen Anstieg der Mn_{ges}-Gehalte. Diese Ergebnisse stützen den in Kap. 10.3.2 diskutierten Fakt der MnO₂-Reduktion. Die Verknüpfung dieses Prozesses mit der Eisenhydroxidbildung ist aus den Abb. 10.3.3 e,f interpretierbar. Es kommt für die Versuche SVJ 2 und 3 zu einer deutlichen Erhöhung der Eisen-Gehalte innerhalb der 3. Fraktion, die vor allem die schlecht kristallinen Eisenhydroxidphasen kennzeichnet. Generell zeigt sich für die sequentiellen Extraktionen, dass eine exakt-quantitative, komplementäre Auswertung im Vergleich zur gesicherten Bilanz der Wasserphase nicht möglich ist. Die Ergebnisse sind qualitativ bis halb-quantitativ zu interpretieren. Die Schwierigkeiten sind in der nicht exakten Selektivität der einzelnen Extraktionsstufen zu sehen.

Die REM-Untersuchungen können auf Grund der in Anl. 6.1.1 angeführten Randgegebenheiten nur das Ziel haben Phänomene aufzuzeigen, aber nicht zur Bilanzierung der Prozesse dienen. Abb. 10.3.4 verdeutlicht die Problematik von Mischmineralphasen. Die Abb. zeigt die Verwachsung von Ca-Karbonatphasen mit Silikatphasen. Es ist festzuhalten, dass es sich bezüglich der relevanten reaktiven Mineralphasen oft nicht um „reine“ Modellmineralphasen handelt, sondern diese Phasen eher einem „Solid Solution“-Konzept (siehe z.B. PARKHURST & APPELO [1999]) entsprechen. Das thermodynamische Verhalten dieser Mischphasen ist gegenüber den Modellmineralphasen wahrscheinlich verändert.

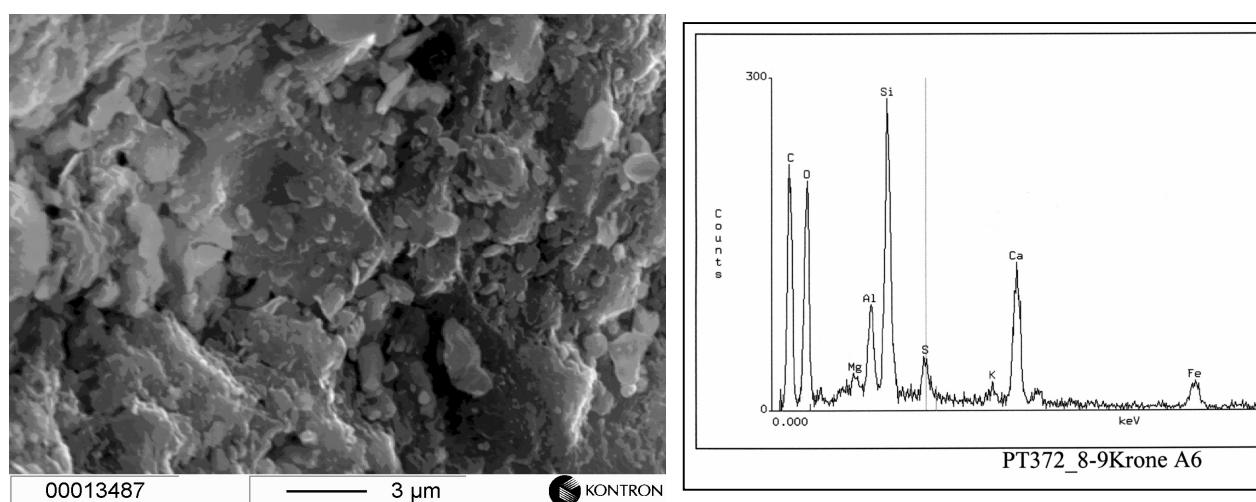


Abb.10.3.4 Versuch SVJ 1 (Anfangszustand – Krone, Teufe 8-9m) – REM-Bild und EDX-Analyse (Ca-Karbonat mit Silikatphase verwachsen)

¹⁰⁹ Eine ausführliche Darstellung der Ergebnisse der sequentiellen Extraktionen ist HOTH ET AL. [2001A] zu entnehmen.

¹¹⁰ Für den Abbildungsteil d) sind keine Voruntersuchungswerte vorhanden.

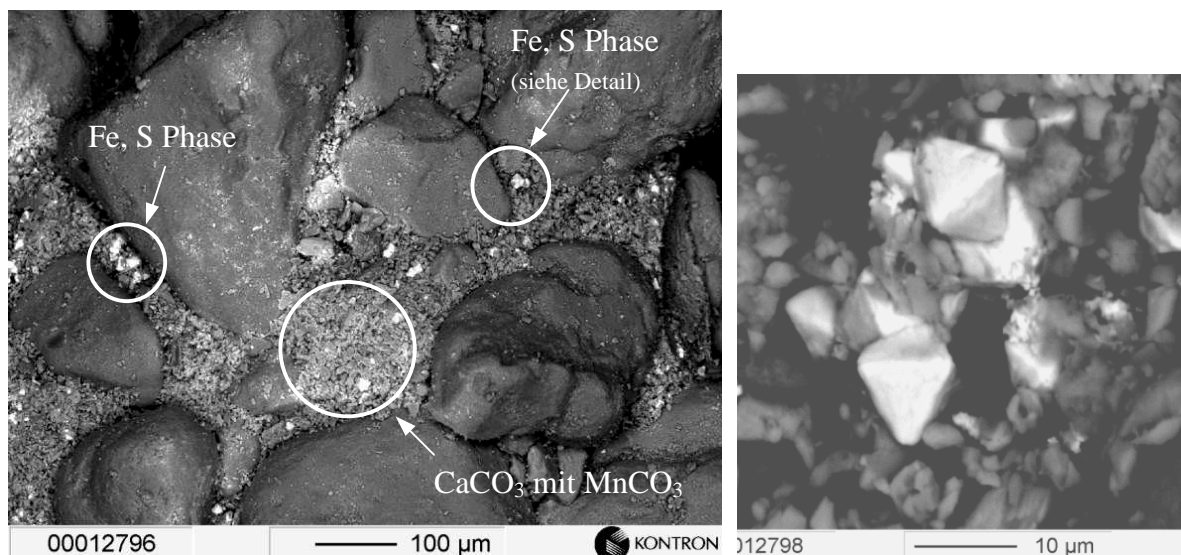


Abb. 10.3.5 Versuch SVJ 1 (Endzustand – Bereich 0-15 cm) – REM-Bild mit Detailaufnahme (Ca,Mn-Karbonat und Fe,S-Phase)

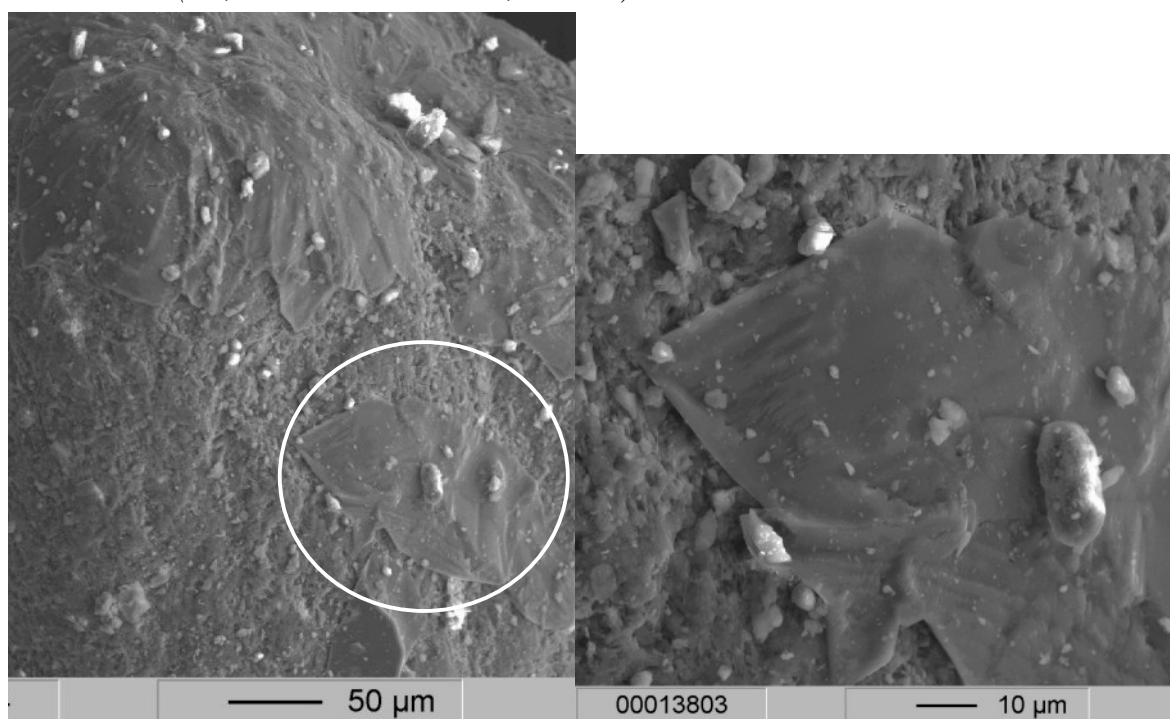


Abb. 10.3.6 Versuch SVJ 2 (Endzustand – Bereich 0-15 cm) – REM-Bild mit Detailaufnahme (Gipshaut auf Silikatmatrix)

sein kann. Abb. 10.3.5 zeigt für die Sandfraktion des zuerst durchströmten Bereiches des Versuches SVJ 1 ein REM-Übersichtsbild. In einer Grundmatrix von Quarzkörnern wird eine Bildung von Ca,Mn-Karbonat deutlich. Die zugehörige EDX-Analyse weist ein Mn:Ca-Verhältnis von ca. 1:1 aus. Weiterhin wird eine Fe,S-Phase ersichtlich. Die EDX-Analyse weist für die sehr kleinen Minerale (Form = tetragonale bzw. oktaedrische Dipyramide ?) ein Fe:S-Verhältnis von ca. 1:2 auf. Es kann nicht abschließend geklärt werden, ob es sich dabei um neugebildete Eisensulfide handelt. Abb. 10.3.6 zeigt für den zuerst durchströmten Bereich des Versuches SVJ 2 die Bildung von Gipshäuten auf einer Silikatmatrix auf. Bezüglich der TC/TIC-Feststoffuntersuchungen muss festgestellt werden, dass diese auf Grund der Fehlergrenzen nur orientierenden Charakter besitzen können.

10.3.4 Modellierung der Abstrom-Säulenversuche

Es erfolgte die Modellierung der 1D-Säulenversuche sowohl mit dem 1D-Transporttool von PHREEQC 2, als auch mit PCGEOFIM (HOTH ET AL. [2001]). Im Folgenden soll exemplarisch nur auf die Modellierung des Versuches SVJ 1 eingegangen werden.

10.3.4.1 Anfangs-, Randbedingungen und Parameterbelegung

Für die Modellierung wird die 60 cm lange Säule in 30 Elemente diskretisiert. In der Modellierung wurde ein konstanter Infiltratvolumenstrom von 7,24 ml/h berücksichtigt. Für die gesamte Säule kommt eine hydrodynamische Dispersivität von $\delta=1$ cm zum Ansatz. Die Feststoffmasse im Säulenkörper betrug 13125,9 g. Die Gesamtporosität wurde zu 0,31, die effektive Porosität zu 0,2 bestimmt (nähere Erläuterungen siehe HOTH ET AL. [2001A]). Anl. 10.3.4 zeigt den hydrogeochemisch relevanten Teil der verwendeten PHREEQC-Inputdatei auf. Hierbei bezeichnet „Solution 0“ die Beschaffenheit des Infiltrates, „Solution 1-30“ die Anfangsbeschaffenheit im Kern¹¹¹. Als reaktive Mineralphasen wurden die angegebenen Modellminerale Calcit, Siderit, Rhodochrosit, Dolomit, Gips, $\text{Fe}(\text{OH})_{3(a)}$ berücksichtigt. Eine Einbeziehung von Eisensulfatphasen erfolgte nicht, da die relevanten Phasen für alle Proben starke Untersättigungen aufzeigten. Die Gehalte der Karbonatphasen wurden aus der 2.Fraktion der sequentiellen Extraktion abgeleitet. Ebenso resultiert die dokumentierte Anfangsaustauscherbelegung aus den mittels sequentieller Extraktion ermittelten Werten. Dabei wurden für die angegebenen Kationen die Gehalte der 1. Fraktion abzüglich der Porenwasserfraktion berücksichtigt. Die Gleichgewichtseinstellung zur Anfangsporenlösung erfolgte dann unter Vorgabe der Austauscherkapazität und Verwendung der in „phreeqc.dat“ enthaltenen Austauschkoeffizienten für die betrachteten Kationen.

10.3.4.2 Modellergebnisse Variante 1

Im linken Teil der Abb. 10.3.7 werden die PHREEQC-Ergebnisse der Modellvariante 1 aufgezeigt. Die Verhältnisse für die Komponenten Ca, SO_4 und TIC werden tendenziell gut nachvollzogen. Es kommt allerdings zu einer etwas zu hohen Berechnung der TIC-Gehalte. Gleichzeitig werden die Maximalwerte für Kalzium nicht erreicht. Bezüglich der TIC-Gehalte steht die Frage einer Unterbestimmung bei der Messung¹¹². Für die Ca-Gehalte ist eine nicht exakte Abbildung der Austauscherpufferung zu diskutieren. Die geringfügige Absenkung der pH-Werte zwischen 1 und 2,5 eff. PV und die Auswaschung des anfänglich vorhandenen Chloridgehalts werden durch das Modell gut abgebildet. Hingegen werden die gemessenen Kurven am Säulenauslauf für Fe_{ges} , Mn_{ges} und Si_{ges} nicht durch das Modell wiedergegeben. Ebenso wird der Anstieg des Mg-Gehaltes bis auf ein Niveau von ca. 7 mmol/l durch das Modell nicht erfasst.

10.3.4.3 Modellergebnisse Variante 2

Zum besseren Nachvollzug der gemessenen Kurven erfolgte die Berechnung einer Modellvariante 2. In dieser Variante wurde zum einen die Reduktion von Manganoxiden, zum anderen veränderte Annahmen zum Gleichgewicht gegenüber der Mineralphase $\text{SiO}_{2(a)}$

¹¹¹Diese Werte resultieren aus der Gleichgewichtseinstellung der gemessenen Infiltrat- und Anfangsbeschaffenheiten gegenüber dem betrachteten reaktiven Feststoffsystem.

¹¹²Die IBF der Analysen waren nahezu durchgehend positiv (fehlende Anionen?).

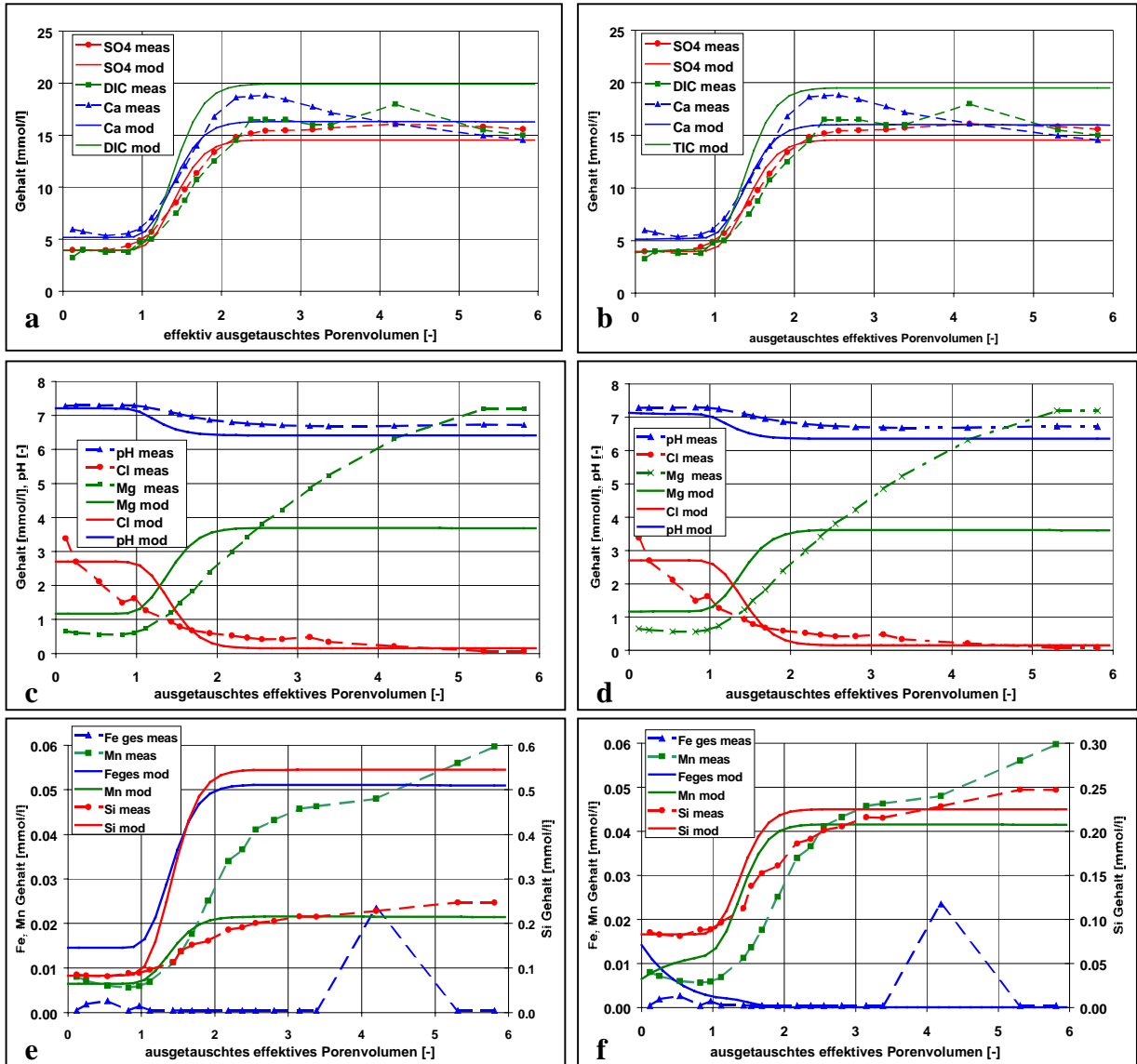


Abb. 10.3.7 PHREEQC-Modellierung Versuch SVJ 1 - Vergleich der wesentlichen Modell(mod) und Messergebnisse (meas) des Säulenauslaufs, Modellvariante 1 (links) und Modellvariante 2 (rechts); Ca-, SO₄- und TIC-Gehalt (a,b); Mg-, Cl-Gehalt und pH-Wert (c,d); Fe_{ges}, Mn_{ges} und Si-Gehalt (e,f)

berücksichtigt. Die Rate der MnO₂-Reduktion (Gl. 10.3.2) zeigt Gl. 10.3.3. Dieses Raten-gesetz basiert auf den Ergebnissen von POSTMA & APPELO [2000]. Der Anfangsgehalt an MnO₂ ergab sich aus dem Mn-Gehalt der 3. Stufe der sequentiellen Extraktion vor dem Versuch (= 0,47 mmol/l).

$$\text{Rate}_{\text{MnO}_2} = 6,98 \cdot 10^{-5} [\text{Fe}^{2+}] \cdot (\text{m} / \text{m}_0)^{0,67} \cdot (1 - \text{SR}_{\text{MnO}_2}) \quad (\text{Gl. 10.3.4})$$

$$\text{mit } \text{SR}_{\text{MnO}_2} = \text{IAP}_{\text{MnO}_2} / k_{\text{MnO}_2}$$

$$\text{Rate}_{\text{MnO}_2} = \text{kinetische Rate der Manganoxidfreisetzung [mol/(l PV} \cdot \text{s)]}$$

$$(\text{m} / \text{m}_0)^{0,67} = \text{Verhältnis momentaner Masse der MnO}_2\text{-Phase zur Anfangsmasse}$$

$$\text{IAP}_{\text{MnO}_2} = \text{Ionenaktivitätsprodukt in der Lösung bezüglich MnO}_2$$

$$k_{\text{MnO}_2} = \text{Löslichkeitskonstante bezüglich MnO}_2$$

Der SI der Modellmineralphase $\text{SiO}_{2(a)}$ wurde auf $-0,8$ festgelegt. Die PHREEQC-Ergebnisse¹¹³ der Modellvariante sind im rechten Teil der Abb. 10.3.7 ersichtlich. Die Veränderungen der Ergebnisse von Variante 2 gegenüber Variante 1 bezüglich der Ca-, SO_4 -, TIC-, Cl-, Mg-Gehalte und des pH-Wertes sind vernachlässigbar. Für die Fe_{ges} -, Mn_{ges} - und Si_{ges} -Gehalte zeigt sich jedoch eine deutliche Annäherung des Modells an die Messergebnisse. Durch die Berücksichtigung der MnO_2 -Reduktion ist die tendenzielle Entwicklung der Fe_{ges} - und Mn_{ges} -Gehalte erklärbar. Als Ausblick für eine weiterführende Modellierung ist die Einbeziehung des Parameteridentifikations-Programms UCODE (POETER & HILL [1998]) zu diskutieren. Dabei spielt vor allem die Anpassung der Austauschkoefizienten für die betrachteten Kationen eine wesentliche Rolle. Zum jetzigen Zeitpunkt sind die Arbeiten dazu aber noch nicht abgeschlossen.

Insgesamt wird bei der Modellierung der Säulenversuche bewusst, dass die Kennzeichnung des Anfangszustandes (exakte Gehalte der relevanten reaktiven Mineralphasen, Belegung des Kationenaustauschers) ein wesentliches Problem darstellt. Hierin besteht nach Meinung des Autors ein wesentlicher Forschungs- und Entwicklungsbedarf auf dem Feld der reaktiven Transportmodellierung.

¹¹³Es werden in beiden Modellvarianten die PHREEQC-Ergebnisse dargestellt, da derzeit für Variante 2 keine PCGEOFIM-Berechnung erfolgen konnte. Die Einbeziehung der MnO_2 -Reduktion erfordert eine kinetische Betrachtung, die derzeit im gekoppelten Programm PCGEOFIM-PHREEQC nicht möglich ist. Die Ergebnisse für Variante 1 entsprechen denen der PHREEQC-Modellierungen.

11 Schlussfolgerungen für das Mitteldeutsche und Niederlausitzer Braunkohlenrevier

Um die langzeitige Gefährdung der die Kippen umgebenden Grundwasserleiter (GWL) zu prognostizieren, müssen zwei Hauptaspekte bearbeitet werden: Zum einen sind Menge und Beschaffenheit des abströmenden Kippengrundwassers zu charakterisieren, wozu es des Verständnisses der wesentlichen geohydraulischen und hydrogeochemischen Prozesse in der Kippe bedarf. Zum anderen ist der Migrationsprozess der abströmenden Kippengrundwässer mittels geeigneter Modelle abzubilden, um belastbare Aussagen zur Gefährdung von Schutzgütern/-objekten treffen zu können. Die im Folgenden aufgeführten Schlussfolgerungen werden schematisch durch Abb. 11.1 untersetzt.

Die Kippenkörper müssen als anthropogene, technologisch strukturierte Sedimentkörper verstanden werden. Ihrer Zusammensetzung nach sind sie im Detail ein heterogenes Gemenge, welches bei großräumiger Betrachtungsweise jedoch eine mittlere Beschaffenheit der zum Versturz gelangten Vorfeldsubstrate besitzt. Ein Repräsentatives Elementarvolumen (REV) der Kippe besitzt deutlich größere Abmaße, als sie durch Punktaufschlüsse (Bohrungen) erfassbar sind. Die Kennzeichnung der geohydraulisch/ geochemischen Verhältnisse des Kippenkörpers muss daher mit einer Bilanzierung der Vorfeldverhältnisse („Vorfeldbilanzierung“) untersetzt werden. Dabei sind die wesentlichen technologisch bedingten Strukturen zu beachten.

Für die geochemischen Vorfeldverhältnisse der ausgehaltenen geologischen Einheiten stellen die Daten der Bodengeologischen Vorfeldgutachten die wichtigste Quelle dar. Ihre Bedeutung liegt in der Zahl und der flächenhaften Verbreitung der Aufschlusspunkte. Für beide Untersuchungsgebiete zeigt sich, dass für die abraumrelevanten tertiären Einheiten ein enger Zusammenhang zwischen deren fazieller Stellung und den C/S-Verhältnissen bzw. Schwefelgehalten besteht. Somit werden die Grundideen des Modells nach BERNER [1984] bestätigt. Die C/S-Verhältnisse stellen einen Paläosalinitätsindikator dar, der die marine Beeinflussung der geologischen Einheiten kennzeichnet.

Aus dem Verschnitt, der für das Vorfeld ermittelten Mächtigkeiten und bodenphysikalisch, geochemischen Parametern resultiert ein Kippenmodell, mit dem eine flächendifferenzierte Prognose der geohydraulischen Verhältnisse, der Karbonatpufferpotentiale und der generierten Aciditäten möglich ist. Dabei liegt die Bedeutung im Erkennen genereller Tendenzen und der Ausweisung von Problemzonen. An Hand dieser Bilanzierungen führt die auf hydrogeochemische Modelle gestützte Prognose der Kippengrundwasserbeschaffenheit zu belastbaren Ergebnissen. Ein wesentlicher, die Beschaffenheit der Kippengrundwässer prägender Faktor ist der Karbonatgehalt der Vorfeldsubstrate. Die tertiären Kohlebegleitschichten des Südraums Leipzig besitzen, im Gegensatz zu den abraumrelevanten Tertiärssubstraten des Niederlausitzer Reviers, zum Teil deutliche Karbonatgehalte. Dies bestimmt die Entstehung unterschiedlicher Kippengrundwässer. Für das Niederlausitzer Revier ist weiterhin vereinfachend von einem zunehmenden Quartäranteil am Abraum von Süd nach Nord auszugehen. In Folge der Karbonatgehalte der Quartärssubstrate sind daher für

die nördlichen Kippen des Reviers (z.B. Jänschwalde) günstigere Beschaffenheiten zu erwarten, als für Kippen der südlichen Tagebaue bzw. der Tertiärhochflächen.

Nach längeren Kippenliegezeiten ist von einer vertikalen geochemischen Zonierung des Kippenkörpers auszugehen. Für langfristig O₂-exponierte Tertiärkippenbereiche kommt es zur Ausbildung von sekundären Verwitterungszonen. Diese sind bereits mit einfachen Elutionen gut zu erkennen (hohe ELF-Werte, niedrige pH-Werte) und befinden sich zumeist in den Hangendbereichen der Absetzer-Kippen und der Förderbrücken-Kippen. In diesen Zonen sind zum Teil erhebliche Gehalte an Eisen, Sulfat, Aluminium und Spurenmetallen mobil. Vor allem für Nickel, Zink und Cobalt werden die Maßnahmenschwellenwerte nach LAWA [1994] zum Teil erheblich überschritten. Die Spurenmetall-Gehalte resultieren aus der auf Grund des pH-Wertniveaus ablaufenden Silikatphasenverwitterung. Auch langfristig exponierte tertiärsubstrathaltige Restlochböschungen sind durch diese Verwitterungszonen geprägt. Die kurz- bis mittelfristige Stoffanlieferung zum Restsee auf dem Grundwasserpfad wird durch diese Verwitterungszonen bestimmt. Diesem Fakt ist bei der Bilanzierung der dem Restsee zugehenden Stoffströme Rechnung zu tragen. Es kann eine deutliche Diskrepanz zwischen den Grundwasserbeschaffenheiten der Messstellen in den Kippen bzw. gewachsenen GWL und den tatsächlich dem Restsee zugehenden Konzentrationen in Folge von Elution der Restlochverwitterungszonen bestehen. Es bedarf deshalb, neben den Messungen in den Gütemessstellen, ergänzender Untersuchungen zur Charakterisierung der Verwitterungszonen. Allgemein wirkt die vertikale Verteilung der Güteparameter an den Kippenmessstellen (siehe Kap. 6.4), in Kombination mit der diskutierten Diskrepanz zwischen REV „Kippe“ und dem Maßstab von Punktaufschlüssen die Frage nach der Repräsentanz der Ergebnisse der Gütemessstellen auf. Eine die Bohrung begleitende Durchführung von Feldelutionen ist angeraten, um die Messstellenfilter gezielt im vertikalen hydrogeochemischen Profil zu positionieren. Nach Einstellung der quasi-stationären hydraulischen Verhältnisse ist für Hauptgefährdungsbereiche (hohe Stofffrachten) die Quantifizierung der (Kippen)-Grundwasserfrachten mit einem integralen Verfahren (TEUTSCH ET AL. [2000], PTAK ET AL. [2000]) zu erwägen.

Im Liegenden der sekundären Verwitterungszonen, vor allem in den Kippenbereichen mit erhöhten C_{org}-Gehalten, kommt es zum Ablauf reduktiver Prozesse. Diese beruhen auf der mikrobiellen Umsetzung tertiärer organischer Substanz, unter „Verbrauch“ von Elektronenakzeptoren. Typische Kennzeichen sind die hohen CO₂-Gehalte der Kippengasphase, wobei die ¹³C-Isotopie des CO₂ die Abgrenzung zu Karbonatpufferungsprozessen ermöglicht. Das Stadium der Eisenreduktion ist allgegenwärtig und kommt in den hohen Fe²⁺-Gehalten der Kippenporen- und -grundwässer zum Ausdruck. Für den Standort Espenhain konnte lokal die Abfolge der Redoxsequenz bis zur Sulfatreduktion nachgewiesen werden. Dies wird bekräftigt durch Schwefelisotopie-Messungen am Kippengrundwasser des Nachbartagebaus Cospuden/ Zwenkau (KNÖLLER [2000]). Das Stadium der Eisenreduktion ist zwar durch eine pH-Werterhöhung gekennzeichnet, hat aber, auf Grund der gelösten Eisengehalte, keine Minimierung der potentiellen Acidität der Kippenwässer zur Folge. Die Sulfatreduktion mit anschließender Eisensulfidbildung stellt hingegen eine nachhaltige Aciditätsminimierung dar. Die Abfolge der Redoxsequenz bis zu diesem Stadium ist somit als wesentlicher Selbsthilfe-

mechanismus (Natural Attenuation-Prozess) innerhalb der Kippenkörper anzusehen. Es ist davon auszugehen, dass die im Vorfeld stratiform gelagerten tertiären Abraumeinheiten mit hohem C_{org} -Anteil durch den Tagebauprozess in den gesamten Kippenkörper verteilt werden und sich die Reaktivität des organischen Materials in Folge der Oberflächenvergrößerung stark erhöht. LAVES ET AL. [1994] zeigen an Hand von Versuchen die gute mikrobielle Verfügbarkeit von tertiärer organischer Substanz des Mitteldeutschen und Niederlausitzer Reviers auf.

Die Gesamtheit der oxidativen Prozesse während des Tagebaubetriebs und der reduktiven Prozesskette bei längeren Kippenliegezeiten stellt ein Analogon zum natürlichen Schwefel-/Kohlenstoffkreislauf mit Disulfidverwitterung in Folge terrestrischer Erosion und Disulfidbildung bei brackisch und mariner Sedimentablagerung dar. Die weitere Untersuchung der Selbsthilfeprozesse ist geboten, da diese die Chance der mittel- bis langfristigen Minimierung der „Quellstärke“ der Kippen bieten. Ziel muss es sein, Umsetzungsraten und beeinflussende Randgegebenheiten auszuweisen, um die Bedeutung der Prozesse zu prüfen und technische Möglichkeiten zur Beschleunigung der Aciditätsminimierung (Enhanced Natural Attenuation) zu entwickeln.

Zusammenfassend ist für die Kippenkörper von einer von den Oberflächen nach innen gerichteten „oxidativen Front“ auszugehen, der eine „reduktive Front“, aus der Kippe nach außen gerichtet, entgegentläuft. Die 2-Fluidphasen-Modellstudie (Kap. 4) zur Wiederaufsättigung der wasserteilgesättigten Kippen zeigt den nach außen gerichteten konvektiven Gasstrom. Die Diskrepanz zwischen den anfänglich starken Anstiegen der Kippengrundwasserstände und den geringen Versickerungsmengen aus der Bodenzone sind auf die Umverteilung des Anfangswassergehaltes, in Folge von Kapillardruckphänomenen und Gravitation zurückzuführen. Zur Erklärung der Diskrepanz bedarf es keiner großräumig ausgeprägten Drainagestrukturen. Der Umverteilungsprozess wird von den hydraulischen Eigenschaften der Kippensubstrate geprägt und hat für die bindigen mitteldeutschen Kippen größere Relevanz, als für die rolligeren Kippen der Niederlausitz. Generell ist zwischen der Versickerung aus der Bodenzone und der Grundwasserneubildung (GWN) zu unterscheiden. In der Umverteilungsphase sind diese beiden Größen als völlig entkoppelt anzusehen. Erst nach der Einstellung quasi-stationärer Zustände gleichen sie sich mengenmäßig an, unterscheiden sich dann aber immer noch in ihren Beschaffenheiten. Vertikal stark differenzierte Verteilungsmuster und eventuelle Gaseinschlüsse sind durch heterogen verteilte Substrate mit unterschiedlichen Kapillardruck-Sättigungsverhältnissen begründbar. Aus den 2-Fluidphasenmodellierungen kann abgeleitet werden, dass eine Strömungsmodellkalibrierung für Kippenstandorte mittels 1-Fluidphasenmodell nur nach Abschluss der Umverteilungsphase erfolgen kann.

Die Modellierung des Migrationsprozesses der abströmenden Kippengrundwässer bedarf, auf Grund der komplexen hydrogeochemischen Wechselwirkungen, eines reaktiven Stofftransportmodells. Das für Fragestellungen der ostdeutschen Braunkohlereviere oft genutzte Programm PCGEOFIM (SAMES & BOY [1997]) ist auf Grund der Kopplung zum hydrogeochemischen Modell PHREEQC (PARKHURST & APPELO [1999]) zur Abbildung komplexer

Migrationsprozesse in der Lage. Dies wird durch den Nachvollzug von Benchmark-Beispielen und Säulenversuchen zum Acid Mine Drainage (AMD)-Abstrom deutlich.

Die reaktiven Transportmodellierungen zeigen, dass der Abstrom der Kippengrundwässer in die angrenzenden gewachsenen GWL langfristig die Entwicklung von quasi-stationären „Beeinflussungssäumen“ zur Folge hat. Dabei resultiert deren Größe aus den Faktoren: „Quellstärke Kippe“ (Stofffracht), „Verdünnung im gewachsenen Gebirge“ (GWN) und „Pufferpotential der gewachsenen GWL“. Einen wesentlichen Einfluss besitzt das hydraulische System des Gebietes. Hauptkennzeichen des Abstromprozesses ist die Ausbildung einer Sulfatfront. Die pH-Werte werden bei vorhandenen Karbonatgehalten gut gepuffert. Der Rückhalt der Eisengehalte basiert vor allem auf Kationenaustauschprozessen und auf der Bildung von Eisenhydroxid-Phasen (abhängig vom Redoxzustand). Das Voranschreiten der Fronten erfolgt für großräumige Modelle in einem Maßstab von Jahrzehnten. Die für den Standort Jänschwalde durchgeführten Säulenversuche zeigen, dass die an Hand der Modellierungen benannten Puffersysteme auch effektiv wirksam sind. In allen 3 durchgeführten Versuchen ergab sich als zusätzliches Phänomen, dass die Eisenhydroxidbildung mit einer Reduktion von im Quartärsubstrat enthaltenen MnO_2 -Phasen verbunden ist. Dies hatte die Verkopplung der Festlegung der Fe^{2+} -Gehalte mit einer Mobilisierung von Mn zur Folge. Es ist somit von einer den Fe^{2+} -Gehalten vorausgehenden Mn-Front auszugehen.

Abschließend ist festzuhalten, dass bei allen vergleichenden Kippenstandort-Diskussionen die Fakten „Vorfelddbeschaffenheit“, „angewandte Tagebautechnologie“, „hydraulisches System“ und „Kippenliegezeit“ zu beachten sind.

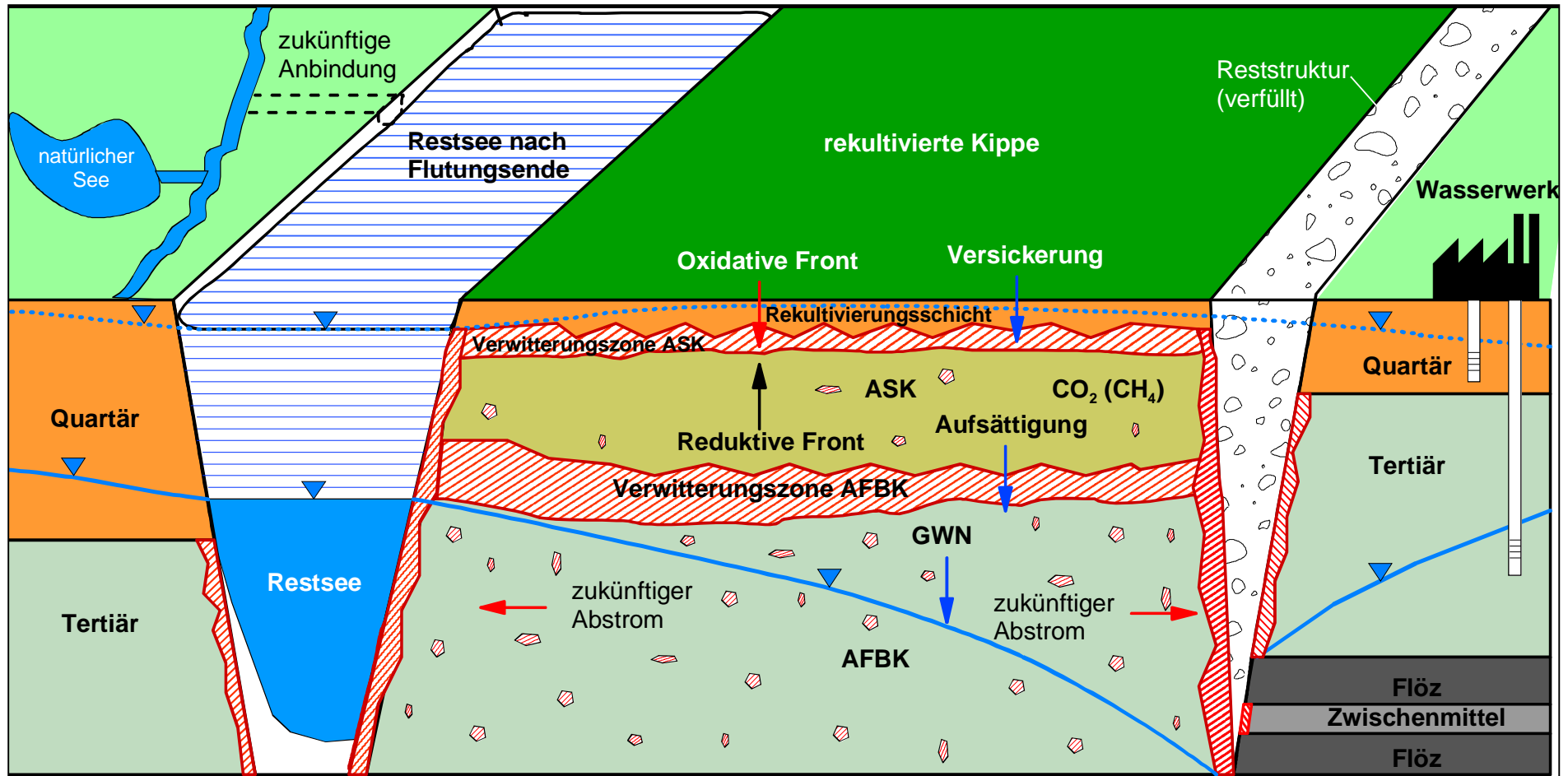


Abb. 11.1 Schematische Darstellung des Systems „Kippe-Reststrukturen-gewachsene Grundwasserleiter“

Literaturverzeichnis

- ABEL, A., MICHAEL, A. & ZARTL, A. [1998]: „Prognosemöglichkeiten der starkniederschlagsbedingten Böschungserosion von Tagebaurestseen: Massenabtrag und Stoffmobilisierung.“ *Proceedings des DGFZ e.V.*, **13**, Dresden, 199–207.
- ALLISON, J.D., BROWN, D.S., NOVO-GRADAC, K.J. [1991]: „MINTEQA2 / PRODEF A2, a geochemical assesment model for enviromental systems.“ EPA Report, Athens, Georgia, USA.
- ALTSCHULER, Z.S., SCHNEPPE, M.M., SILBER, C.C., SIMON, F.O. [1983]: „Sulfur diagenesis in Everglades peat and origin of pyrite in coal.“ *Science*, **221**, 221-227.
- ANDERSON, D.W. & SCHOENAU, J.J. [1993]: „Soil humus fraction.“ Chapter 38 in CARTER, M.R.: „Soil sampling and Methods of Analysis.“, Lewis Publishers, 391- 395.
- ANDERSON, T.F., KRUGER, J., RAISWELL, R. [1987]: „C-S-Fe relationships and the isotopic composition of pyrite in the New albany Shale of the Illinois basin, U.S.A.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **51**, 2795-2805.
- APPELO, C.A.J.& POSTMA, D. [1996]: „Geochemistry, groundwater and pollution.“ Balkema Rotterdam, 3. Auflage, 533 S. .
- APPELO, C.A.J.& POSTMA, D. [1999]: „Variable dispersivity in a column experiment containing MnO₂ and FeOOH-coated sand.“ *Jour. of Cont. Hydrology*, **40**, 95-106.
- APPELO, C.A.J.& WILLEMSSEN, A. [1987]: „Geochemical calculations and observations on saltwater intrusion. I: Acombined geochemical mixing cell model. *Journal of Hydrology*, **94**, 313 –330.
- AZIZ, K. & SETTARI, A. [1979]: „Petroleum Reservoir Simulation.“ Elsevier Applied Science, London – New York, 476 S. .
- BAF [1984]: „Grundwasserwiederanstieg in Kippen.“ unveröffentlicher FE - Bericht im Auftrag VE Braunkohlenkombinat Senftenberg, Bergakademie Freiberg - Sektion Geotechnik Bergbau.
- BELLMANN, H.-J. [1976]: „Zur Geologie und Mineralogie der Abraumschichten der Braunkohle in der Leipziger Bucht südlich von Leipzig.“ Dissertation, Bergakademie Freiberg, 202 S. .
- BERGER, W. [2000]: „Stoffinventar und Stoffänderung durch Redoxreaktionen in Sedimenten des Lausitzer Braunkohlereviere.“ Dissertation, DGFZ Dresden, *Proceedings des DGFZ e.V.*, **18**, 151 S. .
- BERGMANN, A. [1999]: „Hydrogeochemische Untersuchungen anoxischer Redoxprozesse in tiefen Porengrundwasserleitern der Niederrheinischen Bucht – im Umfeld des Tagebaus Garzweiler I“, Dissertation, *Bochumer Geologische und Geotechnische Arbeiten*, **51**, 167 S. .
- BERNER, R.A. [1984]: „Sedimentary pyrite formation: An update.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **48**, 605 – 615.
- BERKNER, A. [1998]: „Naturraum und ausgewählte Geofaktoren im Mitteldeutschen Förderraum.“ In PFLUG, W. „Braunkohlentagebau und Rekultivierung.“ Springer Verlag, S. 776.
- BEYER, W. [1964]: „Zur Bestimmung der Wasserdurchlässigkeit aus Kiesen und Sanden aus der Kornverteilungskurve.“ *WWT*, **14**, 165-168.
- BÖTTCHER, J., STREBEL, O. & DUYNISVELD, H.M. [1985]: „ Vertikale Stoffkonzentrationsprofile im Grundwasser eines Lockergesteins-Aquifers und deren Interpretation (Beispiel Fuhrberger Feld).“ *Zeitschr. Dt. geol. Ges.*, **136**, 534-552.
- BÖTTCHER, J. & STREBEL, O. [1985]: „Redoxpotential und E_h/pH-Diagramme von Stoffumsetzungen in reduzierendem Grundwasser (Beispiel Fuhrberger Feld).“ *Geol. Jahrbuch.*, **C 40**, 1-34.
- BOTTINGA, Y. [1968]: „Calculation of fractionation factors for carbon and oxygen in the system calcite-carbon dioxide-water.“, *Journal Physical Chemistry*, **72**, 800-808.
- BRÄUNIG, A. [2000]: „Entwicklung forstlich rekultivierter sowie renaturierter Böden und Simulation ihres Wasserhaushaltes in der Mitteldeutschen Braunkohlen- Bergbaufolgelandschaft.“ Dissertation, TU Bergakademie Freiberg, 181 S. , ebenfalls als *Freiberger Forschungshefte*, **C 489**.
- BRAND, T. [1996]: „Numerische Simulation dreidimensionaler Strömungs-, Transport- und hydrogeochemischer Reaktionsprozesse im Grundwasserabstrom von Braunkohlentagebaukippen.“ Dissertation, *Besondere Mitteilung zum Deutschen Gewässerkundlichen Jahrbuch*, **59**, Hrsg. LUA NRW, 123 S. .

- BRAND, T. & KÖNIG, C. [1994]: „Numerische Modellierung der räumlich- zeitlichen Entwicklung der Beschaffenheit des Grundwassers in Abraumkippen der Rheinischen Braunkohle und in deren Abstrom mit einem hydrogeochemischen Transport- und Reaktionsmodell.“, unveröffentlichter Abschlußbericht, RU Bochum, 97 S. .
- BREMSTAHLER, F. & WERNER, F. [1999]: „Prognostische Betrachtungen zur Wasserbeschaffenheit im zukünftigen Restsee Störmthal als Fortschreibung der limnologischen Einschätzung von 1996.“ unveröffentlichter Bericht, Wi.-Techn. Projekt im Auftrag der LMBV, DGFZ Dresden, 37 S. .
- BROOKS, R.H. & COREY, C.T. [1964]: „Hydraulic properties of porous media.“ *Hydrol. Paper* , **3**, Colorado State University, Fort Collins.
- BTUC [1998]: „Ermittlung der Grundwasserbeschaffenheit der Braunkohlenabraumkippe des Tagebaus Jänschwalde.“ unveröffentlichter Abschlußbericht, Wi.-Techn. Projekt im Auftrag der LAUBAG, BTU Cottbus, 96 S.
- BU CZKO, U. [1999]: „Modellierung des Wasserflusses und Stofftransport in der wasserungesättigten Zone heterogener Braunkohletagebau- Abraumkippen der Lausitz.“ Dissertation, BTU Cottbus, *Cottbuser Schriften zu Bodenschutz und Rekultivierung*, **6**, 200 S. .
- BURDINE, N.T. [1953]: „Relative permeability calculations from pore size distribution data.“ *Petr. Trans. Inst. Mining Metall. Eng.* , **198**, 71 – 77.
- BUSCH, K.F. & LUCKNER, L. [1993]: „Geohydraulik.“ Gebr. Bornträger, Berlin - Stuttgart, 3. neubearbeitete Auflage, 497 S. .
- CANFIELD, D.E & RAISWELL,R. [1999]: „The evolution of the sulfur cycle“. *Amer. Jour. of Science*, **299**, 697-723.
- CHRISTOPH, G. [1999]: „Modellstudien zum Aufsättigungsprozess der Kippe Zwenkau/Cospuden.“ *UFZ-Bericht*, **25**, 40-51.
- CLARK I. & FRITZ P. [1997]: „Environmental Isotopes in Hydrogeology.“ Lewis Publishers. New York, 328 S. .
- DAVIES, H.R., BYERS,C.W. & DEAN,W.E. [1988]: „Pyrite formation in the lower Cretaceous Mowry shale: effect on organic matter type and reactive iron content.“ *Amer. Jour. of Science*, **288**, 873 – 890
- DEBRIV [1998], [2002]: Informationen von der Internetseite des Verbandes der Deutschen Braunkohlenindustrie. www.debriv.de.
- DEBYE, P., HÜCKEL, E. [1923]: „Zur Theorie der Elektrolyte.“ *Phys. Z.*, **24**, 185 –208.
- DE HAAN, S.B. [1991]: „A review of the rate of pyrite oxidation in aqueous systems at low temperature.“ *Earth Science Reviews*, **31**, 1-10.
- DIERSCH, H.-J. [1998]: „Manual FEFLOW[®]“ WASY, Berlin.
- DOHRMANN, H. [2000]: „Untersuchungen zu hydraulischen und hydrochemischen Prozessen im Initialstadium bindiger Mischbodenkippen des Mitteldeutschen Braunkohlereviere.“ Dissertation, *UFZ-Bericht*, **34**, 136 S. .
- DOYLE, R.W. [1968]: „The origin of the ferrous iron – ferric oxide Nernst potential in environments containing ferrous iron.“ *Amer. Jour. of Science*, **266**, 840 – 859.
- DREBENSTEDT, C. [1998]: „Planungsgrundlagen der Wiedernutzbarmachung.“ In PFLUG, W.: „Braunkohlentagebau und Rekultivierung.“ Springer Verlag, 488.
- DVWK [1992]: „Anwendung hydrogeochemischer Modelle.“ *DVWK Schriften*, **100**, Parey Verlag, Hamburg.
- DYBEK, K. & SCHWAN, M. [1988]: „Prognose der Grundwasserbeschaffenheit in Bergbaugebieten.“ *Wasserwirtschaft - Wassertechnik*, **4**, 77 - 79.
- EISSMANN, L. [1968]: „Überblick über die Entwicklung des Tertiärs in der Leipziger Tieflandsbucht.“ *Sächs. Heimatblätter*, **1**, 25 –37, Leipzig.
- EISSMANN, L. [1994]: „Leitfaden der Geologie des Präquartärs im Saale- Elbe Gebiet.“ In EISSMANN, L.: „Das Quartär Mitteldeutschlands.....“ *Altenbg. Nat. wiss. Forsch.* , **7** , 458 S. .
- EVANGELOU, V.P. [1995]: „Pyrite oxidation and its control.“ CRC Press, Boca Raton- New York, 293 S. .

- FIB [1996]: „Geochemische Prozesse in kohlehaltigen wassergesättigten Abraums substraten.“ BMBF Projekt – FKZ 0339624, Abschlußbericht.
- FIEDLER, H.J. [1965]: „Die Untersuchung der Böden - Band 2.“ Theodor Steinkopf Verlag, Dresden und Leipzig, 255 S. .
- FROBENIUS, A. [1977]: „Bodengeologisches Vorfelddgutachten Jänschwalde - Mitte.“ Unveröffentlicher Bericht, GFE Halle BT Berlin.
- FROBENIUS, A. [1979]: „Bodengeologisches Vorfelddgutachten Zwischenmittelpuben Cottbus-Nord.“ Unveröffentlicher Bericht, GFE Halle BT Berlin.
- FROBENIUS, A. [1984A]: „Bodengeologisches Vorfelddgutachten Jänschwalde -Süd.“ Unveröffentlicher Bericht, GFE Halle BT Berlin.
- FROBENIUS, A. [1984B]: „Bodengeologisches Vorfelddgutachten Cottbus - Süd.“ Unveröffentlicher Bericht, GFE Halle BT Berlin.
- FROBENIUS, A. [1986]: „Bodengeologisches Vorfelddgutachten Jänschwalde - Neißefeld.“ Unveröffentlicher Bericht, GFE Halle BT Berlin.
- GARRELS, R.M. & THOMPSON, M.E. [1962]: „A chemical model for seawater at 25 °C and one atmosphere total pressure.“ *American Jour. of Science*, **260**, 57-66.
- GLÖCKNER, M. [2001]: „Reaktive Transportmodellierung mit den Programmsystemen PCGEOFIM und PHREEQC auf der Grundlage von Benchmark-Beispielen.“ Diplomarbeit, TU Bergakademie Freiberg, Inst. f. Bohrtechnik, 66 S. .
- GOLDHABER, M.B. [1983]: „Experimental study of metastable sulfur oxyanion formation during pyrite oxidation at pH 6-9 and 30°C.“ *Amer. Jour. of Science*, **283**, 193-217.
- GOULD, W.D., BECHARD, G. & LORTIE, L. [1994]: „The nature and role of microorganisms in the tailings enviroment.“ Chapter 7 in JAMBOR, J.L.& BLOWES, D.W.: „Short Course Handbook on Enviromental Geochemistry of Sulfid Mine Wastes.“ Mineralogical Association of Canada, Waterloo-Ontario. 185-199.
- GOUY, J., BERGE, P. & LABROUE, L. [1984]: „*Gallionella ferruginea*, facteur de denitrification dans les eaux pauvre en matiere organique.“ *C.R. Acad.Sc. Paris*, **298**, 153-156.
- GROßER, K.H. [1998]: „Der Naturraum und seine Umgestaltung.“ In PFLUG, W. „Braunkohlentagebau und Rekultivierung.“ Springer Verlag, 463.
- GRUNERT ET.AL. [1978]: „Geologischer Erkundungsbericht Jänschwalde- Mitte/ Horno.“ Unveröffentlicher Bericht.
- HABICHT, K. [1997]: „Sulfur isotope fractionation in marine sediments and bacterial cultures.“ Dissertation, *Berichte Fachbereich Geowissenschaften der Uni Bremen* , **106**, 125 S. .
- HÄFNER, F., SAMES D. & VOIGT, H.-D. [1992]: „Wärme- und Stofftransport.“ Springer Verlag Berlin, 626 S. .
- HÄFNER, F., BOY, S., WAGNER, S. & BEHR, A. [1997]: „The “front limitation” algorithm – a new and fast finite-difference method for groundwater pollution problems.“ *Journal of Contaminant Hydrology*, **27**, 43-61.
- HAUBOLD [1979]: „Bodengeologisches Vorfelddgutachten - Kohlefeld Espenhain-Störmthal“, unveröffentlicher Bericht, GFE Freiberg.
- HAVERKAMP, R., BOURAOUI, F., ZAMMIT, C. & ANGULO-JARAMILLO, R. [1999]: „Soil properties and moisture movement in the unsaturated zone.“ Kap. 5 in DELLEUR, J.: „The handbook of groundwater engineering.“, CRC Press und Springer Verlag, Boca Raton und Heidelberg.
- HEBERT, D. [1997]: „Isotopenmethoden in der Hydrogeologie.“ *Wissenschaftliche Mitteilungen des Institut. f. Geologie* , **2**, TU Bergakademie Freiberg, 110 S. .
- HEM, J.D. [1961]: „Stability field diagrams as aids in iron chemistry studies.“ *J. Am. Water Works Assoc.*, **53** , 211 – 228.
- HGN [2000]: „Untersuchungen zur Prognose der Güteentwicklung von Grundwässern und Oberflächenwässern in durch Kippen geprägten Braunkohlenfolgelandschaften.“ TP 2 - „Einsatz geophysikalischer Meßverfahren zur Erkundung der Bodenstrukturen und Wasserwegsamkeiten im Kippenkörper.“ Abschlußbericht des BMBF Themas 02 WB 9670/7, Torgau.
- HÖLTING, B. [1992]: „Hydrogeologie.“ Enke Verlag, Stuttgart, 4. Auflage , 415 S. .

- HÖRMANN, G. [1997]: „SIMPEL – Ein einfaches, benutzerfreundliches Bodenwassermodell zum Einsatz in der Ausbildung.“ *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen*, **41**, 67-72.
- HOTH, N., WAGNER, S. & HÄFNER, F. [1997]: „Entwicklung eines numerischen Modells zur Beschreibung und Simulation instationärer hydrogeochemischer Transportprozesse im Grundwasser der Kippe des Tagebaus Jänschwalde und in deren Abstrom.“ unveröffentlichter Zwischenbericht, Wi.-Techn. Projekt im Auftrag der LAUBAG, TU Bergakademie Freiberg, Inst. f. Bohrtechnik u. Fluidbergbau, 83 S. .
- HOTH, N., WAGNER, S. & HÄFNER, F. [1998]: „Entwicklung eines numerischen Modells zur Beschreibung und Simulation instationärer hydrogeochemischer Transportprozesse im Grundwasser der Kippe des Tagebaus Jänschwalde und in deren Abstrom.“ unveröffentlichter Abschlußbericht, Wi.-Techn. Projekt im Auftrag der LAUBAG, TU Bergakademie Freiberg, Inst. f. Bohrtechnik u. Fluidbergbau, 97 S. .
- HOTH, N., WAGNER, S. & HÄFNER, F. [1999 A]: „Entwicklung eines numerischen Modells zur Beschreibung und Simulation instationärer hydrogeochemischer Transportprozesse im Grundwasser der Kippe des Tagebaus Jänschwalde und in deren Abstrom.“ unveröffentlichter Folgebericht, Wi.-Techn. Projekt im Auftrag der LAUBAG, TU Bergakademie Freiberg, Inst. f. Bohrtechnik u. Fluidbergbau, 26 S. .
- HOTH, N., FELDMANN, H., RINKER, A., BOY, S., KORNAJEV, A. & HÄFNER, F. [1999 B]: „Ansätze zum Reaktiven Stofftransport und Ergebnisse zu Felduntersuchungen auf der Kippe Espenhain.“ *UFZ-Bericht*, **25**, 60-70.
- HOTH, N. [2000]: „Reduktive und Pufferungsprozesse in Braunkohleabraumkippen – ein wirksamer Selbsthilfemechanismus?“ *Freiberger Forschungshefte – Reihe C*, **482**, 114-127.
- HOTH, N., WAGNER, S. & HÄFNER, F. [2001A]: „Durchführung exemplarischer Säulenversuche – Untersuchung der Auswirkungen des Kippengrundwassers Jänschwalde auf gewachsene Grundwasserleiter.“ unveröffentlichter Abschlußbericht, Wi.-Techn. Projekt im Auftrag der LAUBAG, TU Bergakademie Freiberg, Inst. f. Bohrtechnik u. Fluidbergbau, 111 S. .
- HOTH, N., WAGNER, S. & HÄFNER, F. [2001B]: „Predictive modelling of dump water impact on the surroundings of the lignite dump site Jänschwalde (Eastern Germany).“ *Jour. of Geochem. Exploration*, **73**, 113-121.
- HOTH, N., HUTSCHENREUTER, J. & HÄFNER, F. [2002]: „Migration of AMD water in carbonate buffered aquifers - column flow experiments and their modelling.“ in METZ, V.: „TRePro 2002 : Modelling of Coupled Transport Reaction Processes.“ *Wissenschaftliche Berichte FZ Karlsruhe*, **6721**, 31-35.
- IBGW [1999]: „Präzisierung des Hydrogeologischen Großraummodells Süd – Modell HGMS99.“ unveröffentlichter Bericht, Ingenieurbüro für Grundwasser ,Leipzig.
- IBGW [2000]: „Untersuchungen zur Prognose der Güteentwicklung von Grundwässern und Oberflächenwässern in durch Kippen geprägten Braunkohlenfolgelandschaften“ TP 4 - „Entwicklung eines gekoppelten Oberflächenwasser- und Grundwassergütemodells.“ Abschlußbericht des BMBF Themas 02 WB 9672/2, Ingenieurbüro für Grundwasser, Leipzig.
- JAKOB, W. [1984]: „Zu einigen speziellen Aspekten des Einsatzes geoelektrischer Verfahren zur Beurteilung der Wasserführung in Mischbodenkippen.“ *Neue Bergbautechnik*, **14**, 50-53.
- JUSTIN, P. & KELLY, D.P. [1978A]: „Growth kinetics of *Thiobacillus denitrificans* in anaerobic and aerobic chemostat culture.“ *Jour. Gen. Microbiol.*, **17**, 123-130.
- JUSTIN, P. & KELLY, D.P. [1978B]: „Metabolic changes in *Thiobacillus denitrificans* in accompanying the transition from aerobic to anaerobic growth in continuous chemostat culture.“ *Jour. Gen. Microbiol.*, **17**, 131-137.
- KAUBISCH, M. [1986]: „Zur indirekten Ermittlung hydrogeologischer Kennwerte von Kippenkomplexen, dargestellt am Beispiel des Braunkohlenbergbaues.“ Dissertation, Bergakademie Freiberg, 104 S. .
- KAUBISCH, M. & FISCHER, M. [1984A]: „Zur Berechnung der Filtrationskoeffizienten in Tagebaukippen, Teil 1: Die Ermittlung des Filtrationskoeffizienten aus Korngrößenanalysen in rolligen Kippen.“ *Neue Bergbautechnik*, **14**, 340.
- KAUBISCH, M. & FISCHER, M. [1984B]: „Zur Berechnung der Filtrationskoeffizienten in Tagebaukippen, Teil 2: Die Ermittlung des Filtrationskoeffizienten aus Durchströmungsversuchen für schluffige Feinsande aus Mischbodenkippen.“ *Neue Bergbautechnik*, **14**, 424.

- KAUBISCH, M. & FISCHER, M. [1985]: „Zur Berechnung der Filtrationskoeffizienten in Tagebaukippen, Teil 3: Ermittlung des Filtrationskoeffizienten für schluffige Feinsande aus Mischbodenkippen durch Korngrößenanalysen.“ *Neue Bergbautechnik*, **15**, 142-143.
- KAWELKE [1998]: Staatliche Umweltbetriebgesellschaft Radebeul, 01435 Radebeul, Laborleiter, persönliche Mitteilung vom 5.1.1998
- KNOCH, D., SCHAAF, W., EMBACHER, A., FAB, H.-J., GAST, M., SCHERZER, J. & WILDEN, R. [1999]: „Wasser- und Stoffdynamik von Waldökosystemen auf schwefelsauren Kippsubstraten des Braunkohletagebaus im Lausitzer Revier.“ In HÜTTL, R.F., KLEMM, D., WEBER, E.: „Rekultivierung von Bergbaufolgelandschaften.“ Walter de Gruyter Verlag Berlin - New York., 45-73.
- KNÖLLER, K. [2000]: „Anwendung stabiler Umweltisotope zur Bewertung hydrochemischer Zustände und Prozesse in Folgelandschaften des Braunkohlebergbaus.“, Dissertation, *UFZ-Bericht*, **33**, 153 S. .
- KÖLLE, W., WERNER, P., STREBEL, O. & BÖTTCHER, J. [1983]: „Denitrifikation in einem reduzierten Grundwasserleiter.“ *Vom Wasser*, **61** , 125-147.
- KÖLLE, W., STREBEL, O. & BÖTTCHER, J. [1987]: „Reduced sulfur compounds in sandy aquifers and their interactions with groundwater.“ *Int. Symp. Groundwater monitoring*, Dresden, 12 S. .
- KONONOVA, M.M. [1966]: „Soil organic matter.“ Pergamon Press, London, 544 S. .
- KOOL, J.B., PARKER, J.C. & VAN GENUCHTEN, M.T. [1987]: „Parameter estimation for unsaturated flow and transport models – a review.“ *Journal of Hydrology*, **91**, 255-293.
- KRÄMER, S. [1992]: „Pyritoxidation im Tagebau Inden I und chemische Beeinflussung des Grundwassers durch Braunkohleabraumkippen.“ Diplomarbeit, RU Bochum.
- LAUBAG [1997]: Arbeitsmaterial der LAUBAG.
- LAVES, D., FRANKO, U. & THUM, J. [1993]: „Umsatzverhalten fossiler organischer Substanzen.“ *Arch. Acker-, Pflanzenbau, Bodenkunde*, **37**, 211-219.
- LAVES, D., THUM, J. & WÜNSCHE, M. [1998]: „Wirkung organischer Substanzen auf wesentliche Bodenfruchtbarkeitsmerkmale in Kippsubstraten.“ in PFLUG, W. (Hrsg.) „Braunkohletagebau und Rekultivierung.“, Springer Verlag, 809 – 821.
- LAWA [1994]: „Empfehlungen für die Erkundung, Bewertung und Behandlung von Grundwasserschäden.“ Herausgeber Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA), Stuttgart , 19 S. .
- LEHMANN, F. [2000]: „Geochemische Modellierung zukünftiger aquatischer Zustände von Restseen am Beispiel des Braunkohletagebaus Espenhain.“ Dissertation, TU Berlin, 133 S. .
- LEIBINGER, H. [1964]: „Über Gesetzmäßigkeiten der Bodenentmischung beim Verkippen von Mischböden in Braunkohletagebauen.“ *Freiberger Forschungshefte* , **A 309**.
- LEOPOLD [1964]: „Geologischer Erkundungsbericht Jänschwalde- Mitte/ Hornow.“ Unveröffentlichter Bericht.
- LEUCHS, W. [1985]: „Mikrobiell beeinflusste Stoffverschiebungen zwischen Grundwasser und Grundwasserleiter in einem pleistozänen Aquifer.“ *Zeitschr. Dt. geol. Ges.*, **136**, 553-561.
- LfUG [1994]: „Fakten zur Umwelt“, Eigenverlag , Dresden.
- LIEBNER, F. & KATZUR, J. [1997]: „Reduktionsprozesse in der gesättigten Zone belüfteter kohlehaltiger Tertiärsubstrate des Lausitzer Braunkohlereviers.“ *Mitteilungen der Dt. Bodenkdl. Gesell.* ,**83**, 175–178.
- LIN, S. & MORSE, J.W. [1991]: „Sulfate reduction and iron sulfide mineral formation in Gulf of Mexico anoxic sediments.“ *Amer. Jour. of Science*, **291**, 55 –89.
- LINDBERG, R.D. & RUNNELLS, D.D. [1984]: „Ground water redox reactions: An analysis of equilibrium state applied to Eh measurements and geochemical modelling.“ *Science*, **225**, 925 –927.
- LMBV [1999]: „Montanhydrologisches Monitoring – Grundwasserprobenahme.“ Anlage 7.2, 16 S. .
- LOWSON, R.T.[1982]: „Aqueous oxidation of pyrite by molecular oxygen.“ *Chemical Review*, **82**, 461 - 497.
- LUCKNER, L. & SCHESTAKOW, W.M. [1986]: „Migrationsprozesse im Boden- und Grundwasserbereich.“ Dt. Verlag für die Grundstoffindustrie, Leipzig, 1. Auflage, 372 S.

- LUCKNER, L., GOCKEL, G. & SEIDEL, K.-H. [1997]: „Restlochflutung – Gefahrenabwehr, Wiedernutzbar-
machung und Normalisierung der wasserwirtschaftlichen Verhältnisse im Lausitzer Revier.“ Hrsg.
LMBV, 85 S.
- MATSCHAK, H. [1969 A]: „Beiträge zur Strukturforchung an Tagebaukippen, Teil 1: Rohdichteverteilung in
Abhängigkeit von der Fallhöhe und anderen Faktoren.“ *Bergbautechnik*, **19**, 287-293.
- MATSCHAK, H. [1969 B]: „Beiträge zur Strukturforchung an Tagebaukippen, Teil 2: Bodenkennwerte und ihre
Beziehungen in nichtbindigen Kippenböschungen.“ *Bergbautechnik*, **19**, 397-402.
- MATSCHAK, H. & WALDE, M. [1968]: „Versickerungs- und Feuchtemessungen in den Tagebaukippen.“
Bergbautechnik, **18**, 620-625.
- MATSCHAK, H. & WALDE, M. [1970]: „Untersuchungen über Versickerungs- und Zuflußanteile bei der
Grundwasserregenerierung in Tagebaukippen.“ *Bergbautechnik*, **20**, 561-569.
- MAUTZSCHKE [1984]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten - Peres.“ Unveröffentlicher Bericht, GFE Freiberg.
- MAUTZSCHKE [1986]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten - Cospuden.“ Unveröffentlicher Bericht, GFE
Freiberg.
- MAUTZSCHKE [1988]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten - Peres.“ Unveröffentlicher Bericht, GFE
Freiberg.
- MAYER, K.U. [1999]: „A numerical model for multicomponent reactive transport in variably saturated porous
media.“ Ph D Thesis, University of Waterloo, 286 S. .
- MC KIBBEN, M.A. [1984]: „Kinetics of aqueous oxidation of pyrite by ferric iron, oxygen, and hydrogen
peroxide from pH 1-4 and 20-40 °C.“ Ph.D. thesis, Pennsylvania State Uni.
- MC KIBBEN, M.A. & BARNES, H.L. [1986]: „Oxidation of pyrite in low temperature acidic solutions: rate laws
and surface texture.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **50**, 1509 - 1520.
- MEYER, G. [1950]: „Der Einfluß der geologischen Strukturen im Meuselwitz- Bornaer Braunkohlenrevier auf
Planung und Abbau.“ Freiburger Forschungshefte, **1** .
- MORIN, K.A. & CHERRY, J.A. [1988]: „Migration of acid groundwater seepage from uranium tailings
impoundments. 3, simulation of the conceptual model with application to the seepage area A. *Journal of
Contaminant Hydrology*, **2**, 323-342.
- MORSE, J.W. , MILLERO, F.J. , CORNWELL, J.C. & RICKARD, D.T. [1987]: „The chemistry of the Hydrogen
Sulfide and Iron Sulfide Systems in natural waters.“ *Earth-Science Reviews*, **24**, 1-42.
- MORSE, J.W. & BERNER, R.A. [1995]: „What determines sedimentary C/S ratios?“ *Geochim. Cosmochim. Acta*,
59, 1073-1077.
- MOSES, C.O., NORDSTRÖM, D.K., HERMAN, J.S. & MILLS, A.L. [1987]: „Aqueous pyrite oxidation by dissolved
oxygen and by ferric iron.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **51**, 1561-1571.
- MOSES, C.O. & HERMAN, J.S. [1991]: „Pyrite oxidation at circum-neutral pH.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **55**,
471-482.
- MUALEM, Y. [1976]: „A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media.“
Water Resources Research, **12**, 513 – 522.
- NEKRASSOV, A., BEHR, A., BRUSILOVSKY, A., HÄFNER, F. & POLONSKI, D. [2001]: „Approximation of the Mass
Exchange, Convection and Dispersion Fluxes in the compositional Reservoir Simulation.“, *SPE Paper*,
66387, SPE Symposium Houston, Texas.
- NEKRASSOV, A. [2002]: „Compositional modelling of natural reservoirs.“ Dissertation , TU Bergakademie
Freiberg.
- NICHOLSON, R.V., GILLHAM, R.W. & REARDON, E.J. [1988]: „Pyrite oxidation in carbonate-buffered solutions:
Part 1 - Experimental Kinetics.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **52**, 1077-1085.
- NICHOLSON, R.V., GILLHAM, R.W. & REARDON, E.J. [1990]: „Pyrite oxidation in carbonate-buffered solutions:
Part 2 - Rate control by oxide coatings.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **54**, 395-402.

- NICHOLSON, R.V. [1994]: „Iron sulfid Oxidation Mechanisms: Laboratory Studies.“ Chapter 6 in JAMBOR, J.L. & BLOWES, D.W.: „Short Course Handbook on Enviromental Geochemistry of Sulfid Mine Wastes.“ Mineralogical Association of Canada, Waterloo – Ontario, 163 - 183.
- NITZSCHE, C., GUDERITZ, I. & NEUMANN, V. [1999]: „Hydrochemie der Grundwässer im Bereich des Tagebaues Cospuden und Methodik der Probenahme“. *UFZ Bericht*, **25**, 71 – 91.
- NITZSCHE, H.-M., GLÄSER, H.R. & SCHRECK, M. [1999]: „Faseroptische Temperaturmessungen und gasisotopische Untersuchungen auf der Innenflurkippe des Tagebaurestloches Cospuden.“ *UFZ Bericht*, **25**, 154-161.
- NITZSCHE, O. [1997]: „TReAC- Modell zur Beschreibung des reaktiven Stofftransports im Grundwasser“ Dissertation, *Wissenschaftliche Mitteilungen des Inst. f. Geologie*, **1**, TU Bergakademie Freiberg, 105 S. .
- NIXDORF, B., WOLLMANN, K. & DENEKE, R. [1998]: „Ecological Potentials for Planktonic Development and Food Web Interactions in Extremely Acidic Mining Lakes in Lusatia.“ In GELLER, W. & KLAPPER, H.: „Acidic mining lakes.“ Springer Verlag, Berlin, 147 – 167.
- OEHME [1964]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten - Kohlefeld Espenhain- West“, unveröffentlichter Bericht, GFE Freiberg.
- OEHME [1974]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten - Kohlefeld Espenhain- Ost“, unveröffentlichter Bericht, GFE Freiberg.
- OEHME [1975]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten – Kohlefeld Eythra“, unveröffentlichter Bericht, GFE Freiberg.
- PALAGI, C.L. [1992]: „Generation and Application of Voronoi Grids to Model flow in Heterogeneous Reservoirs" Ph.D Thesis , Stanford University.
- PARKHURST, D.L. [1995]: „Users guide to PHREEQC.“, U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report, 95-4227, Lakewood-Colorado.
- PARKHURST, D.L. & APPELO, C.A.J. [1999]: „User’s guide to PHREEQC 2“, U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report, 99-4259, Denver-Colorado.
- PAUWELS, H., KLOPPMANN, W., FOUCHER, J.C., MARTELAT, A. & FRITSCH, V. [1998]: „Field tracer test for denitrification in a pyrite-bearing schist aquifer.“ *Applied Geochemistry*, **13**, 767-778.
- PAUWELS, H., LACHASSAGNE, P., BORDENAVE, P., FOUCHER, J.C. & MARTELAT, A. [2001]: „Temporal variability of nitrate concentration in a schist aquifer and transfer to surface water.“ *Applied Geochemistry*, **16**, 583-596.
- PFLUG, W. [1998]: „Einführung“ in PFLUG, W.: „Braunkohletagebau und Rekultivierung.“ Springer Verlag, 6.
- PIETZSCH, K. [1963]: „Geologie von Sachsen.“ VEB Dt. Verlag der Wissenschaften. Berlin
- PITZER, K.S. [1991]: „Ionen interaction approach: theory and data correlation.“ In PITZER, K.S. „Activity coefficients in electrolyte solutions.“ CRC Press, Boca Raton, 75 – 153.
- POETER, E.P. & HILL, M.C. [1998]: „Documentation of UCODE – A computer code for universal inverse modelling.“ USGS, Water-Resources Investigations Report 98-4080, Denver Colorado, 116. S
- POSTMA, D., BOESEN, C., KRISTIANSEN, H. & LARSEN, F. [1991]: „Nitrate reduction in an unconfined sandy aquifer: water chemistry, reduction processes and geochemical modelling.“ *Water Resources Research*, **27**, 2027-2045.
- POSTMA, D. & APPELO, C.A.J [1999]: „Reduction of Mn-oxides by ferrous iron in a flow system; column experiment and reactive transport modelling.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **64**, 1237-1247.
- PTAK, T., SCHWARZ, R., HOLDER, T. & TEUTSCH, G. [2000]: „Ein neues integrales Verfahren zur Quantiizierung der Grundwasserimmission, Teil II: Numerische Lösung und Anwendung in Eppelheim.“ *Grundwasser*, **4/00**, 176-183.
- RAISWELL, R. [1988]: „Degree of pyritization of iron as a paleoenvironmental indicator of bottom-water oxygenation.“ *Journal of Sediment. Petrol.*, **58**, 812-819.
- RAISWELL, R. & BERNER, R.A. [1985]: „Pyrite formation in euxinic and semi-euxinic sediments.“ *Amer. Journal of Science*, **285**, 710 –724.

- REICHE, E.-W. [1991]: „Entwicklung, Validierung und Anwendung eines Modellsystems zur Beschreibung und flächenhaften Bilanzierung der Wasser- und Stickstoffdynamik in Böden.“ *Kieler Geografische Schriften*, **79**, 150 S. .
- RENGER, M. & STREBEL, O. [1980]: „Jährliche Grundwasserneubildung in Abhängigkeit von Bodennutzung und Bodeneigenschaften.“ *Wasser und Boden*, **32**, 362-366.
- RICHTER, J., SZYMCAK, P., ABRAHAM, T. & JORDAN, H. [1993]: „Use of combinations of lumped parameter models to interpret groundwater isotopic data.“ *Journal of Contaminant Hydrology*, **14**, 1-13.
- RICKARD, D.T. [1975]: „Kinetics and mechanism of pyrite formation at low temperatures.“ *Amer. Jour. of Science*, **275**, 636-652.
- RINKER, A. [2001]: „Beschreibung der Wasser- und Stoffhaushaltsdynamik devastierter Flächen mit dem Simulationsmodell WASMOD am Beispiel des Braunkohlentagebaus Espenhain.“ Dissertation, TU Bergakademie Freiberg, <http://fridolin.tu-freiberg.de/dissliste.html>, 185 S.
- RITCHIE, A.I.M. [1994]: „Sulfide Oxidation Mechanisms: Controls and Rates of Oxygen Transport.“ in JAMBOR, J.L. & BLOWES, D.W.: „Short Course Handbook on Environmental Geochemistry of Sulfid Mine Wastes.“ Mineralogical Association of Canada, Waterloo – Ontario, 201 - 221.
- ROLLAND, W., CHMIELEWSKI, R., WAGNER, H. & GRÜNEWALD, U. [1998]: „Ergebnisse von Felduntersuchungen zur Pyritverwitterung am Beispiel eines aktiven Tagebaus der Lausitz.“ In GBL: „Vortragsband des 4. GBL Kolloquiums vom 26. – 28.11. 1997.“, Schweitzbartsche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, 48 –56.
- ROLLAND, W., WAGNER, H., CHMIELEWSKI, R. & GRÜNEWALD, U. [2001]: „Evaluation of the long term groundwater pollution by the open cast lignite mine Jänschwalde (Germany).“ *Journal of Geochemical Exploration*, **73**, 97-111.
- RPW [1996]: „Sanierungsrahmenplan Tagebau Espenhain.“ Regionaler Planungsverband Westsachsen.
- SAMES, D. & BOY, S. [1997]: „PCGEOFIM – Anwenderdokumentation“, IBGW Leipzig.
- SCHEFFER, F. & SCHACHTSCHABEL, P. [1998]: „Lehrbuch der Bodenkunde.“, 14 Auflage, Enke Verlag, Stuttgart., 494 S. .
- SCHMIDT [1965]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten Jänschwalde-Mitte.“, Unveröffentlichter Bericht, GFE Halle BT Berlin.
- SCHMIDT [1973]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten Cottbus- Nord.“, Unveröffentlichter Bericht, GFE Halle BT Berlin.
- SCHÖPKE, R. [1999]: „Erarbeitung einer Methodik zur Beschreibung hydrochemischer Prozesse in Kippengrundwasserleitern.“ Dissertation, BTU Cottbus, *Schriftenreihe Siedlungswasserwirtschaft und Umwelt*, **2**.
- SCHOLZ, R.-P., KAUBISCH, M. [1986]: „Zur wasserhaushaltlichen Charakterisierung von Kippenkomplexen im Bergbau.“ *Neue Bergbautechnik*, **16**, 460-463.
- SCHUBERT [1970]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten - Kohlefeld Witznitz.“ unveröffentlichter Bericht, GFE Freiberg.
- SCHUBERT [1977]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten - Kohlefeld Kitzscher.“ unveröffentlichter Bericht, GFE Freiberg.
- SCHULTE, U., STRAUB, H., BERGMANN, A. & OBERMANN, P. [1997]: „Isotopenverhältnisse der Schwefel- und Kohlenstoffspezies aus Sedimenten und tiefen Grundwässern der Niederrheinischen Bucht.“ *Grundwasser*, **3/97**, 103-110.
- SCHWERTMANN, U., SÜSSER, P. & NÄTSCHER, L. [1998] in SCHEFFER, F. & SCHACHTSCHABEL, P.: „Lehrbuch der Bodenkunde.“, 14 Auflage, Enke Verlag, Stuttgart, 108.
- SEIBEL [1985]: „Geologischer Erkundungsbericht Jänschwalde-Neißefeld.“ Unveröffentlichter Bericht.
- SINGER, P.C. & STUMM, W. [1970]: „Acidic Mine Drainage: The Rate-Determining Step.“ *Science*, **167**, 1121 - 1123.
- SMITH, E.E. [1970]: „Sulfide to sulfate reaction mechanism.“ Fed. Water Qual. Admin. Water Poll. Contrl. Res. Study 14010-FPS 02-70.

- STANDKE, G., SUHR, P. [1998]: „Vulkane-Flüsse-Küstenmoore: Die fazielle Vielfalt am Südrand der Nordwest-Europäischen Tertiärsenke.“ GEO Berlin 98 – Exkursionsführer, Exkursion A10, 79 – 98.
- STUMM, W. & MORGAN, J.J. [1996]: „Aquatic Chemistry“. John Wiley, 1022 S. .
- TAYLOR, B.E., WHEELER, M.C. & NORDSTRÖM, D.K. [1984]: „Stable isotope geochemistry of acid mine drainage: Experimental oxidation of pyrite.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **48**, 2669-2678.
- TEUTSCH, G., PTAK, T., SCHWARZ, R. & HOLDER, T. [2000]: „Ein neues integrales Verfahren zur Quantifizierung der Grundwasserimmission, Teil I: Beschreibung der Grundlagen.“ *Grundwasser*, **4/00**, 170-175.
- TU BAF [2000]: „Untersuchungen zur Prognose der Güteentwicklung von Grundwässern und Oberflächenwässern in durch Kippen geprägten Braunkohlenfolgelandschaften.“ TP 1 - „Experimentelle und modellgestützte Untersuchungen zum Stoffumsatz und Stofftransport im Kippenkörper.“ Abschlußbericht des BMBF Themas 02 WB 9669/0, Freiberg, 311 S. .
- UHLMANN, W. [1997]: „Grundwassermonitoring im Bereich aktiver Braunkohletagebaue der LAUBAG – Grundwassergütebericht Juni 1997.“ Wi.-Techn. Projekt im Auftrag der LAUBAG, unveröffentlichtes Gutachten, IWB Possendorf, 38 S. .
- UHLMANN, W. [2000]: „Grundwassermonitoring im Bereich aktiver Braunkohletagebaue der LAUBAG – Grundwassergütebericht Mai 2000.“ Wi.-Techn. Projekt im Auftrag der LAUBAG, unveröffentlichtes Gutachten, IWB Possendorf, 35 S. .
- VAIRAVAMURTHY, M.A. [1995]: „Geochemical transformation of sedimentary sulphur : an introduction.“ *ACS Symposium Series*, **612**, 1-14.
- VAN BERGK, W. [1996]: „Die Auswirkungen der Eisendisulfidoxidation auf die hydrogeochemischen Verhältnisse im Umfeld von Lagerstätten.“ Symposium TU Dresden - Institut für Grundwasserwirtschaft, 115 - 157.
- VAN GENUCHTEN, M. T. [1980]: „A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils.“ *Soil Science Soc. Am. Journal*, **44**, 892-898.
- VWV [1993]: „Verwaltungsvorschrift „Bodenproben“ des Umweltministeriums Baden- Württemberg“, Anlage 4.
- WALTER, A.L [1993]: „Simulation of multi-component reactive transport in Groundwater.“ Master thesis, University of Waterloo, 126 S. .
- WALTER, A.L., FRIND, E.O., BLOWES, D.W., PTACEK, C.J. & MOLSON, J.W. [1994A, B]: „Modelling of multicomponent reactive transport in groundwater.“ *Water Resources Research*, **30**, Part 1: 3137-3148, Part 2: 3149-3158.
- WENDT-POTTHOFF, K. & NEU, T.R. [1998]: „Microbial Processes for Potential in Situ Remediation of Acidic Lakes.“ In GELLER, W. & KLAPPER, H. (Hrsg.) : Acidic mining lakes. Springer Verlag, Berlin, 269 –284.
- WENZEL, D. [1999]: „Bearbeitung von Proben aus Horizontalbohrungen ins Anstehende des RL Störmthal.“, Studienarbeit, Studienrichtung Geoökologie, TU Bergakademie Freiberg, 19 S. .
- WERNER, F. [1999]: „Modellgestützte Untersuchungen zur Genese der Wasserbeschaffenheit in Folgelandschaften des Braunkohlebergbaus.“ Dissertation, DGFZ Dresden, *Proceedings des DGFZ e.V.*, **14**, 128 S. .
- WILKIN, R.T. & BARNES, H.L. [1996]: „Pyrite formation by reactions of iron monosulfides with dissolved inorganic and organic sulfur species.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **60**, 4167-4179.
- WILLIAMSON, M.A. & RIMSTIDT, J.D. [1994]: „The kinetics and electrochemical rate-determining step of aqueous pyrite oxidation.“ *Geochim. Cosmochim. Acta*, **58**, 5443-5454.
- WISOTZKY, F. [1994]: „Untersuchungen zur Pyritoxidation in Sedimenten des Rheinischen Braunkohlerevieres und deren Auswirkungen auf die Chemie des Grundwassers.“ *Besondere Mitteilung zum Deutschen Gewässerkundlichen Jahrbuch*, **58**, Hrsg. LUA NRW, 153 S. .
- WISOTZKY, F. [1998]: „Assesment of the extent of sulfate reduction in lignite mining dumps using thermodynamic equilibrium models.“ *Water, Air and Soil Pollution*, **108**, 285-296.
- WÜNSCHE, M. [1974]: „Die bodenphysikalischen, -chemischen und mineralogischen Eigenschaften der Abraumschichten und ihre Eignung für die Wiederurbarmachung im Braunkohlenrevier südlich von Leipzig.“ Unveröffentlichter Forschungsbericht, VEB GFE Halle - BT Freiberg, 192 S. .

- WÜNSCHE, M. [1987]: „Bodengeologisches Vorfeldgutachten - Kohlefeld Espenhain- Störmthal.“ Unveröffentlichter Bericht, GFE Freiberg.
- YEH, G.T. & TRIPATHI, V.S. [1989]: „A critical evaluation of recent development in hydrogeochemical transport models of reactive multichemical components.“ *Water Resources Research*, **25**, 93-108.
- ZEHNDER, A.J.B. & ZINDER, S.H. [1980]: „The sulfur cycle.“ in HUTZINGER, O.: „The natural environment and the biogeochemical cycles.“ In the collection: „The handbook of environmental chemistry.“ Springer Verlag, Vol. 1, Part A, 105-141.
- ZEIEN, H. & BRÜMMER, G.W. [1989]: „Chemische Extraktionen zur Bestimmung von Schwermetallbindungsformen in Böden.“ *Mitteilungen Dt. Bodenkundl. Gesellschaft*, **59/I**, 505 - 510.
- ZEIEN, H. & BRÜMMER, G.W. [1991]: „Ermittlung der Mobilität und Bindungsformen von Schwermetallen in Böden mittels sequentiellen Extraktionen.“ *Mitteilungen Dt. Bodenkundl. Gesellschaft*, **66/I**, 439 – 442.
- ZHANG, Y.L. & EVANGELOU, V.P. [1996]: „Influence of iron oxide forming conditions on pyrite oxidation.“ *Soil Science*, **161**, 852-864.

Abbildungsverzeichnis

Die Nummerierung der Abbildungen erfolgte unter Einbeziehung der beiden ersten Kapitelnummerierungsebenen (z.B. Abb. 6.2.2 → ist die 2. Abbildung in Kap. 6.2).

ABB. 2.2.1	SCHEMA DER SEDIMENTÄREN PYRITBILDUNG NACH BERNER [1984].....	5
ABB. 2.2.2	$C_{\text{ORG}} / S_{\text{GES}}$ - VERHÄLTNISSE AUS BERNER [1984]	6
ABB. 2.2.3	VERTEILUNG DER $C_{\text{ORG}} / S_{\text{GES}}$ -VERHÄLTNISSE FÜR SEDIMENTE DES BRITISCHEN KARBONS AUS BERNER [1984]	6
ABB. 2.3.1	SCHEMATISCHE DARSTELLUNG DER LAGERUNGSVERHÄLTNISSE IN AFB-TAGEBAUEN	8
ABB. 2.4.1	EH-PH DIAGRAMM - STABILITÄTSFELDER DER EISENSPEZIES (HEM [1961] IN DE HAAN [1991])	13
ABB. 2.4.2	VERWITTERUNGSKREISLAUF DES PYRITS (NACH SINGER & STUMM [1970])	14
ABB. 2.4.3	„SHRINKING CORE“-MODELL AUS NICHOLSON [1994]	14
ABB. 2.4.4	OXIDATIONS-RATEN VON Fe(II) ZU Fe(III) ALS FUNKTION DES PH-WERTES (NACH SINGER & STUMM [1970]).....	15
ABB. 2.4.5	REDUKTIONS- UND OXIDATIONS-PROZESSE MIKROBIELL KATALYSIERTER REDOXREAKTIONEN (AUS STUMM & MORGAN [1996])	19
ABB. 2.4.6	SEQUENZ DER REDOXREAKTIONEN (AUS STUMM & MORGAN [1996])	19
ABB. 2.4.7	$\delta^{13}\text{C}$ -ISOTOPIEWERTE VON NATÜRLICH GEBILDETEM CO_2 UND CH_4 (CLARK & FRITZ [1997]).....	20
ABB. 3.1.1	LAGE DES UNTERSUCHUNGS- GEBIETS ESPENHAIN	26
ABB. 3.1.2	NORMALPROFIL DES TAGEBAUFELDES ESPENHAIN (NACH MIBRAG / LMBV)	28
ABB. 3.2.1	ÜBERSICHTSKARTE DES KOHLEFELDES JÄNSCHWALDE (LAUBAG [1997])	30
ABB. 3.2.2	NORMALPROFIL DES KOHLEFELDES JÄNSCHWALDE UNMAßSTÄBLICH (LAUBAG [1997])	31
ABB. 3.2.3	ABRAUMFÖRDERBRÜCKENVERBAND IM TAGEBAU JÄNSCHWALDE	33
ABB. 4.2.1	STRUKTURELLER MODELLAUFBAU DER MULTIF MODELLIERUNGEN – MODELLVARIANTE 1	38
ABB. 4.2.2	VERWENDETE KAPILLARDRUCK-SÄTTIGUNGS-BEZIEHUNGEN UND RELATIVE DURCHLÄSSIGKEITEN DER BETRACHTETEN SUBSTRATE	40
ABB. 4.3.1	ERGEBNISVERGLEICH SÄTTIGUNGSVERTEILUNG FÜR MODELLVARIANTE 1A MIT MODELLVARIANTE 1B FÜR DIE BERECHNUNGSZEITPUNKTE 1 JAHR, 3 JAHRE, 7JAHRE	42
ABB. 4.3.2	ERGEBNISVERGLEICH SÄTTIGUNGSVERTEILUNG FÜR MODELLVARIANTE 2A, 2B UND 2C FÜR DIE BERECHNUNGSZEITPUNKTE 1 JAHR UND 3 JAHRE.....	43
ABB. 4.3.3	ERGEBNISVERGLEICH SÄTTIGUNGSVERTEILUNG FÜR MODELLVARIANTE 2A, 2B UND 2C FÜR BERECHNUNGSZEITPUNKTE 7 JAHRE UND 15 JAHRE.....	44
ABB. 5.3.1	TEUFENORIENTIERTE DARSTELLUNG VON S_{GES} , S_{DIFF} – GEHALT, $C_{\text{ORG}} / S_{\text{GES}}$ - VERHÄLTNIS UND KARBONAT-, PELIT-GEHALT, HYDROLYTISCHE ACIDITÄT FÜR DIE BOHRUNGEN 49/64, 32/72, 66/71 (NW – SE SCHNITT)	49
ABB. 5.3.2	PROGNOSTIZIERTE A) S_{DIFF} -GEHALTE B) KARBONATGEHALT C) HYDROLYT. ACIDITÄT D) ALKALINITÄTSBILANZ E) C_{ORG} F) „LOG K_F –WERTE“ DER AFB KIPPE ESPENHAIN	52
ABB. 5.4.1	TEUFENORIENTIERTE DARSTELLUNG VON S_{GES} , S_{DIFF} – GEHALT, $C_{\text{ORG}} / S_{\text{GES}}$ -VERHÄLTNIS UND KARBONAT-, PELIT-GEHALT, HYDROLYTISCHE ACIDITÄT FÜR DIE BOHRUNGEN 6482, 1652, 2263 (NE – SW SCHNITT).....	55
ABB. 5.4.2	TEUFENORIENTIERTE DARSTELLUNG VON S_{GES} , S_{DIFF} – GEHALT, $C_{\text{ORG}} / S_{\text{GES}}$ -VERHÄLTNIS UND PELIT GEHALT, HYDROLYTISCHE ACIDITÄT FÜR DIE BOHRUNGEN 1511, 1571	56
ABB. 5.4.3	PROGNOSTIZIERTE A) S_{DIFF} -GEHALT B) KARBONATGEHALT C) HYDROLYT. ACIDITÄT D) ALKALINITÄTSBILANZ E) C_{ORG} F) „LOG K_F –WERTE“ DER AFB KIPPE JÄNSCHWALDE.....	60
ABB. 6.2.1	MITTLERE MOBILISIERTE STOFFMENGEN FÜR VERSCHIEDENE ANSTEHENDE STRATIGRAPHISCHE EINHEITEN IM ÖSTLICHEN VORFELD DES TAGEBAUS ESPENHAIN– DATENGRUNDLAGE FELDMANN IN TU BAF [2000]	63
ABB. 6.2.2	VERSUCH SVE 2 - ZEITLICHE ENTWICKLUNG DER BESCHAFFENHEIT DES SÄULENAUSLAUFS	67
ABB. 6.2.3	VERSUCH SVE 3 - ZEITLICHE ENTWICKLUNG DER BESCHAFFENHEIT DES SÄULENAUSLAUFS	68

ABB. 6.3.1	FELDELUATKENNWERTE DER RKS MF 0/3.....	69
ABB. 6.3.2	MESSFELD ASK ESPENHAIN - GEOPHYSIKALISCHES LEITFÄHIGKEITSMODELL NACH INVERSEM MODELLIERUNG (HGN [2000]).....	70
ABB. 6.3.3	ELUATKENNWERTE – RKS „GY 2“(GEOPHY. MINIMUM), „GY 3“(GEOPHY. MAXIMUM).....	71
ABB. 6.3.4	SCHWEFEL SPEZIES - RKS „GY 2“(GEOPHY. MINIMUM), „GY 3“(GEOPHY. MAXIMUM).....	71
ABB. 6.3.5	SCHWEFEL SPEZIES (NORMIERT) - RKS „GY 3“, MIT REM-AUFNAHME.....	72
ABB. 6.3.6	RKS „ESP 6“- GASPHASENBESCHAFFENHEIT UND MILIEUKENNWERTE DER FELDELUATE.....	73
ABB. 6.4.1	KIPPE ESPENHAIN - FELDELUATKENNWERTE UND $\delta^{13}\text{C}$ WERTE DER TIEFEN BOHRUNGEN „TB 6“, „TB 4“ UND „TB 1“.....	74
ABB. 6.4.2	KIPPE ESPENHAIN - PORENWASSERANALYTIK DER TIEFEN BOHRUNGEN „TB 6“, „TB 4“ UND „TB 1“- SULFAT-, Fe_{GES} -GEHALT, PH-WERT.....	76
ABB. 6.4.3	KIPPE ESPENHAIN - PORENWASSERANALYTIK DER TIEFEN BOHRUNGEN „TB 6“, „TB 4“ UND „TB 1“- ALUMINIUM-, KIESELSÄURE- UND NICKEL-GEHALTE.....	76
ABB. 6.4.4	KIPPE ESPENHAIN - BERECHNETE SÄTTIGUNGSINDIZES FÜR GIPS, CALCIT, SIDERIT, DOLOMIT DER TIEFEN BOHRUNGEN „TB 6“, „TB 4“ UND „TB 1“.....	77
ABB. 6.4.5	BERECHNETE SÄTTIGUNGSINDIZES DER TIEFEN BOHRUNGEN „TB 6“, „TB 4“ UND „TB 1“ - JURBANIT, $\text{SiO}_{2(\text{A})}$, $\text{Al}(\text{OH})_{3(\text{A})}$	77
ABB. 6.4.6	TRITIUMINPUTFUNKTION DES NIEDERSCHLAGES FÜR FREIBERG (NACH RICHTER ET AL. [1993])....	79
ABB. 6.4.7	KIPPE ESPENHAIN - ERGEBNISSE DER TRITIUMMESSUNGEN AN PORENWÄSSERN DER BOHRUNGEN TB 3, TB 5 UND TB6.....	80
ABB. 6.4.8	KIPPE ESPENHAIN - FLÄCHENHAFT DARSTELLUNG DER MITTLEREN GASPHASENBESCHAFFENHEIT DER TIEFEN BOHRUNGEN.....	81
ABB. 6.5.1	RKS „ESP 1 BL“ UND „ESP 1“- GASPHASENBESCHAFFENHEIT, MILIEUKENNWERTE DER FELDELUATE UND TOC-GEHALTE.....	83
ABB. 6.5.2	A) RKS „ESP 7“- GASPHASENBESCHAFFENHEIT UND MILIEUKENNWERTE DER FELDELUATE B) RKS „MF A3“- MILIEUKENNWERTE DER FELDELUATE, SULFATREDUZIERER-KEIMZAHL.....	84
ABB. 6.5.4	GWGM 5258 UND TB 6 - ZEITLICHER VERLAUF DER SULFATREDUZIERERVERSUCHE.....	85
ABB. 6.5.5	$\delta^{34}\text{S}$ -WERTE UND SULFATGEHALTE VON KIPPENGRUNDWASSERMESSSTELLEN DER ASK BZW. AFBK ZWENKAU-COSPUDEN (AUS KNÖLLER [2000]).....	86
ABB. 6.6.1	PROGNOSEERGEBNISSE FÜR DIE AFB-KIPPE ESPENHAIN- A) PH-WERTE B) Fe_{GES} -GEHALTE C) SULFAT-GEHALTE.....	90
ABB. 7.3.1	PROGNOSEERGEBNISSE FÜR DIE AFB-KIPPE JÄNSCHWALDE – A) PH-WERTE B) Fe_{GES} -GEHALTE C) SULFAT-GEHALTE.....	94
ABB. 7.3.2	DARSTELLUNG DER SO_4^{2-} , Fe_{GES} -GEHALTE UND PH-WERTE IN ABHÄNGIGKEIT VOM PE-WERT AN KGWM (DATEN AUS BTUC [1998]).....	95
ABB. 7.3.3	KIPPE JÄNSCHWALDE (GWGM 1340) - ZEITLICHER VERLAUF EINFACHER FLASCHENVERSUCHE ZUR AKTIVIERBARKEIT VON SULFATREDUZIERERN.....	95
ABB. 8.1.1	PROGRAMMTECHNISCHER ABLAUF DER KOPPLUNG PCGEOFIM-PHREEQC (AUS IBGW [2000] BZW. HOTH IN TUBAF [2000]).....	96
ABB. 8.2.1	BENCHMARK-BSP. 1 - VERGLEICH DER MODELLERGEBNISSE VON PCGEOFIM MIT PHREEQC 2 AM SÄULENAUSLAUF.....	98
ABB. 8.3.1	BENCHMARK-BSP. 2 - VERGLEICH DER WESENTLICHEN MODELLERGEBNISSE VON PCGEOFIM MIT PHREEQC 2 UND MINTRAN FÜR BERECHNUNGSZEITPUNKT T= 6D.....	100
ABB. 8.4.1	BENCHMARK-BSP.3 - VERGLEICH WESENTLICHER MODELLERGEBNISSE VON PCGEOFIM MIT DEN MESSWERTEN DES SÄULENVERSUCHS 3 (AUS BRAND [1996]).....	103
ABB. 8.5.1	ELUTIONSVERSUCH „SVE 2“ MODELLVARIANTE 1– VERGLEICH WESENTLICHER MODELLERGEBNISSE VON PCGEOFIM MIT DEN MESSWERTEN.....	105
ABB. 8.5.2	ELUTIONSVERSUCH „SVE 2“ MODELLVARIANTE 2– VERGLEICH WESENTLICHER MODELLERGEBNISSE VON PCGEOFIM MIT DEN MESSWERTEN.....	105
ABB. 9.2.1	REAKTIVES 3D-TRANSPORTMODELL ESPENHAIN – HYDROISOHYPSENPLAN ZEITPUNKT 2010.....	110
ABB. 9.2.2	REAKTIVES 3D-TRANSPORTMODELL ESPENHAIN – HYDROISOHYPSENPLAN ZEITPUNKT 2050.....	110

ABB. 9.2.3	REAKTIVES 3D-TRANSPORTMODELL ESPENHAIN – HYDROISOHYPSENPLAN ZEITPUNKT 2100	111
ABB. 9.2.4	REAKTIVES 3D-TRANSPORTMODELL ESPENHAIN – PH-WERTE FÜR ZEITPUNKT 2002 UND 2100..	111
ABB. 9.2.5	REAKTIVES 3D-TRANSPORTMODELL ESPENHAIN – SULFAT-GEHALTE FÜR ZEITPUNKT 2002 UND 2100.....	112
ABB. 9.2.6	REAKTIVES 3D-TRANSPORTMODELL ESPENHAIN – Fe_{GES} -GEHALTE FÜR ZEITPUNKT 2002 UND 2100	112
ABB. 9.2.7	REAKTIVES 3D-TRANSPORTMODELL ESPENHAIN - BILANZKLASSENEINTEILUNG FÜR RESTLOCH MARKLEEBERG UND RESTLOCH STÖRMTHAL	114
ABB. 9.2.8	FLIEBGWÄSSER PLEIBE – ZEITLICHER VERLAUF DER EXFILTRATION/ INFILTRATION SOWIE EXFILTRIERENDE STOFFFRACHTEN.....	115
ABB. 9.2.9	FLIEBGWÄSSER GÖSEL – ZEITLICHER VERLAUF DER EXFILTRATION/ INFILTRATION SOWIE EXFILTRIERENDE STOFFFRACHTEN.....	115
ABB. 9.3.1	DURCHSTRÖMUNG RESTLOCHVERWITTERUNGSZONEN, MODELLVARIANTE 1 – ZEITLICHE BESCHAFFENHEITSENTWICKLUNG DES IN DEN RESTSEE AUSSTRÖMENDEN GRUNDWASSERS	118
ABB. 9.3.2	DURCHSTRÖMUNG RESTLOCHVERWITTERUNGSZONEN, MODELLVARIANTE 2 – ZEITLICHE BESCHAFFENHEITSENTWICKLUNG DES IN DEN RESTSEE AUSSTRÖMENDEN GRUNDWASSERS	118
ABB. 9.3.3	DURCHSTRÖMUNG RESTLOCHVERWITTERUNGSZONEN, VERGLEICH MODELLVARIANTEN 1 UND 2 – ZEITLICHE ENTWICKLUNG DER $K_{B,6,5}$ -WERTE.....	119
ABB. 10.1.1	MODELLSTRUKTUR DES REAKTIVEN 2D-VERTIKALSCHNITTMODELS JÄNSCHWALDE.....	121
ABB. 10.1.2	REAKTIVES 2D-VERTIKALSCHNITTMODELL JÄNSCHWALDE – K_f -WERTVERTEILUNG [M/S]	122
ABB. 10.1.3	REAKTIVES 2D-VERTIKALSCHNITTMODELL JÄNSCHWALDE – CALCITGEHALTE UND GEOCHEMISCHE ZONIERUNG DES MODELLGEBIETES	123
ABB. 10.2.1	REAKTIVES 2D-VERTIKALSCHNITTMODELL JÄNSCHWALDE – BERECHNUNGSERGEBNISSE (T=0A; T=50A) A) PH-WERT B)SULFAT-GEHALT C) Fe^{2+} -GEHALT.....	125
ABB. 10.2.2	REAKTIVES 2D-VERTIKALSCHNITTMODELL JÄNSCHWALDE – BERECHNUNGSERGEBNISSE (T=100A; T=200A) A) PH-WERT B)SULFAT-GEHALT C) Fe^{2+} -GEHALT.....	126
ABB. 10.2.3	NICHTREAKTIVES 2D-VERTIKALSCHNITTMODELL JÄNSCHWALDE – BERECHNUNGSERGEBNISSE (T=200A) B)SULFAT-GEHALT C) Fe^{2+} -GEHALT.....	127
ABB. 10.3.1	ABSTROMSÄULENVERSUCHE JÄNSCHWALDE – WESENTLICHE BESCHAFFENHEITSPARAMETER DES SÄULENAUSLAUFS, VERSUCHE SVJ 1 UND SVJ 2; ELF UND PH (A,B); SO_4^{2-} , TIC, Si, Fe_{GES} (C,D); Ca^{2+} , Mn_{GES} , Na^+ , Mg^{2+} (E,F)	129
ABB. 10.3.2	ABSTROMSÄULENVERSUCHE JÄNSCHWALDE (VERSUCH SVJ2) – BERECHNETE SÄTTIGUNGSINDIZES DER AUSLAUFPROBEN BEZÜGLICH DER PHASEN GIPS, CALCIT, DOLOMIT UND RHODOCHROSIT ...	130
ABB. 10.3.3	ABSTROMSÄULENVERSUCHE JÄNSCHWALDE HAUPTERGEBNISSE BESCHAFFENHEIT PORENWASSER UND SEQUENTIELLE EXTRAKTION	131
ABB. 10.3.4	VERSUCH SVJ 1 (ANFANGSZUSTAND – KRONE, TEUFE 8-9M) – REM-BILD UND EDX-ANALYSE	132
ABB. 10.3.5	VERSUCH SVJ 1 (ENDZUSTAND – BEREICH 0-15 CM) – REM-BILD MIT DETAILAUFNAHME	133
ABB. 10.3.6	VERSUCH SVJ 2 (ENDZUSTAND – BEREICH 0-15 CM) – REM-BILD MIT DETAILAUFNAHME	133
ABB. 10.3.7	PHREEQC-MODELLIERUNG VERSUCH SVJ 1 - VERGLEICH DER WESENTLICHEN MODELL- UND MESSERGEBNISSE DES SÄULENAUSLAUFS.....	135
ABB. 11.1	SCHEMATISCHE DARSTELLUNG DES SYSTEMS „KIPPE-RESTSTRUKTUREN-GEWACHSENE GRUNDWASSERLEITER“	141

Tabellenverzeichnis

Die Nummerierung der Tabellen erfolgte unter Einbeziehung der beiden ersten Kapitelnummerierungsebenen (z.B. Tab. 6.2.2 → ist die 2. Tabelle in Kap. 6.2).

TAB. 2.3.1	MISCHUNGSKOEFFIZIENTEN VERSCHIEDENER TAGEBAUTECHNOLOGIEN (KAUBISCH [1986])	8
TAB. 4.2.1	ZUSAMMENSTELLUNG DER WESENTLICHEN MODELLPARAMETER	40
TAB. 5.3.1	GEWÄHLTE EINTEILUNG DER STRATIGRAPHISCHEN EINHEITEN	48
TAB. 5.4.1	GEWÄHLTE EINTEILUNG DER ABRAUMRELEVANTEN STRATIGRAPHISCHEN EINHEITEN OBERHALB DES 2. LAUSITZER FLÖZ HORIZONTES (2. LFH)	53
TAB. 6.2.1	MITTLERE KONZENTRATIONEN DER BS- EXTRAKTE DER VERWITTERUNGSVERSUCHE FÜR STRATIGRAPHISCHE EINHEITEN IM BEREICH DES ÖSTLICHEN VORFELDS DES TAGEBAUS ESPENHAIN – DATENGRUNDLAGE VERWITTERUNGSVERSUCHE VON FELDMANN IN TU BAF [2000]	65
TAB. 6.2.2	KENNZEICHNUNG BESCHAFFENHEIT EXPONIERTER RESTLOCHBÖSCHUNGEN- MITTLERE KONZENTRATIONEN DER BS- EXTRAKTE FÜR ANSTEHENDE STRATIGRAPHISCHE EINHEITEN IM BEREICH DES TAGEBAU ESPENHAIN — DATENGRUNDLAGE WENZEL [1999]	65
TAB. 6.2.3	INFILTRATBESCHAFFENHEITEN DER SÄULENVERSUCHE SVE 2 UND SVE 3	66
TAB. 6.4.1	KIPPE ESPENHAIN - MITTLERE GASPHASENBESCHAFFENHEIT DER TIEFEN BOHRUNGEN	81
TAB. 7.1.1	ANSTEHENDE ABRAUMSUBSTRATE TAGEBAU JÄNSCHWALDE - VERGLEICH ZWISCHEN MITTLEREN STOFFGEHALTEN AUS BTUC [1998] UND DER AUSWERTUNG DER VORFELDGUTACHTEN	91
TAB. 8.2.1	BENCHMARK-BSP. 1 - INFILTRAT- UND ANFANGSKONZENTRATIONEN DER FLÜSSIGEN PHASE	98
TAB. 8.3.1	BENCHMARK-BSP. 2 – ANFANGS- UND INFILTRATKONZENTRATIONEN	99
TAB. 8.4.1	BENCHMARK 3 – ANFANGS- UND INFILTRATKONZENTRATIONEN	102
TAB. 8.5.1	ELUTIONSVERSUCH „SVE 2“ – STUFENFUNKTION DER RB 2. ART AM SÄULENEINLAUF	104
TAB. 8.5.2	ELUTIONSVERSUCH „SVE 2“ – ANFANGSBEDINGUNGEN	104
TAB. 9.1.1	REAKTIVES 3D-TRANSPORTMODELL ESPENHAIN - DER GEWACHSENEN GWL UND DER FLUSSRANDBEDINGUNGEN	109

Abkürzungs- und Symbolverzeichnis

Abkürzungen

Abb.	Abbildung
AFB	Abraumförderbrückentechnik
AFBK	Abraumförderbrückenkippe
AG	Arbeitsgruppe
AMD	Acid Mine Drainage
Anl.	Anlage
ARD	Acid Rock Drainage
ASK	Absetzerkippe
BAF	Bergakademie Freiberg
Bhr.	Bohrung
BSE, BS-Extrakte	Bodenwassersättigungsextraktion, -extrakte
BTUC	Brandenburgische Technische Universität Cottbus
CDT	Canon Diablo Troilit (Standard für $\delta^{34}\text{S}$ -Messung)
DGFZ	Dresdner Grundwasser Forschungszentrum e.V.
DIC	Dissolved inorganic Carbon
DOP	Degree of Pyritization
DVWK	Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau
E	Osten
E1, E2	Stadien des Elster-Glazials
EDX	energiedispersiver Detektor
eff. PV, effek. PV	effektiv ausgetauschtes Porenvolumen
ELF	elektrische Leitfähigkeit
FA-C	in Fulvosäuren gebundener Kohlenstoffgehalt
FEM	Finite Elemente Methode
FIB	Forschungsinstitut für Bergbaufolgelandschaften e.V.
fk	feinkiesig
fs	feinsandig
FS	Feinsand
G, GWL	Grundwasserleiter
G.E.O.S.	Geotechnik Erkundung Ökologie Sanierung
geophy.	geophysikalisch
GS	Grobsand
GW	Grundwasser
GWN	Grundwasserneubildung
HA-C	in Huminsäuren gebundener Kohlenstoffgehalt
HB	Horizontalbohrungen
HGN	Hydrogeologie Nordhausen
HS	Hangendschluff
Hydr., hydrl., hydrolyt.	hydrolytische
IBGW	Ingenieurbüro für Grundwasser
IC	Ionenchromatograph(ie)
ICP	induktiv gekoppeltes Plasma
INC	Institut für Nichtklassische Chemie

Kap.	Kapitel
KGM/KGWM	Kippengrundwassermessstelle
KGGM	Kippengrundwassergütemessstelle
KrL	relative Durchlässigkeit der Substrate bezüglich der Gasphase
KrW	relative Durchlässigkeit der Substrate bezüglich der Wasserphase
LAUBAG	Lausitzer Braunkohle Aktiengesellschaft
LAWA	Länder Arbeitsgemeinschaft Wasser
LFH	Lausitzer Flözhorizont
LfUG	Landesamt für Umwelt und Geologie
LMBV	Lausitzer und Mitteldeutsche Bergbau-Verwaltungsgesellschaft
LS	Liegendschluff
MIBRAG	Mitteldeutsche Braunkohle Aktiengesellschaft
Mittelw.	Mittelwert
MO	Mikroorganismen
MPN	most probable number
MS	Mittelsand
N	Norden
NDS	Niederschlag
NW	Nordwesten
PDB	PeeDee-Belemnit (Standard für $\delta^{13}\text{C}$ -Messung)
pmC	percent modern Carbon
PW, PWG	Porenwasser, Porenwassergewinnung
Q	Quartär
RB	Randbedingung
REM	Raster Elektronen Mikroskop
REV	Repräsentatives Elementarvolumen
RKS	Rammkernsondierungen
RL	Restloch
RS	Restsee
S	Süden
S1, S2	Stadien des Saale-Glazials
sequent.	sequentielle
SE	Südosten
SI	Sättigungsindex
Stratigr.	stratigraphisch
T	Tertiär
Tab.	Tabelle
TB	tiefer Bohrungen
TC	Total Carbon
TIC	Total Inorganic Carbon
TOC	Total Organic Carbon
tlw.	teilweise
TU	Tritium Units
u	schluffig
U	Schluff
VWV	Verwaltungsvorschrift
W	Westen

WS	Wassersäule
WS	Wasserstand
ZM	Zwischenmittel

Symbole

\varnothing	Durchmesser
γ	Parameter für Tortuosität und Verkopplung der Luftpfade eines porösen Mediums
γ_i, γ_j	Aktivitätskoeffizient der chemischen Komponente i, des Komplex j
$\delta, \delta_L, \delta_T$	Dispersivität, longitudinale -, transversale -
δ^{13C}	relative Abweichung des $^{13}C/^{12}C$ – Isotopenverhältnisses von einem Standard
δ^{34S}	relative Abweichung des $^{34}S/^{32}S$ – Isotopenverhältnisses von einem Standard
λ	Abbaukoeffizient
μ	dynamische Viskosität
μ	Ionenstärke der Lösung
θ	volumetrischer Wassergehalt
θ_{wr}	volumetrischer Wassergehalt bei Wasserrestsättigung
θ_{ws}	volumetrischer Wassergehalt, bei Wasservollsättigung (= Restsättigung Luft)
ρ_w	Dichte des Wassers
σ	Standardabweichung
ψ	Saugspannungshöhe $\hat{=}$ h_c Kapillardruckhöhe
a_i	Aktivität der Komponente i in der Lösung
A	Scaling-Parameter im VAN GENUCHTEN-Modell = $1/h_g$
A	temperaturabhängige Konstante in DAVIES-Gleichung
$\Sigma A(eq)$	Summe der Anionen
c, c_i, c_k	Konzentration eines gelösten Stoffes
$c_{j,i}$	stöchiometrischer Koeffizient der Komponente i in der komplexierten Spezies j
$c_{k,i}$	stöchiometrischer Koeffizient der Komponente i im Mineral k
$cplx_j$	Molmenge der komplexierten Spezies
C_{org}	Feststoffgehalt an organischem Kohlenstoff
d_{10}	Korngröße bei 10 % Siebdurchgang
d_{60}	Korngröße bei 60 % Siebdurchgang
D	hydrodynamischer Dispersionskoeffizient
e_i	Redoxstatus der Komponente i
e_j	Redoxstatus des Komplexes j
Eh	Elektrisches Potential gegenüber Wasserstoffelektrode
Fe_{ges}	Eisen Gesamt Gehalt
$frac KG_{Kippe}$	fraktioneller Anteil der Korngrößenklasse am Rasterelement der Kippe
$frac KG_j$	fraktioneller Anteil der Korngrößenklasse innerhalb der geologischen Schicht j
$frac m_j$	fraktioneller Anteil der Schicht j an der Gesamtmächtigkeit im Vorfeld
ΔG_r	Änderung der freien Gibbsschen Energie durch eine chemische Reaktion
ΔG_f	freie Bildungsenergie für 1 mol des betrachteten chemischen Stoffes
h_c	Kapillardruckhöhe $\hat{=}$ ψ Saugspannungshöhe
h_g	Scaling-Parameter im VAN GENUCHTEN-Modell = $1/A$
h_p	Druckhöhe

I	Ionenstärke einer Lösung
IAP _k	Ionenaktivitätsprodukt der Lösung bezüglich Mineral k
IBF	Ionenbilanzfehler
k(θ)	Durchlässigkeit für Wasser als Funktion des volumetrischen Wassergehalts
k _f	Durchlässigkeitsbeiwert für Wasser (bei T = 10 °C, ρ _w = 1000 g/cm ³)
k _r	relative Durchlässigkeit für Wasser
k _s	Durchlässigkeit für wassergesättigten Zustand
k _G	Durchlässigkeit für Gas
k _{Gr}	relative Durchlässigkeit für Gas
k _{Gs}	Durchlässigkeit für gasgesättigten Zustand
K	Permeabilität (unabhängig vom Fluid)
K _k , K _j	Gleichgewichtskonstante (Löslichkeitsprodukt) des Minerals k, des Komplex j
ΣK(eq)	Summe der Kationen
m	Fittingparameter im VAN GENUCHTEN-Modell
m	Molmenge
m _i	Molmenge der freien unkomplexierten Spezies der Komponente i
M	Mächtigkeit
M _{GAb;k}	Gesamtabraummächtigkeit am Rasterelement k
M _{Vo;j;k}	Vorfeldmächtigkeit der Schicht j am Rasterelement k
Mn _{ges}	Mangan Gesamt Gehalt
n	Fittingparameter im VAN GENUCHTEN-Modell
n _{eff}	effektive Porosität
nFK	nutzbare Feldkapazität (für pF 1,8 bis 4,2)
p _G	Überdruck in der Gasphase gegenüber Atmosphärendruck
p _w	Überdruck in der Wasserphase gegenüber Atmosphärendruck
pE	negativer dekadischer Logarithmus der Elektronen Aktivität
pF	dekadischer Logarithmus der in cm WS angegebenen Saugspannung
pH	negativer dekadischer Logarithmus der Wasserstoff-Ionen Aktivität
P	Pelitanteil (Summe aus Schluff- und Tonfraktion)
P _{O₂} , P _{CO₂}	Partialdruck in der Gasphase bezüglich O ₂ bzw. CO ₂
P _{Kipp,k}	prognostizierter Mischparameter der Kippe am Rasterelement k
P _{Vo;j;k}	Vorfeldparameter der Schicht j am Rasterelement k
q	Quell-/ Senkenterm
q _k	Quell-/Senkenterm bezüglich der gelösten Komponente k
Q	Durchfluss
r	Korrelationskoeffizient
r	kinetische Umsatzraten für chemische Reaktion
R	Retardationskoeffizient
R _{1,2,...,4}	Residuen verschiedener Gleichungen
s	Wassersättigung
s _e	effektive Wassersättigung
s _{Ge}	effektive Gassättigung
S ⁰	Feststoffgehalt an elementar gebundenem Schwefel
S _{ges}	Gesamtschwefel-Gehalt am Feststoff
S _{red}	Feststoffgehalt an reduziert gebundenem Schwefel
S _{di}	Feststoffgehalt an disulfidisch gebundenem Schwefel
S _{diff}	Differenz zwischen S _{ges} und S _{SO₄}

S_{SO_4}	Feststoffgehalt an sulfatisch gebundenem Schwefel
SI_k	Sättigungsindex der Lösung bezüglich Phase k
SR	Saturation Ratio
Tot e	Redoxstatus eines hydrogeochemischen Systems
Tot _i	Gesamtmenge der Komponente i in einem hydrogeochemischen System
U	Ungleichförmigkeitsgrad
v_a	Abstandsgeschwindigkeit
v_z	Fließgeschwindigkeit in z-Richtung
V	Variationskoeffizient
V	Volumen
w_0	Quell-/ Senkenterm
z_i	elektrische Ladung der Komponente i
z_j	elektrische Ladung

Anlagenverzeichnis

Die Nummerierung der Anlagen erfolgte unter Einbeziehung der beiden ersten Kapitelnummerierungsebenen (z.B. Anl. 5.3.2 → ist die 2. Anlage in Bezug zu Kap. 5.3). Damit ist aus der Anlagennummer auch der Bezug zum Text ersichtlich.

- ANL. 5.2.1 UNTERSUCHUNGSMETHODEN DER BODENGEOLOGISCHEN VORFELDGUTACHTEN
- ANL. 5.3.1 UNTERSUCHUNGSGEBIET ESPENHAIN – LAGE DER VERWENDETEN BOHRUNGEN ZUR VORFELDBILANZIERUNG
- ANL. 5.3.2 UNTERSUCHUNGSGEBIET ESPENHAIN – MÄCHTIGKEITSVERHÄLTNISSE DER WESENTLICHEN ABRAUMRELEVANTEN TERTIÄREN AUSWERTEEINHEITEN
- ANL. 5.3.3 UNTERSUCHUNGSGEBIET ESPENHAIN - AUSWERTEEINHEIT „OBERE MEERESSANDE“ ; FLÄCHENHAFTE VERTEILUNG VERSCHIEDENER PARAMETER
 - A) S_{GES} -GEHALT UND S_{DIFF} -GEHALT
 - B) $C_{\text{ORG}}/S_{\text{GES}}$ - VERHÄLTNIS UND PELITGEHALT
 - C) KARBONATGEHALT UND HYDROLYTISCHE ACIDITÄT
- ANL. 5.3.4 UNTERSUCHUNGSGEBIET ESPENHAIN - AUSWERTEEINHEIT „UNTERE MEERESSANDE“ ; FLÄCHENHAFTE VERTEILUNG VERSCHIEDENER PARAMETER
 - A) S_{GES} -GEHALT UND S_{DIFF} -GEHALT
 - B) $C_{\text{ORG}}/S_{\text{GES}}$ - VERHÄLTNIS UND PELITGEHALT
 - C) KARBONATGEHALT UND HYDROLYTISCHE ACIDITÄT
- ANL. 5.4.1 UNTERSUCHUNGSGEBIET JÄNSCHWALDE – LAGE DER VERWENDETEN BOHRUNGEN ZUR VORFELDBILANZIERUNG
- ANL. 5.4.2 UNTERSUCHUNGSGEBIET JÄNSCHWALDE – HANGENDSCHLUFF 1 DER 1. FB DES 2. LFH; FLÄCHENHAFTE VERTEILUNG DER $C_{\text{ORG}}/S_{\text{GES}}$ -VERHÄLTNISSE UND DER S_{GES} -GEHALTE
- ANL. 5.4.3 UNTERSUCHUNGSGEBIET JÄNSCHWALDE – LIEGENDSCHLUFFE DER 1 UND 2.FB DES 2. LFH; FLÄCHENHAFTE VERTEILUNG DER $C_{\text{ORG}}/S_{\text{GES}}$ -VERHÄLTNISSE UND DER S_{GES} -GEHALTE
- ANL. 5.4.4 UNTERSUCHUNGSGEBIET JÄNSCHWALDE – MÄCHTIGKEITSVERHÄLTNISSE DER ABRAUMRELEVANTEN GEOLOGISCHEN AUSWERTEEINHEITEN
 - A) „QUARTÄR ROLLIG“ UND „QUARTÄR BINDIG“
 - B) „TERTIÄR ROLLIG“ UND „TERTIÄR BINDIG“
- ANL. 5.4.5 UNTERSUCHUNGSGEBIET JÄNSCHWALDE –AUSWERTEEINHEIT „QUARTÄR BINDIG“; FLÄCHENHAFTE VERTEILUNG VERSCHIEDENER PARAMETER
 - A) S_{GES} -GEHALT UND PELITGEHALT
 - B) KARBONATGEHALT UND HYDROLYTISCHE ACIDITÄT
- ANL. 5.4.6 UNTERSUCHUNGSGEBIET JÄNSCHWALDE –AUSWERTEEINHEIT „QUARTÄR ROLLIG“; FLÄCHENHAFTE VERTEILUNG VERSCHIEDENER PARAMETER
 - A) S_{GES} -GEHALT UND PELITGEHALT
 - B) KARBONATGEHALT UND HYDROLYTISCHE ACIDITÄT
- ANL. 5.4.7 UNTERSUCHUNGSGEBIET JÄNSCHWALDE –AUSWERTEEINHEIT „TERTIÄR BINDIG“; FLÄCHENHAFTE VERTEILUNG VERSCHIEDENER PARAMETER
 - A) S_{GES} -GEHALT UND S_{DIFF} -GEHALT
 - B) $C_{\text{ORG}}/S_{\text{GES}}$ -VERHÄLTNIS UND C_{ORG} -GEHALT
 - C) PELITGEHALT UND HYDROLYTISCHE ACIDITÄT
- ANL. 5.4.8 UNTERSUCHUNGSGEBIET JÄNSCHWALDE –AUSWERTEEINHEIT „TERTIÄR ROLLIG“; FLÄCHENHAFTE VERTEILUNG VERSCHIEDENER PARAMETER
 - A) S_{GES} -GEHALT UND S_{DIFF} -GEHALT
 - B) $C_{\text{ORG}}/S_{\text{GES}}$ -VERHÄLTNIS UND C_{ORG} -GEHALT
 - C) PELITGEHALT UND HYDROLYTISCHE ACIDITÄT

- ANL. 6.1.1 ANGEWANDTE UNTERSUCHUNGSMETHODEN
 - A) FESTPHASE - PROBENAHME UND UNTERSUCHUNGSMETHODEN
 - B) WASSERPHASE - PROBENAHME UND UNTERSUCHUNGSMETHODEN
 - C) GASPHASE - PROBENAHME UND UNTERSUCHUNGSMETHODEN
- ANL. 6.1.2 UNTERSUCHUNGSGEBIET ESPENHAIN – IONENBILANZFEHLER DER WASSERANALYSEN
- ANL. 6.5.1 STOFFGRUPPENANALYSE DER ORGANISCHEN SUBSTANZ AUS Wünsche [1974]
- ANL. 6.6.1 KIPPENGRUNDWASSER-BESCHAFFENHEITSPROGNOSE, BEISPIEL DER PHREEQC –INPUTDATEI
- ANL. 8.3.1 BENCHMARK-BEISPIEL 2 – VERGLEICH DER MODELLERGEBNISSE VON PCGEOFIM, PHREEQC 2 UND MINTRAN
 - A) ERGEBNISVERGLEICH FÜR BERECHNUNGSZEITPUNKT T=12D
 - B) ERGEBNISVERGLEICH FÜR BERECHNUNGSZEITPUNKT T=24D
- ANL. 9.2.1 RS MARKLEEBERG – PROGNOSE DER KIPPENSEITIGEN STOFFMASSENSTRÖME
- ANL. 9.2.2 RS STÖRMTHAL – PROGNOSE DER KIPPENSEITIGEN STOFFMASSENSTRÖME
- ANL. 9.3.1 MODELL ZUR DURCHSTRÖMUNG VON RESTLOCHVERWITTERUNGSZONEN – ZUSAMMENSTELLUNG CHEMISCHE ANFANGSBEDINGUNGEN
- ANL. 9.3.2 MODELL ZUR DURCHSTRÖMUNG VON RESTLOCHVERWITTERUNGSZONEN, MODELLVARIANTE 1 – KONZENTRATIONSVERTEILUNGEN IM MODELLGEBIET
- ANL. 9.3.3 MODELL ZUR DURCHSTRÖMUNG VON RESTLOCHVERWITTERUNGSZONEN, MODELLVARIANTE 2 – KONZENTRATIONSVERTEILUNGEN IM MODELLGEBIET
- ANL. 10.1.1 REAKTIVES 2D-VERTIKALSCHNITTMODEL JÄNSCHWALDE – GEOCHEMISCHE ZONIERUNG
- ANL. 10.3.1 ABSTROMSÄULENVERSUCHE JÄNSCHWALDE – KONSERVIERUNG VON INFILTRAT UND GWL-MATERIAL
- ANL. 10.3.2 ABSTROMSÄULENVERSUCHE JÄNSCHWALDE – BESCHAFFENHEIT DER DURCHSTRÖMUNGSFLUIDE
- ANL. 10.3.3 UNTERSUCHUNGSGEBIET JÄNSCHWALDE – IONENBILANZFEHLER DER WASSERANALYSEN
- ANL. 10.3.4 MODELLIERUNG ABSTROMSÄULENVERSUCH SVJ 1 – HYDROGEOCHEMISCH RELEVANTER TEIL DER PHREEQC INPUTDATEI

Anl. 5.2.1 Untersuchungsverfahren der Bodengeologischen Vorfeldgutachten

Bodenphysikalische Untersuchungen

Die Korngrößenanalyse erfolgte vergleichbar zur DIN 19683. Es wurde die Grobbodenfraktion (Kies > 2 mm) sowie die Sandfraktionen (Grob-, Mittel- und Feinsand) bestimmt. Die Pelitfraktion (< 2 mm) wurde durch Sedimentationsuntersuchung (Pipetierung nach KÖHN) in die Fraktionen Grob-, Mittel-, Feinschluff und Ton untergliedert.

Bodenchemische Untersuchungen

Die chemischen Untersuchungen erfolgten alle an der Feinbodenfraktion (< 2mm). Die Werteangaben für die einzelnen Proben beziehen sich also nur auf diesen Fraktionsteil.

Boden-pH [-]	Maß für die „freie Säure“ im Porenwasser <i>Bestimmung</i> : 40 g Feinboden in 100 ml 0,1 n KCL- Lösung aufgeschlämmt (erfasst auch einen Anteil der am Austausch gebundenen Acidität)
H- Wert [mval/100gSubstrat]	Maß für die Belegung der KAK mit H^+ , Al^{3+} , Fe^{2+} -Ionen <i>Bestimmung</i> : 20 g Boden mit 250 g Boratpufferlösung 2 h geschüttelt. Eluat mit 0,1 n HCL - Lösung gegen Tashiroindikator titrieren.
S- Wert [mval/100gSubstrat]	Maß für die Belegung der KAK mit Erdalkalien und Alkalien <i>Bestimmung nach VAGELER & ALTEN</i> : 50 g Boden mit 250/ 500 ml 0,1 n NH_4Cl -Lösung 2 h geschüttelt. 25 ml Filtrat mit Formaldehyd versetzt und mit 0,1 n NaOH gegen Phenolphthalein titriert. <i>Bestimmung nach Kappen</i> : 20 g Boden mit 100 ml 0,1 n HCL-Lösung 1 h geschüttelt. 50 ml Filtrat mit 0,1 n NaOH gegen Phenolphthalein titriert.
T- Wert [mval/100gSubstrat]	Maß für die gesamte KAK. <i>Bestimmung</i> : rechnerische Ermittlung aus dem H- und dem S-Wert.
V- Wert [%]	Maß für die prozentuale Belegung der KAK mit Erdalkalien und Alkalien <i>Bestimmung</i> : rechnerisch S- Wert/ T- Wert * 100
hydrolytische Acidität [ml/ 50 g Substrat]	Maß für die „freie“ und die an die Austauscher gebundene Acidität <i>Bestimmung</i> : 40 g Boden mit 100 ml 1 n Ca-acetat-Lösung 1 h geschüttelt. 50 ml Filtrat mit 0,1n NaOH gegen Phenolphthalein titriert.
Austauschacidität [ml/ 50 g Substrat]	Maß für die an die Austauscher gebundene Acidität <i>Bestimmung</i> : 40 g Boden mit 100 ml 1 n KCL-Lösung 1 h geschüttelt. 50 ml Filtrat mit 0,1n NaOH gegen Phenolphthalein titriert.

C_{org} - Gehalt [Ma %]	Maß für den organischen Kohlenstoffgehalt (TOC) <i>Bestimmung:</i> Nassoxidation mit K ₂ Cr ₂ O ₇ in schwefelsaurer Lösung, Rücktitration des nicht verbrauchten Dichromats (durch H ₂ SO ₄ wird TIC vorher ausgetrieben und nicht mit bestimmt)
CaCO₃ - Gehalt [Ma %]	Maß für den Karbonatgehalt (Summe aller karbonatischen Minerale angegeben als CaCO ₃) <i>Bestimmung nach FRESENIUS-CLASSEN:</i> 0,1–3g Boden im Stickstoffstrom mit 70 %iger HClO ₄ zur Reaktion bringen, 15 min Stickstoffspülung Gravimetrische Bestimmung der Zersetzung (TGL 168-2000, Blatt 5) <i>Bestimmung nach SCHEIBLER:</i> 0,5–2g Boden in Scheiblerapparatur, Probe versetzen mit 20 ml 10% HCL, CO ₂ -Bestimmung über Druckausgleich.
CaO, MgO, P₂O₅, K₂O [Ma %]	Bestimmung der einzelnen Elemente als Oxide aus dem 10%-igen Salzsäureauszug CaO, MgO → komplexometrisch; P ₂ O ₅ → gravimetrisch; K ₂ O → flammen-fotometrisch
S_{ges} [Ma% SO ₃]	Bestimmung des Gesamtschwefel-Gehaltes <i>gravimetrische Bestimmung:</i> Nach Aufschluss mittels Natriumperoxyd und Soda erfolgt Ausfällung als BaSO ₄ , gravimetrische Bestimmung <i>Bestimmung durch Verbrennung:</i> Nach TGL 14481 Verbrennung der Probe im Sauerstoffstrom bei 1300 °C, jodometrische bzw. alkalimetrische Titration
S_{SO4} [Ma% SO ₃]	Bestimmung des Sulfatschwefel-Gehaltes <i>Bestimmung:</i> 10 ml des Salzsäureaufschlusses wurden nach der gravimetrischen S _{ges} -Methodik behandelt

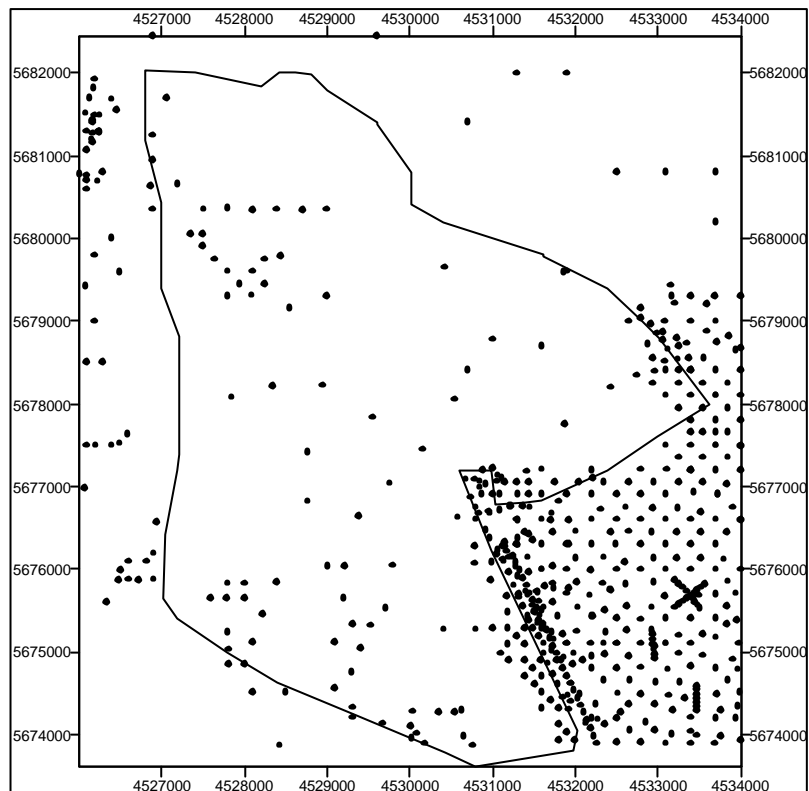
Betrachtungen zur Probenlagerung

Auf Grund der insgesamt hohen Probenanzahl lagerten die Proben im feldfeuchten Zustand eine Zeit, ehe sie bei 70°C getrocknet wurden und in gemahlener Form für die Analytik vorlagen (KAWELKE [1998]). Es ist somit von einer Überprägung der verwitterungsrelevanten Werte auszugehen.

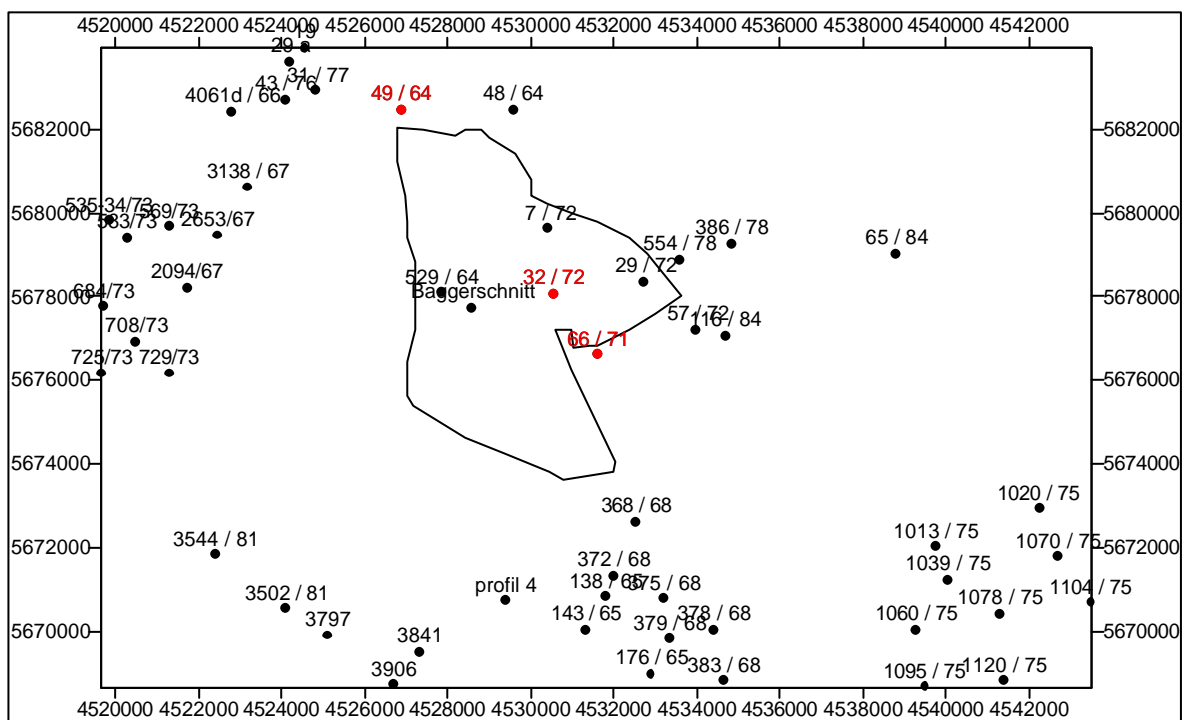
Schwefelspezies-Verhältnisse

Die Differenz aus S_{ges} und S_{SO4} wird in der hier vorliegenden Arbeit als S_{diff} bezeichnet. Die Größe eignet sich zur Kennzeichnung der Disulfidgehalte unter der Voraussetzung, dass die Gehalte an organischem, elementarem und monosulfidischen Schwefel als vernachlässigbar angesehen werden. Eine gewisse Überprägung der Gehalte auf Grund der Probenlagerung (siehe oben) kann nicht ausgeschlossen werden.

Anl. 5.3.1 Untersuchungsgebiet Espenhain – Punktinformationen zur Vorfeldbilanzierung

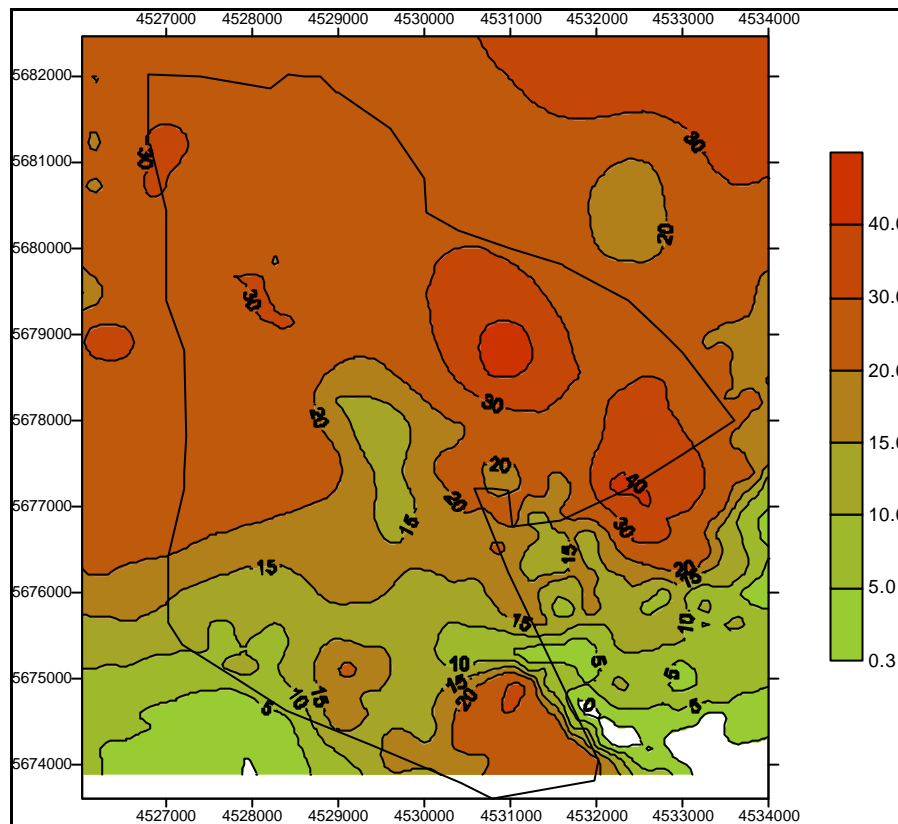


Lage der verwendeten Vorfeldbohrungen zur Mächtigkeitsbilanzierung (mit Kippenumriss)

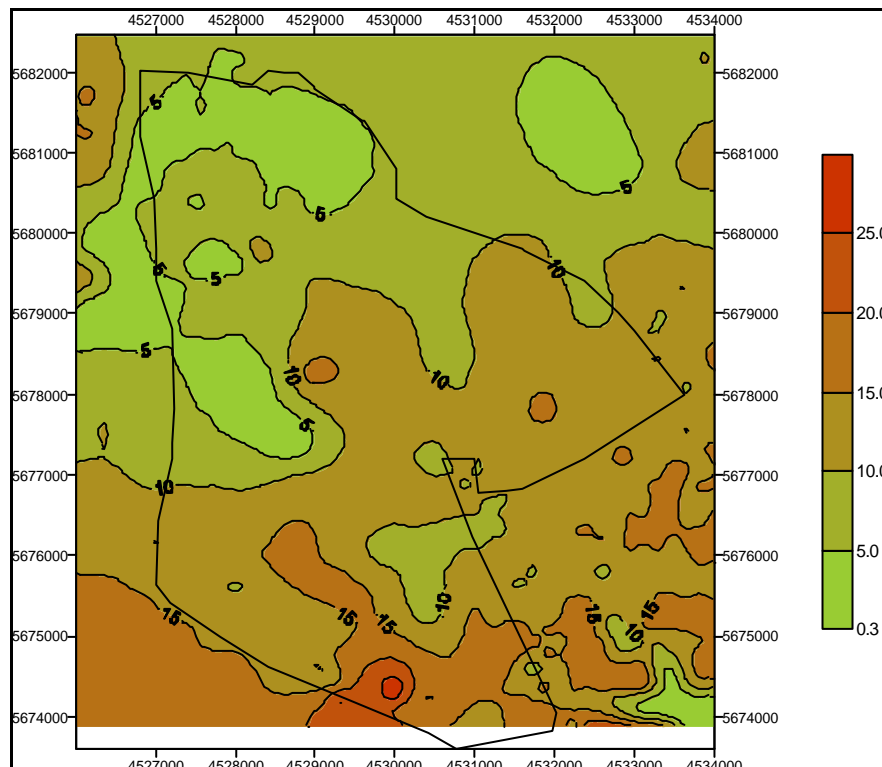


Lage der verwendeten Vorfeldbohrungen zur geochemisch/ bodenphysikalischen Kennzeichnung (mit Kippenumriss), rot dargestellt = in Kap. 5.3.2 ausgewertete Einzelbohrungen

Anl. 5.3.2 Untersuchungsgebiet Espenhain – Mächtigkeitsverhältnisse der wesentlichen abraumrelevanten tertiären Auswerteeinheiten (Datengrundlage Bohrdatenbank LfUG Sachsen)

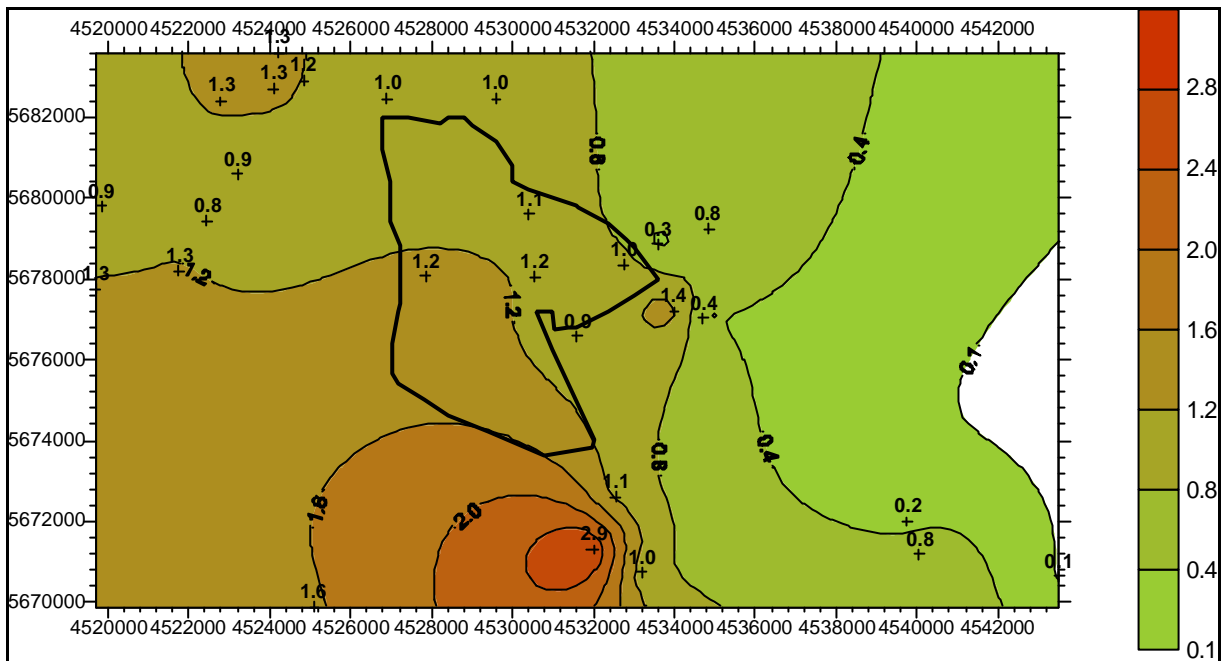


Auswerteeinheit „Obere Meeressande“ - Mächtigkeit [m] im AFBK-Abraum

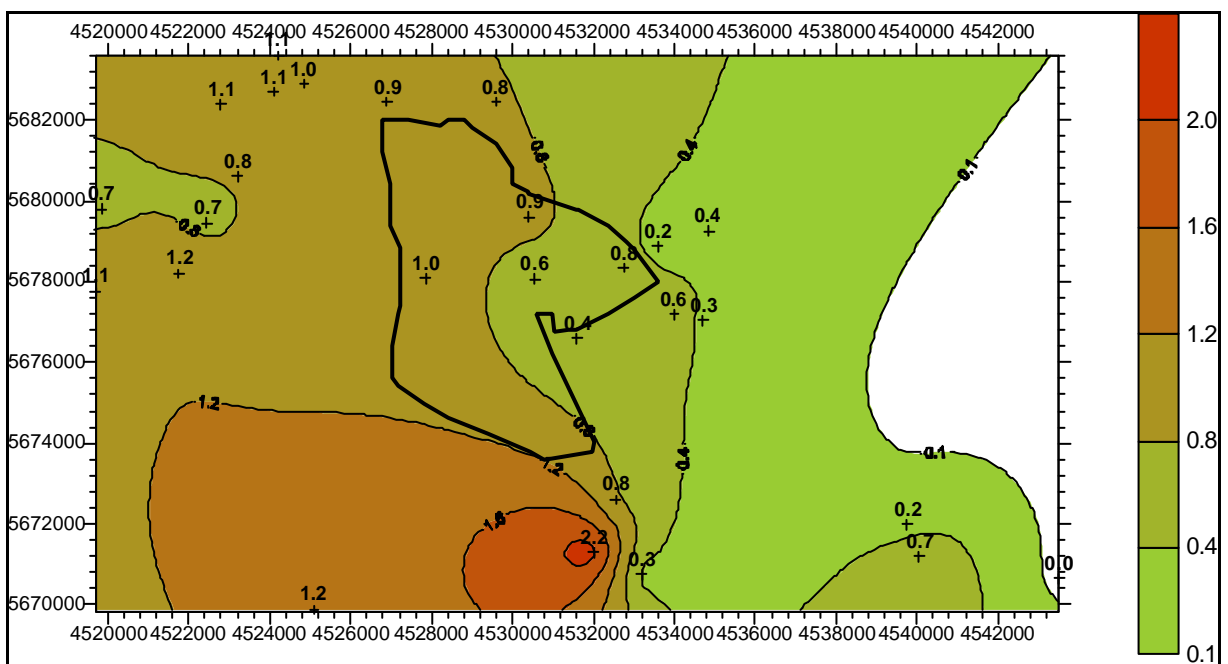


Auswerteeinheit „Obere Meeressande“ - Mächtigkeit [m] im AFBK-Abraum

**Anl. 5.3.3 a Untersuchungsgebiet Espenhain - Auswerteeinheit „Obere Meeressande“ ;
 flächenhafte Verteilung der Parameter S_{ges} -Gehalt und S_{diff} -Gehalt
 (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

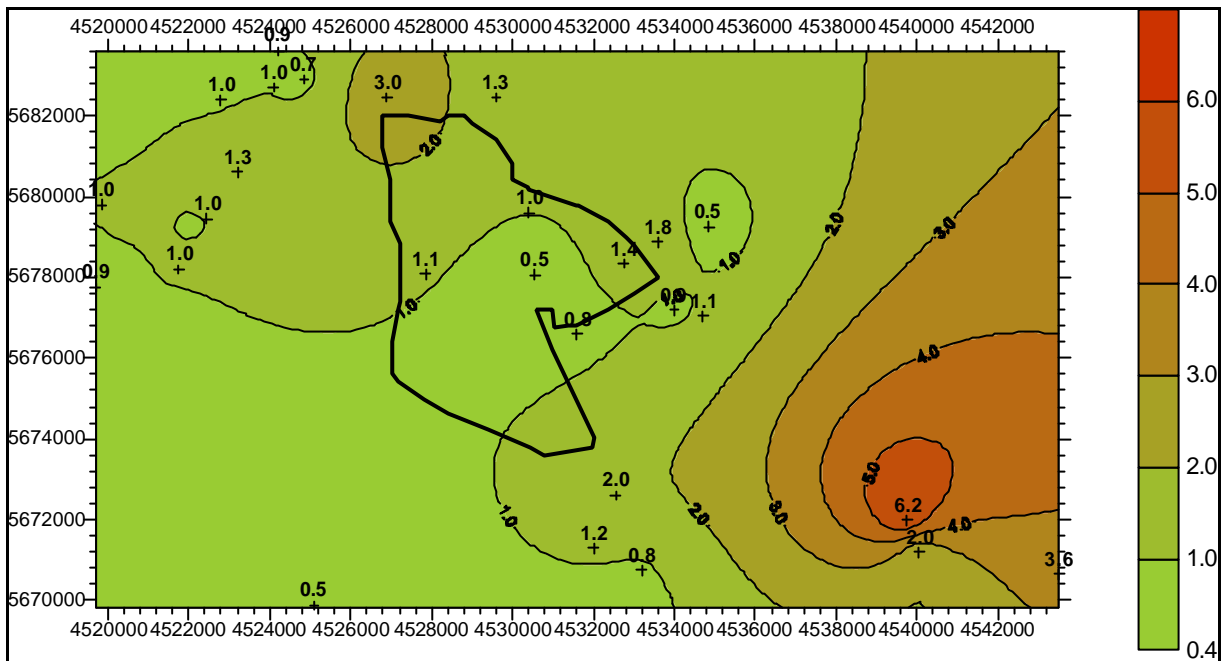


„Obere Meeressande“ – Gewichtete S_{ges} -Gehalte [Ma% S] (mit Kippenumriss)

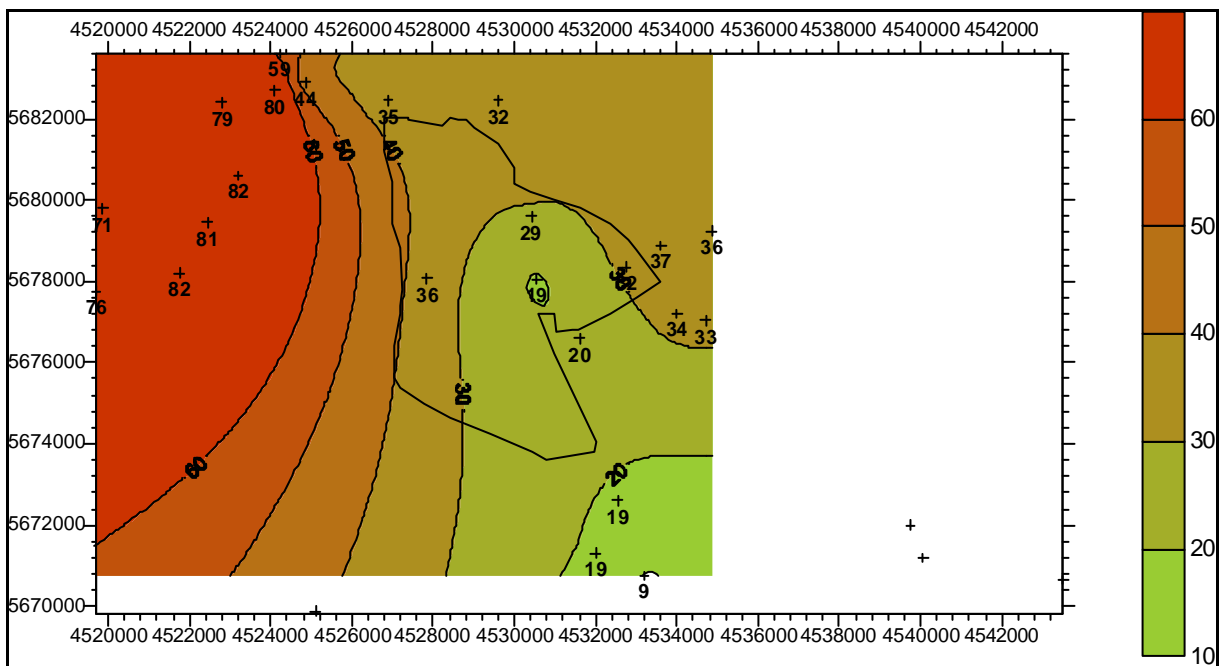


„Obere Meeressande“ – Gewichtete S_{diff} -Gehalte [Ma% S] (mit Kippenumriss)

**Anl. 5.3.3 b Untersuchungsgebiet Espenhain - Auswerteeinheit „Obere Meeressande“ ;
 flächenhafte Verteilung der Parameter C_{org}/S_{ges} -Verhältnis und Pelitgehalt
 (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

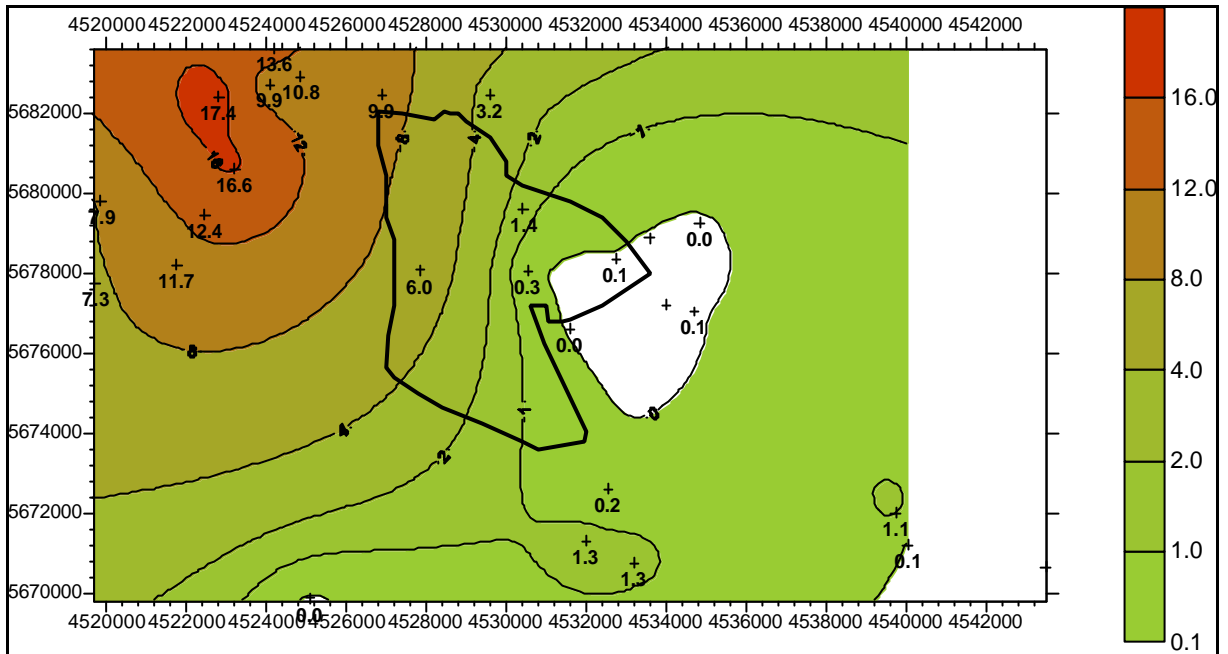


„Obere Meeressande“ – Gewichtete C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse [-] (mit Kippenumriss)

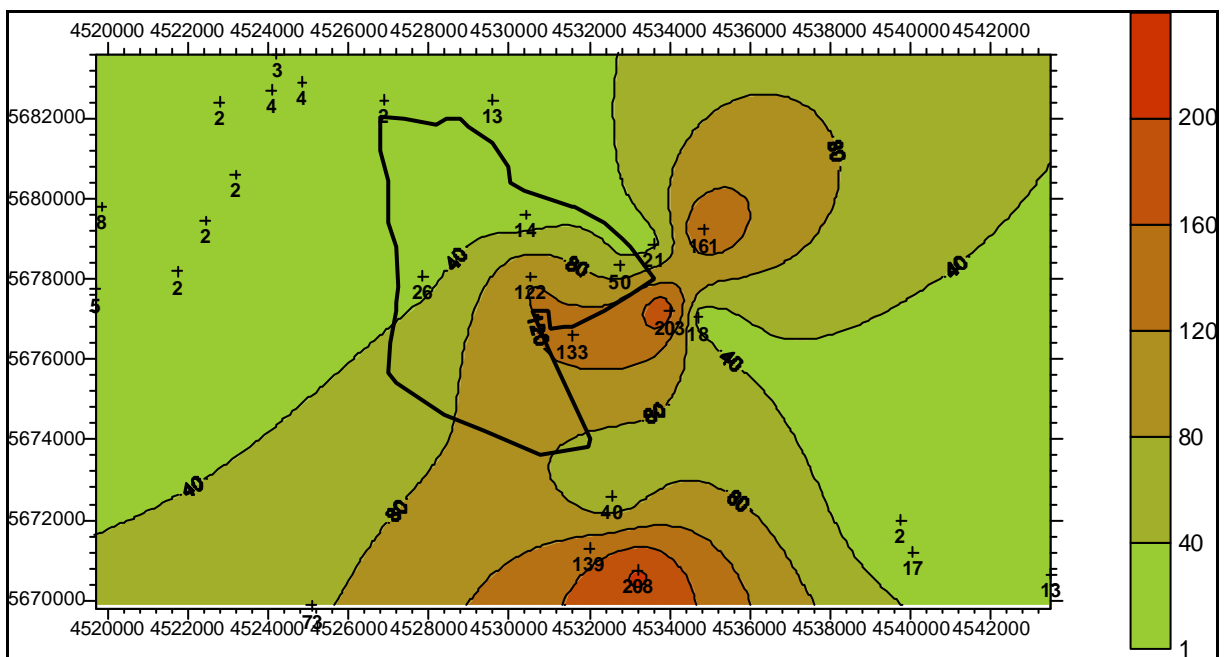


„Obere Meeressande“ – Gewichtete Pelitgehalte [Ma%] (mit Kippenumriss)

**Anl. 5.3.3 c Untersuchungsgebiet Espenhain - Auswerteeinheit „Obere Meeressande“ ;
flächenhafte Verteilung der Parameter Karbonatgehalt und hydrolytische
Acidität (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

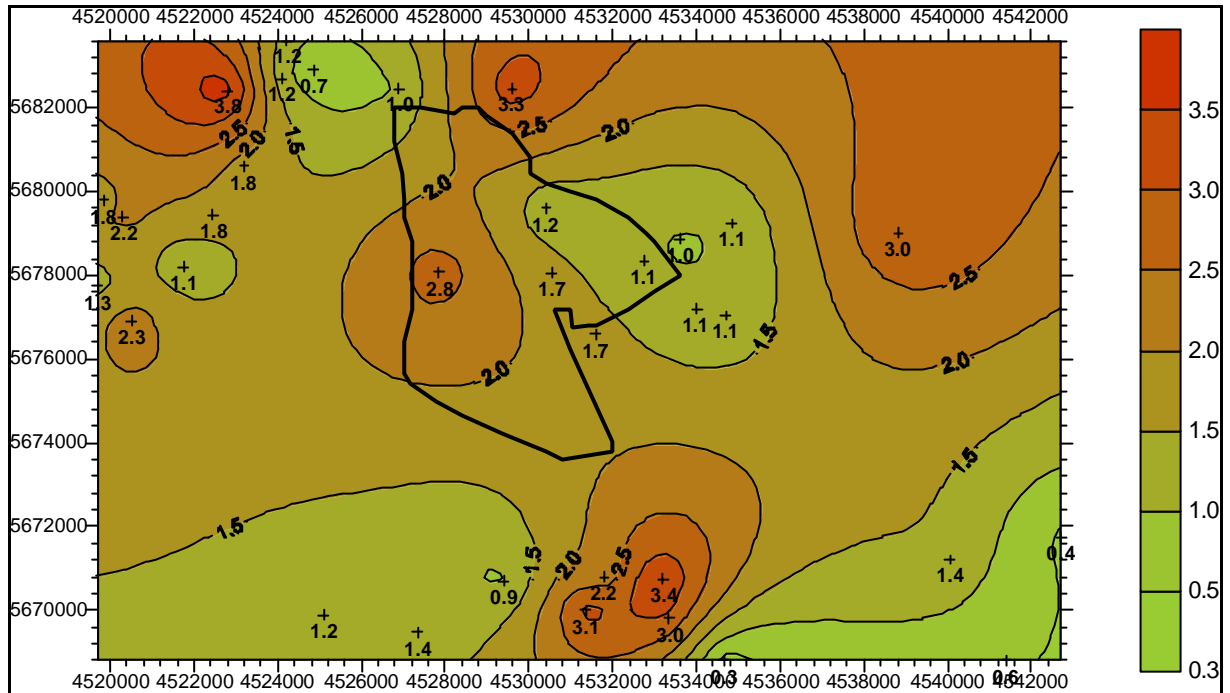


„Obere Meeressande“ – Gewichtete Karbonatgehalte [Ma% CaCO₃] (mit Kippenumriss)

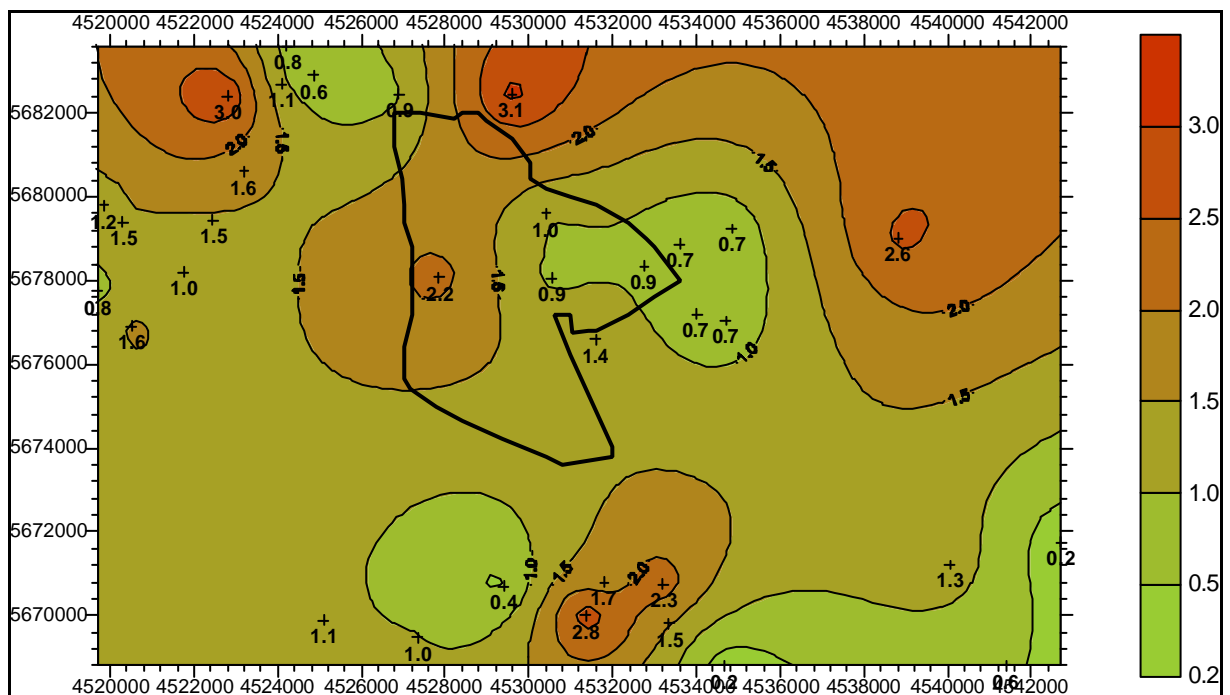


„Obere Meeressande“ – Gewichtete hydrolytische Aciditäten [ml 0,1n NaOH/50 g Substrat]
(mit Kippenumriss)

**Anl. 5.3.4 a Untersuchungsgebiet Espenhain - Auswerteeinheit „Untere Meeressande“ ;
 flächenhafte Verteilung der Parameter S_{ges} -Gehalt und S_{diff} -Gehalt
 (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

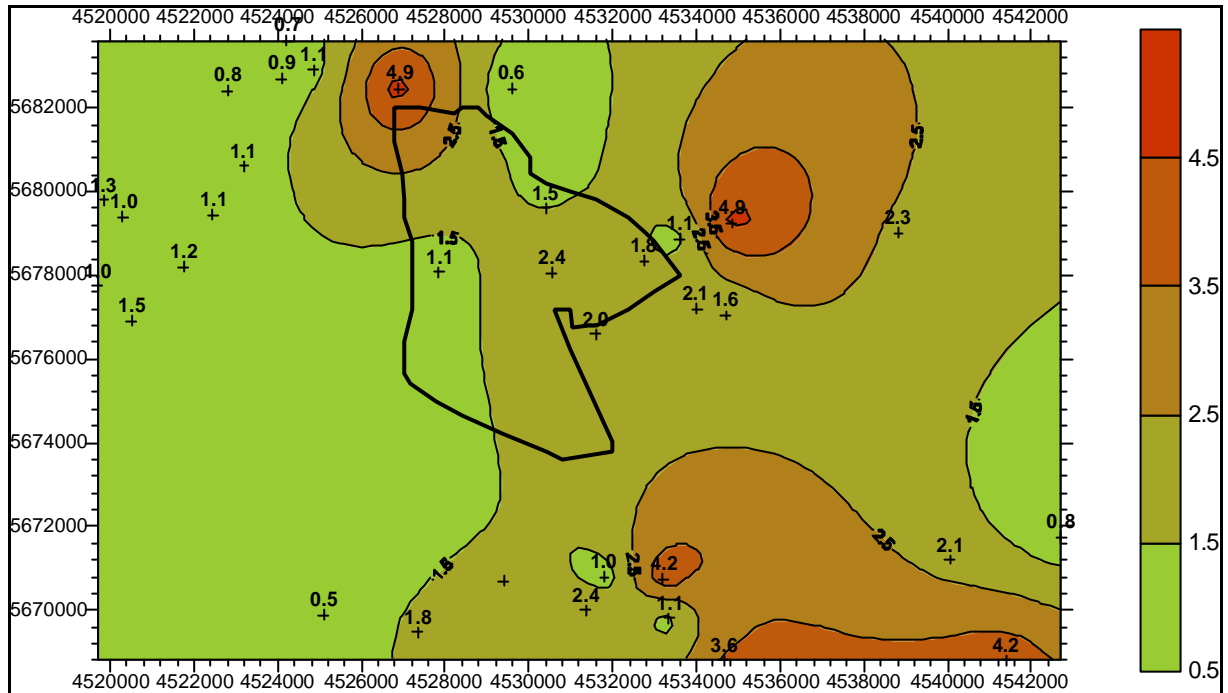


„Untere Meeressande“ – Gewichtete S_{ges} -Gehalte [Ma% S] (mit Kippenumriss)

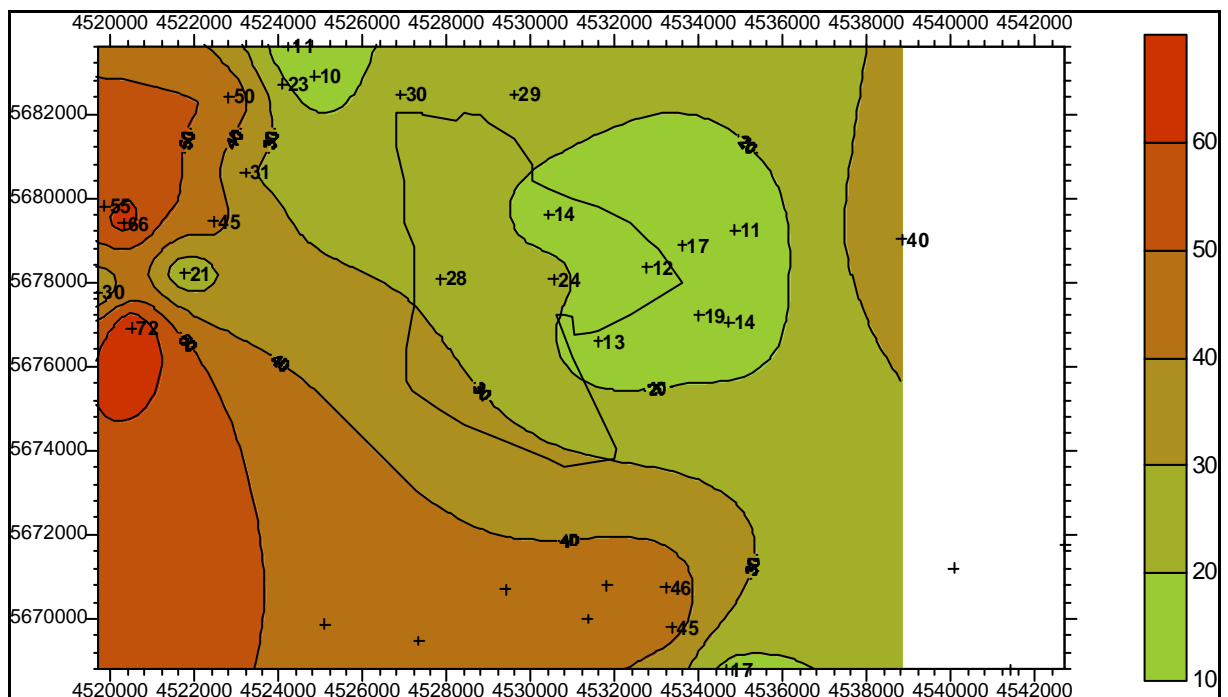


„Untere Meeressande“ – Gewichtete S_{diff} -Gehalte [Ma% S] (mit Kippenumriss)

**Anl. 5.3.4 b Untersuchungsgebiet Espenhain - Auswerteeinheit „Untere Meeressande“ ;
 flächenhafte Verteilung der Parameter C_{org}/S_{ges} -Verhältnis und Pelitgehalt
 (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

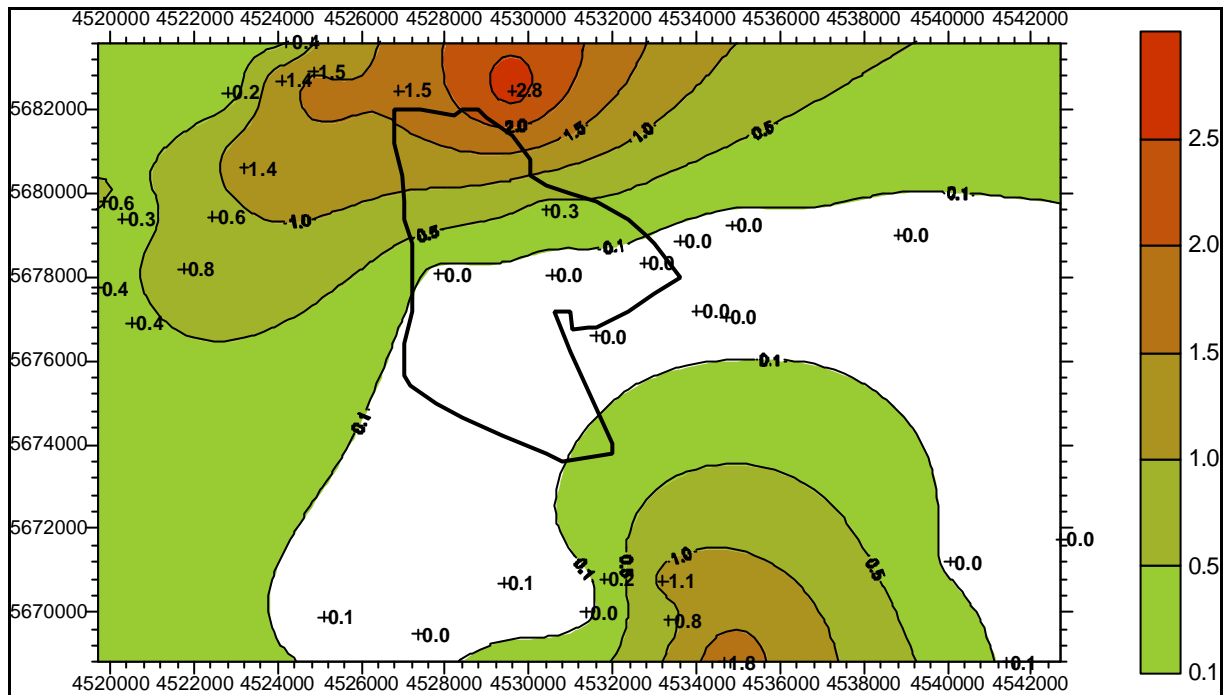


„Untere Meeressande“ – Gewichtete C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse [-] (mit Kippenumriss)

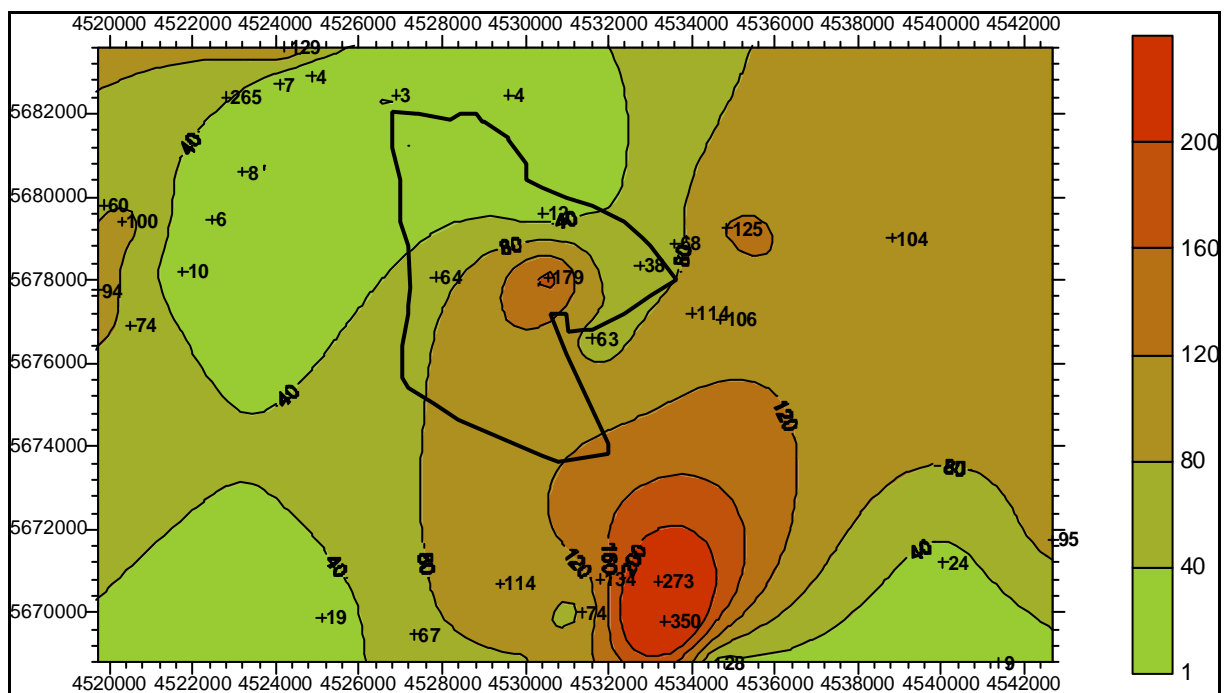


„Untere Meeressande“ – Gewichtete Pelitgehalte [Ma%] (mit Kippenumriss)

**Anl. 5.3.4 c Untersuchungsgebiet Espenhain - Auswerteeinheit „Untere Meeressande“ ;
flächenhafte Verteilung der Parameter Karbonatgehalt und hydrolytische
Acidität (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

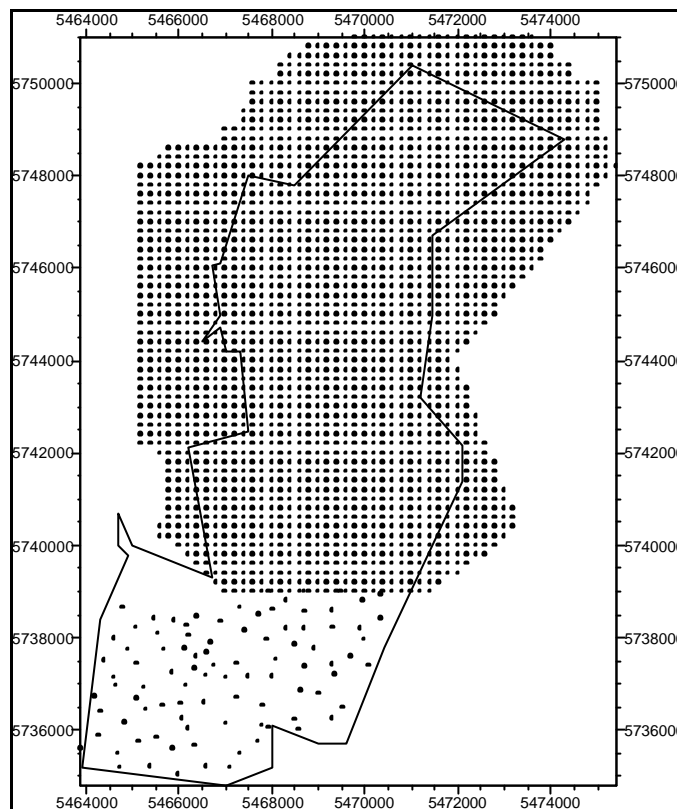


„Untere Meeressande“ – Gewichtete Karbonatgehalte [Ma% CaCO₃] (mit Kippenumriss)

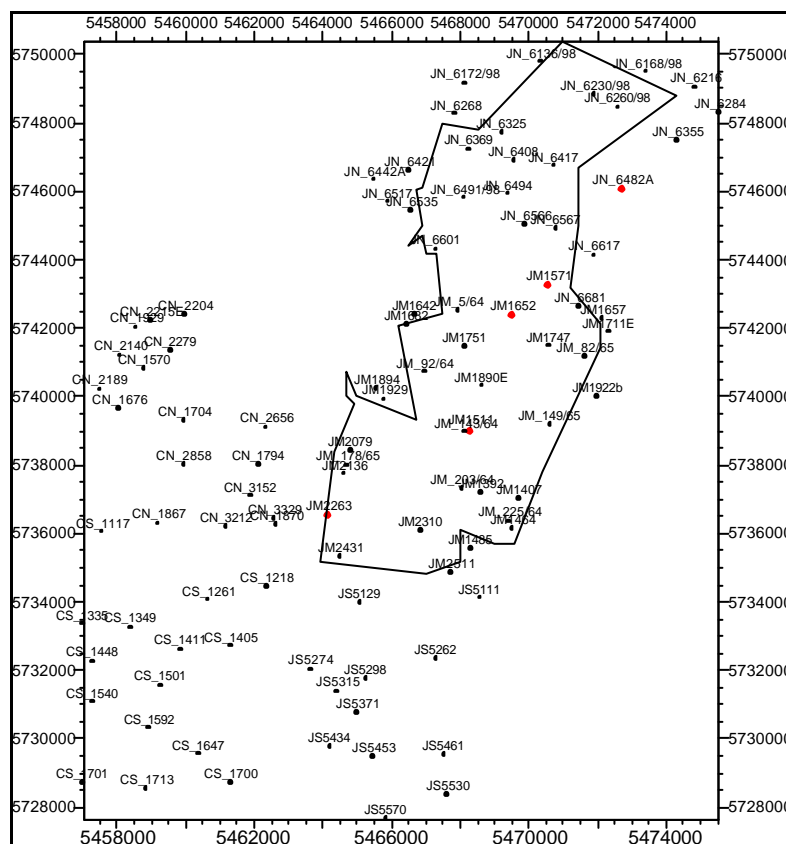


„Obere Meeressande“ – Gewichtete hydrolytische Aciditäten [ml 0,1n NaOH/50 g Substrat] (mit Kippenumriss)

Anl. 5.4.1 Untersuchungsgebiet Jänschwalde – Punktinformationen zur Vorfeldebilanzierung

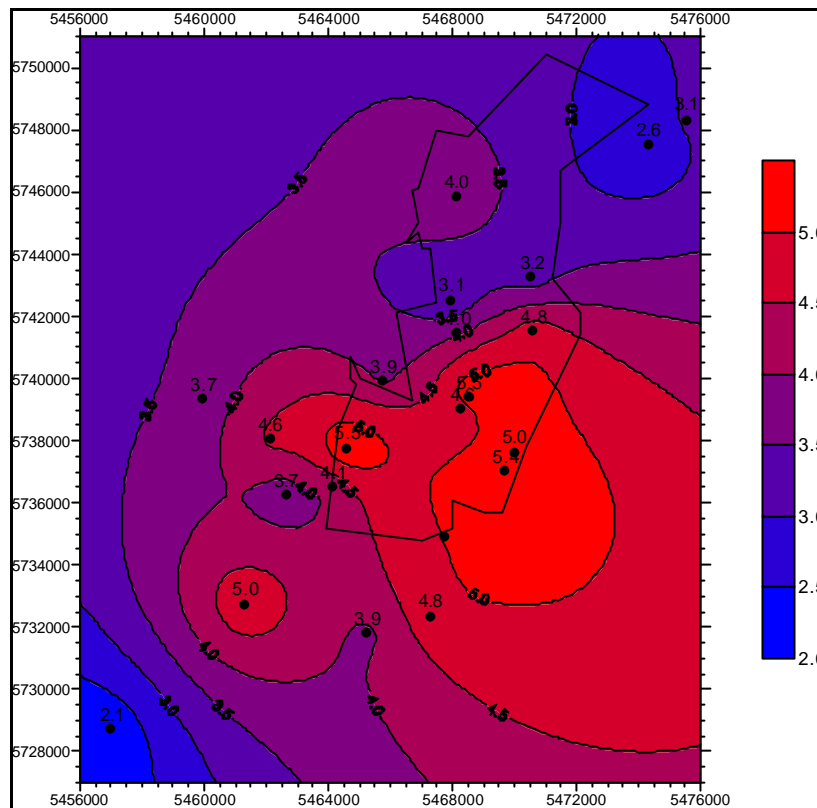


Lage der verwendeten Vorfeldinformationen zur Mächtigtkeitsbilanzierung (mit Kippenumriss)

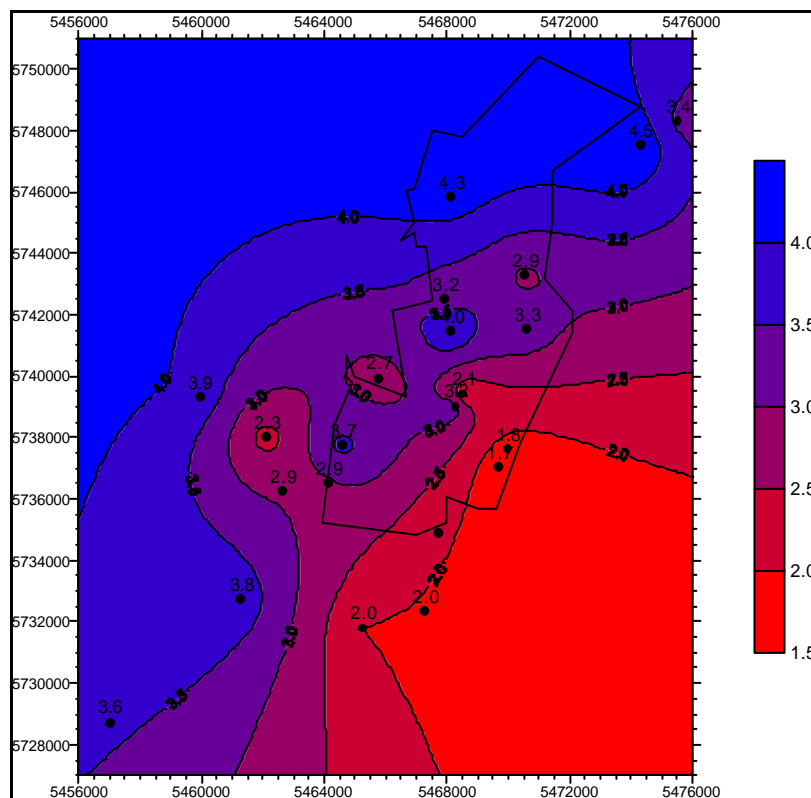


Lage der verwendeten Vorfeldbohrungen zur geochemisch/ bodenphysikalischen Kennzeichnung (mit Kippenumriss), rot dargestellt = in Kap. 5.4.2 ausgewertete Einzelbohrungen

Anl. 5.4.2 Untersuchungsgebiet Jänschwalde – Hangendschluff 1 der 1. FB des 2. LFH; flächenhafte Verteilung der C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse und der S_{ges} -Gehalte (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)

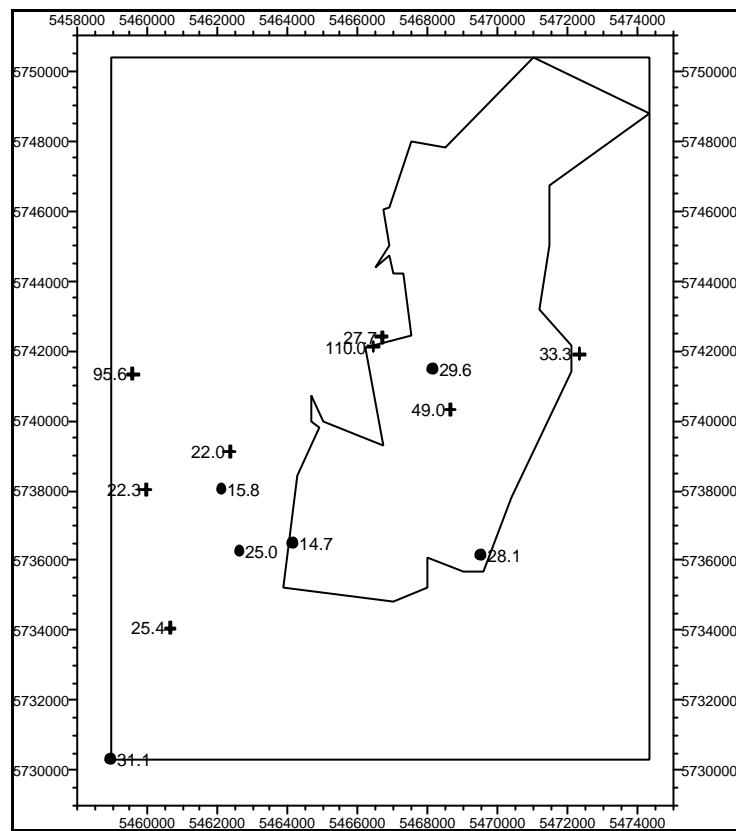


Hangendschluff 1 der 1. FB des 2. LFH – C_{org}/S_{ges} –Verhältnis [-]

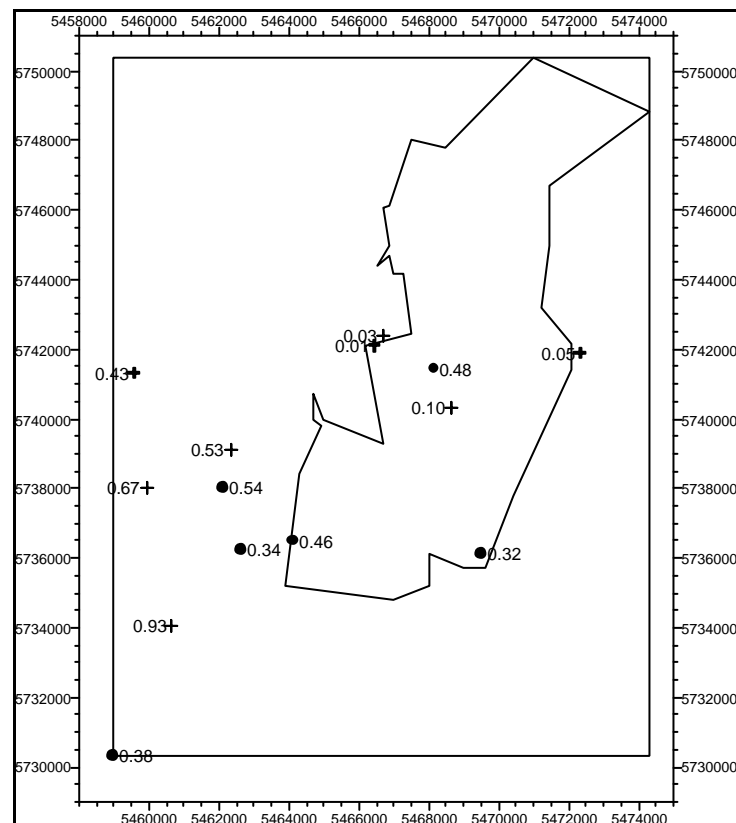


Hangendschluff 1 der 1. FB des 2. LFH – S_{ges} –Gehalt [Ma% S]

Anl. 5.4.3 Untersuchungsgebiet Jänschwalde – Liegendschluffe der 1. und 2. FB des 2. LFH; flächenhafte Verteilung der C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse und S_{ges} -Gehalte (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)

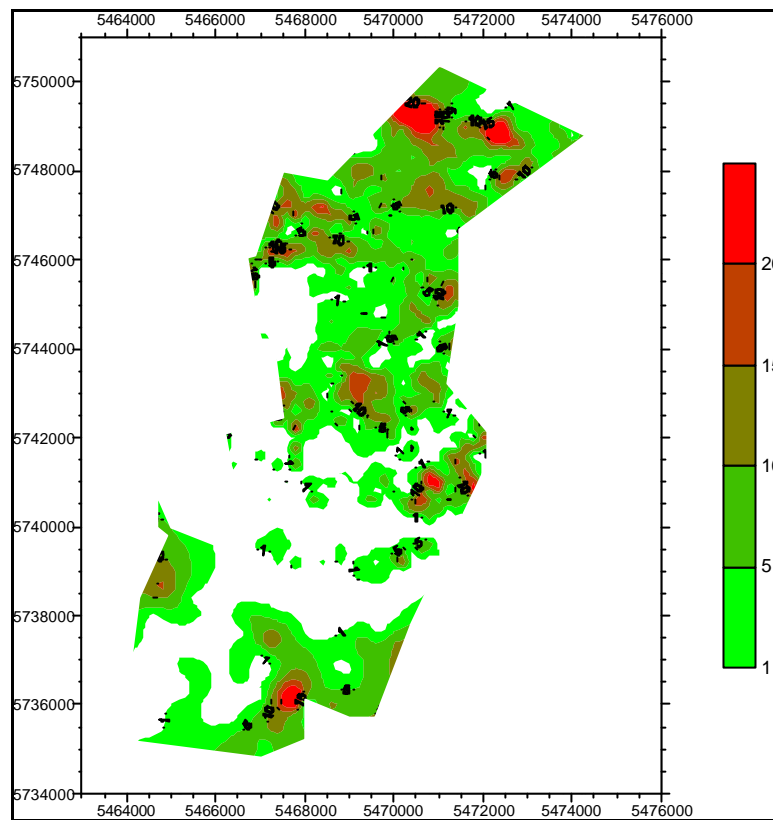


Liegendschluff der 1.FB (Punkte) und 2. FB (Kreuze) des 2. LFH – C_{org}/S_{ges} -Verhältnis [-]

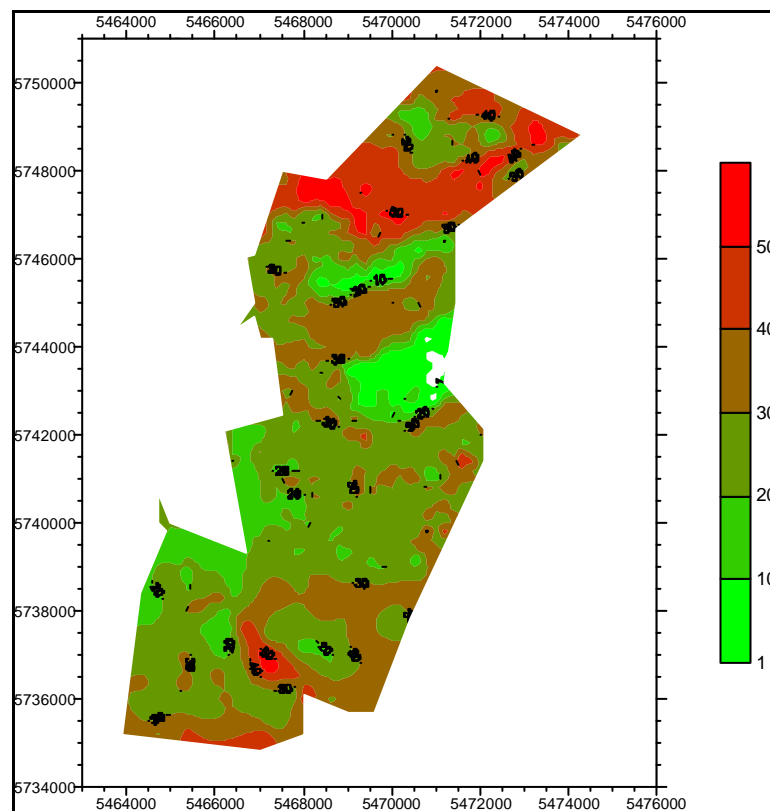


Liegendschluff der 1.FB (Punkte) und 2. FB (Kreuze) des 2. LFH – S_{ges} -Gehalt [Ma% S]

**Anl. 5.4.4 a Untersuchungsgebiet Jänschwalde – Mächtigkeitsverhältnisse der Auswerteeinheiten „Quartär bindig“ und „Quartär rollig“
(Datengrundlage Bohrdatenbank LAUBAG)**

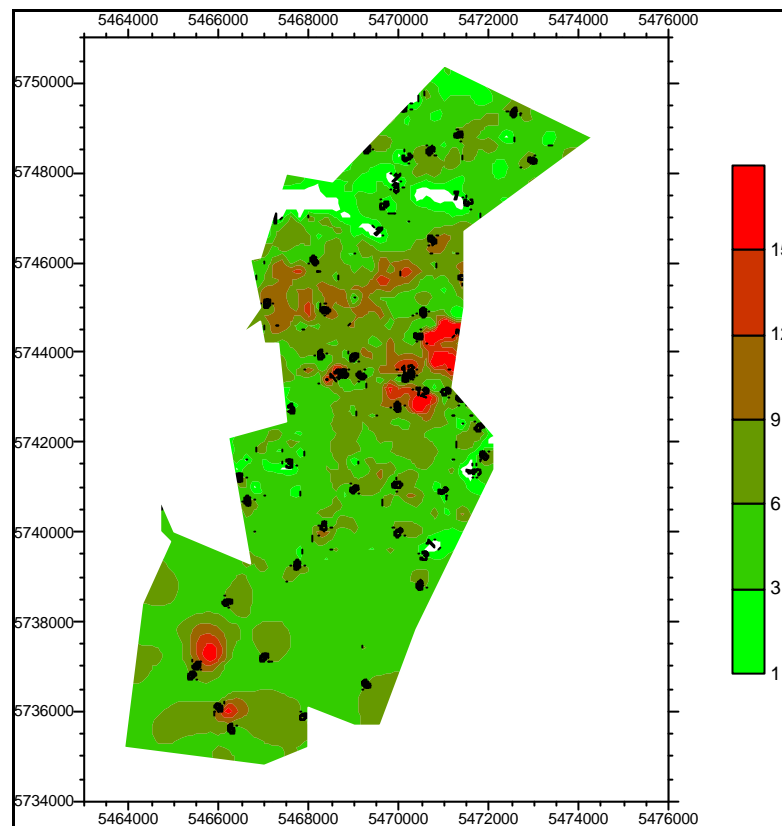


Auswerteeinheit „Quartär bindig“ - Mächtigkeit [m] im AFBK-Abraum

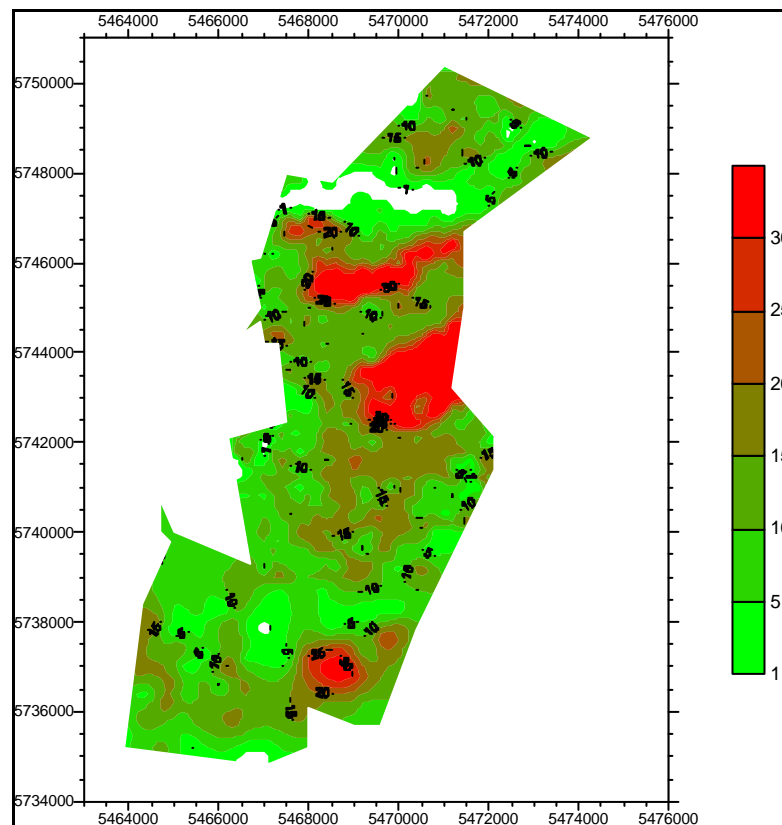


Auswerteeinheit „Quartär rollig“ - Mächtigkeit [m] im AFBK-Abraum

**Anl. 5.4.4 b Untersuchungsgebiet Jänschwalde – Mächtigkeitsverhältnisse der Auswerteeinheiten „Tertiär bindig“ und „Tertiär rollig“
(Datengrundlage Bohrdatenbank LAUBAG)**

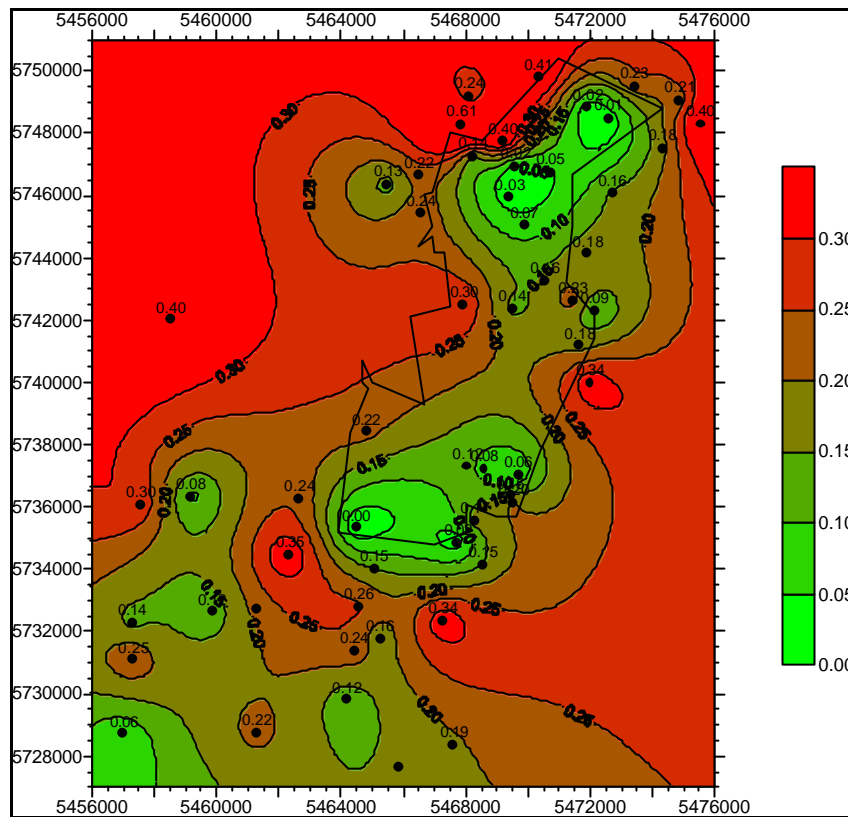


Auswerteeinheit „Tertiär bindig“ - Mächtigkeit [m] im AFBK-Abraum

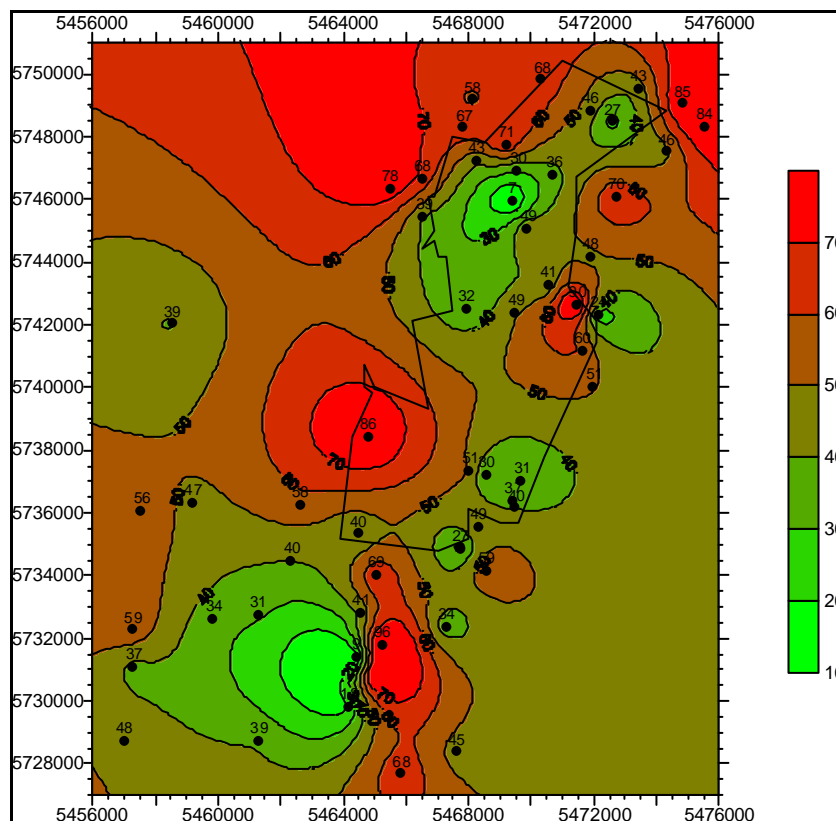


Auswerteeinheit „Tertiär rollig“ - Mächtigkeit [m] im AFBK-Abraum

**Anl. 5.4.5 a Untersuchungsgebiet Jänschwalde - Auswerteeinheit „Quartär bindig“;
 flächenhafte Verteilung der Parameter S_{ges} -Gehalt und Pelitgehalt
 (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

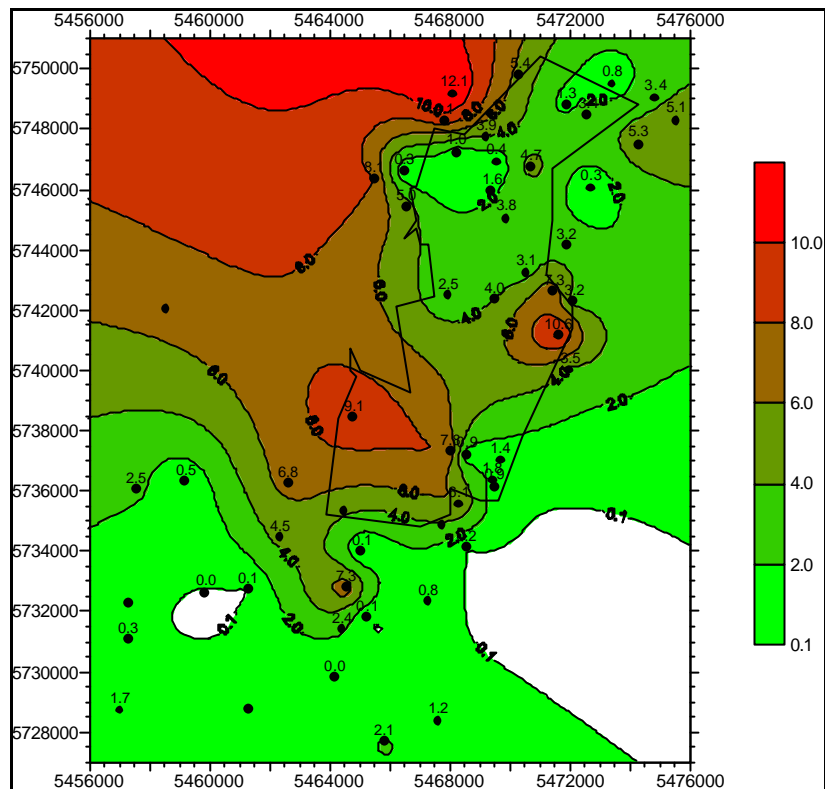


„Quartär bindig“ – Gewichtete S_{ges} -Gehalte [Ma% S] (mit Kippenumriss)

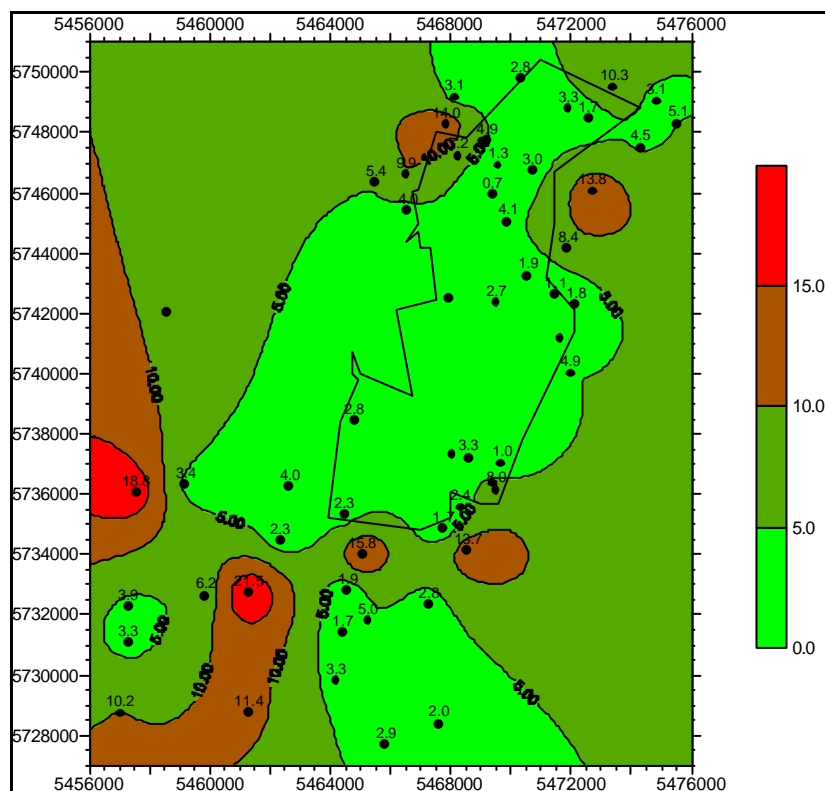


„Quartär bindig“ – Gewichtete Pelitgehalte [Ma%] (mit Kippenumriss)

Anl. 5.4.5 b *Untersuchungsgebiet Jänschwalde - Auswerteeinheit „Quartär bindig“ ; flächenhafte Verteilung der Parameter Karbonatgehalt und hydrolytische Acidität (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)*

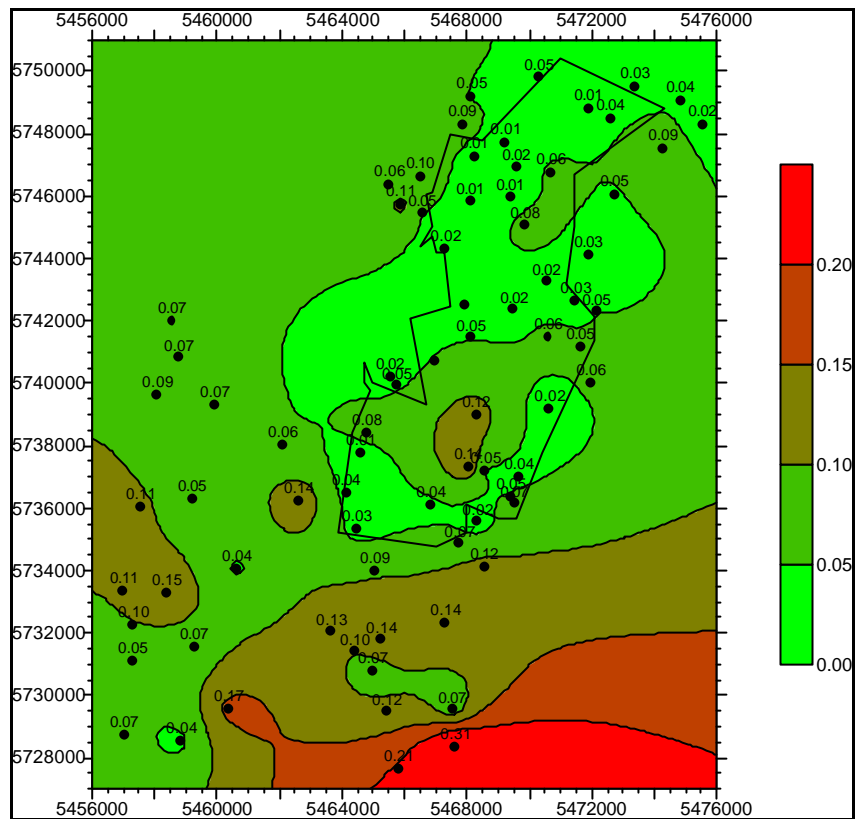


„Quartär bindig“ – Gewichtete Karbonatgehalte [Ma% CaCO₃] (mit Kippenumriss)

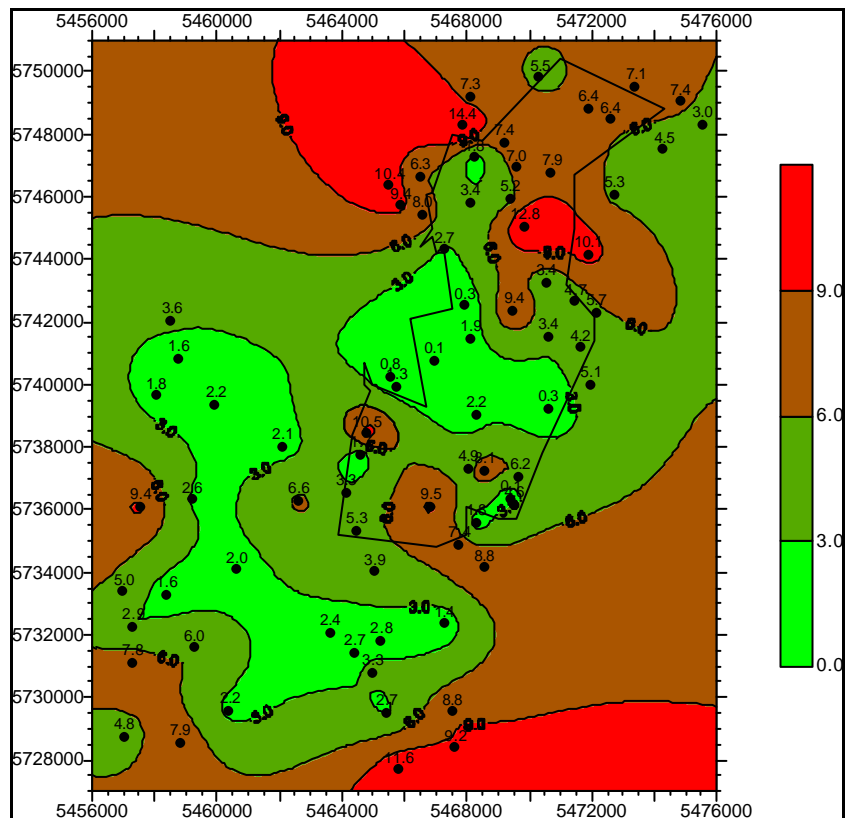


„Quartär bindig“ – Gewichtete hydrolytische Aciditäten [ml 0,1n NaOH/50 g Substrat] (mit Kippenumriss)

**Anl. 5.4.6 a Untersuchungsgebiet Jänschwalde - Auswerteeinheit „Quartär rollig“;
 flächenhafte Verteilung der Parameter S_{ges} -Gehalt und Pelitgehalt
 (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

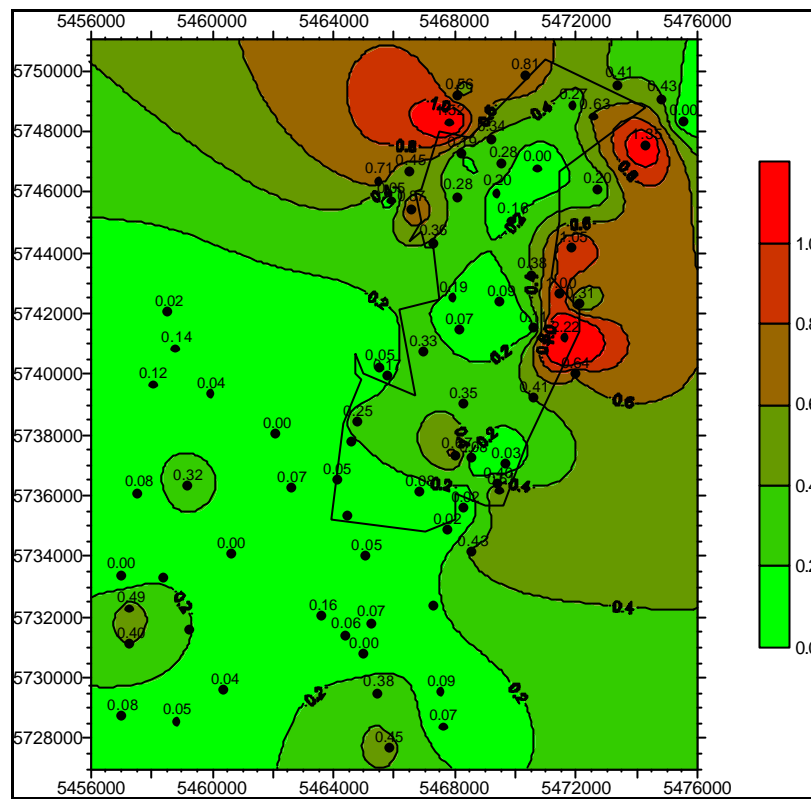


„Quartär rollig“ – Gewichtete S_{ges} -Gehalte [Ma% S] (mit Kippenumriss)

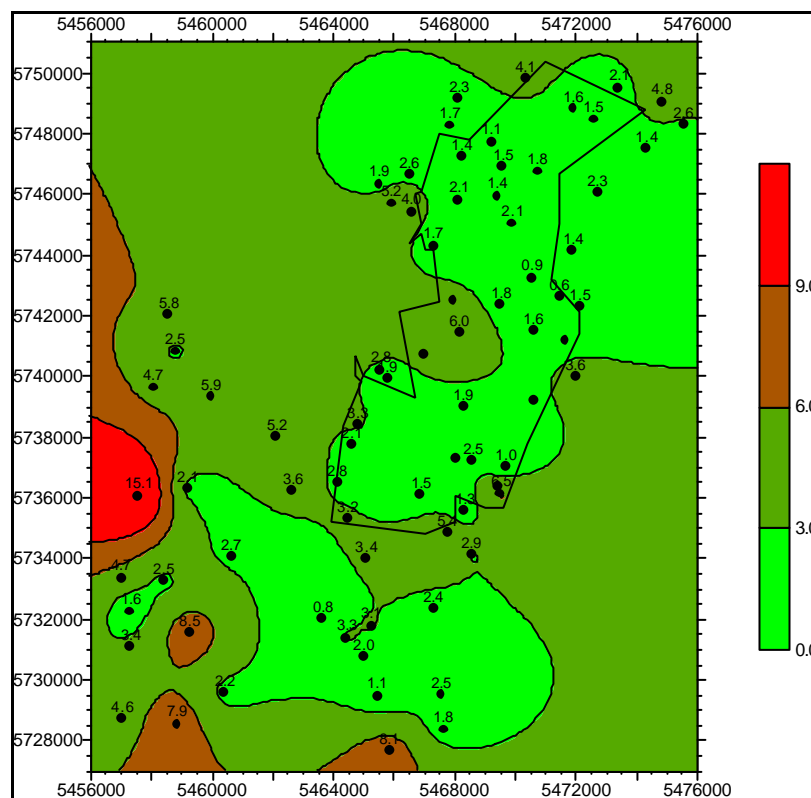


„Quartär rollig“ – Gewichtete Pelitgehalte [Ma%] (mit Kippenumriss)

**Anl. 5.4.6 b Untersuchungsgebiet Jänschwalde - Auswerteeinheit „Quartär rollig“ ;
flächenhafte Verteilung der Parameter Karbonatgehalt und hydrolytische
Acidität (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

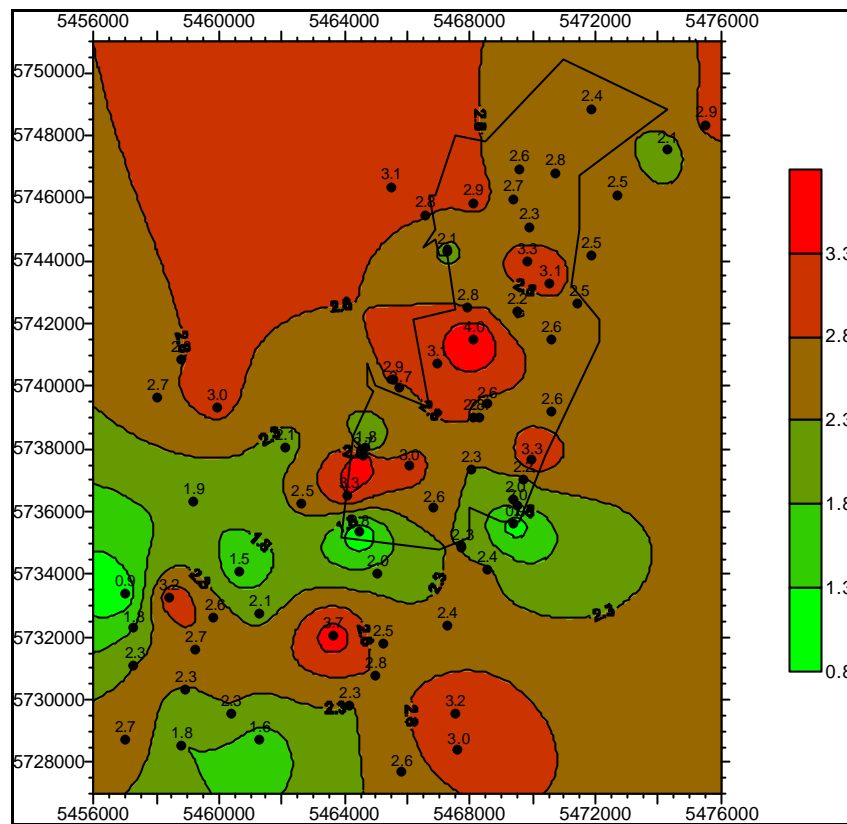


„Quartär rollig“ – Gewichtete Karbonatgehalte [Ma% CaCO₃] (mit Kippenumriss)

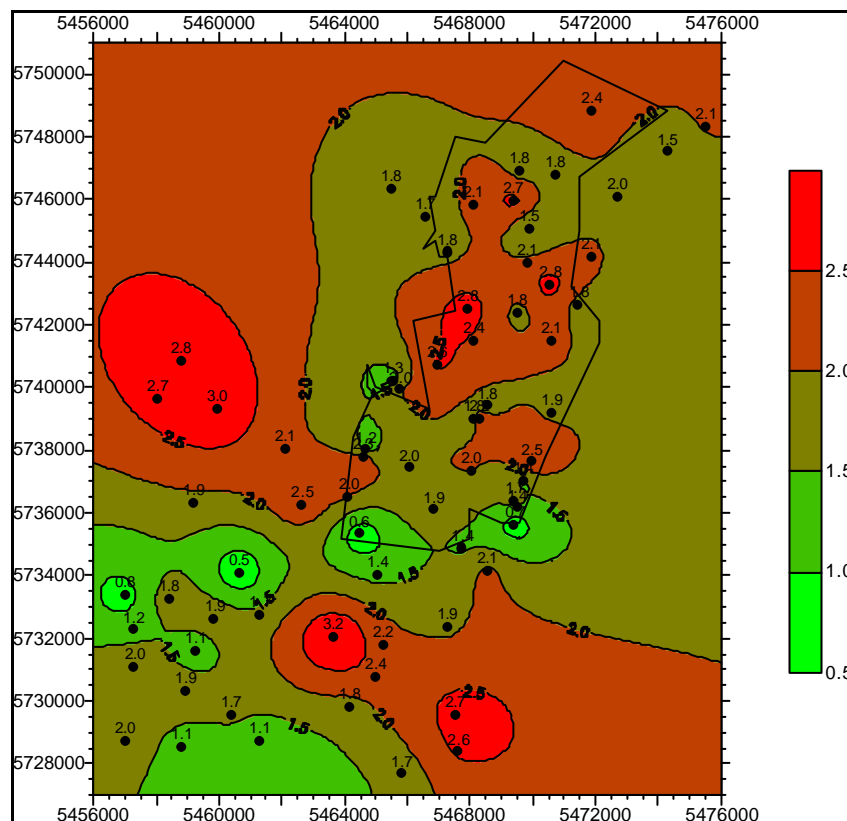


„Quartär rollig“ – Gewichtete hydrolytische Aciditäten [ml 0,1n NaOH/50 g Substrat]
(mit Kippenumriss)

**Anl. 5.4.7 a Untersuchungsgebiet Jänschwalde - Auswerteeinheit „Tertiär bindig“;
 flächenhafte Verteilung der Parameter S_{ges} -Gehalt und S_{diff} -Gehalt
 (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

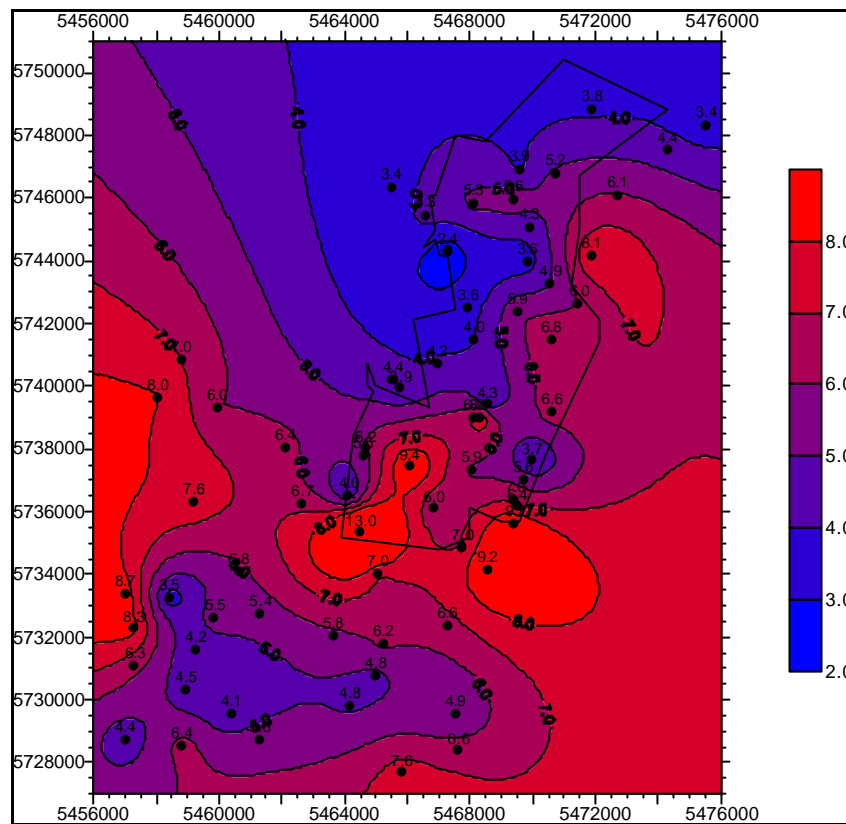


„Tertiär bindig“ – Gewichtete S_{ges} -Gehalte [Ma% S] (mit Kippenumriss)

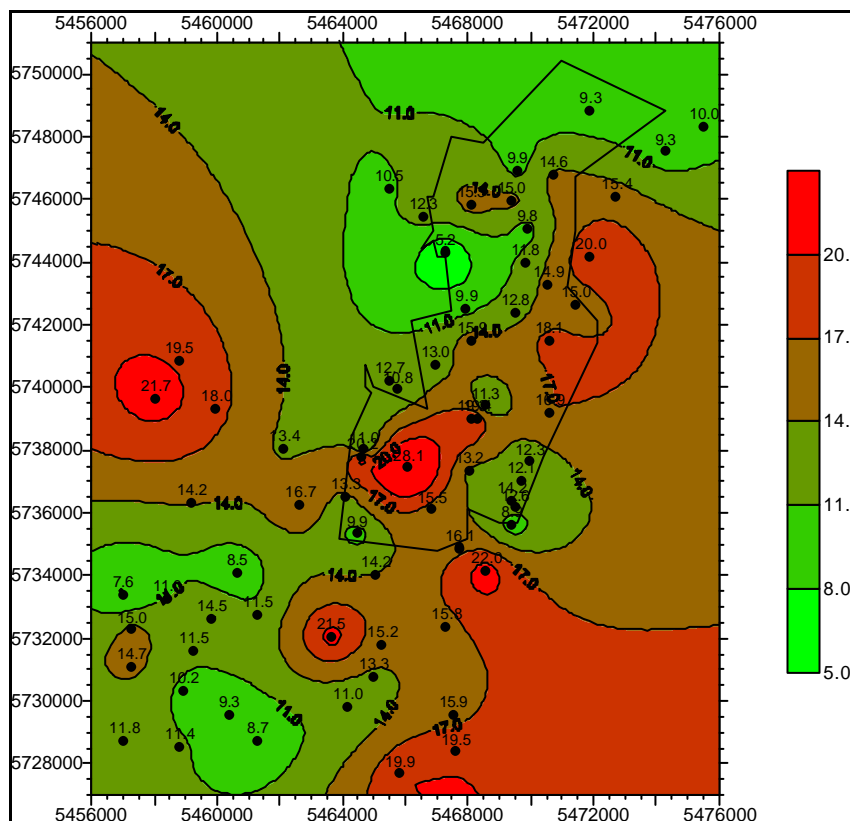


„Tertiär bindig“ – Gewichtete S_{diff} -Gehalte [Ma% S] (mit Kippenumriss)

**Anl. 5.4.7 b Untersuchungsgebiet Jänschwalde - Auswerteeinheit „Tertiär bindig“ ;
 flächenhafte Verteilung der Parameter C_{org}/S_{ges} -Verhältnis und C_{org} -Gehalt
 (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

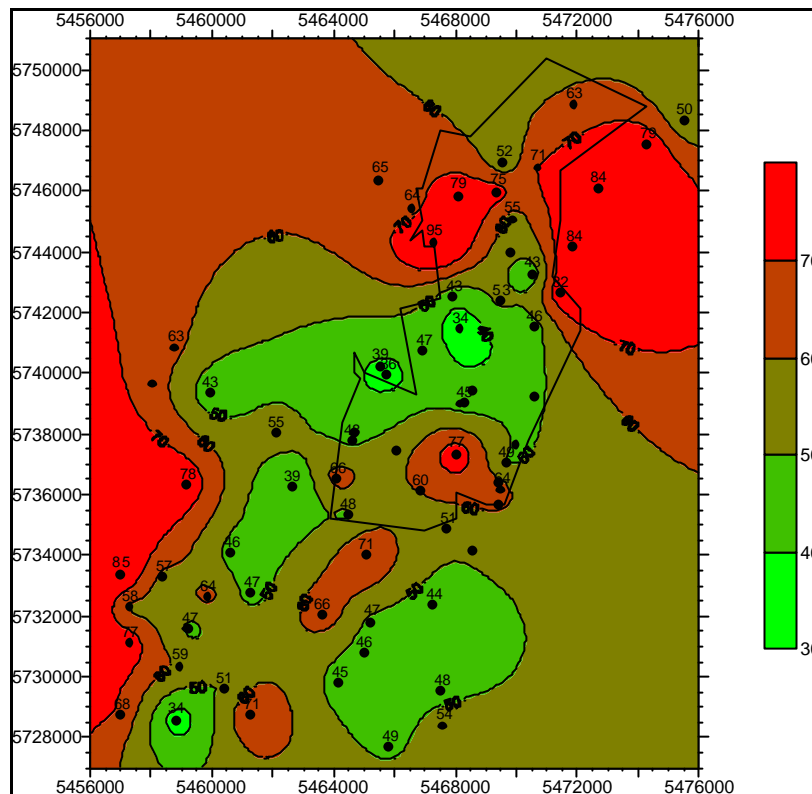


„Tertiär bindig“ – Gewichtete C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse [-] (mit Kippenumriss)

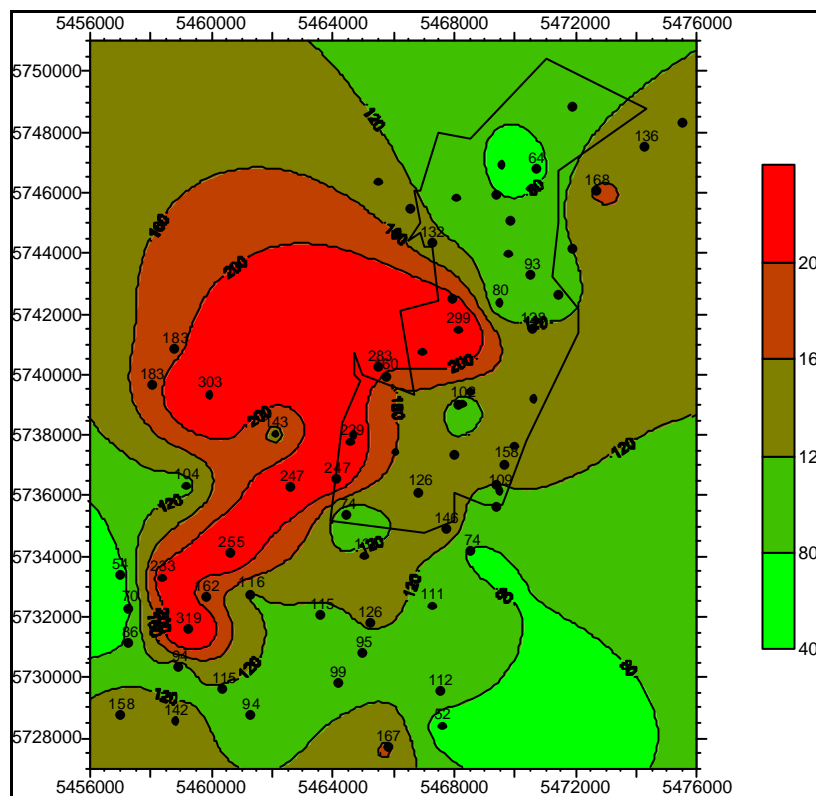


„Tertiär bindig“ – Gewichtete C_{org} -Gehalte [Ma% C] (mit Kippenumriss)

**Anl. 5.4.7 c Untersuchungsgebiet Jänschwalde - Auswerteeinheit „Tertiär bindig“;
flächenhafte Verteilung der Parameter Pelitgehalt und hydrolytische Acidität
(Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

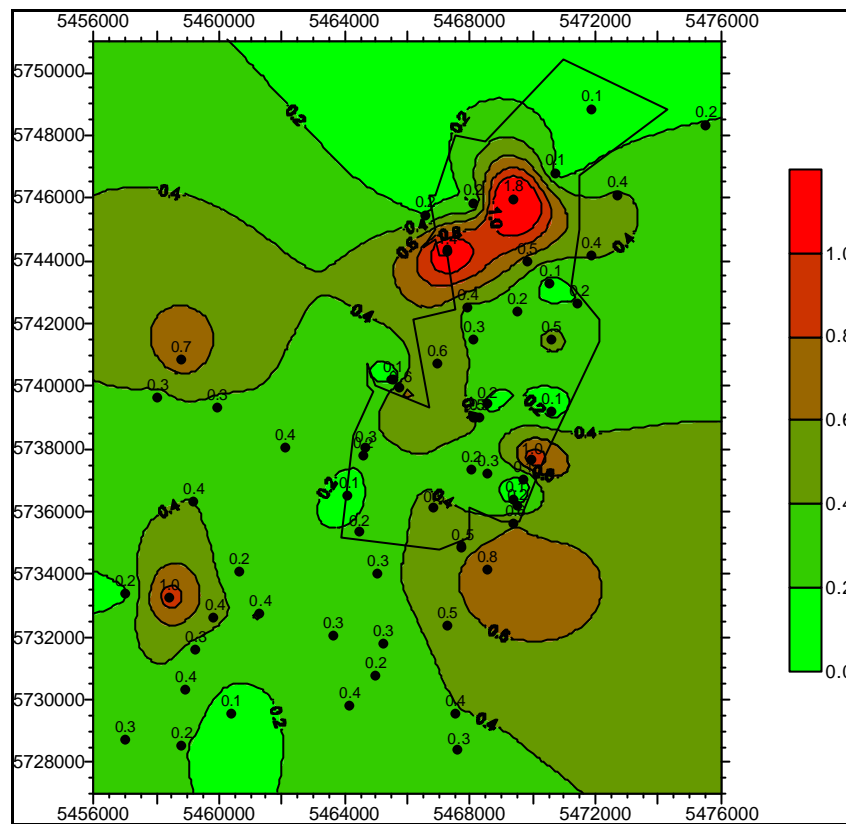


„Tertiär bindig“ – Gewichtete Pelitgehalte [Ma%] (mit Kippenumriss)

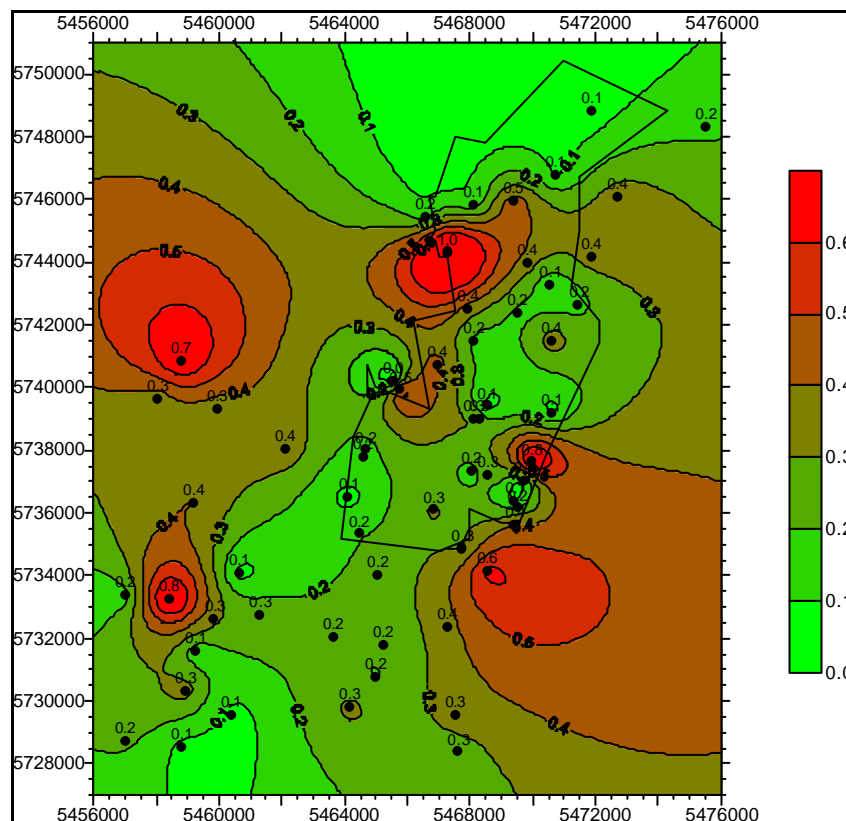


„Tertiär bindig“ – Gewichtete hydrolytische Aciditäten [ml 0,1n NaOH/50 g Substrat]
(mit Kippenumriss)

**Anl. 5.4.8 a Untersuchungsgebiet Jänschwalde - Auswerteeinheit „Tertiär rollig“;
 flächenhafte Verteilung der Parameter S_{ges} -Gehalt und S_{diff} -Gehalt
 (Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

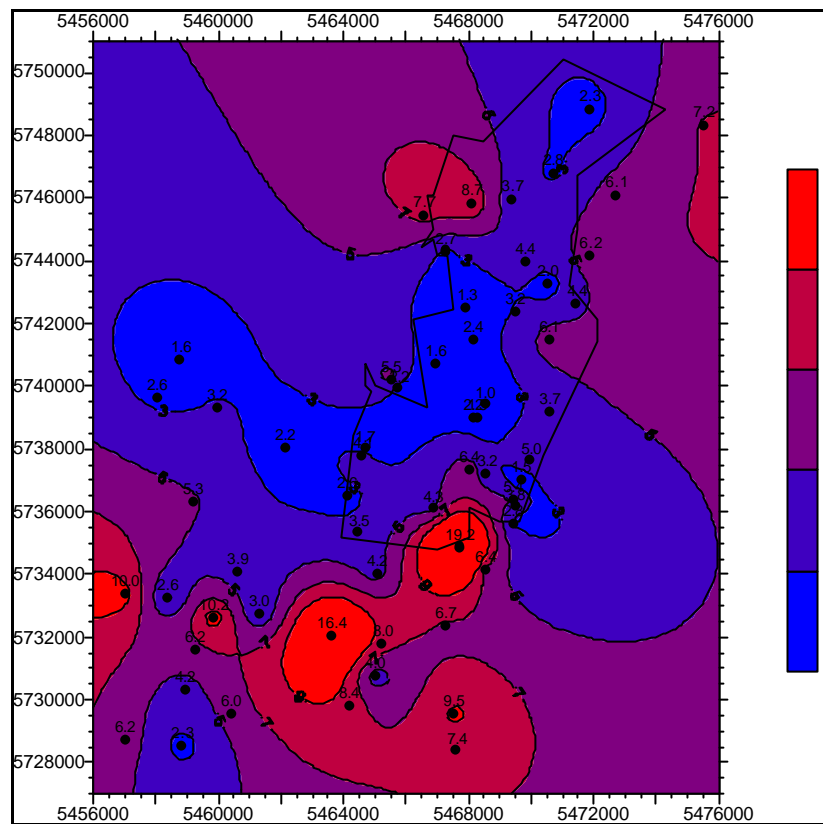


„Tertiär rollig“ – Gewichtete S_{ges} -Gehalte [Ma% S] (mit Kippenumriss)

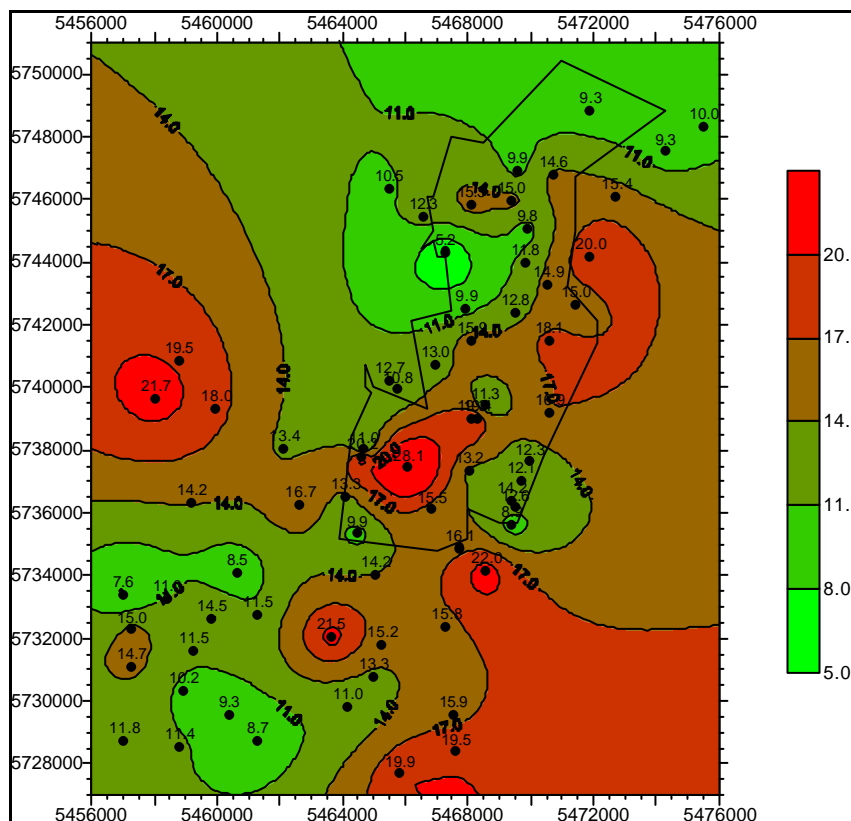


„Tertiär rollig“ – Gewichtete S_{diff} -Gehalte [Ma% S] (mit Kippenumriss)

**Anl. 5.4.8 b Untersuchungsgebiet Jänschwalde - Auswerteeinheit „Tertiär rollig“ ;
flächenhafte Verteilung der Parameter C_{org}/S_{ges} -Verhältnis und C_{org} -Gehalt
(Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**

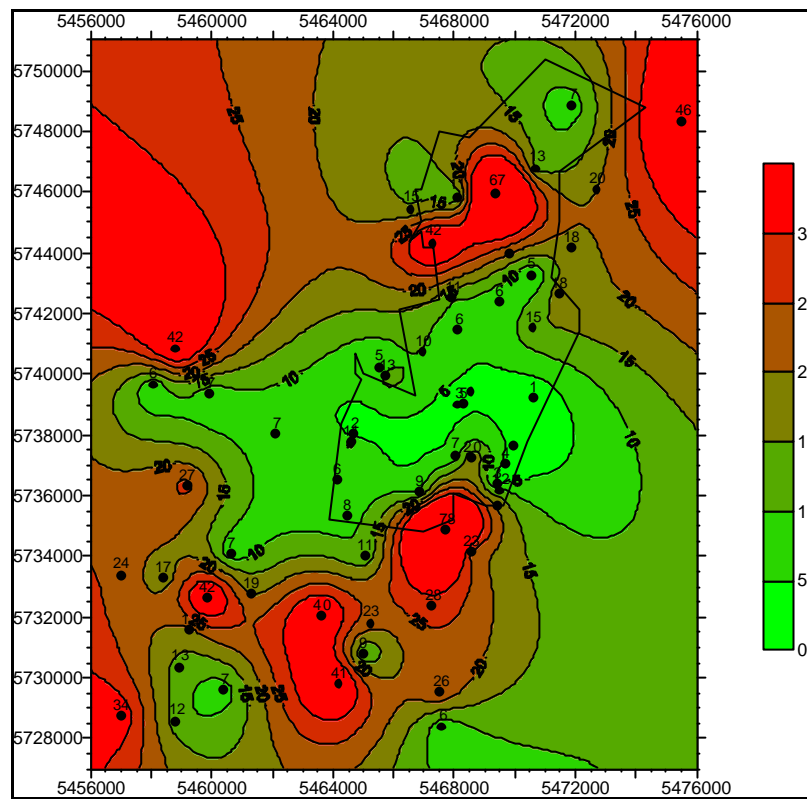


„Tertiär rollig“ – Gewichtete C_{org}/S_{ges} -Verhältnisse [-] (mit Kippenumriss)

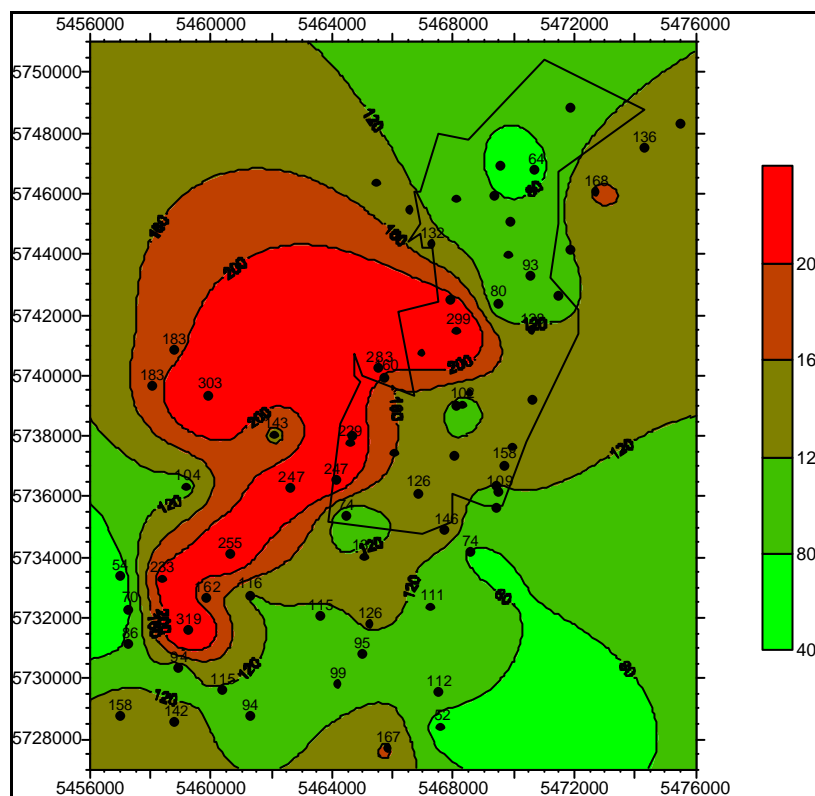


„Tertiär rollig“ – Gewichtete C_{org} -Gehalte [Ma% C] (mit Kippenumriss)

**Anl. 5.4.8 c Untersuchungsgebiet Jänschwalde - Auswerteeinheit „Tertiär rollig“;
flächenhafte Verteilung der Parameter Pelitgehalt und hydrolytische Acidität
(Datengrundlage Bodengeologische Vorfeldgutachten)**



„Tertiär rollig“ – Gewichtete Pelitgehalte [Ma%] (mit Kippenumriss)



„Tertiär rollig“ – Gewichtete hydrolytische Aciditäten [ml 0,1n NaOH/50 g Substrat]
(mit Kippenumriss)

Anl. 6.1.1a Festphase – Probenahme und Untersuchungsmethoden

Probenahme und Konservierung

Sedimentproben wurden durch 3 Arten von Bohrungen gewonnen: Rammkernsondierungen (RKS), tiefere Bohrungen (TB) und Horizontalbohrungen (HB).

Rammkernsondierungen (RKS)

Die RKS erfolgten mittels Bohrhammer der Fa. Cobra (Rammsonden - Ø 3,8 bzw. 6 cm). Die Endteufen lagen zwischen 4 bis max. 12 m unter GOK Die erbohrten Substrate wurden geologisch angesprochen. Es erfolgte eine bohrungsbegleitende, teufenorientierte Bearbeitung mittels „Feldeluat“ (siehe Anl. 6.1.1b). Die entnommenen Proben wurden im Feld Stickstoff begast und in PE-Beutel eingeschweißt. Die Lagerung erfolgte bis zur weiteren Verwendung bei –15 °C.

Tiefere Bohrungen (TB)

Tiefere Bohrungen dienten der Erstellung von Grundwassergütemessstellen. Die Bohrungen wurden als Trockenbohrungen mit Bohrdurchmessern von 368 und 273mm durch die Fa. BBM Benndorf niedergebracht. Es wurde mit Wendel gebohrt. Beim Eindringen in den wassergesättigten Bereich der Kippe wurde das Bohrwerkzeug gewechselt und eine Schutzverrohrung mitgeführt. Es erfolgte eine vorausseilende Linergewinnung. Im Labor wurden die Liner mittels einer Trennschleife geöffnet und geologisch bemustert. Zur weiteren Untersuchung wurden nur die mittleren 60 cm der Liner konserviert. Dabei wurden diese Stickstoff begast und in verstärkte PE-Beutel eingeschweißt. Auf Grund der Probenmenge musste die Lagerung bis zur Untersuchung bei ca. 10 °C erfolgen (Lehrbergwerk der TU BAF – „Reiche Zeche“).

Horizontalbohrungen (HB)

Zur Kennzeichnung der chemischen Verhältnisse innerhalb der Restschläuche erfolgten Horizontalbohrungen in deren Böschungen. Diese wurden mit einem Handbohrgerät bis zu einer Teufe von max. 2m ausgeführt. Die dabei gewonnenen Proben wurden ebenfalls im Feld Stickstoff begast und in PE-Beutel eingeschweißt. Die Lagerung erfolgte bis zur weiteren Verwendung bei –15 °C.

Untersuchungsmethoden

Bestimmung der Schwefel- und Kohlenstoffgehalte

Die Bestimmung der Gesamtschwefel- und Schwefelspezies-Gehalte erfolgte nach DIN 51724. Es wurde keine Bestimmung des monosulfidisch gebundenen Schwefels vorgenommen. Somit umfasst die bestimmte Fraktion des disulfidischen Schwefels sowohl den di- als auch monosulfidisch gebundenen Schwefel.

Die Bestimmung der TC/ TIC-Gehalte erfolgte mittels C-mat der Fa. Ströhlein. Dabei wird das durch die Probenbehandlung freigesetzte CO₂ mittels nichtdispersiver Infrarotmessung bestimmt. Der TIC-Gehalt resultiert aus der Behandlung der Probe mit erwärmter Phosphorsäure, der TC-Gehalt aus der Verbrennung bei ca. 1300 °C im Sauerstoffstrom.

Untersuchungen am Raster-Elektronen-Mikroskop (REM)

Die Untersuchungen an ausgewählten Proben erfolgten am Inst. f. Geologie der TU BAF (REM der Fa. Philipps). Es wurde die Sandfraktion (0,063 - 2 mm) bzw. die Pelitfraktion (< 0,063 mm) untersucht. Aus der Sandfraktion wurden auffällige Mineralkörner und Aggregate ausgelesen. Es war die Trocknung und Kohlenstoffbedampfung der Proben notwendig, da im Hochvakuum gemessen werden muss. Es standen der SE-Detektor (Abbildung der Oberflächenform), BSE- Detektor (Abbildung des Phasenkontrastes) und EDX-Detektor (Mikroanalyse der in Folge Elektronenstrahlbeschuss emittierten Röntgenstrahlung) zur Verfügung. Die an rauen Proben (Körner-Präparaten) gewonnenen Analysedaten sind nur halbquantitativ zu bewerten und zu interpretieren. Aufgrund der Oberflächenbeschaffenheit der Proben kann es durch Streuung und Absorption der charakteristischen Röntgenstrahlung zur Überprägung der Intensitäten und damit der ermittelten Elementgehalte kommen. Auf die Herstellung von polierten Dünnschliffen und Mikrosondenanschliffen (glatte Proben) wurde verzichtet, da dies nach der Trocknung und Kohlenstoff-Bedampfung eine weitere starke Veränderung der Probe darstellt. Bei der EDX-Analyse bezüglich Kohlenstoff (Karbonate) ist die Überprägung auf Grund der Kohlenstoffbedampfung der Proben zu beachten.

Bestimmung der selektiven Sulfatreduzierer-Keimzahlen

Die Bestimmung der selektiven Sulfatreduzierer-Keimzahlen erfolgte freundlicherweise in Zusammenarbeit mit der AG Dr. Glombitza (G.E.O.S. Freiberg). Es kam die MPN-Methode zur Anwendung (Aufzuchtverfahren). Dabei wurden die entnommenen Proben in Röhrchen mit einer Nährlösung (siehe Anl. 6.1.1b) in parallelen Reihen mit dekadisch zunehmender Verdünnung beimpft. Es erfolgte anschließend für 14 Tage die Inkubation bei 30°C in anaerober Atmosphäre (95% N₂+ 5% CO₂). An Hand statistischer Tabellen kann dann der Wahrscheinlichkeitsbereich der Keimzahlen bestimmt werden. Mit diesem Verfahren werden nur die kultivierbaren Keime erfasst.

Lanthannitratextraktion - Bestimmung der Austauschbelegung nach ABEL ET AL.[1998]

Mehrmalige Extraktion mit 1N Lanthannitratlösung anschließendes Zentrifugieren und Ionenanalyse.

Sequentielle Extraktion nach ZEIEN & BRÜMMER [1989], [1991]

Das Verfahren beruht auf einer Abfolge von Extraktionen mit Salzlösungen, komplexierenden Lösungen und Reduktionsmitteln bei ansteigender Acidität. Es kam ein verkürztes Verfahren zur Anwendung:

1. Fraktion 1M Ammoniumnitrat Extraktion
Kennzeichnung der Kationen Austauschbelegung
2. Fraktion 1M Ammoniumacetat (50% Essigsäure) Extraktion
Kennzeichnung der spezifisch adsorbierten Kationen, Auflösung der kinetisch nicht gehinderten Karbonate (Calcit)
3. Fraktion 0,2 M Di-Ammonium-Oxalat-Monohydrat (Oxalsäure, Ammoniak)
Kennzeichnung der kinetisch gehinderten Karbonate (Siderit, Dolomit), Manganoxide, der organischen Substanz und schlecht kristalliner Eisenverbindungen.

Anl. 6.1.1b Wasserphase – Probenahme und Untersuchungsmethoden

Probenahme und Untersuchungsmethoden

Grundwasser

Die Grundwasserbeprobungen erfolgten ausschließlich an Gütemessstellen. Bei der Beprobung dienten, neben den Richtlinien von DIN, DVGW, DVWK und LAWA, die Forderungen des „Montanhydrologischen Monitoring – Grundwasserprobenahme“ (LMBV [1999]) sowie NITZSCHE ET AL. [1999] als Leitfaden. Dabei ist ein „chemisches Kriteriums“ (quasi-stationäre Verhältnisse der Milieuparameter - ELF, pH, Temperatur und Redoxpotential) sowie ein „hydraulisches Kriterium“ (Abpumpen des 1,5-fachen Filtervolumens bezüglich Bohrdurchmesser) einzuhalten. Weiterhin erfolgt die Festlegung des maximalen Fördervolumenstroms, in Abhängigkeit des anstehenden Grundwasserleiter-Materials, bei dem noch eine „sanfte Beprobung“ realisiert werden kann. Bei den geringdurchlässigen bindigen Mischbodenkippen ist die Einhaltung des hydraulischen Kriteriums oft nicht möglich. Die Beprobungen erfolgten mittels der Pumpe MP1 (Fa. Grundfos). Die Einbautiefe lag jeweils 1m oberhalb des Filterbereiches.

Feldelution

Die Bearbeitung erfolgte vor Ort, um eine Vielzahl von Proben ohne Konservierung bearbeiten zu können. Es wurde in Anlehnung an DIN 38414-4 eine Elution im Verhältnis 1:2,5 durchgeführt. Dabei wurden 10 ml Probe mit 25 ml aqua dest. überschichtet und danach geschüttelt. Nach Einstellung quasi-stationärer Verhältnisse wurden pH-Wert und ELF im Eluat gemessen.

Bodenwassersättigungsextraktion (BSE)

Die Bodenwassersättigungsextraktion wurde zur Kennzeichnung der Porenwasserbeschaffenheit durchgeführt. Dies erfolgte in Anlehnung an VWV [1993] bzw. ABEL [1998]. Es wurden 200 – 400 g feldfeuchte Probe (Lagerung vorher bei - 15°C) bis zur Erreichung der Wassersättigung mit deionisiertem Wasser aufgesättigt. Nach 24h Gleichgewichtseinstellung wurde dann zentrifugiert (5000 U/min, 10 –20 min). Das erhaltene Zentrifugat wurde über einen Membranfilter filtriert (0,45 µm). An der so gewonnenen Probe erfolgte die Analytik.

Tritiumgehaltsmessungen

Es wurde das Porenwasser ausgewählter Kerne der Tiefbohrungen bearbeitet. Die Messungen erfolgten am Institut für Angewandte Physik der TU BAF (AG Prof. Hebert). Die konservierten Feststoffproben wurden aufgeschnitten und anschließend ausgeheizt. Der sich bildende Wasserdampf wurde in flüssigem Stickstoff aufgefangen und stellte die zu vermessende Probe dar. Die Messung der Aktivität der Probe erfolgte dann mittels Flüssigkeitsszintillationszähler LSC Quantulus (siehe auch HEBERT [1997]).

Porenwassergewinnung (PWG) - Stickstoffdruckfiltration

Die Porenwassergewinnung erfolgte durch Anlegen eines Stickstoff-Überdruckes von 1 – 1,5 bar. Es wurden ca. 600 – 800g Sedimentprobe in einen Filtrationstopf der Fa. Schleicher & Schuell eingebaut (siehe Abb.). Der Einbau erfolgte in einer Stickstoff gespülten Glovebox. Das Porenwasser wurde über einen Membranfilter (0,45 µm) filtriert und in einer Stickstoff gespülten Probenflasche aufgefangen.



Abb.: Porenwassergewinnung mittels Stickstoffdruckfiltration

Durchströmungsversuche zum Elutionsverhalten von Verwitterungszonenmaterial

Dazu wurde das durch RKS gewonnene Material in HDPE-Probenhalter eingebaut. Zur Herstellung im Feld vorhandener Lagerungsdichten wurde das Material eingerüttelt. Die senkrecht eingebauten Probenhalter wurden von unten durchströmt. Es wurde dem eigentlichen Versuch eine Aufsättigungsphase vorgeschaltet, um eine höchstmögliche Wassersättigung zu erreichen. Die Durchströmung erfolgte mittels kontinuierlichem Volumenstrom.

Flaschenversuche zur Aktivierbarkeit von Sulfatreduzierern

Die Versuche erfolgten in Zusammenarbeit mit der AG Dr. Glombitza (G.E.O.S. Freiberg). Es wurde unmittelbar nach der Probenahme 1 ml Kippengrundwasser mit einer sterilen Einweg-Spritze in 100 ml Septumsflaschen injiziert. Die Septumsflaschen waren mit 50 ml steriler Nährlösung gefüllt. Dabei handelt es sich um eine FeSO_4 -Lösung mit Zusatz anderer Salze (Nährstoffe) und einer leicht umsetzbaren organischen Substanz (Lactat oder Methanol). Weiterhin enthielt die Lösung, zur Realisierung niedriger Redoxpotentiale, N-thioglycolat, Ascorbinsäure und Dithionit. Der pH-Wert der Lösungen betrug $= 7$. Der Gasraum der Flaschen war mit einem N_2/CO_2 -Gemisch gefüllt. In der Flasche lagen somit optimale Verhältnisse für die SRB vor. Es erfolgte keine Wachstumsverhinderung anderer Keime durch Antibiotika. In den Versuchen wurde die Zeit bis zur FeS-Bildung bewertet.

Analytik

Die bei den verschiedenen Untersuchungsmethoden gewonnenen Wasserproben wurden mit denen in der nachfolgenden Tabelle aufgezeigten Verfahren analysiert. Dabei wurden alle Parameter in der über 0,45 µm Membranfilter filtrierte Probe gemessen. Eine Ausnahme bilden die Milieuparameter. Teilweise erfolgte auch die Bestimmung der K_B , K_S – Werte an der unfiltrierten Probe (dann $\hat{=}$ TIC). Die Proben für die ICP-Analytik wurden mit 0,3 bis 0,5 ml HNO_3 -suprapur auf 50 ml Probe konserviert (pH mind. < 2). Aus der Tabelle geht hervor dass in Kap. 6 die Analytik geringfügig anders erfolgte als an den Proben in Kap. 10

Tab.: Angewandte Bestimmungsmethoden bei Wasseranalysen

Parameter	Bestimmungsmethode	Vor Ort/ Labor
ELF, Eh, pH, Temp., O ₂	elektrometrisch	Vor Ort
Fe ²⁺ , Fe _{ges} , Si _{ges}	fotometrisch	Vor Ort
S ²⁻ , SO ₄ ²⁻	fotometrisch	Vor Ort (Sulfat als Vergleich zur IC/ ICP Analyse)
K _S und K _B - Wert (Berechnung DIC)	titrimetrisch	Vor Ort
NO ₃ ⁻ , Cl ⁻ , SO ₄ ²⁻	Ionenchromatographie	TU BAF – Kap. 6 (Inst. f. Hydrogeologie)
Na ⁺ , K ⁺ , Ca ²⁺ , Mg ²⁺	Ionenchromatographie	TU BAF – Kap. 6 (Inst. f. Hydrogeologie)
Al, As, Cd, Cr, Cu, Mn, Ni, Pb, Zn teilweise (V, Co, Hg, Tl, Th, U)	ICP – MS	TU Dresden/ Tharandt (Inst. f. Ökologie) - Kap. 6
Na, K, Ca, Mg Al, As, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, Mn, Ni, Pb, Zn, Si, S = SO ₄ ²⁻	ICP – AES	GFI Dresden - Kap. 10

Anl. 6.1.1c Gasphase – Probenahme und Untersuchungsmethoden

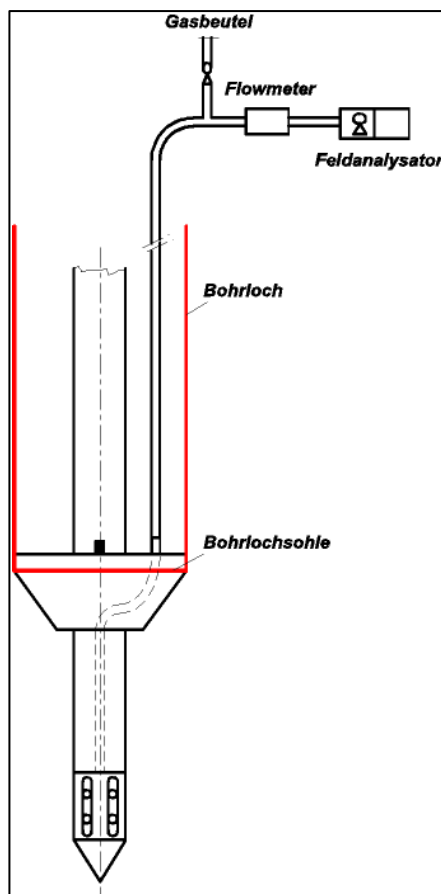


Abb.: Schema der Kippengasphasenbeprobung

Probenahme

An ausgewählten RKS und 7 tiefen Kippenbohrungen wurde die Gasphase teufenorientiert und begleitend zum Bohrprozess beprobt. Dabei kamen selbst entwickelte Gassonden zum Einsatz. Grundprinzip war die Kompatibilität der Sonde zu den jeweils eingesetzten Bohrgestängen (RKS – Cobra-Gestänge bzw. TB - Nordmeyer-Gestänge, Sechskant- 80 mm). Die Abbildung zeigt die Verfahrensweise der Beprobung mittels dieser Sonden schematisch auf. Die Beprobung erfolgte in verschiedenen Teufen. Die zu beprobenden Teufenstufen wurden an Hand des durch eine Vorsondierung ermittelten Bohrprofils festgelegt. Beim Einbau der Sonde wurde diese soweit eingedrückt, dass ihr Konus eine Abdichtung herstellte. Die Förderung des Gases erfolgte zuerst mittels der im Feldanalysatorsystem der Fa. Meta integrierten Pumpe. Dabei wurde über einen Flowmeter der Volumengasstrom gemessen. Der Filterbereich der Sonde war durch einen Hart-PE-Schlauch mit Übertage verbunden. Für einen Großteil der Bohrungen wurden über eine zweite Pumpe Proben für die Laboranalytik in aluminiumbeschichtete Gasbeutel (Diffusionshemmung) entnommen.

Analytik

Gasbeschaffenheit

Es erfolgt eine vor Ort-Analytik mittels des Messgerätes der Fa. Meta. Es wurden dabei folgende Gasphasengehalte gemessen:

CO₂ → nichtdispersive Infrarotmessung

CH₄ → nichtdispersive Infrarotmessung

O₂ → amperometrischer Sensor mit selektiv elektrochemischem Detektor

H₂S → Halbleiterdetektor

An denen in Gasbeutel entnommenen Proben wurde im Labor des INC Leipzig (AG Dr. Nitzsche) eine Gasvollanalyse unter Einbeziehung der Kohlenwasserstoff durchgeführt.

Isotopie des CO₂

An denen in Gasbeutel entnommenen Proben wurde im Labor des INC Leipzig (AG Dr. Nitzsche) weiterhin die ¹³C-Isotopie am CO₂ gemessen.

Für zwei RKS wurde die ¹⁴C-Isotopie des CO₂ untersucht. Das CO₂ des Kippengases wurde im Feld mittels Ba(OH)₂-Verfahren als BaCO₃ gefällt. Die Aktivitätsmessung an der Probe erfolgte dann im Labor des Inst. f. Angewandte Physik, TU BAF (AG Prof. Hebert) mittels Flüssigkeitsszintillationszähler LSC Packard 4530 (siehe HEBERT [1997]).

Anl. 6.1.2 Untersuchungsgebiet Espenhain – Ionenbilanzfehler der Wasseranalysen

Die Grafik umfasst die Ionenbilanzfehler (IBF) der Analysen der Porenwässer der tiefen Bohrungen und der Horizontalbohrungen sowie der Analysen der Säulenversuche SVE 2 und 3 und der KGGM-Beprobungen. Die Auswertung erfolgt zum einen in Häufigkeitsklassen, zum anderen in Abhängigkeit von der Ionenstärke.

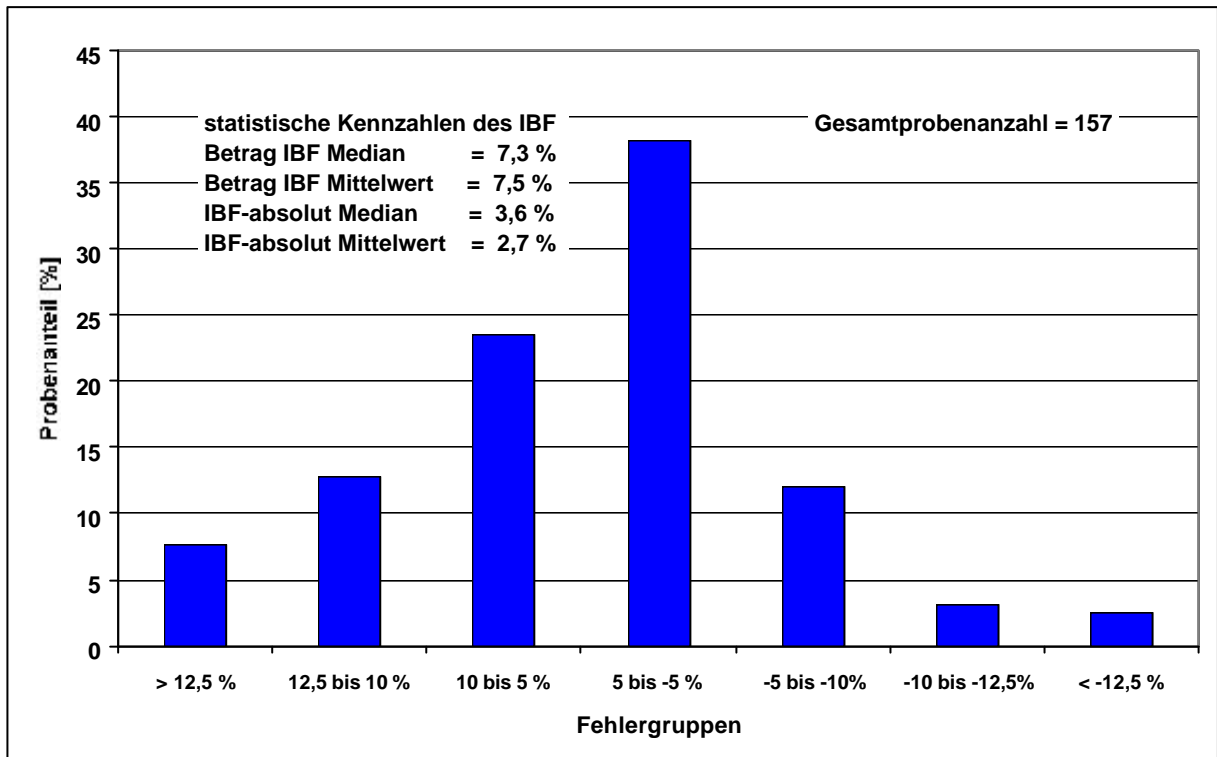


Abb.: Untersuchungsgebiet Espenhain - IBF nach Häufigkeitsklassen

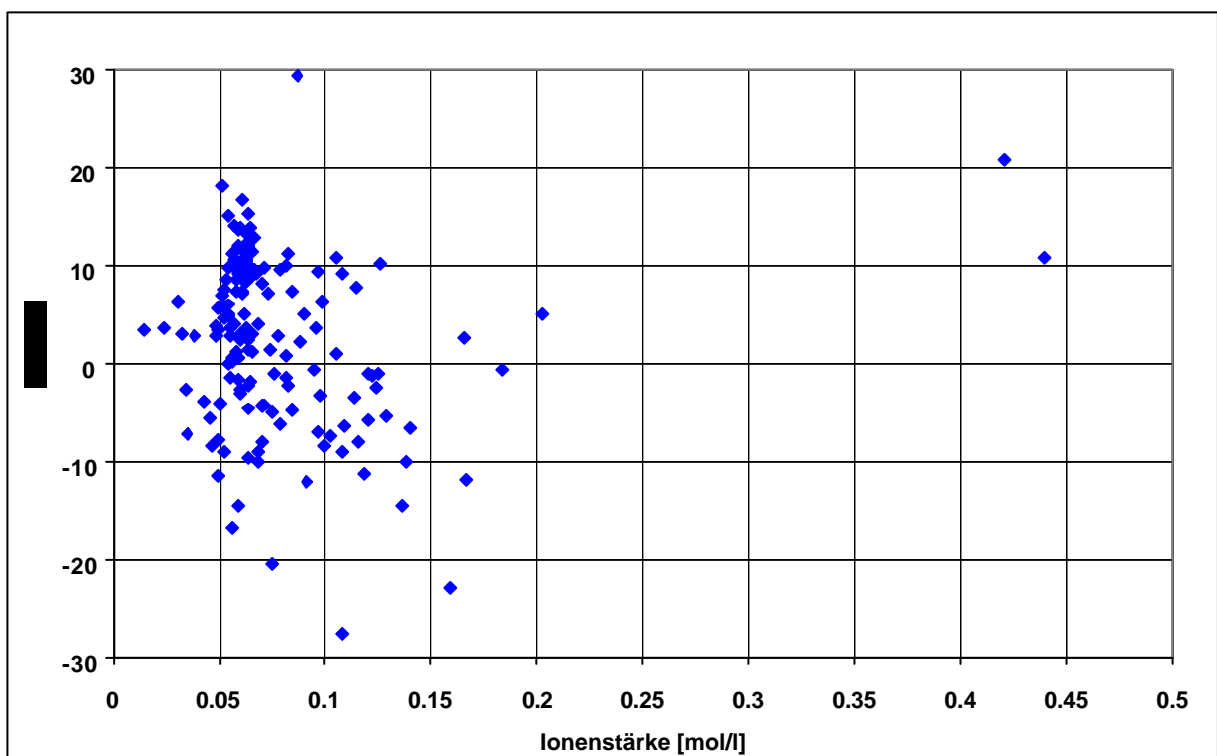


Abb.: Untersuchungsgebiet Espenhain - IBF in Abhängigkeit von der Ionenstärke

Anl. 6.5.1 Stoffgruppenanalyse der organischen Substanz aus WÜNSCHE [1974]*Vorgehensweise und Bedeutung der Stoffgruppenanalyse*

Die „organischen Substanz“ wird an Hand einer Extraktion mit kalter NaOH-Lösung in Fulvosäuren (FA), Huminsäuren (HA) und den nichtlöslichen Humin-Rest (HR) eingeteilt (z.B. FIEDLER [1965], ANDERSON & SCHOENAU [1993]). Dabei sind die FA gegenüber den HA deutlich besser mikrobiell verfügbar (weiterführend z.B. SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL [1998]). Der HR ist auf eine starke Bindung an mineralische Oberflächen zurückzuführen. Grundlegende Quellen zur Stoffgruppenanalyse stellen KONONOVA [1966] und FIEDLER [1965] dar. Zur genaueren Unterteilung der HA erfolgt auch eine Bestimmung des Farbquotienten (FQ) (Absorption bei 465 und 665 nm). Zusammenfassend charakterisiert der FA-Gehalt den besser abbaubaren Anteil der organischen Substanz. Die HA/FA-Verhältnisse beschreiben den Grad der Humifizierung, wobei Werte deutlich < 1 auf einen geringen Humifizierungsgrad und damit gute mikrobielle Verfügbarkeit hinweisen. Die Messung von C:N bzw. C:N:P-Verhältnissen ermöglicht Aussagen zur Nährstofflimitierung.

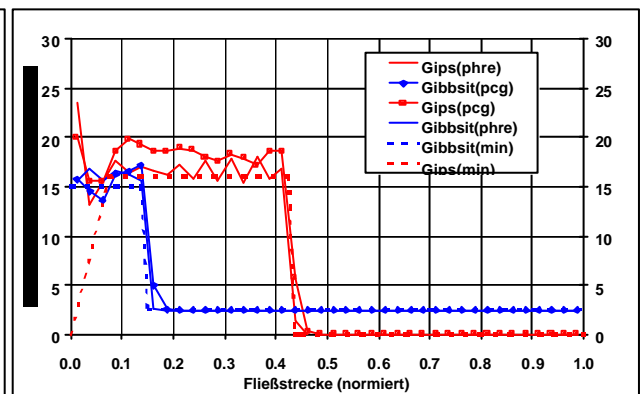
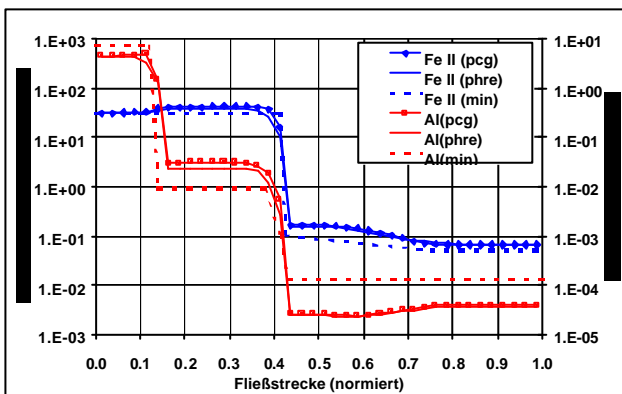
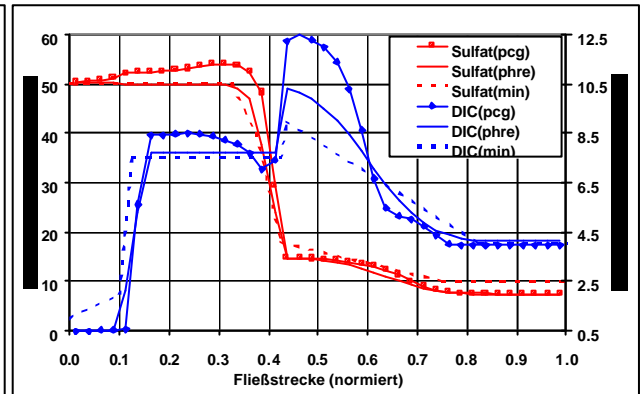
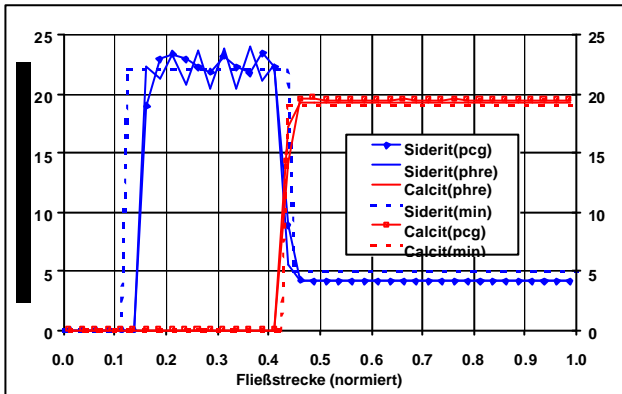
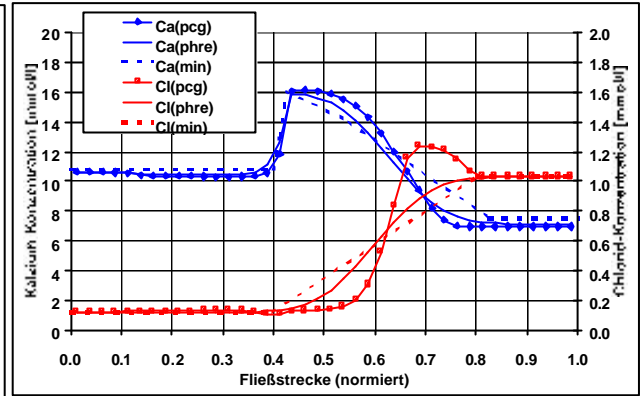
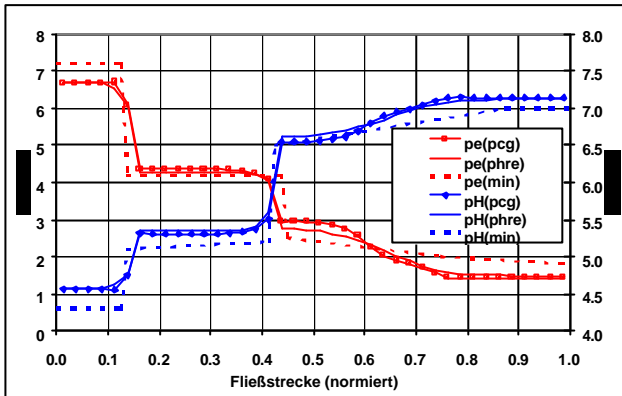
Die abgebildete Tabelle zeigt für die in WÜNSCHE [1974] bearbeiteten Proben des Südraums Leipzig die Ergebnisse zur Stoffgruppenanalyse nach KONONOVA [1966] auf. Die Werte für FAI und FAII wurden zu FA_{ges} zusammengefasst. Unter der Angabe Ma% ist Ma% Kohlenstoff zu verstehen.

Substrat	Ct [Ma%]	HA [Ma%]	HA [%]	FAges [Ma%]	FAges [%]	HR [Ma%]	HR [%]	HA/FA [-]	FQ [-]
quartäre Substrate									
Auenlehm	1.1	0.42	38.2	0.26	23.6	0.42	38.2	1.62	3.04
Lößlehm Pr.1	2.3	0.72	31.3	0.30	13.0	1.28	55.7	2.40	3.48
Lößlehm Pr.2	4.8	1.24	25.8	0.43	9.0	3.13	65.2	2.88	4.14
Obere Meeressande									
Glaukonitsand Pr.1	1.1	0.07	6.4	0.10	9.1	0.93	84.5	0.70	4.88
Glaukonitsand Pr.2	1.7	0.08	4.7	0.13	7.6	1.49	87.6	0.62	4.73
Untere Meeressande									
Brauner Sand Pr.1	7.1	0.06	0.8	0.15	2.1	6.89	97.0	0.40	5.54
Brauner Sand Pr.2	6.8	0.05	0.7	0.11	1.6	6.64	97.6	0.45	7.05
Brauner Sand Pr.3	0.6	0.02	3.3	0.05	8.3	0.53	88.3	0.40	5.33
Brauner Sand Pr.4	1.9	0.05	2.6	0.14	7.4	1.71	90.0	0.36	5.06
Mittel- Flöz IV-II/III, rollig									
Flußsande Bornaer Schichten	1.2	0.07	5.8	0.14	11.7	0.99	82.5	0.50	7.88
Limn. Sande Bornaer Schichten	3	0.05	1.7	0.11	3.7	2.84	94.7	0.45	7.68
Limn. Sande Bornaer Schichten	2.3	0.07	3.0	0.16	7.0	2.07	90.0	0.44	7.5
Mittel- Flöz IV-II/III, bindig									
Schluff/Ton Liegendes Flöz IV	35.7	0.05	0.1	0.19	0.5	35.46	99.3	0.26	5.13
Schluff/Ton Liegendes Flöz IV	3.2	0.1	3.1	0.18	5.6	2.92	91.3	0.56	5.12
Schluff/Ton Liegendes Flöz IV	7.1	0.07	1.0	0.10	1.4	6.93	97.6	0.70	5.28
Schluff/Ton Liegendes Flöz IV	9.4	0.02	0.2	0.15	1.6	9.23	98.2	0.13	8.2
Liegendes Flöz II/III, bindig									
Schluff/Ton Liegendes Flöz II/III	4.4	0.18	4.1	0.34	7.7	3.88	88.2	0.53	7.18
Schluff/Ton Liegendes Flöz II/III	15.7	0.02	0.1	0.07	0.4	15.61	99.4	0.29	7.2
Flöze									
Kohle Flöz IV	56.2	0.05	0.1	0.29	0.5	55.86	99.4	0.17	8.12
Kohle Flöz II/ III	60	0.09	0.2	0.17	0.3	59.74	99.6	0.53	7.2

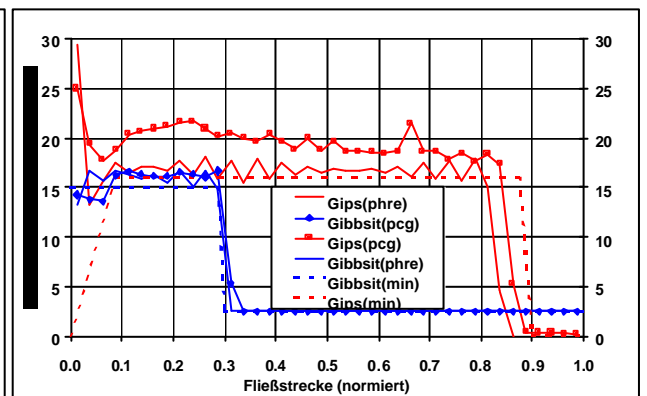
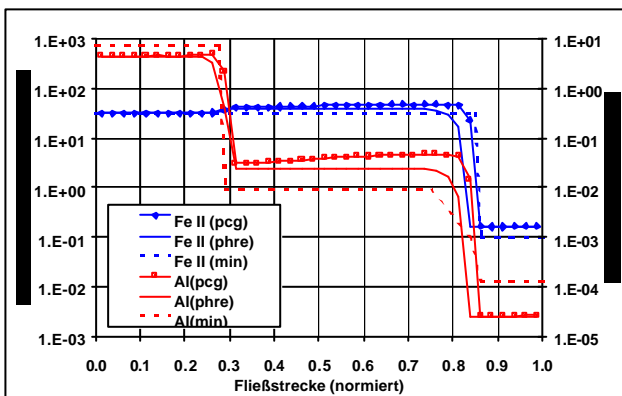
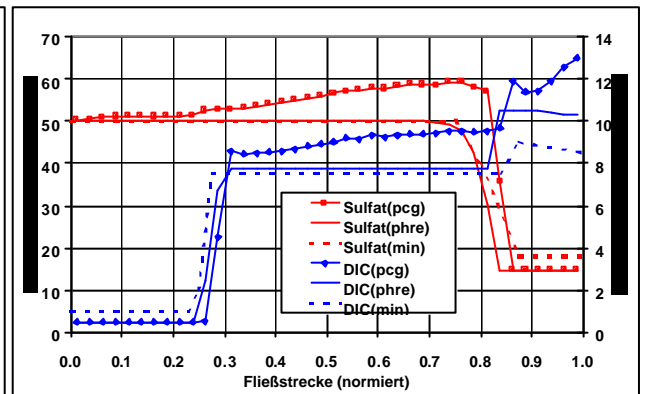
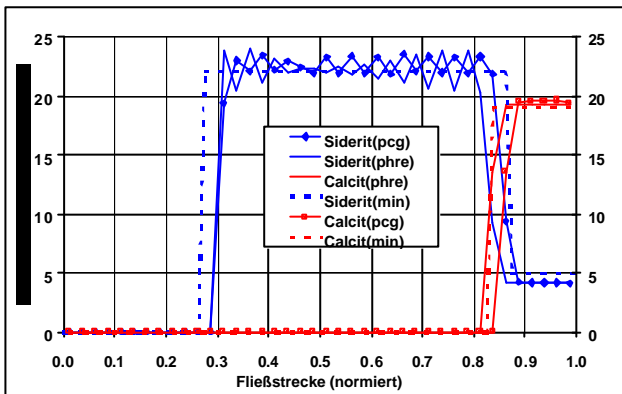
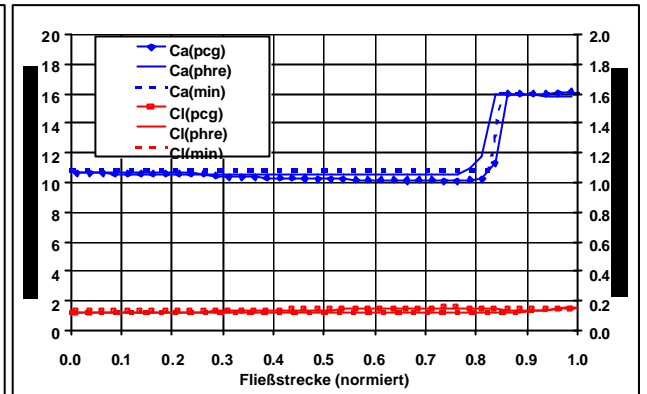
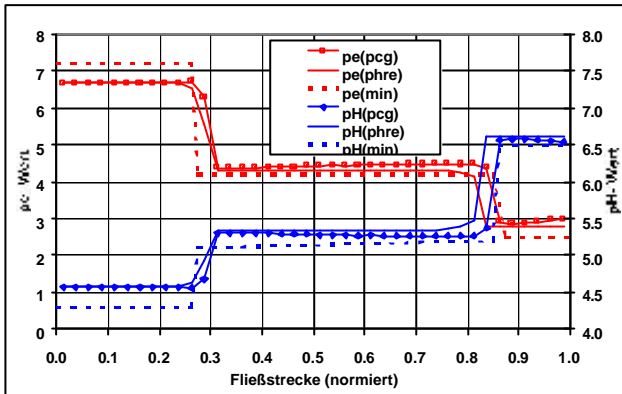
**Anl. 6.6.1 Kippengrundwasser-Beschaffenheitsprognose, Beispiel der PHREEQC -
Inputdatei**

```
TITLE Berechnung Anfangsdaten Kippe Espenhain
SOLUTION
temp 10
units mg/l
density 1
pH 7.0
pe 4.0
Ca
Fe(2)
Fe(3)
C(4)
S(6)
K
Al
Si
EQUILIBRIUM_PHASES
Fe(OH)3(a) 0.0 0.0
Calcite 0.0 0.05
Gypsum 0.0 0.0
Siderite 0.0 0.0
CO2(g) -0.68 0.1
Kmica -2.0 1
Kaolinite -2.0 1
Al(OH)3(a) 0.0 0.000
JarositeK 0.0 0.0
SiO2(a) 0.0 0.0
Alunite 0.0 0.0
REACTION
Fe(OH)3 0.5
Fe 0.5
S 2
H 2
O 8
0.04732000 moles
EXCHANGE
CaX2
FeX2
KX
AIX3
KNOBS
-iterations 300
-pe_step_size 5
SELECTED_OUTPUT
-file phreeqc.pun
-totals Ca Fe(2) Fe(3) C(4) S(6) K Al Si
-equilibrium_phases Fe(OH)3(a) Calcite Gypsum Siderite CO2(g) Kmica Kaolinite Al(OH)3(a) JarositeK SiO2(a) Alunite
-molalities CaX2 FeX2 KX AIX3
```

Anl. 8.3.1a *Benchmark-Beispiel 2 – Vergleich der Modellergebnisse von PCGEOFIM, PHREEQC 2 und MINTRAN (Berechnungszeitpunkt t=12 d)*



Anl. 8.3.1b *Benchmark-Beispiel 2 – Vergleich der Modellergebnisse von PCGEOFIM, PHREEQC 2 und MINTRAN (Berechnungszeitpunkt t=24 d)*



Anl. 9.2.1 RS Markleeberg – Prognose der kippenseitigen Massenströme

Volumenströme und Konzentrationen									
Jahr	Klasse	Infiltration vom RS [m ³ /min]	Exfiltration zum RS [m ³ /min]	Ca ²⁺ [mmol/l]	Fe ²⁺ [mmol/l]	Fe ³⁺ [mmol/l]	DIC [mmol/l]	SO ₄ ²⁻ [mmol/l]	pH [-]
2020	Klasse1	2.94E-02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
	Klasse2	2.36E-02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
	Klasse3	3.71E-02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
	Klasse4	1.22E-01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
	Klasse5	1.02E-02	2.11E-01	4.66E+00	3.20E-03	3.69E-06	2.02E+00	3.82E+00	7.49E+00
	Summe/Mittel:	2.22E-01	2.11E-01	4.66E+00	3.20E-03	3.69E-06	2.02E+00	3.82E+00	
Jahr	Klasse	Infiltration vom RS [m ³ /min]	Exfiltration zum RS [m ³ /min]	Ca ²⁺ [mmol/l]	Fe ²⁺ [mmol/l]	Fe ³⁺ [mmol/l]	DIC [mmol/l]	SO ₄ ²⁻ [mmol/l]	pH [-]
2050	Klasse1	3.79E-03	1.08E-02	1.13E+01	4.80E-02	5.58E-06	2.98E+00	1.02E+01	7.12E+00
	Klasse2	1.99E-03	7.89E-03	1.59E+01	7.07E-02	9.75E-06	6.36E+00	1.37E+01	6.77E+00
	Klasse3	1.14E-03	1.61E-02	1.61E+01	7.27E-02	1.08E-05	7.46E+00	1.36E+01	6.71E+00
	Klasse4	2.19E-03	6.23E-02	1.60E+01	7.09E-02	9.88E-06	6.53E+00	1.37E+01	6.76E+00
	Klasse5	0.00E+00	2.29E-01	3.76E+00	8.32E-03	3.83E-06	2.37E+00	2.80E+00	7.45E+00
	Summe/Mittel:	9.11E-03	3.26E-01	7.25E+00	2.63E-02	5.53E-06	3.53E+00	5.93E+00	
Jahr	Klasse	Infiltration vom RS [m ³ /min]	Exfiltration zum RS [m ³ /min]	Ca ²⁺ [mmol/l]	Fe ²⁺ [mmol/l]	Fe ³⁺ [mmol/l]	DIC [mmol/l]	SO ₄ ²⁻ [mmol/l]	pH [-]
2100	Klasse1	3.78E-03	1.14E-02	1.22E+01	5.32E-02	7.08E-06	4.40E+00	1.06E+01	6.95E+00
	Klasse2	1.96E-03	8.42E-03	1.61E+01	7.19E-02	1.04E-05	7.00E+00	1.37E+01	6.73E+00
	Klasse3	1.14E-03	1.79E-02	1.63E+01	7.44E-02	1.16E-05	8.34E+00	1.36E+01	6.67E+00
	Klasse4	2.19E-03	6.66E-02	1.63E+01	7.46E-02	1.17E-05	8.43E+00	1.36E+01	6.67E+00
	Klasse5	0.00E+00	2.29E-01	3.41E+00	8.90E-03	3.62E-06	2.04E+00	2.58E+00	7.53E+00
	Summe/Mittel:	9.08E-03	3.33E-01	7.30E+00	2.86E-02	5.95E-06	3.86E+00	5.92E+00	
Massenströme zum Restsee									
Jahr	Klasse	Ca ²⁺ [mol/min]	Fe ²⁺ [mol/min]	Fe ³⁺ [mol/min]	DIC [mol/min]	SO ₄ ²⁻ [mol/min]			
2020	Klasse1	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00			
	Klasse2	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00			
	Klasse3	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00			
	Klasse4	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00			
	Klasse5	9.85E-01	6.76E-04	7.80E-07	4.27E-01	8.07E-01			
	Summe:	9.85E-01	6.76E-04	7.80E-07	4.27E-01	8.07E-01			
Jahr	Klasse	Ca ²⁺ [mol/min]	Fe ²⁺ [mol/min]	Fe ³⁺ [mol/min]	DIC [mol/min]	SO ₄ ²⁻ [mol/min]			
2050	Klasse1	1.22E-01	5.18E-04	6.02E-08	3.21E-02	1.11E-01			
	Klasse2	1.26E-01	5.58E-04	7.70E-08	5.02E-02	1.08E-01			
	Klasse3	2.59E-01	1.17E-03	1.73E-07	1.20E-01	2.19E-01			
	Klasse4	9.94E-01	4.41E-03	6.15E-07	4.07E-01	8.54E-01			
	Klasse5	8.60E-01	1.90E-03	8.76E-07	5.42E-01	6.40E-01			
	Summe:	2.36E+00	8.56E-03	1.80E-06	1.15E+00	1.93E+00			
Jahr	Klasse	Ca ²⁺ [mol/min]	Fe ²⁺ [mol/min]	Fe ³⁺ [mol/min]	DIC [mol/min]	SO ₄ ²⁻ [mol/min]			
2100	Klasse1	1.39E-01	6.05E-04	8.06E-08	5.01E-02	1.21E-01			
	Klasse2	1.35E-01	6.05E-04	8.73E-08	5.89E-02	1.15E-01			
	Klasse3	2.92E-01	1.33E-03	2.08E-07	1.50E-01	2.43E-01			
	Klasse4	1.09E+00	4.97E-03	7.79E-07	5.61E-01	9.04E-01			
	Klasse5	7.82E-01	2.04E-03	8.29E-07	4.69E-01	5.91E-01			
	Summe:	2.43E+00	9.55E-03	1.98E-06	1.29E+00	1.97E+00			

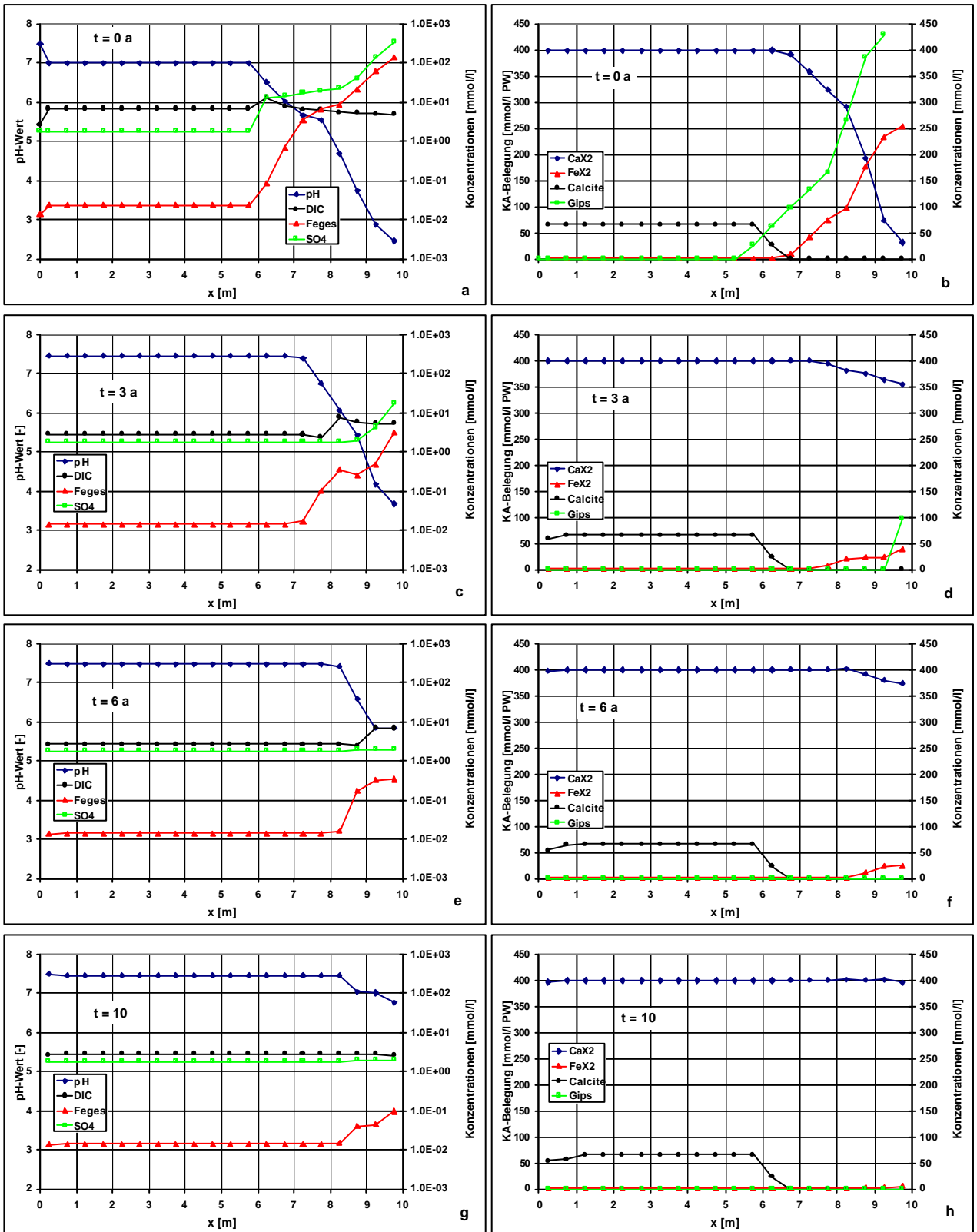
Anl. 9.2.2 RS Störmthal – Prognose der kippenseitigen Massenströme

Volumenströme und Konzentrationen									
Jahr	Klasse	Infiltration vom RS [m ³ /min]	Exfiltration zum RS [m ³ /min]	Ca ²⁺ [mmol/l]	Fe ²⁺ [mmol/l]	Fe ³⁺ [mmol/l]	DIC [mmol/l]	SO ₄ ²⁻ [mmol/l]	pH [-]
2020	Klasse1	0.00E+00	2.00E+00	1.24E+01	1.34E+01	1.60E-04	4.66E+00	2.54E+01	5.47E+00
	Klasse2	1.57E-03	7.38E-01	1.26E+01	1.28E+01	1.59E-04	4.30E+00	2.50E+01	5.47E+00
	Klasse3	3.83E-01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
	Klasse4	2.88E-01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
	Klasse5	4.86E-01	1.90E-03	1.21E+01	5.69E-02	1.01E-05	7.97E+00	9.37E+00	6.74E+00
	Summe/Mittel:	1.16E+00	2.74E+00	1.25E+01	1.32E+01	1.60E-04	4.56E+00	2.53E+01	
Jahr	Klasse	Infiltration vom RS [m ³ /min]	Exfiltration zum RS [m ³ /min]	Ca ²⁺ [mmol/l]	Fe ²⁺ [mmol/l]	Fe ³⁺ [mmol/l]	DIC [mmol/l]	SO ₄ ²⁻ [mmol/l]	pH [-]
2050	Klasse1	0.00E+00	2.05E+00	1.25E+01	1.26E+01	1.54E-04	4.70E+00	2.47E+01	5.48E+00
	Klasse2	1.51E-03	9.06E-01	1.29E+01	1.07E+01	1.41E-04	4.79E+00	2.32E+01	5.52E+00
	Klasse3	7.43E-03	9.19E-02	1.20E+01	1.41E+01	1.13E-04	4.34E+00	2.53E+01	5.63E+00
	Klasse4	2.67E-02	3.12E-02	1.39E+01	6.83E+00	7.93E-05	8.21E+00	1.84E+01	5.80E+00
	Klasse5	2.72E-03	8.00E-02	1.48E+01	6.16E-02	5.98E-06	3.00E+00	1.37E+01	7.07E+00
	Summe/Mittel:	3.84E-02	3.15E+00	1.27E+01	1.17E+01	1.45E-04	4.71E+00	2.39E+01	
Jahr	Klasse	Infiltration vom RS [m ³ /min]	Exfiltration zum RS [m ³ /min]	Ca ²⁺ [mmol/l]	Fe ²⁺ [mmol/l]	Fe ³⁺ [mmol/l]	DIC [mmol/l]	SO ₄ ²⁻ [mmol/l]	pH [-]
2100	Klasse1	0.00E+00	2.05E+00	9.41E+00	8.11E+00	1.17E-04	4.39E+00	1.71E+01	5.60E+00
	Klasse2	1.51E-03	9.19E-01	1.30E+01	9.08E+00	1.31E-04	4.57E+00	2.17E+01	5.55E+00
	Klasse3	7.16E-03	1.12E-01	1.19E+01	1.47E+01	1.35E-04	4.94E+00	2.58E+01	5.55E+00
	Klasse4	2.67E-02	4.06E-02	1.38E+01	8.49E+00	9.05E-05	8.33E+00	2.01E+01	5.74E+00
	Klasse5	2.27E-03	9.44E-02	1.54E+01	6.68E-02	8.20E-06	4.92E+00	1.37E+01	6.87E+00
	Summe/Mittel:	3.76E-02	3.21E+00	1.08E+01	8.39E+00	1.18E-04	4.53E+00	1.87E+01	
Massenströme zum Restsee									
Jahr	Klasse	Ca ²⁺ [mol/min]	Fe ²⁺ [mol/min]	Fe ³⁺ [mol/min]	DIC [mol/min]	SO ₄ ²⁻ [mol/min]			
2020	Klasse1	2.48E+01	2.68E+01	3.21E-04	9.33E+00	5.09E+01			
	Klasse2	9.33E+00	9.42E+00	1.18E-04	3.18E+00	1.85E+01			
	Klasse3	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00			
	Klasse4	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00			
	Klasse5	2.30E-02	1.08E-04	1.92E-08	1.51E-02	1.78E-02			
	Summe:	3.42E+01	3.62E+01	4.39E-04	1.25E+01	6.94E+01			
Jahr	Klasse	Ca ²⁺ [mol/min]	Fe ²⁺ [mol/min]	Fe ³⁺ [mol/min]	DIC [mol/min]	SO ₄ ²⁻ [mol/min]			
2050	Klasse1	2.56E+01	2.57E+01	3.16E-04	9.61E+00	5.06E+01			
	Klasse2	1.17E+01	9.69E+00	1.28E-04	4.34E+00	2.10E+01			
	Klasse3	1.11E+00	1.30E+00	1.03E-05	3.98E-01	2.33E+00			
	Klasse4	4.34E-01	2.13E-01	2.47E-06	2.56E-01	5.74E-01			
	Klasse5	1.19E+00	4.93E-03	4.78E-07	2.40E-01	1.10E+00			
	Summe:	4.00E+01	3.69E+01	4.57E-04	1.48E+01	7.55E+01			
Jahr	Klasse	Ca ²⁺ [mol/min]	Fe ²⁺ [mol/min]	Fe ³⁺ [mol/min]	DIC [mol/min]	SO ₄ ²⁻ [mol/min]			
2100	Klasse1	1.93E+01	1.66E+01	2.39E-04	8.99E+00	3.51E+01			
	Klasse2	1.19E+01	8.34E+00	1.20E-04	4.19E+00	1.99E+01			
	Klasse3	1.34E+00	1.65E+00	1.52E-05	5.54E-01	2.90E+00			
	Klasse4	5.59E-01	3.44E-01	3.67E-06	3.38E-01	8.14E-01			
	Klasse5	1.46E+00	6.30E-03	7.74E-07	4.64E-01	1.29E+00			
	Summe:	3.46E+01	2.69E+01	3.78E-04	1.45E+01	6.00E+01			

Anl. 9.3.1 Modell zur Durchströmung von Restlochverwitterungszonen – Zusammenstellung chemische Anfangsbedingungen

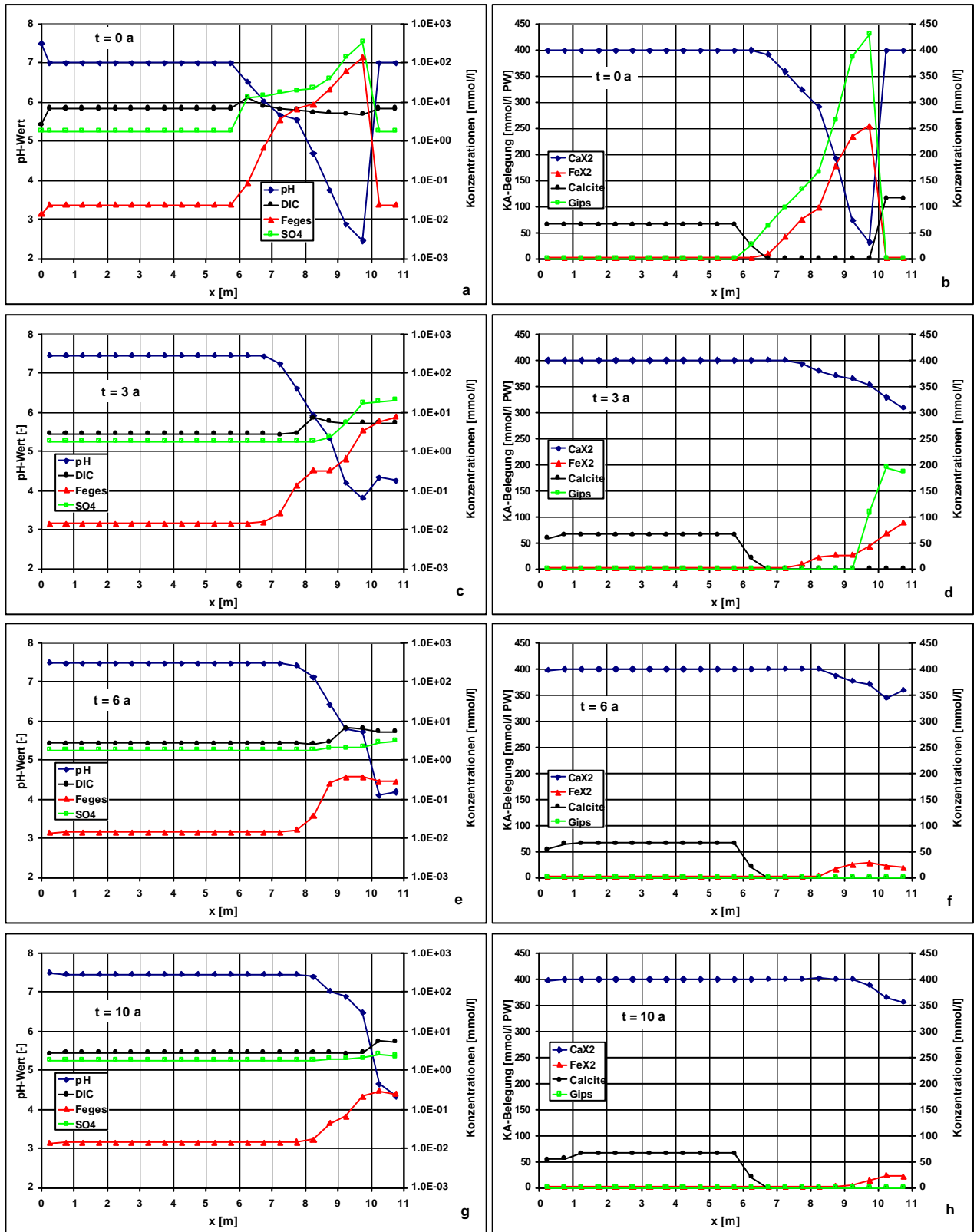
	Sdi (verw.)	Sdi (verw.)	pH	pe	Ca	Fe(2)	Fe(3)	C(4)	S(6)	K	Al	Si	CaX2	FeX2	KX	HX	AlX3
	mmol/l	Ma%	[-]	[-]	mmol/l	mmol/l	mmol/l	mmol/l	mmol/l	mmol/l	mmol/l	mmol/l	mmol/l	mmol/l	mmol/l	mmol/l	mmol/l
Zulauf			7.49	0.95	2.9E+00	1.4E-02	3.6E-06	2.7E+00	1.8E+00	1.6E-01	1.7E-05	2.5E-01	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00
Zelle 1-12			7.00	2.03	4.5E+00	2.3E-02	3.6E-06	6.8E+00	1.8E+00	7.2E-03	6.5E-07	2.5E-01	4.0E+02	7.2E-01	2.0E-01	6.3E-03	6.2E-08
Zelle 13	0.019	0.01	6.52	3.34	1.7E+01	8.2E-02	1.6E-05	1.3E+01	1.3E+01	2.4E-02	5.9E-07	2.5E-01	4.0E-01	7.2E-04	4.0E-04	1.3E-05	4.7E-10
Zelle 14	0.037	0.02	6.02	3.84	1.5E+01	7.0E-01	4.4E-05	7.8E+00	1.5E+01	7.5E-02	3.4E-06	2.5E-01	3.9E-01	8.0E-03	1.3E-03	4.2E-05	1.7E-08
Zelle 15	0.056	0.03	5.67	4.19	1.4E+01	3.5E+00	9.7E-05	6.5E+00	1.7E+01	1.7E-01	2.8E-05	2.5E-01	3.6E-01	4.1E-02	3.0E-03	9.5E-05	2.0E-07
Zelle 16	0.075	0.04	5.54	4.32	1.3E+01	6.6E+00	1.3E-04	6.3E+00	1.9E+01	2.3E-01	7.2E-05	2.5E-01	3.2E-01	7.5E-02	4.0E-03	1.3E-04	5.0E-07
Zelle 17	0.094	0.05	4.69	6.30	1.3E+01	8.7E+00	4.0E-04	5.5E+00	2.2E+01	1.7E+00	5.0E-03	1.3E+00	2.9E-01	9.6E-02	2.8E-02	9.0E-04	3.4E-05
Zelle 18	0.187	0.10	3.74	7.25	1.1E+01	2.1E+01	7.1E-04	5.3E+00	4.0E+01	1.8E-03	4.6E+00	1.4E+00	1.9E-01	1.8E-01	2.7E-05	7.6E-03	1.9E-02
Zelle 19	0.281	0.15	2.87	6.81	9.4E+00	6.1E+01	7.1E-04	5.1E+00	1.4E+02	1.2E+00	4.2E+01	1.4E+00	7.4E-02	2.3E-01	1.3E-02	4.5E-02	4.5E-02
Zelle 20	0.374	0.20	2.45	6.37	8.3E+00	1.4E+02	7.1E-04	4.8E+00	3.2E+02	4.0E+00	1.1E+02	1.3E+00	3.2E-02	2.5E-01	3.2E-02	9.5E-02	3.7E-02
					Fe(OH)_{3(a)}	Calcite	Gips	Siderit	CO2(g)	K-Mica	Kaolinit	Al(OH)_{3(a)}	JarositK	SiO2(a)	Alunit		
Zulauf					0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00		
Zelle 1-12					0.0E+00	6.6E+01	0.0E+00	1.0E+01	0.0E+00	3.5E+01	2.2E+01	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00		
Zelle 13					6.9E-07	2.6E-02	2.6E-02	2.9E-02	1.4E-02	3.5E-02	2.2E-02	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00		
Zelle 14					6.6E-07	0.0E+00	6.2E-02	4.0E-02	3.4E-02	3.4E-02	2.4E-02	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00		
Zelle 15					6.1E-07	0.0E+00	9.7E-02	2.2E-02	5.3E-02	3.2E-02	2.6E-02	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00		
Zelle 16					5.7E-07	0.0E+00	1.3E-01	4.3E-03	7.1E-02	3.1E-02	2.8E-02	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00		
Zelle 17					0.0E+00	0.0E+00	1.7E-01	0.0E+00	7.6E-02	5.2E-03	6.7E-02	0.0E+00	1.0E-07	0.0E+00	3.3E-04		
Zelle 18					0.0E+00	0.0E+00	2.7E-01	0.0E+00	7.6E-02	0.0E+00	1.0E-02	0.0E+00	0.0E+00	1.3E-01	3.5E-02		
Zelle 19					0.0E+00	0.0E+00	3.9E-01	0.0E+00	7.7E-02	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	1.5E-01	2.1E-02		
Zelle 20					0.0E+00	0.0E+00	4.3E-01	0.0E+00	7.7E-02	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	0.0E+00	1.5E-01	-1.1E-19		

Anl. 9.3.2 Modell zur Durchströmung von Restlochverwitterungszonen, Modellvariante 1
– Konzentrationsverteilungen im Modellgebiet



Konzentrationsverteilung im Modellgebiet, wesentliche transportierte Spezies (links), wesentliche reaktive Festphasengehalte (rechts) – Zeitpunkte (Anfangszustand [a,b], t=3a [c,d], t=6a [e,f], t=10a [g,h])

**Anl. 9.3.3 Modell zur Durchströmung von Restlochverwitterungszonen, Modellvariante 2
– Konzentrationsverteilungen im Modellgebiet**



Konzentrationsverteilung im Modellgebiet, wesentliche transportierte Spezies (links), wesentliche reaktive Festphasengehalte (rechts) – Zeitpunkte (Anfangszustand [a,b], t=3a [c,d], t=6a [e,f], t=10a [g,h])

Anl. 10.1.1 Reaktives 2D-Vertikalschnittmodell Jänschwalde – Geochemische Zonierung

Die Tabelle enthält die Anfangsbedingungen der Modellierung. Es sind die Werte für die in Abb. 10.1.3 ausgewiesenen Bereiche A-K aufgeführt.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
CaCO₃ [Ma%]	0.13	1.27	0	0.57	3.17	0.25	0.76	0	0	0.13	0
CaCO₃ [mol/l]	0.078	0.760	0	0.340	1.900	0.150	0.460	0	0	0.077	0
T-Wert [meq/100g]	1	10	2	2	6	3	3	7	15	15	7
T-Wert [mol/l]	0.04	0.41	0.08	0.08	0.25	0.12	0.12	0.29	0.62	0.62	0.29
Ca [mg/l]	94.4	94.4	94.4	94.4	94.4	94.4	94.4	130.2	524.0	681.0	441.0
Fe(2) [mg/l]	0.26	0.26	0.26	0.26	0.26	0.26	0.26	2.51	473.00	4.60	135.00
Fe(3) [mg/l]	1.90 E-04	1.90 E-04	1.90 E-04	1.90 E-04	1.90 E-04	1.90 E-04	1.90 E-04	3.60 E-04	8.38 E-03	8.70 E-04	7.83 E-03
DIC als HCO₃ [mg/l]	152	152	152	152	152	152	152	186.7	380	794	373
SO₄²⁻ [mg/l]	123	123	123	123	123	123	123	202.4	2010	1280	2180
Calcite [mol/l]	0.08	0.76	9.47 E-06	0.34	1.91	0.15	0.46	0	0	7.70 E-02	0
Gips [mol/l]	0	0	0	0	0	0	0	0	1.80 E-01	2.80 E-02	6.01 E-03
Fe(OH)_{3(a)} [mol/l]	3.22 E-06	3.22 E-06	3.22 E-06	3.22 E-06	3.22 E-06	3.22 E-06	3.22 E-06	3.22 E-06	5.54 E-07	6.92 E-07	3.95 E-08
Siderit [mol/l]	0	0	0	0	0	0	0	2.33 E-04	2.06 E-02	1.97 E-02	0
CaX₂ [mol/l]	2.00 E-02	2.05 E-01	4.00 E-02	4.00 E-02	1.25 E-01	6.00 E-02	6.00 E-02	1.44 E-01	2.38 E-01	3.09 E-01	1.31 E-01
FeX₂ [mol/l]	1.49 E-05	1.53 E-04	2.99 E-05	2.99 E-05	9.32 E-05	4.48 E-05	4.48 E-05	7.90 E-04	7.22 E-02	5.59 E-04	1.37 E-02
pH [-]	7.58	7.58	7.58	7.58	7.58	7.58	7.58	6.98	5.49	6.51	5.51
pE [-]	1.13	1.13	1.13	1.13	1.13	1.13	1.13	1.95	4.36	3.34	4.86

Anl. 10.3.1 Abstromsäulenversuche Jänschwalde – Konservierung von Infiltrat und GWL-Material

Die aus der KGGM entnommenen Wässer wurden in Stickstoff gespülten 5 l Glasflaschen konserviert (siehe Abb.) und dunkel bei Grundwassertemperaturen (10 –12 °C) gelagert. Damit konnten die Veränderung der Redoxverhältnisse und Eisenhydroxidausfällungen langfristig stark minimiert werden.

Die aus der quartären Rinne entnommenen Liner (Länge = 1m) wurden auf 60 cm gekürzt und in aluminiumbeschichtete Foliensäcke eingeschweißt und Stickstoff begast (siehe Abb.).



Abb.: Konservierung Kippenwasser-Infiltrat und Linermaterial

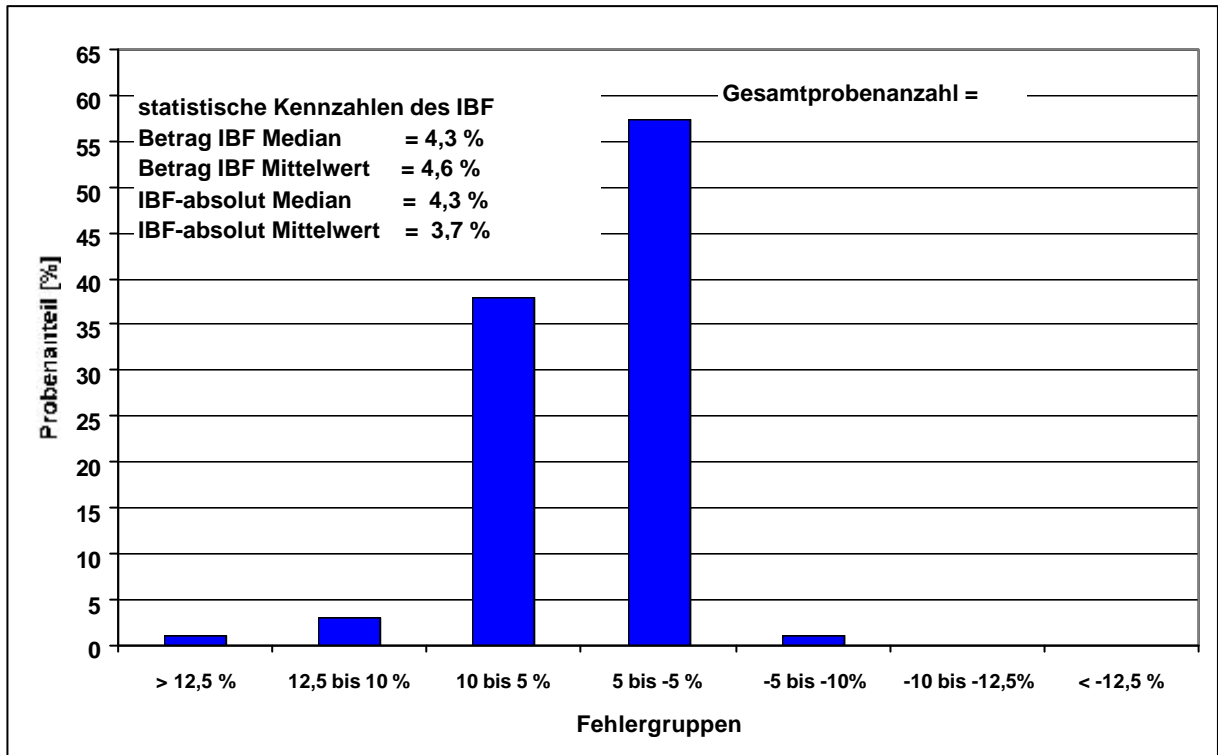
Anl. 10.3.2 Abstromsäulenversuche Jänschwalde – Beschaffenheit der Durchströmungsfluide

In der nachfolgenden Tabelle sind die Analysenergebnisse der entnommenen Durchströmungsfluide aufgeführt. Dabei verkörpert das Grundwasser der GGM 11601 das Aufsättigungsfluid und das Kippengrundwasser der KGGM 1340 das Durchströmungsfluid.

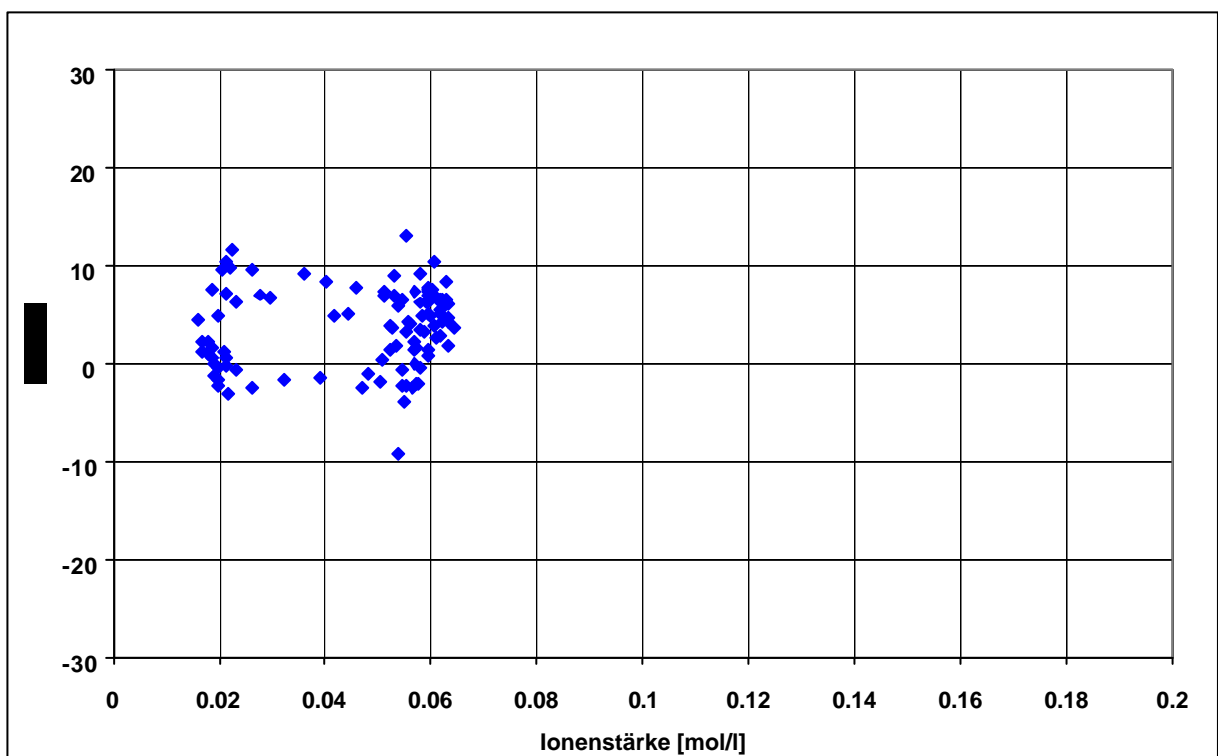
Parameter	Einheit	11601- 4/2000	11601- 10/2000	1340- 4/2000	1340- 10/2000
Temperatur	[°C]	11.6	12	17.2	17.3
pH Wert	[-]	7.38	7.4	6.4	6.5
elektr. Leitfähigkeit bei 25 °C	[µS/cm]	1139	1222	3325	3198
Redoxpotential (Eh)	[mV]	157	115	118	117
Sauerstoffgehalt	[mg/l]	0	0	0.1	0
K _S (pH = 4,3)	[mmol/l]	2.6	3.3	17.2	18
K _B (pH = 8,2)	[mmol/l]	0.7	0.3	14.8	15
Fe (II)	[mg/l]	0.8	0.7	98.5	97
S ₂	[µg/l]	14	8	n.n	n.n
Na	[mg/l]	66.2	69.91	41.68	34.75
Mg	[mg/l]	11.5	16.81	206.5	194.4
Al	[mg/l]	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
K	[mg/l]	3	2.94	16.97	15.59
Ca	[mg/l]	154.5	160.16	567	567.43
Mn	[mg/l]	0.45	0.54	2.25	2
Fe	[mg/l]	0.8	0.95	98.5	97.09
Ni	[mg/l]	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001
Zn	[mg/l]	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001
Cd	[mg/l]	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001
Pb	[mg/l]	<0,004	<0,004	<0,004	<0,004
SiO ₂ als Si	[mg/l]	5.85	6.89	20.09	26.2
SO ₄	[mg/l]	291.5	352.7	1492.4	1377.7
Cl	[mg/l]	26,0	24,2	3,5	4,3
Cr	[mg/l]	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001
Co	[mg/l]	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001
Cu	[mg/l]	<0,003	<0,003	<0,003	<0,003
As	[mg/l]	<0,05	<0,05	<0,05	<0,05
IBF (PHREEQC 2.0)	[%]	4.5	1.1	3.6	-2.8

Anl. 10.3.3 Untersuchungsgebiet Jänschwalde – Ionenbilanzfehler der Wasseranalysen

Die Grafik umfasst die Ionenbilanzfehler (IBF) der Analysen der Säulenversuche und der GGM-Beprobungen. Dabei erfolgt die Auswertung zum einen in Häufigkeitsklassen, zum anderen in Abhängigkeit von der Ionenstärke.



Untersuchungsgebiet Jänschwalde - IBF nach Häufigkeitsklassen



Untersuchungsgebiet Jänschwalde - IBF in Abhängigkeit von der Ionenstärke

Anl. 10.3.4 Modellierung Abstromsäulenversuch SVJ 1 – hydrogeochemisch relevanter Teil der PHREEQC Inputdatei

SOLUTION 0

temp 10.0
units mmol/l
pH 6.8
pe 2.9
redox Fe(2)/Fe(3)
Ca 13.5
Fe(2) 0.45
Fe(3) 1.6e-3
C(4) 16.5
S(6) 15.5
Mg 8.5
Si 7.18e-1
Mn 4.1e-2
Cl 1.23e-1
K 4.36e-1
Na 1.81

SOLUTION 1-30

temp 10.0
units mmol/l
pH 7.29 charge
pe 4.74
redox Fe(2)/Fe(3)
Ca 4.7077
Fe(2) 0.0239
Fe(3) 0.010082
C(4) 3.7537
S(6) 3.2804
Mg 0.78869
Si 0.1139
Mn 0.0081351
Cl 4.1281
K 0.87585
Na 2.0943

EQUILIBRIUM_PHASES 1-30

Calcite 0.0 0.02
Siderite 0.0 0.0002
Gypsum 0.0 0.0000
Fe(OH)3(a) 0.0 0.0000
SiO2(a) 0.0 0.0000
Rhodochro 0.0 0.000
Dolomite 0.0 0.0132

EXCHANGE 1-30

CaX2 0.31
FeX2 0.00064604
MgX2 0.016
MnX2 0.001
KX 0.0022
NaX 0.0003