

Isotopenanalytische Bewertung des Sulfathaushaltes in landwirtschaftlich genutzten Wassergewinnungsgebieten

Abschlussbericht

Zum Teilprojekt 4
des BMBF-Verbundvorhabens

**Wasserversorgung und Sulfatbelastung des Grundwassers unter land- und
forstwirtschaftlich genutzten Flächen**

Dr. Kay Knöller
Dr. Rolf Trettin

Das diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter dem **Förderkennzeichen 02WT9931/0** gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren. Jede Publikation von Daten und Teilen dieses Berichtes durch Dritte bedarf der Zustimmung der Autoren.

Halle, den 15.02.2003

Inhalt

1	AUFGABENSTELLUNG.....	11
1.1	ALLGEMEINE WISSENSCHAFTLICHE AUFGABE.....	11
1.2	NATÜRLICHE ISOTOPENVARIATIONEN ALS MITTEL ZUM PROZESSVERSTÄNDNIS	12
2	DAS UNTERSUCHUNGSGEBIET MOCKRITZ.....	14
2.1	WASSERGEWINNUNG UND GRÖÖE DES EINZUGSGEBIETES.....	14
2.2	HYDROGEOLOGISCHE SITUATION.....	16
2.3	DAS SULFATPROBLEM IN MOCKRITZ.....	18
3	METHODISCHE UND EXPERIMENTELLE GRUNDLAGEN DER ANWENDUNG VON ISOTOPENTRACERN ZUR AUFKLÄRUNG DES SCHWEFELKREISLAUFS.....	20
3.1	ANWENDUNG NATÜRLICHER ISOTOPE ZUR BEWERTUNG DES SCHWEFELKREISLAUFS	20
3.1.1	<i>Grundlagen der isotopischen Untersuchung schwefelhaltiger Verbindungen</i>	22
3.1.1.1	Einleitung	22
3.1.1.2	Quellenspezifische Variationen der isotopischen Zusammensetzung von schwefelhaltigen Substanzen.....	23
3.1.1.2.1	Geogene Schwefelquellen	24
3.1.1.2.2	Isotopische Zusammensetzung von atmosphärischen Schwefelquellen	25
3.1.1.2.3	Isotopische Zusammensetzung des Schwefels in sulfathaltigen Düngemitteln	27
3.1.1.3	Einfluss von Stoffumwandlungen in der gesättigten und ungesättigten Zone auf die isotopische Zusammensetzung von schwefelhaltigen Verbindungen.....	29
3.1.1.3.1	Reduktion des Sulfatschwefels.....	29
3.1.1.3.2	Bildung von Eisendisulfiden	32
3.1.1.3.3	Oxidation von sedimentären Sulfiden	33
3.1.1.3.4	Verhalten der isotopischen Zusammensetzung von Schwefelverbindungen bei Umsetzung in der Bodenzone	35
3.1.2	<i>Isotopische Untersuchung von an Schwefelumsetzungen beteiligten Redoxpartnern</i>	37
3.1.2.1	Isotopische Zusammensetzung des gelösten anorganischen Kohlenstoffs	37
3.1.2.2	Isotopische Zusammensetzung des gelösten Nitrats bei der autotrophen Denitrifikation als Sulfid oxidierenden Prozess.....	38
3.1.3	<i>Angewandte Tracermethoden zur Untersuchung des Wasserkreislaufs</i>	40
3.1.3.1	Motivation	40
3.1.3.2	Tritium.....	41
3.1.3.3	δD und $\delta^{18}O$	43
3.1.3.4	Tritiogenes Helium-3	45

3.1.3.5	FCKW und SF ₆	45
3.1.3.6	Krypton-85	46
3.2	MESSVERFAHREN	48
3.2.1	<i>Isotopenbestimmung am gelösten Sulfat</i>	48
3.2.1.1	Probengewinnung.....	48
3.2.1.2	Präparation des gelösten Sulfats.....	48
3.2.1.3	Umsetzung von Sulfiden	49
3.2.1.4	Bestimmung des ³⁴ S/ ³² S-Verhältnisses	49
3.2.1.5	δ ¹⁸ O-Bestimmung am gelösten Sulfat.....	50
3.2.2	<i>Isotopenbestimmung am gelösten anorganischen Kohlenstoff (DIC)</i>	50
3.2.3	<i>Bestimmung der isotopischen Zusammensetzung des gelösten Nitrats</i>	51
3.2.4	<i>Bestimmung der isotopischen Zusammensetzung des Wassers</i>	52
3.2.4.1	δ ¹⁸ O-Werte	52
3.2.4.2	δD-Werte	52
3.2.4.3	Bestimmung der Tritiumgehalte.....	52
3.2.5	³ He, ⁸⁵ Kr und FCKW-Messungen.....	53
3.2.6	<i>Präparation des Bodenschwefels für die Isotopenanalyse</i>	54
3.2.6.1	Probengewinnung.....	54
3.2.6.2	Präparation des anorganischen Bodensulfats	55
3.2.6.3	Präparation des anorganischen reduzierten Schwefels.....	55
4	ERGEBNISSE DER UNTERSUCHUNGEN IM TRINKWASSEREINZUGSGEBIET TORGAU-MOCKRITZ	57
4.1	EXPERIMENTELLE UNTERSUCHUNGSPROGRAMME UND DATENGRUNDLAGE.....	57
4.2	ISOTOPISCHE ZUSAMMENSETZUNG VON SCHWEFELQUELLEN IM UNTERSUCHUNGSGEBIET MOCKRITZ	59
4.2.1	<i>Isotopische Zusammensetzung der atmosphärischen Schwefeldeposition</i>	59
4.2.2	<i>Isotopische Zusammensetzung sulfathaltiger Mineraldünger</i>	62
4.2.2.1	³⁴ S-Signatur des Ablaufs ausgewählter Lysimeter in Falkenberg.....	64
4.2.3	<i>Isotopische Zusammensetzung punktueller Sulfatquellen</i>	68
4.2.3.1	Deponierte Wasseraufbereitungsrückstände am Wasserwerk Mockritz.....	68
4.2.3.2	Gipsdeponie auf dem WASAG-Gelände	69
4.2.4	<i>Zusammenfassende Betrachtung der anthropogenen Schwefeleinträge</i>	70
4.3	ISOTOPISCHE ZUSAMMENSETZUNG VON BODENSCHWEFELSPECIES IM UNTERSUCHUNGSGEBIET MOCKRITZ	71
4.3.1	<i>Isotopische Klassifizierung von verschiedenen Bodenschwefelverbindungen im Untersuchungsgebiet Torgau-Mockritz</i>	71

4.3.1.1	Reduzierter anorganischer Bodenschwefel (Disulfide).....	71
4.3.1.2	Anorganisches Bodensulfat.....	72
4.3.1.2.1	Isotopische Zusammensetzung des Schwefels.....	72
4.3.1.2.2	Isotopische Zusammensetzung des Sauerstoffs	73
4.3.2	<i>Isotopische Untersuchung von Sondierungsprofilen.....</i>	76
4.3.2.1	Partiell reduzierte Bodenprofile	77
4.3.2.2	Oxidierter Bodenprofile.....	80
4.3.2.3	Isotopische Normalprofile.....	81
4.3.3	<i>Isotopische Zusammensetzung des Sulfataustrages aus der Bodenzone.....</i>	83
4.4	ISOTOPISCHE ZUSAMMENSETZUNG VON GELÖSTEN BESTANDTEILEN IM GRUND- UND OBERFLÄCHENWASSER DES UNTERSUCHUNGSGEBIETES MOCKRITZ.....	87
4.4.1	<i>Verteilung der Sulfatgehalte im Grundwasser</i>	87
4.4.2	<i>Isotopische Zusammensetzung des gelösten Grundwassersulfats.....</i>	88
4.4.2.1	Ermittlung der Herkunft des Grundwassersulfats	88
4.4.2.2	Räumliche Verteilungsmuster der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Grundwassersulfats..	95
4.4.2.3	Bewirtschaftungsversuch am Brunnen 17 der Wasserfassung Mockritz I.....	100
4.4.3	<i>Isotopische Zusammensetzung des gelösten Sulfats in Oberflächenwässern des Untersuchungsgebietes Mockritz</i>	104
4.4.4	<i>Isotopische Zusammensetzung des gelösten Nitrats.....</i>	106
4.4.5	<i>Isotopische Zusammensetzung des im Grundwasser gelösten anorganischen Kohlenstoffs (DIC)</i>	109
4.5	ZUSAMMENFASSUNG DER ERGEBNISSE UND SCHLUSSFOLGERUNGEN AUS DEN UNTERSUCHUNGEN DER STABILEN ISOTOPE IM UNTERSUCHUNGSGEBIET MOCKRITZ .	113
4.6	GRUNDWASSERDYNAMIK UND –KOMMUNIKATION.....	115
4.6.1	<i>Tritiumuntersuchungen</i>	115
4.6.1.1	Allgemeine Beziehungen zwischen Tritium und Sulfat.....	115
4.6.1.2	Verbreitung älterer Wässer.....	116
4.6.1.3	Verteilung entlang von Vertikalschnitten	118
4.6.1.4	Zeitliche Variationen.....	120
4.6.2	<i>Variationen von δD und $\delta^{18}\text{O}$.....</i>	122
4.6.3	<i>Grundwasseruntersuchungen mit Helium-3.....</i>	127
4.6.4	<i>Fluorchlorkohlenwasserstoffe (FCKW) und SF_6</i>	129
4.6.4.1	Kontaminationsprobleme	129
4.6.4.2	Abbauprobleme	130
4.6.4.3	Verweilzeitaussagen.....	130
4.6.4.4	SF_6	133

4.6.5	<i>Krypton-85</i>	134
4.6.6	<i>Schlussfolgerungen aus den Untersuchungen zur Grundwasserdynamik</i>	135
5	ISOTOPENUNTERSUCHUNGEN IM TRINKWASSEREINZUGSGEBIET BRAMSTEDT	136
5.1	ALLGEMEINE AUSSAGEN ZUM UNTERSUCHUNGSGBIET.....	136
5.2	MESSPROGRAMM	138
5.3	ERGEBNISSE	138
5.3.1	<i>Isotopische Zusammensetzung des Wassers ($\delta^{18}O$, δD, 3H)</i>	138
5.3.2	<i>Isotopische Zusammensetzung gelöster und sedimentärer Schwefelspezies</i>	140
5.3.3	<i>Isotopische Zusammensetzung weiterer gelöster Bestandteile (DIC, NO_3)</i>	144
6	ALLGEMEINE SCHLUSSFOLGERUNGEN	146
7	LITERATUR	148
8	DANKSAGUNG	157

Verzeichnis der Abbildungen

Abbildung 1: Wassereinzugs- und Schutzgebiete der Torgauer Fernwasserwerke mit Lage ausgewählter Altlasten	15
Abbildung 2: Übersichtskarte des Untersuchungsgebietes Mockritz mit Hydroisohypsen und Lage der Wasserfassungen und Grundwassermessstellen	17
Abbildung 3: Schematischer Schnitt durch einen Grundwasserleiter und Bezeichnung von Prozessen, die für den Schwefelkreislauf relevant sind	21
Abbildung 4: Variationsbreiten der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von Schwefelverbindung in ausgewählten natürlichen Reservoirien.....	23
Abbildung 5: Gegenüberstellung der Häufigkeitsverteilungen der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von weltweit vorkommenden sedimentären Sulfiden aus allen geologischen Zeitabschnitten und von tertiären und quartären sedimentären Sulfiden aus dem Mitteldeutschen und Lausitzer Braunkohlerevier.	24
Abbildung 6: Übersicht der wichtigsten atmosphärischen Schwefelquellen	25
Abbildung 7: Variationen der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von verschiedenen natürlichen und anthropogenen atmosphärischen Schwefelquellen	26
Abbildung 8: Häufigkeitsverteilungen der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von weltweit produzierten mineralischen Düngemitteln	28
Abbildung 9: Verlauf der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von Sulfat und Schwefelwasserstoff bei der Sulfatreduktion in einem gegenüber Sulfatnachlieferung geschlossenen System mit und ohne Herausbildung eines H_2S -Produktreservoirs.....	30
Abbildung 10: Schematischer Ablauf der dissimilatorischen Sulfatreduktion mit Isotopenfraktionierungen des Schwefels (nach REES, 1973)	31
Abbildung 11: DIC-Quellen und ihre $\delta^{13}\text{C}$ -Ausgangswerte.	38
Abbildung 12: Variation der $\delta^{15}\text{N}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte von verschiedenen natürlichen und anthropogenen Nitratquellen	39
Abbildung 13: Tritiumkonzentration im Niederschlag zur Bildungszeit und theoretische Restkonzentration im Jahre 2001	42
Abbildung 14: Mindesttritiumgehalte in Grundwasserproben.....	43
Abbildung 15: Variation von $\delta^{18}\text{O}$ im Niederschlag von Leipzig 44	
Abbildung 16: FCKW-Konzentrationen im bei 10 °C neu gebildeten Grundwasser	46
Abbildung 17: ^{85}Kr in der nördlichen Hemisphäre	47
Abbildung 18: Apparatur zur Extraktion von Mono- und Disulfiden aus Boden- und Sedimentproben.....	56
Abbildung 19: Zeitlicher Verlauf der isotopischen Zusammensetzung der atmosphärischen Schwefeldeposition (Nassdeposition) an der Messstation Leipzig	61
Abbildung 20: Sulfatgehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte in Sickerwassermischproben (Januar bis März 2000) aus ausgewählten Lysimetern der Lysimeterstation Falkenberg	65
Abbildung 21: Zeitliche Verläufe der isotopischen Schwefelzusammensetzung im Sickerwassersulfat aus Lysimetern der Lysimeterstation Falkenberg	66

Abbildung 22: Zeitliche Verläufe der isotopischen Schwefelzusammensetzung im Sickerwassersulfat aus Lysimetern der Lysimeterstation Falkenberg mit Grünlandbewirtschaftung, die mit verschiedenen Mineraldüngern gedüngt wurden.....	67
Abbildung 23: Tiefenabhängige Variabilität und relative Häufigkeitsverteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von Disulfiden aus der gesättigten und ungesättigten Zone im Untersuchungsgebiet Mockritz	72
Abbildung 24: Tiefenabhängige Variabilität und relative Häufigkeitsverteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte anorganischen Bodensulfats aus der gesättigten und ungesättigten Zone im Untersuchungsgebiet Mockritz	73
Abbildung 25: Tiefenabhängige Variabilität der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte von Porenwasser aus der ungesättigten Zone im Auenbereich des Untersuchungsgebietes Mockritz.....	75
Abbildung 26: Isotopische Zusammensetzung von Porenwasser aus der ungesättigten Zone im Auenbereich des Untersuchungsgebietes Mockritz	75
Abbildung 27: Isotopische Zusammensetzung des anorganischen Bodensulfats in Sondierungsproben aus dem Untersuchungsgebiet Mockritz	76
Abbildung 28: Gehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von verschiedenen Bodenschwefelspezies (Sondierung S-10)	78
Abbildung 29: Gehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von verschiedenen Bodenschwefelspezies (Sondierung S-17)	80
Abbildung 30: Gehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des anorganischen Sulfats (Sondierung 9514).....	81
Abbildung 31: Isotopische Normalprofile für Bodensondierung im Testgebiet Mockritz	83
Abbildung 32: Prozentuale Verteilung der drei hauptsächlichen sedimentären und Bodenschwefelspezies aus Sondierungsprofilen (ungesättigter Bereich) im Untersuchungsgebiet Mockritz	84
Abbildung 33: Regionale Verteilung der Sulfatgehalte im oberen Pegelniveau	87
Abbildung 34: Häufigkeitsverteilungen der $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Grundwassersulfats im Untersuchungsgebiet Mockritz.....	89
Abbildung 35: Isotopische Zusammensetzung von gelösten Grundwassersulfaten aus dem UG Mockritz (Mittelwerte).....	90
Abbildung 36: Zusammenhang zwischen den Sulfatgehalten und den $\delta^{34}\text{S}$ -Werten in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Mockritz.....	92
Abbildung 37: Zusammenhang zwischen den Sulfatgehalten und den $\delta^{18}\text{O}$ - SO_4 -Werten in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Mockritz.....	93
Abbildung 38: $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Sulfats in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Mockritz, deren Sulfatgehalte höher als 700mg/l sind	94
Abbildung 39: Regionale Verteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Grundwassersulfats im oberen Pegelniveau des Untersuchungsgebietes Mockritz (Grundwasseroberfläche bis 10m darunter)	95
Abbildung 40: Regionale Verteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Grundwassersulfats im unteren Pegelniveau des Untersuchungsgebietes Mockritz	97

Abbildung 41: Verteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Sulfats im Profilschnitt durch das zentrale Sulfathochlastgebiet des Untersuchungsgebietes Mockritz	99
Abbildung 42: Versuchsanordnung zum Bewirtschaftungsversuch am Brunnen 17 der Wasserfassung Mockritz I.....	100
Abbildung 43: Zeitliche Verläufe der Sulfatgehalte, der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte und der Wasserstände in Messstellen der Versuchsanordnung zum Bewirtschaftungsversuch Mockritz	101
Abbildung 44: Sulfatgehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte in Proben aus Messstellen der Versuchsanordnung zum Bewirtschaftungsversuch und des Referenzstandortes Mockritz	103
Abbildung 45: Häufigkeitsverteilungen der Sulfatgehalte, der $\delta^{34}\text{S}$ - und der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Sulfats in Oberflächenwässern des Untersuchungsgebietes Mockritz	104
Abbildung 46: Zusammenhang zwischen den Nitratgehalten und den $\delta^{18}\text{O}$ -Werten des gelösten Nitrats in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Mockritz	106
Abbildung 47: Zusammenhang zwischen den Nitratgehalten und den $\delta^{15}\text{N}$ -Werten des gelösten Nitrats in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Mockritz	107
Abbildung 48: Gegenüberstellung von $\delta^{15}\text{N}$ und $\delta^{18}\text{O}$ des gelösten Nitrats in Grund- und Oberflächenwässern des Untersuchungsgebietes Mockritz	108
Abbildung 49: Abhängigkeit des $\delta^{13}\text{C}$ -Wertes des DIC-Gleichgewichts- CO_2 von der beprobten Filtertiefe in Grundwasserproben aus dem Untersuchungsgebiet Mockritz	110
Abbildung 50: Zusammenhang zwischen den DIC-Gehalten und den $\delta^{13}\text{C}$ -Werten des DIC-Gleichgewichts- CO_2 in Grundwasserproben aus dem Untersuchungsgebiet Mockritz	111
Abbildung 51: Gegenüberstellung der $\delta^{13}\text{C}$ -Werte des DIC-Gleichgewichts- CO_2 und der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Sulfats in Grundwasserproben aus dem Untersuchungsgebiet Mockritz	112
Abbildung 52: Sulfatgehalte und Tritiumkonzentrationen von Grundwasserproben aus dem Gütemessnetz des Wasserwerkes Mockritz in Messkampagnen von 1995 und 1996.....	116
Abbildung 53: Verteilung der Tritiumgehalte in den unteren Messniveaus, nachgewiesene Altwasseranteile im UP schwarz umrandet.....	117
Abbildung 54: Verteilung der Tritiumgehalte im tieferen Grundwasser,	118
Abbildung 55: Verteilung von Tritium- und Sulfatgehalten in einem schematischen N-S-Vertikalschnitt nahe des westlichen Auenrandes mit Abgrenzung von Bereichen mit nachgewiesener Altwasserbeteiligung (Daten vom November 1999).....	118
Abbildung 56: Schematische Darstellung der Verteilung von Tritium und Sulfatgehalten in einem W-O-Vertikalschnitt	119
Abbildung 57: Zeitliche Entwicklung von Sulfatgehalt und Tritium in der Messstelle 513/96	121

Abbildung 58: Zeitliche Entwicklung von Sulfatgehalt und Tritium in der Messstelle 502/95	122
Abbildung 59: $\delta^{18}\text{O}$ in Wasser der Weinske	123
Abbildung 60: Flächenhafte Verteilung von $\delta^{18}\text{O}$ -Werten im oberen Teufenniveau	124
Abbildung 61: δD - $\delta^{18}\text{O}$ -Plot für Grundwasserproben aus	125
Abbildung 62: Zwischen 1996 und 2000 gemessene $\delta^{18}\text{O}$ -Werte	126
Abbildung 63: Sulfatgehalte und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte von Grundwasserproben,.....	127
Abbildung 64: Tritiumgehalte im Niederschlag und berechneter Gesamttritiumgehalt (${}^3\text{He}_{\text{tri}}+{}^3\text{H}$) in Abhängigkeit von der kalendarischen bzw. der nach ${}^3\text{He}/{}^3\text{H}$ berechneten Bildungszeit	129
Abbildung 65: Relative FCKW-Gehalte in Wasserproben aus dem Gebiet Mockritz	132
Abbildung 66: Gegenüberstellung von F12- und Tritiumgehalten unter Kennzeichnung der Teufenstufe.....	133
Abbildung 67: Gegenüberstellung von $\delta^{18}\text{O}$ - und δD -Werten in Wasserproben aus dem Untersuchungsgebiet Bramstedt.....	139
Abbildung 68: Tritiumgehalte als Funktion der Filterteufe in Bramstädter Grundwässern ..	140
Abbildung 69: Tiefenabhängige Variabilität der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des anorganischen Bodensulfats und des Disulfids in Bodenproben aus den Bohrungen PB89 und PB90 des Untersuchungsgebietes Bramstedt	141
Abbildung 70: Zusammenhang zwischen den Sulfatgehalten und den $\delta^{34}\text{S}$ -Werten in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Bramstedt.....	142
Abbildung 71: Gegenüberstellung von $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werten des gelösten Grundwassersulfats im Untersuchungsgebiet Bramstedt.....	142
Abbildung 72: Gegenüberstellung der Sulfatgehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte in den Grundwasserproben der Messstellen PB89, 90, HB13 im Untersuchungsgebiet Bramstedt. Weiterhin sind im Diagramm die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der sedimentären Sulfide der Bohrungen PB89 und 90 dargestellt.....	143
Abbildung 73: Zusammenhang zwischen pH-Werten und $\delta^{13}\text{C}$ -Werten des DIC in Grundwasserproben aus dem UG Bramstedt	144
Abbildung 74: Gegenüberstellung der Nitratgehalte und der dazugehörigen $\delta^{15}\text{N}$ -Werte für Grundwasser aus dem UG Bramstedt	145

Verzeichnis der Tabellen

Tabelle 1:	Isotopische Untersuchungsmöglichkeiten für Prozesse des Schwefelkreislaufs	21
Tabelle 2:	Einfluss der Reaktionsschritte der dissimilatorischen Sulfatreduktion auf die isotopische Fraktionierung des Schwefels zwischen Sulfat und Schwefelwasserstoff.....	32
Tabelle 3:	Zusammenstellung der Fraktionierungsfaktoren für Schwefel und Sauerstoff für wesentliche Schwefeltransformationen in der Bodenzone.....	36
Tabelle 4:	Mittelwerte und Standardabweichungen für die isotopische Zusammensetzung von verschiedenen Formen der atmosphärischen Schwefeldeposition an drei Standorten in Mittel- und Norddeutschland	60
Tabelle 5:	$\delta^{34}\text{S}$ -Werte von rezent und historisch in Deutschland eingesetzten Düngemitteln	63
Tabelle 6:	Chemische Zusammensetzung von Deponieschlammern des Wasserwerkes Mockritz	68
Tabelle 7:	Bereiche der isotopischen Zusammensetzung von anthropogenen Sulfateinträgen im Untersuchungsgebiet Mockritz	70
Tabelle 8:	Isotopische Zusammensetzung des aus der Bodenzone durch verschiedene Prozesse mobilisierten Sulfats unter der Annahme, dass die vorherige Bildung der jeweiligen Bodenschwefelspezies aus den in Abschnitt 4.2.4 spezifizierten anthropogenen Einträge erfolgte	85
Tabelle 9:	^3H - und Sulfatmesswerte für GWBR mit signifikanten Veränderungen zwischen 1995/96 und 1999 sowie einer sichtbaren Altwasserbeteiligung	120
Tabelle 10:	Messwerte und abgeleitete Daten einer Grundwasserbeprobung vom September 2001	128
Tabelle 11:	Daten zu Grundwasserbeprobungen mit Gasextraktion (Bestimmung der Gaszusammensetzung durch Hydroisotop GmbH)	134

1 Aufgabenstellung

1.1 Allgemeine wissenschaftliche Aufgabe

Grundwasser bildet eine Ressource, die vielerorts nur in begrenztem Umfang zur Verfügung steht und daher mengen- und qualitätsmäßig bewahrt werden muss (Prinzip der Nachhaltigkeit im Umgang mit Grundwasserressourcen). Diese Bewahrung richtet sich – zumindest in humiden Gebieten - weniger auf die verfügbaren Wassermengen als auf die Qualität des Wassers. Bewahrung setzt das Verständnis der für ein Einzugsgebiet bedeutsamen qualitätsbestimmenden Einflussgrößen voraus. Diese ergeben sich aus dem Zusammenwirken geogen-naturräumlicher und anthropogener Faktoren. Sie müssen erkannt und in quantifizierende Modelle eingebunden werden, die prognostische Aussagen im Hinblick auf die Wirkung allgemeiner und spezieller Umweltveränderungen, der Landnutzung und der wasserwirtschaftlichen Praxis erlauben. Das Zusammenwirken sehr unterschiedlicher Einflussfaktoren begründet die Notwendigkeit einer interdisziplinären Expertise. Diesem Ansatz folgt das Verbundprojekt „Wasserversorgung und Sulfatbelastung des Grundwassers unter land- und forstwirtschaftlich genutzten Flächen“ durch eine aufgabenteilige Zusammenarbeit von Agrarwissenschaftlern, Hydrologen, Hydrochemikern und Wasserwirtschaftlern. Die schwerpunktmäßige Auseinandersetzung mit dem Schwefelkreislauf in diesem Projekt resultiert daraus, dass einerseits in vielen Wasserwerken hohe oder steigende Sulfatgehalte beobachtet werden, dass aber andererseits trotz zahlreicher Studien zu diesem Thema insgesamt ein Nachholbedarf hinsichtlich einer geschlossenen Bewertung gesehen wird. Im Gegensatz beispielsweise zum Nitrat gilt Sulfat im Grundwasser wegen fehlender Toxizität für die menschliche Gesundheit kaum als Problemstoff. Dennoch ist das Auftreten hoher Konzentrationen z.B. aus technischen Gründen unerwünscht. Zudem widerspricht eine gegenüber den natürlichen geogenen Bedingungen unangemessen hohe oder eine wachsende Belastung den Vorstellungen von nachhaltigem Grundwasserschutz und fordert eine Prüfung heraus. Diese ist nur im Rahmen einer komplexen Analyse aller hydrochemisch relevanten Prozesse möglich.

Ziel des Verbundprojekts ist die Aufbereitung und Entwicklung von theoretischem und methodischem Rüstzeug zum Verständnis und zur Behandlung des Sulfatproblems insbesondere in der wasserwirtschaftlichen Praxis. Die praktische Auseinandersetzung mit dem Sulfatproblem erfolgt anhand von Feldstudien. Untersuchungsstandorte hierfür sind die Einzugsgebiete der Wasserwerke Norderstedt (Schleswig-Holstein), Bramstedt

(Niedersachsen), Bruchsal (Baden-Württemberg) und Mockritz (Sachsen), die sich durch unterschiedliche Sulfatbelastungen und Entwicklungstrends des Sulfats im Grundwasser auszeichnen. Die Ergebnisse des Verbundprojektes werden des Weiteren in einem Handbuch „Sulfat im Grundwasser“ und in speziellen Ergebnisberichten und Fachpublikationen dargestellt.

Das Verbundprojekt wurde entsprechend der benötigten Expertisen gebildet und in arbeitsteiliger Zusammenarbeit von Gruppen oder Personen aus folgenden Institutionen durchgeführt

- Hochschule für Technik und Wirtschaft Dresden (HTW), Lehrbereich Geotechnik und Wasserwesen (*Verbundprojektleitung, Standortbearbeitung Mockritz, Modellierung*)
- Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen (*Modellierung*)
- Technische Universität Dresden (TUD), Institut für Wasserchemie (*hydrochemische und bodenchemische Analytik und Prozesse*)
- Technische Universität Hamburg-Harburg (TUHH), DVGW-Forschungsstelle (*Standortbearbeitung Norderstedt und Bramstedt, Modellierung*)
- Technologiezentrum Wasser (TZW), DVGW, Karlsruhe (*Standortbearbeitung Bruchsal, Modellbildung*)
- UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, Sektion Bodenforschung, Forschungsstelle Falkenberg (*Stoffeinträge und Bodenprozesse*)
- UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie/AG Isotopenhydrologie (*Isotopenuntersuchungen in Mockritz und Bramstedt*)
- Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung (ZALF) e.V., Institut für Landnutzungssysteme und Landschaftsökologie, Müncheberg (*Stoffeinträge und –salden aus land- und forstwirtschaftlicher Nutzung, Bodenprozesse, Modellbildung*)

Der vorliegende Teilprojekt-Bericht resümiert isotopenhydrologische Ergebnisse und Erfahrungen aus dem Teilprojekt „Isotopenanalytische Bewertung des Sulfathaushaltes in landwirtschaftlich genutzten Wassergewinnungsgebieten“ unter Schwerpunktsetzung auf das Testgebiet Mockritz.

1.2 Natürliche Isotopenvariationen als Mittel zum Prozessverständnis

Voraussetzung jeder sinnvollen Modellierung und Prognose sind hinreichende System- und Prozesskenntnisse, die im Zusammenwirken unterschiedlicher Diagnoseverfahren erbracht werden müssen. Ein bewährtes Diagnoseinstrument ist die natürliche Variation der Isotopenzusammensetzung leichter Elemente. Durch Auswertung der Isotopenverhältnisse

von im Wasser gelösten Verbindungen des Schwefels ($\delta^{34}\text{S}$ (Sulfat), $\delta^{18}\text{O}$ (Sulfat)), des Stickstoffs ($\delta^{15}\text{N}$ (Nitrat, Ammonium), $\delta^{18}\text{O}$ (Nitrat)) und des Kohlenstoffs ($\delta^{13}\text{C}$ (DIC)) im Vergleich mit quellenspezifischen Mustern (z.B. atmosphärische Einträge, Düngemittel, geogene Quellen wie Sulfide in den Aquifersedimenten oder evaporitische Sulfate in der Lagerstättenumgebung) und unter Beachtung reaktionsspezifischer Isotopieeffekte können Aussagen zu Stoffherkunft und -wandlung getroffen werden. Weiterhin können über Isotopenanalysen am Wasser selbst (δD (H_2O), $\delta^{18}\text{O}$ (H_2O), ^3H (H_2O)) oder gelösten Stoffen (^{14}C (DIC, DOC), ^{85}Kr (Kr), ^3He (He)) Erkenntnisse zur Wasserherkunft und Grundwasserdynamik gewonnen werden. Die erforderlichen Bestimmungsmethoden stehen im UFZ oder bei Kooperationspartnern zur Verfügung bzw. wurden für den Anwendungsfall im Rahmen des Projektes adaptiert. Quellen der Stoffe und Bewegung des Grundwassers bestimmen zusammen die gemessene Verteilung der Beschaffenheitsmerkmale im Aquifer und über ihren Verschnitt die Konzentration im Rohwasser. Deshalb wurde dem Aspekt von Multiisotopenstudien trotz zentraler Rolle der Schwefelspezies in der gelösten und festen Phase große Bedeutung beigemessen. Hauptuntersuchungsgebiet war Mockritz. Dieses Gebiet zeichnet sich durch eine lateral wie vertikal stark heterogene Sulfatverteilung in einem bis über 50 m mächtigen Aquifer mit lokal sehr hohen Gehalten im Grundwasser aus. Umfangreichere Isotopenmessungen wurden auch an Proben aus dem Einzugsgebiet Bramstedt durchgeführt. Daneben enthielt das absolvierte Programm auch eigene Laborversuche sowie die Beteiligung an Feld- und Laborversuchen anderer Partner. Das Gesamtkonzept stützt sich auf eine intensive Verzahnung der Teilprojekte mit einem hohen Anteil arbeitsteiliger Aktivitäten bei Feldarbeiten wie auch der Ergebnisdiskussion. Eine besonders enge Verbindung gab es diesbezüglich zur TU Dresden (chemische Analysen an Wasser und Böden an Böden gekoppelt mit Laborexperimenten) sowie zur HTW Dresden (Objektmanagement, allgemeine hydrogeologische Erkundung und Modellierung).

2 Das Untersuchungsgebiet Mockritz

2.1 Wassergewinnung und Größe des Einzugsgebietes

Mockritz ist die Bezeichnung eines nahe der Elbe gelegenen Wasserwerkes (und Dorfes) nordöstlich von Torgau (in Abbildung 1 zwischen Torgau und Dommitzsch). Es umfasst mehrere Grundwasserfassungen, die sämtlich westlich der Elbe liegen und deren Brunnen in den pleistozänen Kiesen und Sanden der Elbtalwanne ausgebaut sind. Das durch die Fernwasserversorgung Elbaue-Ostharz GmbH (nachfolgend als FWV bezeichnet) gewonnene Wasser dient der Fernversorgung von Teilen von Sachsen und Sachsen-Anhalt. Entsprechend ihrer Lage und den jeweiligen Förderquoten besteht bei den elbnahen Fassungen ein hoher bis sehr hoher (in II und IV bis >75 %, GRISCHEK u.a., 1997, GRISCHEK und NEITZEL, 1998) Uferfiltratanteil. Das Einzugsgebiet wird als elbübergreifend betrachtet.

Als Richtzahl für die Größe des potentiellen Einzugsgebietes werden von FWV ca. 101 km² für den westelbischen und 81 km² für den ostelbischen Teil genannt. Als östliches Einzugsgebiet fungiert formal das Areal, dessen Grundwasser die Elbe im Wasserwerksabschnitt als Vorfluter nutzt. Da sich alle Brunnen westlich der Elbe befinden, wird jedoch nur bei einer entsprechend hohen Förderleistung und Elbnähe ein signifikanter Anteil des ostelbisch gebildeten Wassers zu diesen gelangen. Der experimentelle Nachweis eines lokal elbunterquerenden Grundwassers wurde 1997 im Bereich des südlicheren Torgauer Wasserwerksstandortes (Torgau-Ost) erbracht (NESTLER u.a., 1998). Die im Sulfatprojekt geführten Untersuchungen befassen sich weitgehend nur mit dem westelbischen Einzugsgebiet unter besonderer Berücksichtigung der hier neu gebildeten (und sulfatbelasteten) Grundwässer.

Der Standort Mockritz (und Elsnig) weist eine wechselvolle Geschichte auf (FOLTAN, 1996 und 1999), die bis in die 30er Jahre zurückreicht. Eine wesentliche Aufgabe war zunächst die Versorgung der bei Elsnig ansässigen Westfälisch-Anhaltinischen Sprengstoffwerke AG (WASAG). Deren Anlagen wurden während und nach dem Krieg zerstört. Relikte von Anlagen und Produktionstätigkeit bergen bis heute ein erhebliches Kontaminationspotential an sprengstofftypischen Verbindungen (STV) für das Grundwasser. Die frühe Wassergewinnung betrifft die Wasserwerksstandorte Elsnig (I und II) sowie Mockritz I. Die Wasserförderung erfolgte nach dem Krieg zunächst in Elsnig für die regionale Versorgung. 1968 wurde das Wasserwerk Mockritz mit einer Kapazität von 30.000 m³/d wieder in Betrieb genommen und bis 1981 im Zusammenhang mit dem Aufbau eines überregionalen Fernwassernetzes auf ca. 109.000 m³/d ausgebaut, so dass zusammen mit Elsnig eine

technische Wasserwerkskapazität von ca. 120.000 m³/d zur Verfügung stand. Nach 1989 gingen Fernwasserbedarf und Förderung drastisch zurück. Seit etwa 1995 erfolgt die Produktion etwa gleich bleibend auf geringem Niveau. Mit Schließung des Wasserwerkes Elsnig im Jahre 1998, dessen Wasser nach Mockritz übergeleitet worden war, gingen die Fassungen Elsnig I, in der ausnahmslos regional gebildetes Grundwasser (z.T. aus der WASAG-Problemzone) gewonnen wurde, sowie die nördlichste der elbnahen Fassungen, Elsnig II, außer Betrieb. Das Wasserwerk Mockritz verfügt gegenwärtig über zwei unterschiedlich genutzte Brunnenfassungen entlang der Elbe (Mockritz III und IV) sowie über eine weitere Fassung (Mockritz I mit 25 Brunnen) in durchschnittlich etwa 1,5 km Abstand von der Elbe (Abbildung 2).

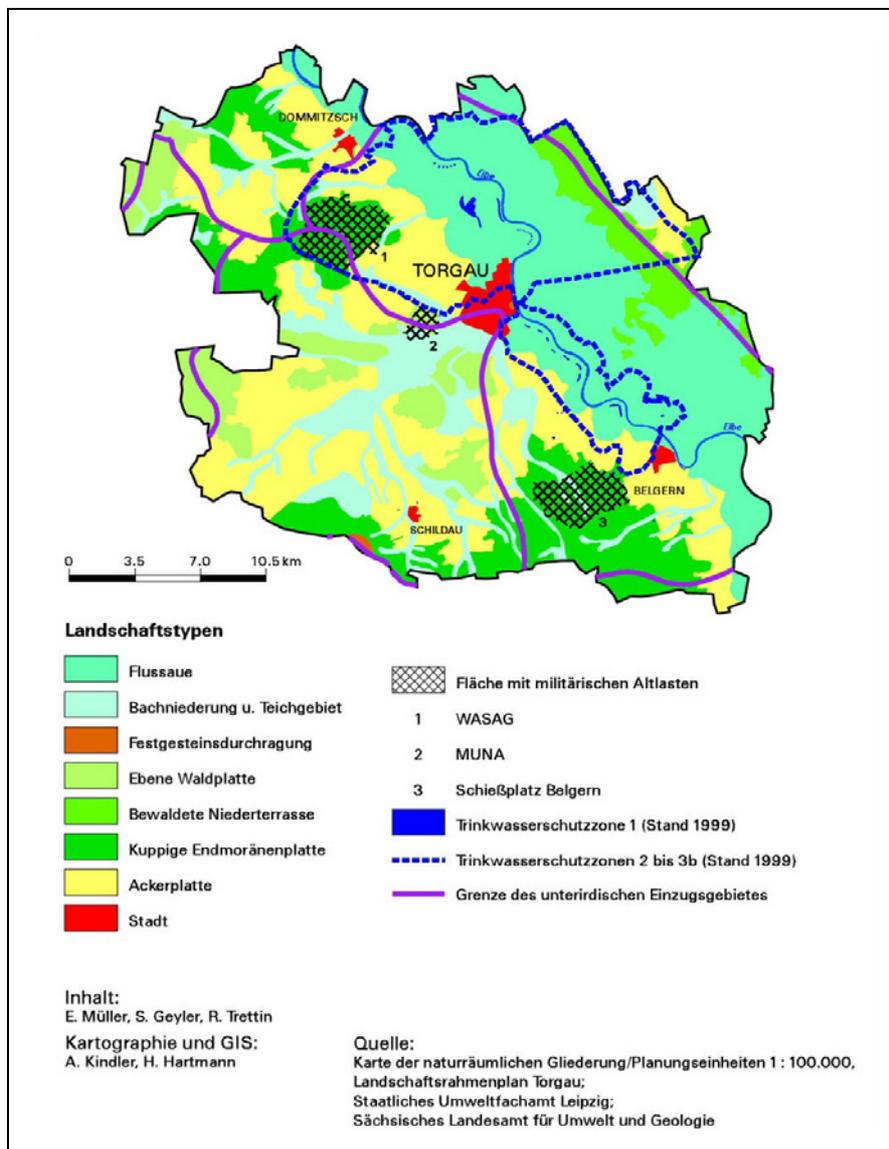


Abbildung 1: Wassereinzugs- und Schutzgebiete der Torgauer Fernwasserwerke mit Lage ausgewählter Altlasten (Karte nach HORSCH u.a., 2001)

Die Veränderungen in den Förderquoten haben Einfluss auf die Einzugsgebietsgrenzen. Durch Wegfall der Brunnen von Elsnig I und II ist hiervon vor allem die Nordausdehnung des Einzugsgebietsteils westlich der Elbe betroffen.

2.2 Hydrogeologische Situation

Aus geologischer Sicht (vergl. MÜLLER, 1988 und EISSMANN und LITT, 1994) sind für den Raum Mockritz vor allem zwei Einheiten bedeutend. Die eine ist die breite glaziale Exarationsrinne (Elbtalwanne zwischen Riesa und Dessau), die im Torgauer Raum lokal Tiefen bis 10 mNN erreicht und deren Streichrichtung etwa durch den Elbeverlauf markiert wird. In ihr befinden sich meist 30-40 m mächtige elstereiszeitliche Ablagerungen aus Sanden und Kiesen mit einer gröberen unteren (GWL 1.6) und einer etwas feineren oberen Folge (GWL 1.4). Diese Wanne wird nach unten durch tertiäre Tone (Bitterfelder Deckton) abgeschlossen. Über den pleistozänen Sedimenten lagern bis 10 m mächtige grobsandig-kiesige holozäne Flussschotter der Elbe (GWL 1.0). Spätere Bildungen von Saale- und Weichselkaltzeit sind in diesem Teil des Untersuchungsgebietes praktisch nicht erhalten geblieben. Der GWL 1.0 wird durch Auelehm bzw. bindige Schichten unterschiedlicher Mächtigkeit bedeckt. Die auf etwa 80mNN liegende Elbeniederung (hier auch als Aue bezeichnet) wird nach Westen hin durch eine deutlich sichtbare Erosionskante begrenzt. Diese markiert in etwa auch den Übergang zur morphologisch vor allem saaleglazial geprägten Hochfläche der Dübener Heide und deren Ausläufer. Darunter verbirgt sich ein Stauchendmoränensystem, in dem pleistozäne und tertiäre Sedimente in komplizierter lateraler und vertikaler Abfolge (Schollen) koexistieren. Im Gegensatz zur Niederung (Erosionswanne) kann hier nicht mehr von einem hydraulisch einheitlichen Grundwasserleiter ausgegangen werden. Durch den Einschnitt der Elbtalwanne sind die grundwasserleitenden Schichten an den Flanken an den Elbe-Aquifer angeschlossen. Der tiefste pleistozäne Grundwasserleiter in diesem Gebiet wird durch die Elster-I-Vorschüttsande (GWL 1.8) gebildet.

Die höchste Geländeerhebung liegt bei 130 mNN. Wie der Isohypsenplan in Abbildung 2 zeigt, folgt das Grundwasser ausgehend von dieser Hochlage zunächst grob dem Geländegefälle. Erst später schwenken dann auch die zunächst nach Nordost und Südwest gerichteten Fließtrajektorien in Richtung auf die Elbe bzw. die vorgelagerten Fassungen ein.

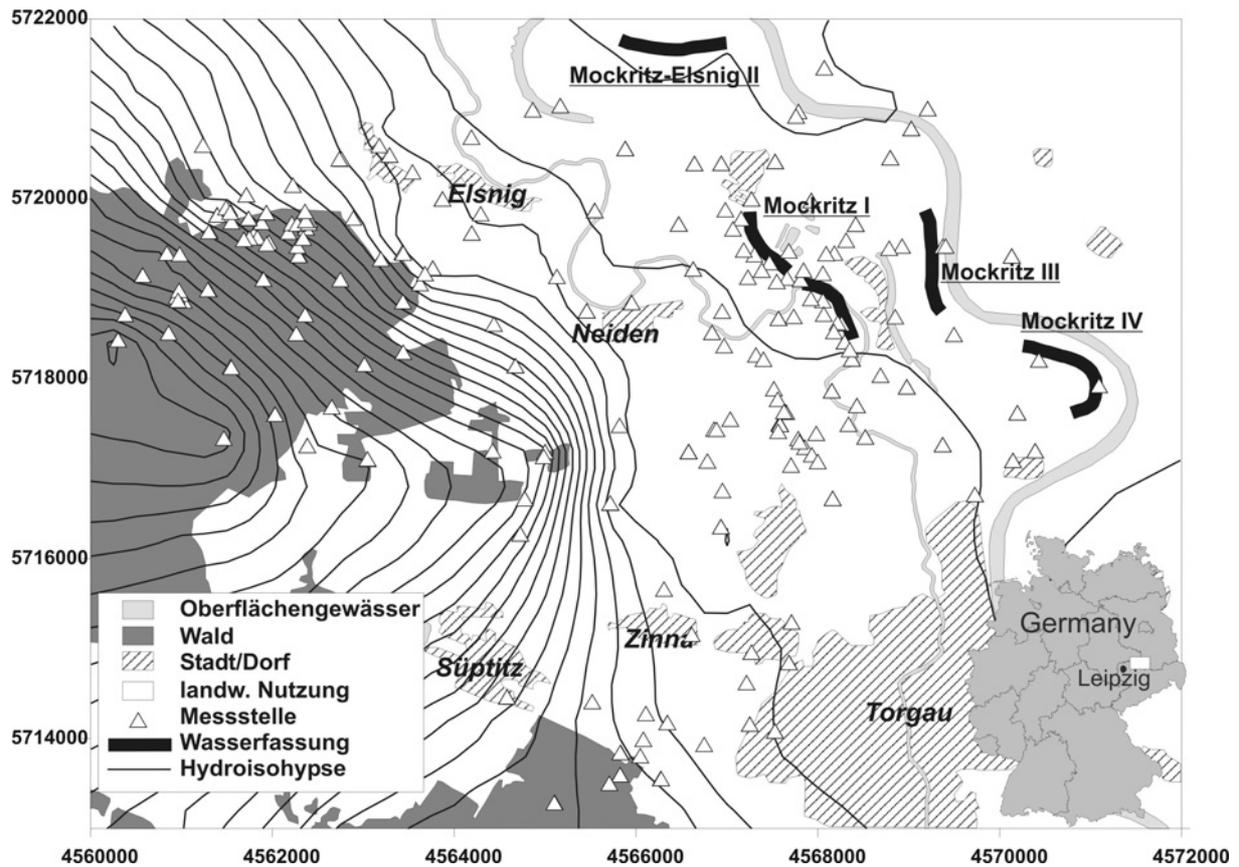


Abbildung 2: Übersichtskarte des Untersuchungsgebietes Mockritz mit Hydroisohypsen und Lage der Wasserfassungen und Grundwassermessstellen

Im Bereich der Niederung ist das Grundwasserhöhengefälle nur noch gering. Dementsprechend können sich hier Fluktuationen des Elbewasserpegels (bei Torgau bei Mittelwasser etwa 77mNN) und auch eine variable Grundwasserabsenkung durch ungleichförmigen Brunnenbetrieb deutlicher auf die Grundwasserbewegung auswirken. Hochwässer der Elbe überschreiten den eingedeichten Elbelauf in aller Regel nicht, so dass durch sie als direkte Wirkung (neben der Veränderung der hydraulischen Verhältnisse und damit des Grundwasserfließregimes) höchstens ein Aufsteigen von Quellwässern (GEHMLICH, 2000, persönliche Mitteilung) am leeseitigen Deichfuß zu erwarten ist. Der Grundwasserflurabstand in der Aue schwankt in der Regel zwischen zwei und fünf Metern. Im Gebiet der Hochlagen ist der Grundwasserflurabstand z.T. deutlich höher (z.B. nördlich Süptitz mit 15 bis 20m). Lokal können sich hier oberflächennah auch stauende tertiäre Schichten befinden, so dass der vertikale Austausch behindert wird oder gar ein hängendes Grundwasser existieren kann, so dass der laterale Abfluss begünstigt wird (TGU, 1997).

VOLK u.a. (2001) geben als mittlere Grundwasserneubildung für den Torgauer Raum 133 mm/a an. In TGU (1997) wird von ca. 100 mm/a ausgegangen. Im Verbundprojekt (HTW)

werden für die Neubildung in der Mockritzer Aue durchschnittlich etwa 75 mm/a und im Bereich der Hochfläche etwa 100 mm/a angesetzt.

Eine modifizierende Rolle für den Wasserhaushalt spielt auch der das Auegebiet quasi parallel zur Elbe durchziehende lokale Vorfluter Schwarzer Graben (Südteil bis Neiden) bzw. Weinske (nördliche Fortsetzung). Dieser nachfolgend nur noch als Weinske bezeichnete Wasserlauf besitzt nach Flußbettsondierungen (GEHMLICH, 1997, persönliche Mitteilung) abschnittsweise Kontakt zum Grundwasser. Gezielte Durchflussbilanzmessungen im Rahmen dieses Verbundprojektes (HTW) konnten dies zumindest für höhere Wasserführung stützen. Das Flusssystem kann innerhalb einer separaten Eindeichung Hochwasser führen, so dass die Abflussrate stark schwankt. Es entwässert das Niederungsgebiet westlich von Torgau und nimmt das Wasser der im Raum Mockritz von der Hochfläche kommenden Bäche Röhrgraben, Striebach und Grüne Mühlebach auf. Die Weinske schneidet durch die Brunnenreihe der Wasserfassung Mockritz I.

Ständige Stillgewässer sind der innerhalb der im Norden des Gebietes ausbuchtenden Elbeeindeichung gelegene Elbealtarm nordwestlich von Elsnig sowie ein Altarm östlich von Döbern mit dem bis zum Wasserwerk anschließenden Feuchtgebiet inklusive einiger Teiche bzw. Becken. Weniger ausgedehnte und episodische Vernässungsflächen sowie Gräben finden sich östlich der B182 zwischen Welsau und Neiden.

2.3 Das Sulfatproblem in Mockritz

In den 1990er Jahren wurden insbesondere im Rohwasser von Mockritz I und dann auch in den Grundwässern wachsende bzw. hohe Sulfatgehalte festgestellt, wobei der Sulfatgrenzwert von 250 mg/l (Indikatorparameterwert gemäß EU-Richtlinie von 1998) z.T. deutlich überschritten wurde. Das Problem höherer Sulfatgehalte im oder über dem Prüfwert von 250 mg/l stellt sich in Mockritz nicht für das gesamte Einzugsgebiet und nicht für alle Fassungen. Infolge der moderaten Flusswassergehalte von unter 100 mg/l (1995...97) und des hohen Uferfiltratanteils lagen die diesbezüglichen Gehalte im Rohwasser der elbnahen Fassungen zu allen Zeiten deutlich unter 200 mg/l. Anders war die Situation bei den landseitig gebildeten Grundwässern. Nach Auswertung der Daten der südlichen Teilfassung von Mockritz I (HTW Dresden) fiel ein markanter Anstieg um 1995 zeitlich mit einer starken Drosselung der Förderquote zusammen. Zwischen 1993 und 1996 erfolgte der Aufbau eines Grundwassergütemessnetzes im Bereich der Elbeniederung westlich der Fassungen. Die damit verfügbaren 23, bei ausreichender Mächtigkeit des GWL jeweils in bis zu drei Teufenstufen verfilterten Gütemessstellen (obere bis 15 m, mittlere 15...30 m, untere 30...>50 m unter Gelände), bildeten die Grundlage für eine signifikantere hydrochemische

Bewertung des Grundwasserfeldes und ein seither laufendes Monitoring. Es ergab sich auf dieser Basis eine lateral wie auch vertikal sehr inhomogene Konzentrationsverteilung. Kenntnislücken bestanden jedoch weiterhin insbesondere für den Bereich der Hochfläche sowie das oberflächennahe Grundwasser. Im Zusammenwirken mit der FWV und anderen Institutionen wurden im Rahmen des Sulfatprojektes im Frühjahr 2000 rund 400 Grundwasserproben aus unterschiedlichsten Grundwassermessstellen im Einzugsgebiet von Mockritz entnommen, und analysiert. Anhand der gewonnenen Daten wurde die regionale Sulfatverteilung ermittelt. Erkennbar sind mehrere Zentren mit stark erhöhter Sulfatkonzentration, die sämtlich im Niederungsbereich liegen.

3 Methodische und experimentelle Grundlagen der Anwendung von Isotopentracern zur Aufklärung des Schwefelkreislaufs

3.1 Anwendung natürlicher Isotope zur Bewertung des Schwefelkreislaufs

Die Verwendung konventioneller hydrochemischer Parameter und Methoden, insbesondere von Stoffkonzentrationen, eignet sich hervorragend zur Beschreibung und mengenmäßigen Erfassung von Stoffeinträgen und Stoffverlagerungen. Soll der Schwefelkreislauf aber im Detail analysiert werden, was für aktuelle Fragestellungen des Trinkwasserressourcenschutzes und- managements oftmals unabdingbar ist, stößt man bei der alleinigen Betrachtung der Gehalte der verschiedenen Schwefelspezies schnell an die Grenzen der Aussagekraft dieser konventionellen Untersuchungen. Insbesondere wenn es darum geht, verschiedene Schwefelquellen zu identifizieren und ihren lokal und zeitlich variierenden Beitrag für die Sulfatfracht der jeweils betrachteten, oftmals hydraulisch komplexen Grundwasserressource zu quantifizieren, können Konzentrationsuntersuchungen nur einen beschränkten Beitrag leisten. Darüber hinaus lassen sich Schwefeltransformationen nur unzureichend bewerten und quantifizieren.

Die Anwendung und Kombination verschiedener natürlicher Isotopentracer stellt eine ausgezeichnete Methode dar, die beschriebenen Grenzen der konventionellen Untersuchungen zu überschreiten und damit detaillierte qualitative und quantitative Fragestellungen hinsichtlich der Entschlüsselung des Schwefelkreislaufs zu beantworten.

Abbildung 3 zeigt einen schematischen Schnitt durch einen typischen Grundwasserleiter, in dem die einzelnen, für den Schwefelkreislauf relevanten Prozesse bezeichnet sind. Die Betrachtung des Schwefelkreislaufs beginnt sinnvoller Weise mit den externen Schwefeleinträgen. Diese Einträge können in diffuser, also großflächiger oder in punktueller Form vor sich gehen. Zu den wichtigsten diffusen Einträgen zählen die atmosphärische Deposition in ihren verschiedenen Erscheinungsformen und auf landwirtschaftlich genutzten Flächen die Ausbringung von sulfathaltigen Mineraldüngern. Der punktuelle Eintrag wird in erster Linie durch Deponien und Altablagerungen verursacht. Der eingetragene Schwefel wird im Boden durch drei wesentliche Prozesse, nämlich die Sorption, die Immobilisierung und die Fällung festgelegt. In der Reihenfolge ihrer Nennung bilden sich durch diese Prozesse anorganisches Bodensulfat, organische Bodenschwefelverbindungen und Sulfide. Wenn es die Boden- und hydrochemischen Bedingungen erlauben, werden diese gespeicherten Schwefelspezies mobilisiert und in der Regel als gelöstes Sulfat mit dem Sickerwasser aus der ungesättigten Zone in das Grundwasser überführt. Im Grundwasserleiter selbst wird der

Schwefelkreislauf nachhaltig von der Hydrodynamik beeinflusst, wobei Mischungsprozesse und die Kommunikation mit Oberflächengewässern eine vorrangige Rolle spielen. Aber auch (bio)chemische Prozesse in der gesättigten Zone, wie Sulfatreduktion oder Sulfidoxidation wirken sich erheblich auf den Schwefelhaushalt eines Trinkwassereinzugsgebietes aus. Tabelle 1 liefert eine Übersicht darüber, welche der in Abbildung 3 bezeichnete Prozesse mit welchen Isotopenmethoden eingehender charakterisiert werden können.

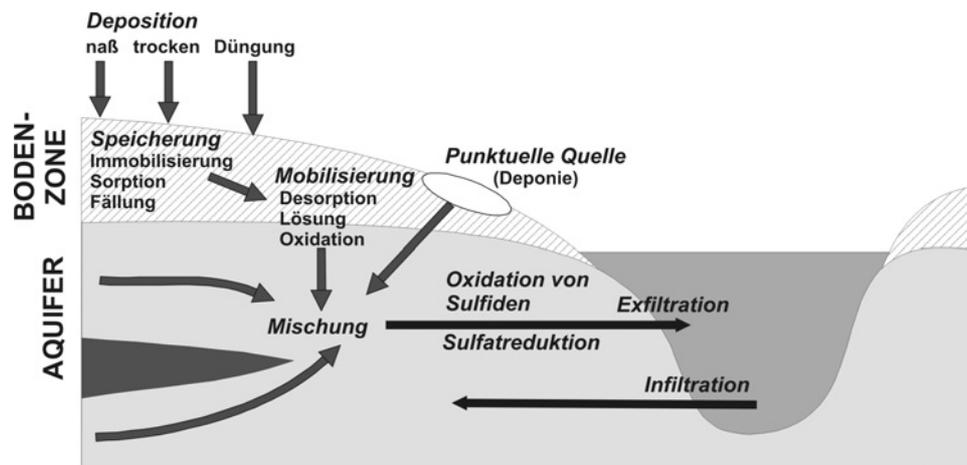


Abbildung 3: Schematischer Schnitt durch einen Grundwasserleiter und Bezeichnung von Prozessen, die für den Schwefelkreislauf relevant sind

Tabelle 1: Isotopische Untersuchungsmöglichkeiten für Prozesse des Schwefelkreislaufs

Prozess	Untersuchtes Isotop oder Isotopenverhältnis	Untersuchungsobjekt
Diffuser Eintrag	$\delta^{34}\text{S}$, $\delta^{18}\text{O}$	Gelöstes Sulfat im Niederschlag, sulfathaltige Mineraldünger
Punktuelle Eintrag	$\delta^{34}\text{S}$, $\delta^{18}\text{O}$	Deponiematerial
Sorption/Desorption	$\delta^{34}\text{S}$, $\delta^{18}\text{O}$	Anorganisches Bodensulfat/Sickerwasser
Immobilisierung/Mineralisation	$\delta^{34}\text{S}$	Kohlenstoff-gebundener Schwefel, organische Estersulfate
	$\delta^{34}\text{S}$, $\delta^{18}\text{O}$	Gelöstes Sulfat im Sickerwasser
Fällung/Oxidation (einschließlich verknüpfter Redoxreaktionen wie autotrophe Denitrifikation)	$\delta^{34}\text{S}$	Mono-/Disulfid
	$\delta^{34}\text{S}$, $\delta^{18}\text{O}$	Gelöstes Sulfat im Sicker-/Grundwasser
	$\delta^{15}\text{N}$, $\delta^{18}\text{O}$	Gelöstes Nitrat im Sicker-/Grundwasser
Sulfatreduktion (einschließlich verknüpfter Redoxreaktionen wie C_{org} -Oxidation)	$\delta^{34}\text{S}$	Gelöstes Sulfid
	$\delta^{34}\text{S}$, $\delta^{18}\text{O}$	Gelöstes Sulfat im Grundwasser
	$\delta^{13}\text{C}$	Gelöster anorganischer Kohlenstoff
Hydrodynamisch beeinflusste Prozesse (wie Mischung, Exfiltration, Infiltration)	$\delta^{34}\text{S}$, $\delta^{18}\text{O}$	Gelöstes Sulfat im Grundwasser
	$\delta^{18}\text{O}$, δD , ^3H , ^{85}Kr , FCKW, ^3He	Wasser und darin gelöste Gase

3.1.1 Grundlagen der isotopischen Untersuchung schwefelhaltiger Verbindungen

3.1.1.1 Einleitung

Schwefel besitzt im natürlichen Umfeld vier stabile Isotope, deren relative Häufigkeiten 95.02% (^{32}S), 0.75% (^{33}S), 4.21% (^{34}S) und 0.02% (^{36}S) betragen (MACNAMARA und THODE, 1950). Das breit gefächerte Vorkommen des Schwefels in Lithosphäre, Hydrosphäre, Atmosphäre und Biosphäre sowie die zahlreichen Bindungsformen eröffnen ein weites Feld der Einsatzmöglichkeiten von Schwefelisotopenuntersuchungen.

Aufgrund ihrer relativen Häufigkeiten und der relativ großen prozentualen Massendifferenz lassen sich die Isotopenuntersuchungen am besten mit ^{32}S und ^{34}S durchführen.

Die geowissenschaftliche Nutzung der Schwefelisotope als Quellen- und Prozessindikator begann in den späten 40er Jahren des letzten Jahrhunderts z. B. mit den Arbeiten von TROFIMOV (1949) und THODE u.a. (1949), wo erstmalig die Variationsbreite der Häufigkeiten der Schwefelisotope aufgezeigt wurde. Die höchsten jemals gemessenen Werte wurden bei Sulfaten bestimmt und betragen +120‰, während die niedrigsten Werte von -65‰ bei sedimentären Sulfiden gefunden wurden (HOEFS, 1997).

Zunächst beschränkten sich die Schwefelisotopenuntersuchungen auf rein geochemische Prozesse, die insbesondere mit Erzbildung, Sedimentation und Diagenese verbunden sind. Von besonderem Interesse war dabei die im Zusammenhang mit der sedimentären Sulfidbildung stehende dissimilatorische Sulfatreduktion (z. B. HARRISON und THODE, 1958, KAPLAN und RITTENBERG, 1964, KEMP und THODE, 1968, REES, 1973). In den 80er Jahren des vergangenen Jahrhunderts fanden die Schwefelisotope zunehmend Anwendung in umweltrelevanten Problematiken (z. B. KROUSE, 1980, KROUSE und CASE, 1983, KROUSE u.a., 1984, MAYER u.a., 1999). Erst viel später, nämlich zu Beginn der 90er Jahre wurde damit begonnen, biologische und abiologische Schwefelumsetzungsprozesse in der Bodenzone anhand von Isotopenuntersuchungen genauer zu charakterisieren (z.B. VAN STEMPVOORT u.a., 1991, MAYER, 1993, MAYER u.a., 1995, KNIEF, 1998, MAYER u.a., 1999).

Da aufgrund der großen Variabilität der Schwefelisotopenzusammensetzung oftmals nur beschränkte Aussagen über die Mechanismen der Umsetzungsprozesse möglich sind, wurde Ende der 60er Jahre damit begonnen, die Sauerstoffisotopenzusammensetzung der oxidierten Schwefelverbindungen in die Untersuchungen einzubeziehen (RAFTER, 1967, TAYLOR u.a., 1984, TORAN und HARRIS, 1989, FRITZ u.a., 1989, TAYLOR und WHEELER, 1994, KNÖLLER, 2000). Anhand der Sauerstoffisotope war es einerseits möglich, Oxidationsprozesse von

reduzierten Schwefelspezies bestimmten Milieus und Mechanismen zuzuordnen, andererseits konnte das Ausmaß des Abbaus oxidierter Schwefelformen quantifiziert werden.

3.1.1.2 *Quellenspezifische Variationen der isotopischen Zusammensetzung von schwefelhaltigen Substanzen*

Schwefelhaltige Verbindungen, denen eine Quellenfunktion für das Grundwasser zukommen kann, sind in allen Kompartimenten des Übergangsbereiches Lithosphäre/Atmosphäre gegenwärtig. In den folgenden Abschnitten sollen die isotopischen Zusammensetzungen geogener, atmosphärischer, landwirtschaftlicher und weiterer anthropogener Schwefelquellen eingehender beschrieben werden. Einen generellen Überblick der Variationsbreite der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte natürlicher Quellen liefert Abbildung 4.

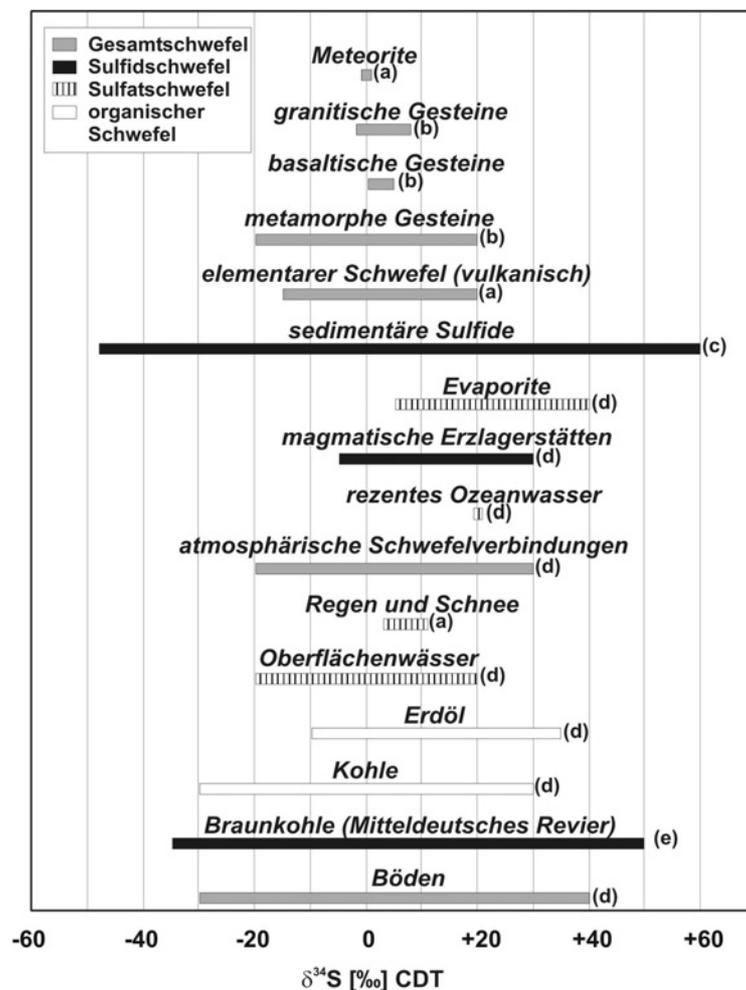


Abbildung 4: Variationsbreiten der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von Schwefelverbindungen in ausgewählten natürlichen Reservoiren. Die Daten entstammen den zusammenfassenden Darstellungen von (a) THODE (1991), (b) HOEFS (1997) und (d) KROUSE (1980) sowie den Arbeiten von (c) KRÜGER (1967) und (e) HAHNE (1982).

3.1.1.2.1 Geogene Schwefelquellen

Für die untersuchten Trinkwassereinzugsgebiete kommen als vorrangige geogene Schwefelquellen sedimentäre Sulfide in Frage, die insbesondere in den tertiären marinen Sedimenten aber auch in fluviatilen quartären Ablagerungen anzutreffen sind.

Die isotopische Zusammensetzung der sedimentären Sulfide ist sehr variabel. Da die Bildung dieser Schwefelverbindungen maßgeblich durch mikrobiologische Prozesse gesteuert ist, kommt es z.T. zu erheblichen isotopischen Fraktionierungen gegenüber dem in der Regel als Ausgangsmaterial anzusehenden gelösten marinen Sulfat. Die natürliche Schwankungsbreite der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von sedimentären Eisensulfiden aus allen geologischen Zeitabschnitten reicht von -50‰ ... $+60\text{‰}$ (CDT) (KRÜGER, 1967, Zusammenfassung von 333 Literaturdaten + 136 vom Autor erhobene Daten). Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von tertiären Eisensulfiden aus marinen Sedimenten und Braunkohlenebengesteinen streuen nach KRÜGER (1967) in einem Bereich von -36.8‰ ... $+13.4\text{‰}$ (CDT), der Mittelwert beträgt -3.2‰ (CDT). Ein Häufigkeitsmaximum ist bei -7.5‰ ausgebildet. Ein ähnlicher Streubereich (-27.9‰ bis $+16.5\text{‰}$) wird durch KNÖLLER (2000) genannt. Eine zusammenfassende Darstellung der Variationen von $\delta^{34}\text{S}$ -Werten in sedimentären Sulfiden erfolgt in den Häufigkeitsverteilungsdiagrammen der Abbildung 5.

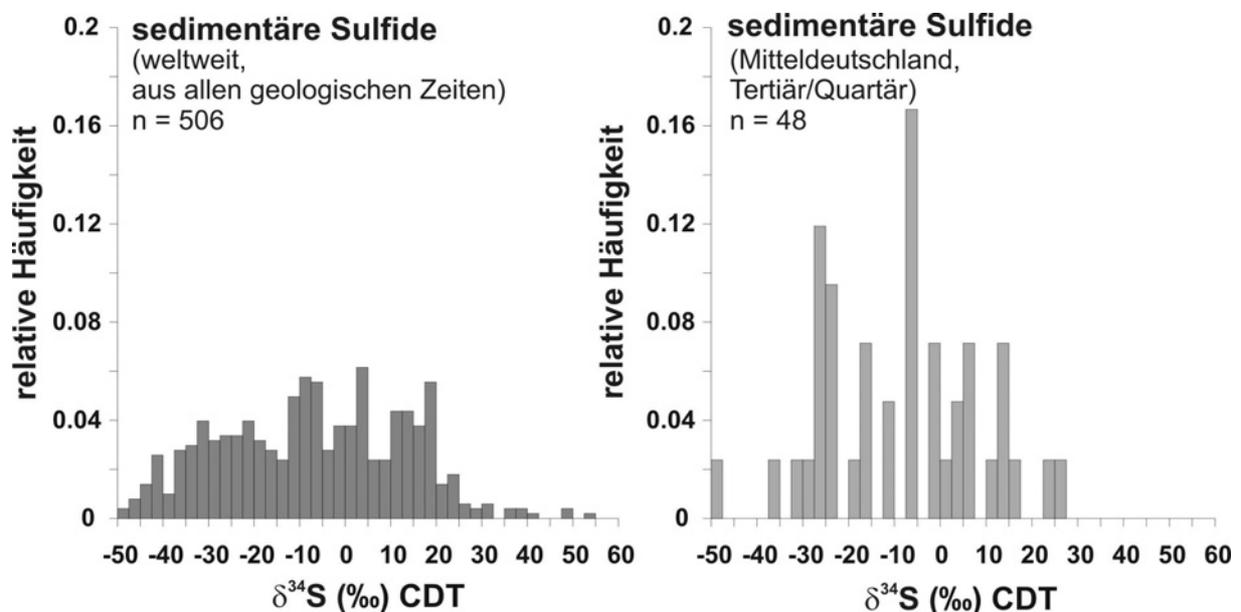


Abbildung 5: Gegenüberstellung der Häufigkeitsverteilungen der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von weltweit vorkommenden sedimentären Sulfiden aus allen geologischen Zeitabschnitten und von tertiären und quartären sedimentären Sulfiden aus dem Mitteldeutschen und Lausitzer Braunkohle-Revier. Die Daten entstammen den Arbeiten von KRÜGER (1967) und KNÖLLER (2000).

3.1.1.2.2 Isotopische Zusammensetzung von atmosphärischen Schwefelquellen

Atmosphärische Schwefelverbindungen können in allen für Schwefel möglichen Oxidationsstufen und in allen drei Aggregatzuständen auftreten. Die wichtigsten atmosphärischen Schwefelverbindungen sind in Abbildung 6 gezeigt.

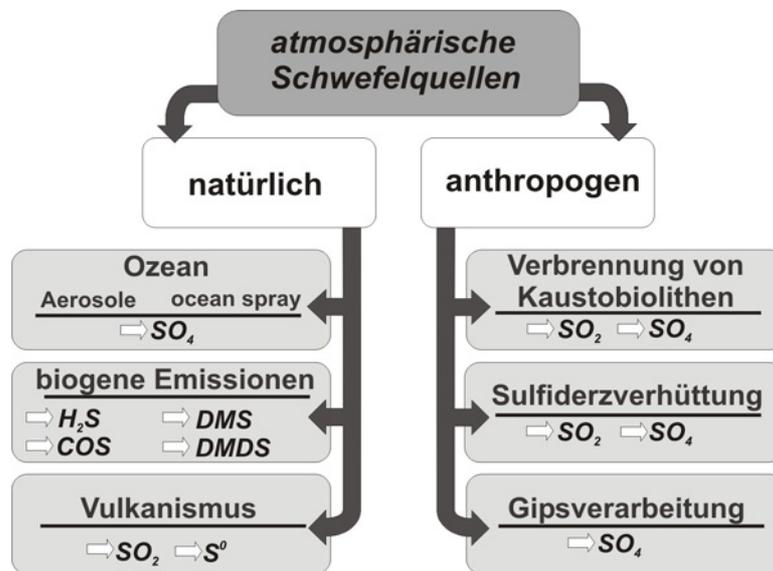


Abbildung 6: Übersicht der wichtigsten atmosphärischen Schwefelquellen

Die Verwendung der Schwefelisotope zur atmosphärischen Quellenidentifikation führt nicht immer zu eindeutigen Ergebnissen. Insbesondere die große Variationsbreite der möglichen Quellen und die sich dadurch oftmals überlappenden $\delta^{34}\text{S}$ -Werte verhindern eine klare Zuordnung. Allenfalls in einem lokal sehr eng gefassten Maßstab lassen sich deutlich isotopisch voneinander unterscheidbare atmosphärische Schwefelquellen hinsichtlich ihres Anteils an der Schwefeldeposition quantifizieren (z.B. Kohleverbrennung und ocean spray). Einen generellen Überblick über die Schwankungsbreiten der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der wichtigsten atmosphärischen Schwefelquellen liefert Abbildung 7. Detaillierte Angaben über die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von atmosphärischen Schwefelverbindungen an zahlreichen weltweiten Standorten sind bei NEWMAN u.a. (1991) aufgelistet.

Die zweifellos wichtigste Form der atmosphärischen Schwefeldeposition in den untersuchten Gebieten geht aus der Verbrennung schwefelhaltiger fossiler Rohstoffe hervor. KNIEF (1998) konnte zeigen, dass die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der Feuchtdeposition auch saisonale Schwankungen aufweisen. Für den Standort Bad Lauchstädt, ca. 20km südlich von Halle/Saale, wurde für den

Zeitraum 1992-1995 eine jährliche Variationsbreite der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von +1,1 bis +4,9‰ (VCDT) ermittelt. Die erhöhten Werte traten dabei insbesondere in den Wintermonaten auf. Ursache hierfür ist der isotopisch schwerere Beitrag des Hausbrandes zur atmosphärischen Schwefeldeposition. Für einen Standort an der nördlichen Stadtgrenze von München ließ sich diese, durch den Hausbrand verursachte saisonale Schwankung nicht erkennen (MAYER, 1993). Zwar schwankten die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte auch dort zwischen -3,9 und +3,5‰ (VCDT), aber diese Variabilität wird durch den temporären Einfluss isotopisch verschiedener Emittenten bei unterschiedlichen Windrichtungen verursacht.

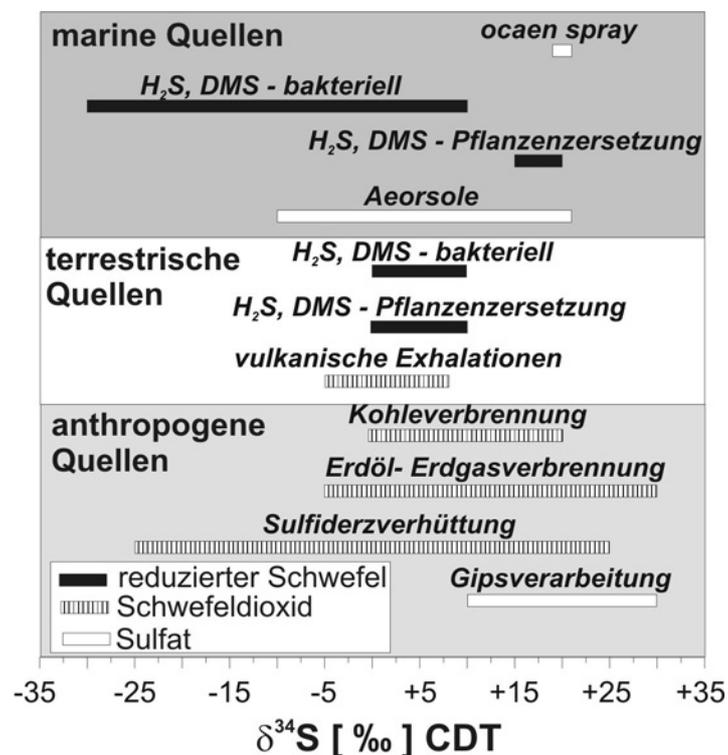


Abbildung 7: Variationen der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von verschiedenen natürlichen und anthropogenen atmosphärischen Schwefelquellen (Daten nach NEWMAN u.a., 1991 und HOEFS, 1997)

Während bei den Schwefelisotopen nur moderate Fraktionierungen bei der Transformation der atmosphärischen Schwefelspezies zu beobachten sind, variiert die Sauerstoffisotopenzusammensetzung des atmosphärischen Sulfats in einem wesentlich größeren Ausmaß. Ursache sind die im Oxidationsmechanismus begründeten variablen Anteile des Sulfatsauerstoffs aus dem Wasser und aus der Luft. Vollzieht sich die Bildung des Sulfats aus SO_2 vollständig als *in situ*-Reaktion in der Atmosphäre, müsste eine eindeutige Korrelation zwischen $\delta^{18}\text{O}\text{-SO}_4^{2-}$ und $\delta^{18}\text{O}\text{-H}_2\text{O}$ (atmosphärischer Wasserdampf) bestehen. Erfolgt die

SO₂-Oxidation über H₂O zu SO₄²⁻ konstituiert sich der Sulfatsauerstoff zu ¾ aus dem Wassersauerstoff. Wenn das SO₂ durch H₂O₂ oxidiert wird, enthält das resultierende Sulfatmolekül zwei Sauerstoffatome aus dem Wasser (HOLT u.a., 1981, 1982). Für den Fall der vollständigen *in situ*-Oxidation ermittelten HOLT u.a. (1981) folgende Regression (Gleichung 1):

$$\delta^{18}O(SO_4^{2-}) = 0,79 * \delta^{18}O(H_2O) + 12 \quad \text{Gleichung 1}$$

An den meisten Standorten lassen sich deutliche Abweichungen von dieser Korrelation feststellen. Dieser Umstand liegt darin begründet, dass das Sulfat der Feuchtdeposition neben dem durch atmosphärische *in situ*-Oxidation gebildeten Sulfat auch eine so genannte primäre Sulfatkomponente enthält, die isotopisch sehr schwer sein kann und δ¹⁸O-Werte von bis zu +40‰ (VSMOW) erreicht (HOLT u.a., 1981). Je größer der Anteil der primären Sulfate in der Feuchtdeposition ist, umso geringer fällt die Steigung m der Regressionsgeraden aus, die über die δ¹⁸O-H₂O- und δ¹⁸O-SO₄²⁻-Werte ermittelt werden kann. Beispiele für unterschiedliche Anstiege der Regressionsgeraden und damit für unterschiedliche Anteile an primären Sulfaten wurden durch MAYER (1993) (m=0.66, München Neuherberg), KEPPLER (1996) (m=0.53, Grimsel, Schweiz) und KNIEF (1998) (m=0.54, Scheyern, 40km nördlich von München) vorgestellt.

3.1.1.2.3 Isotopische Zusammensetzung des Schwefels in sulfathaltigen Düngemitteln

Sulfathaltige mineralische Düngemittel stellen neben der atmosphärischen Deposition die zweite große anthropogene Schwefelquelle für den Boden und damit auch für das Grundwasser dar. Oftmals dient der landwirtschaftliche Einsatz dieser Düngemittel weniger dem Abbau von eventuell vorhandenen Schwefeldefiziten, vielmehr stellt das Sulfat einen Begleitstoff in den Düngemitteln dar, die die Versorgung der Pflanzen mit den Grundnährstoffen gewährleisten sollen.

Die isotopische Zusammensetzung der schwefelhaltigen Komponente in den Düngemitteln wird maßgeblich durch die bei der Herstellung vorliegenden Rohstoffe bestimmt. In Deutschland wird ein großer Teil der Mineraldünger aus den Salzen der Zechsteinsalinare hergestellt. Die δ³⁴S-Werte der Zechsteinsulfate liegen zwischen +10 und +14‰ (VCDT), demzufolge weisen die aus Zechsteinsalzen gewonnenen Düngemittel ähnliche δ³⁴S-Werte auf. Diese Annahme konnte MALLÉN (2000) für Ammoniumsulfate, die nach dem Gipsverfahren aus dem Werra-Anhydrit hergestellt wurden, bestätigen. Kommt bei der

$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ -Herstellung das so genannte Sättigungsverfahren zum Einsatz, bei dem Ammoniak durch Schwefelsäure geleitet wird, bestimmt das Ausgangsmaterial der Schwefelsäureherstellung die Isotopensignatur des Schwefels im Düngemittel. Da für die Schwefelsäureherstellung oftmals sulfidisches Erz zum Einsatz kommt, das relative leichte $\delta^{34}\text{S}$ -Werte aufweist, ist zu erwarten, dass Ammoniumsulfate aus dem Sättigungsverfahren ebenfalls isotopisch leicht sind. Auch diese Annahme wurde durch MALLÉN (2000) bestätigt, indem er zeigte, dass $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ aus dem Sättigungsverfahren mehr als 10‰ leichter sein kann, als das $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ aus dem Gipsverfahren.

In Abbildung 8 sind die Variationsbreiten der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von aus der weltweiten Produktion stammenden Ammoniumsulfaten und Superphosphaten dargestellt.

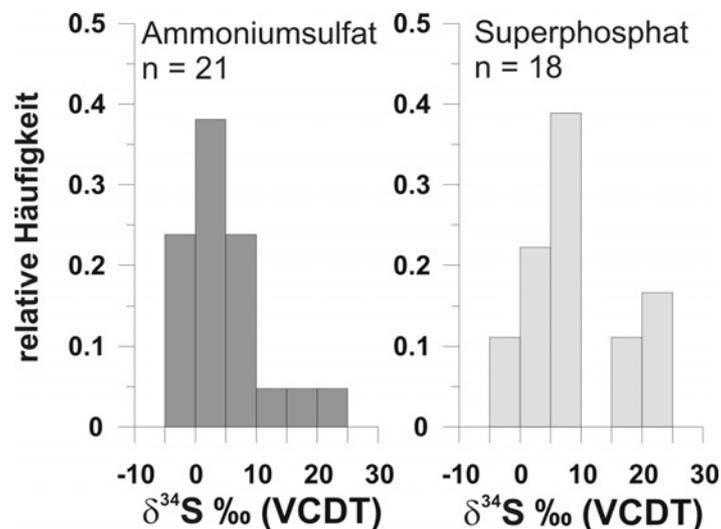


Abbildung 8: Häufigkeitsverteilungen der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von weltweit produzierten mineralischen Düngemitteln (Daten nach MIZOTA und SASAKI (1996))

Neben den mineralischen Düngemitteln können auch organische Dünger (Gülle, Stallmist) zum Einsatz kommen. Die isotopische Zusammensetzung der Schwefelkomponenten im organischen Dünger ergibt sich im Wesentlichen aus der Schwefelisotopensignatur der als Tiernahrung dienenden Pflanzen. KNIEF (1998) gibt z.B. für Gülle und Stallmist einen mittleren $\delta^{34}\text{S}$ -Wert von +1‰ (VCDT) an.

3.1.1.3 Einfluss von Stoffumwandlungen in der gesättigten und ungesättigten Zone auf die isotopische Zusammensetzung von schwefelhaltigen Verbindungen

3.1.1.3.1 Reduktion des Sulfatschwefels

Die Fraktionierung der Schwefelisotope bei der Sulfatreduktion beruht vorrangig auf kinetischen Isotopieeffekten. Solche Effekte ergeben sich aus den Unterschieden in den Reaktionsraten der verschiedenen Isotopenspezies. Bei der chemischen Reduktion von Sulfat zu Schwefelwasserstoff ergibt sich die kinetische Fraktionierung aus dem Verhältnis der Ratenkonstanten k_{32}/k_{34} der beiden Teilreaktionen (Gleichungen 2 und 3).



Für den zeitlichen Abbau unter konstanten Bedingungen und ohne Rückreaktion ergeben sich die Differentialgleichungen

$$d[{}^{32}\text{SO}_4^{2-}] = -K_{32}[{}^{32}\text{SO}_4^{2-}]dt \quad \text{Gleichung 4} \quad d[{}^{34}\text{SO}_4^{2-}] = -K_{34}[{}^{34}\text{SO}_4^{2-}]dt \quad \text{Gleichung 5}$$

und als Quotient

$$\frac{d[{}^{32}\text{SO}_4^{2-}]}{d[{}^{34}\text{SO}_4^{2-}]} = K_{32}/K_{34} \left[\frac{{}^{32}\text{SO}_4^{2-}}{{}^{34}\text{SO}_4^{2-}} \right] \quad \text{Gleichung 6}$$

Die für 20°C bestimmte Größe des Verhältnisses K^{32}/K^{34} beträgt 1.022 (HARRISON und THODE, 1958). Damit reagiert ${}^{32}\text{SO}_4^{2-}$ 1.022 mal schneller zu H_2S als ${}^{34}\text{SO}_4^{2-}$ und der während der Reaktion gebildete Schwefelwasserstoff ist zu jedem Zeitpunkt etwa 22‰ leichter als das noch vorhandene Sulfat, das sich dadurch laufend an ${}^{34}\text{S}$ anreichert (Abbildung 9).

Betrachtet man eine einzelne, ständig vom Grundwasser durchflossene Aquiferzelle, in der Sulfatreduktion stattfindet, so werden infolge der kontinuierlichen Nachlieferung an frischem Sulfat je nach Bedingungen und Aufenthaltszeit am Ausgang der Zelle höhere, aber stets gleiche $\delta^{34}\text{S}$ -Werte gemessen werden. Folgt man dem Grundwasser von Zelle zu Zelle, so wächst $\delta^{34}\text{S}$ des Sulfats ständig an. Wird der gebildete Schwefelwasserstoff ohne Verluste mittransportiert, so wächst auch dessen $\delta^{34}\text{S}$ -Wert ständig an, startet aber gemäß der Fraktionierung nach Gleichung 7 von einem niedrigeren Niveau aus. Bei hohem Reduktionsgrad nähert er sich infolge der Massenbilanz dem Wert des initialen Sulfats. Wird H_2S hingegen unmittelbar nach der Entstehung als Sulfid gebunden, also sofort aus dem

System entfernt, so wird das sedimentierte Sulfid anfangs niedrigere und später höhere $\delta^{34}\text{S}$ -Werte als das initiale Sulfat und somit eine breite ortsabhängige Verteilung aufweisen.

Die Entwicklungsverläufe der isotopischen Zusammensetzung von Edukt und Produkt für die beiden Fälle eines Systems ohne Sulfatnachlieferung (mit und ohne Bildung eines Produktreservoirs) werden durch die Gleichungen 7 und 8 beschrieben. Beide Reservoirs werden als gut gemischt angenommen. Die Veranschaulichung der Verläufe für den Fall einer isotopischen Fraktionierung von 25‰ erfolgt in Abbildung 10. Näherungsweise gelten nach dem Modell der Rayleigh-Destillation für das residuale Sulfat

$$\delta^{34}\text{S}_{\text{SO}_4^{2-}} = \delta^{34}\text{S}_{\text{SO}_4^{2-}-0} + \varepsilon \ln f \quad \text{Gleichung 7}$$

und für das gebildete und akkumulierte H_2S

$$\delta^{34}\text{S}_{\text{H}_2\text{S-PR}} = \delta^{34}\text{S}_{\text{SO}_4^{2-}-0} - \frac{f\varepsilon \ln f}{(1-f)} \quad \text{Gleichung 8}$$

$\delta^{34}\text{S}_{\text{SO}_4-0}$: Schwefelisotopenwert des Residual- und Ausgangssulfates

$\delta^{34}\text{S}_{\text{H}_2\text{S-PR}}$: Schwefelisotopenwert des Schwefelwasserstoffs im sich bildenden Produktreservoir

ε : Isotopische Fraktionierung in ‰

f : Fraktion des Residualsulfats $f = C_{\text{SO}_4-t} / C_{\text{SO}_4-0}$

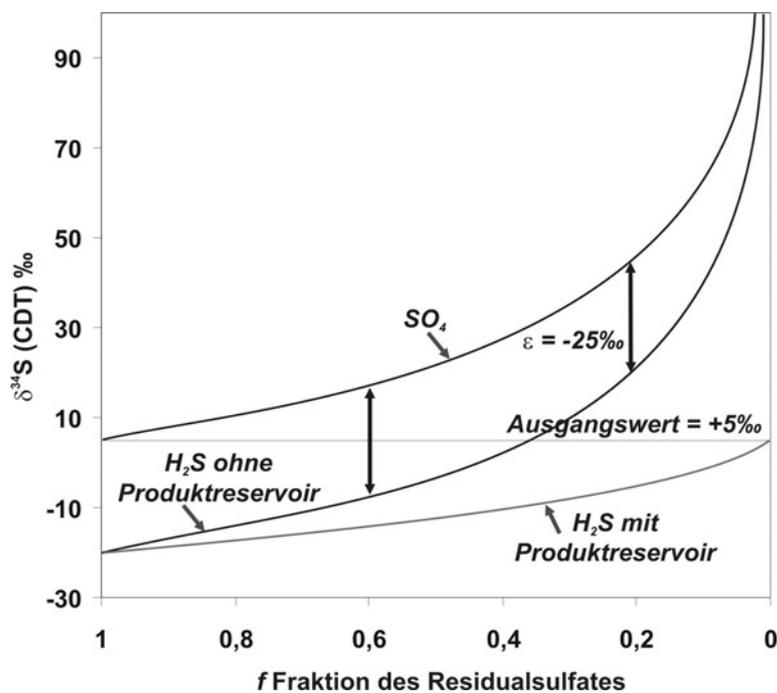


Abbildung 9: Verlauf der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von Sulfat und Schwefelwasserstoff bei der Sulfatreduktion in einem gegenüber Sulfatnachlieferung geschlossenen System mit und ohne Herausbildung eines H_2S -Produktreservoirs. Als Fraktionierung wurde -25‰ und als $\delta^{34}\text{S}_{\text{SO}_4}$ -Startwert +5‰ (CDT) angenommen.

Unter natürlichen Bedingungen bilden diese, nur aus einem Schritt bestehenden Reaktionen eher die Ausnahme. Vielmehr bestehen die Umsetzungsprozesse, insbesondere mikrobiologisch beeinflusste Reaktionen, aus einer Kette von Teilschritten. Die isotopische Gesamtfractionierung ergibt sich dann aus der Summe der kinetischen oder Gleichgewichts-Isotopieeffekte der einzelnen Reaktionsschritte.

Die dissimilatorische Reduktion des Sulfatschwefels erfolgt durch heterotrophe Bakterien der Gattungen *Desulfovibrio* und *Desulfotomaculum* vereinfacht nach Gleichung 9 unter obligat anaeroben Bedingungen.



CH_2O steht dabei als Synonym für ein weites Spektrum als Elektronendonatoren dienender organischer Substanzen, das u.a. Kohlenwasserstoffe, Kohlehydrate, Aminosäuren und Fettsäuren einschließt (BERNER, 1971).

Die Reduktion des Sulfats wird von erheblichen Isotopendiskriminierungen des Schwefels begleitet. Grundlage für die Erklärung der isotopischen Fractionierung bei der dissimilatorischen Sulfatreduktion bildet ein 4-Schritt-Modell, das von HARRISON und THODE (1958) eingeführt und von REES (1973) präzisiert wurde (Abbildung 10).

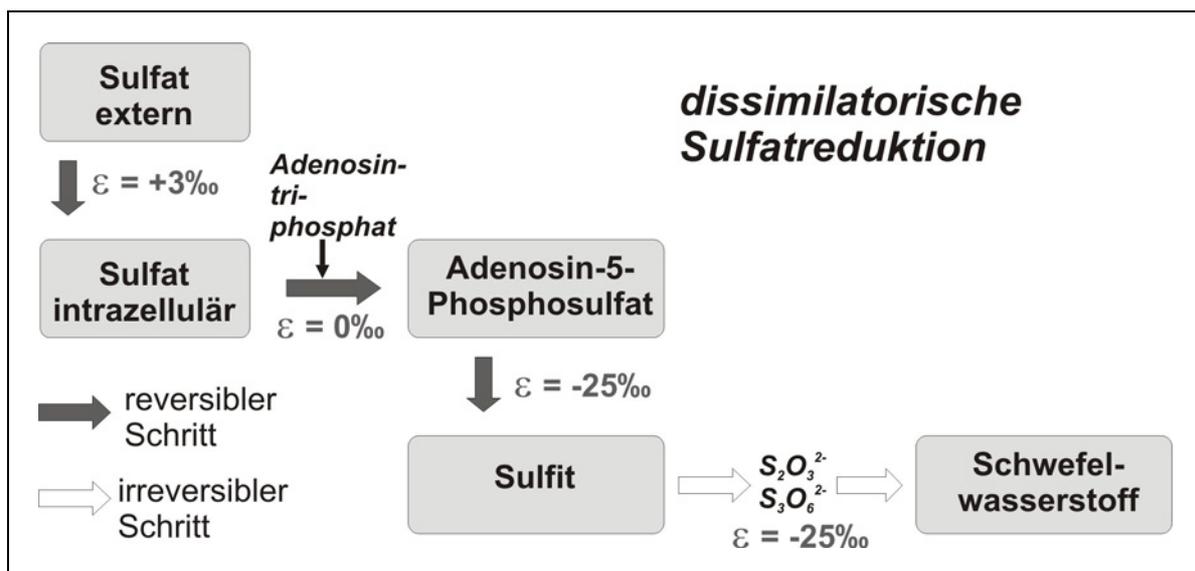


Abbildung 10: Schematischer Ablauf der dissimilatorischen Sulfatreduktion mit Isotopenfractionierungen des Schwefels (nach REES, 1973)

Die Summe der bei den einzelnen Teilschritten auftretenden Fraktionierungen ergibt die Gesamtfraktionierung bei der Sulfatreduktion. Entsprechend den Modellannahmen kann der dabei abgedeckte Bereich zwischen +3‰ und -47‰ liegen. Die tatsächliche Größe der Fraktionierung hängt von den herrschenden physiko-chemischen Bedingungen und damit davon ab, durch welchen der Reaktionsschritte die Reduktionsrate bestimmt wird (Tabelle 2).

Tabelle 2: Einfluss der Reaktionsschritte der dissimilatorischen Sulfatreduktion auf die isotopische Fraktionierung des Schwefels zwischen Sulfat und Schwefelwasserstoff

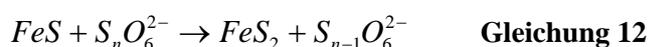
limitierender Reaktionsschritt	Ursache	resultierende Gesamtfraktionierung ($\delta^{34}\text{S-H}_2\text{S} - \delta^{34}\text{S-SO}_4^{2-}$)
intrazelluläre Sulfataufnahme	<ul style="list-style-type: none"> geringes Sulfatangebot hohe spezifische Reduktionsrate (= absolute Reduktionsrate/Zelldichte) 	+3‰
Reduktion des APS zu Sulfit	<ul style="list-style-type: none"> hohes Sulfatangebot hohe spezifische Reduktionsrate 	-22‰
Reduktion des Sulfit zu Schwefelwasserstoff	<ul style="list-style-type: none"> hohes Sulfatangebot niedrige spezifische Reduktionsrate 	-47‰

3.1.1.3.2 Bildung von Eisendisulfiden

Pyrit und Markasit werden nicht direkt aus der Lösung abgeschieden, sondern bilden sich sekundär aus metastabilen Eisenmonosulfiden. Die initialen amorphen Eisenmonosulfide werden durch die Reaktion von Fe(II) mit Hydrogensulfid ausgefällt. Durch progressive Sulfidisierung bilden sich aus den Monosulfiden entsprechend der allgemeinen Gleichung 10 über metastabile Zwischenstufen wie Mackinawit und Greigit die Eisendisulfide (BERNER, 1970; WANG und MORSE, 1996).



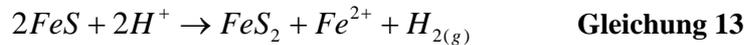
Die Pyritisierung setzt nicht zwangsläufig das Vorhandensein der S^0 -Spezies voraus. Thiosulfate und Polythionate können nach den Gleichungen 11 und 12 ebenso an diesem Prozess beteiligt sein (LANGMUIR, 1997).



S^0 , Thiosulfate und Polythionate entstammen dabei größtenteils der Rückoxidation von dissimilatorisch gebildetem H_2S . Demzufolge ist die Pyritbildung durch progressive Sulfidisierung auf einen Einfluss des oxidativen Teils des Sediment-Schwefelkreislaufes

angewiesen. Dieser Einfluss ist im streng reduzierenden Milieu der tieferen Sedimenthorizonte am geringsten und verstärkt sich mit abnehmender Sedimenttiefe.

WILKIN und BARNES (1996) wiesen experimentell nach, dass die Pyritbildung nicht an den Sulfidierungsprozess gebunden ist, sondern durch Fe^{2+} -Verlust vollzogen werden kann (Gleichung 13).

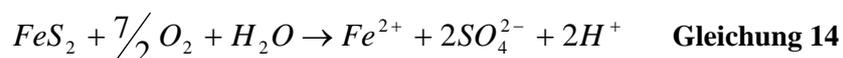


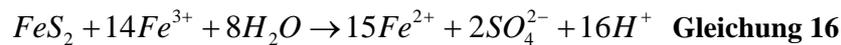
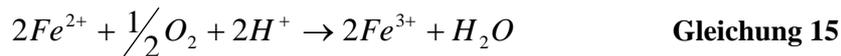
Unabhängig von dem für die Pyritbildung angenommenen Modell kann davon ausgegangen werden, dass die isotopische Zusammensetzung des Schwefels im Pyrit sich nicht wesentlich von der im Monosulfid unterscheidet. In durch Eisenverlust entstandenen Pyriten wird gegenüber dem Monosulfid keine zusätzliche Schwefelkomponente eingebaut, so dass die Isotopensignaturen identisch sind (WILKIN und BARNES, 1996). Auch bei der Pyritbildung durch progressive Sulfidierung kann kein großer isotopischer Unterschied zwischen Monosulfid und Pyrit bestehen, da der zusätzlich eingebaute Schwefel aus Schwefelzwischenprodukten der Oxidation des auch für die Monosulfidbildung relevanten H_2S stammt und der Oxidationsprozess von keinen großen isotopischen Fraktionierungen begleitet wird (HABICHT u.a., 1998).

Experimentelle Arbeiten von OHMOTO und RYE (1979), PRICE und SHIEH (1979) und BÖTTCHER u.a. (1998) belegen, dass im System $FeS-H_2S-H_2O$ nur sehr geringe Fraktionierungen der Schwefelisotope auftreten, die zwischen -1.4‰ und $+2.5\text{‰}$ liegen. Es ist deshalb davon auszugehen, dass im Sediment gebildeter Schwefelwasserstoff und sekundär entstandener Pyrit in den meisten Fällen annähernd gleiche $\delta^{34}S$ -Werte aufweisen. Gelegentliche Ausnahmen von diesem Verhalten sind auf die bakterielle Disproportionierung der durch Rückoxidation entstandenen intermediären Schwefelverbindungen in H_2S und SO_4^{2-} zurückzuführen. Diese Disproportionierung ist von erheblichen Isotopieeffekten begleitet und kann somit einen deutlichen isotopischen Unterschied zwischen dem aus der Sulfatreduktion hervorgegangenen H_2S und dem gebildeten Pyrit hervorrufen (JØRGENSEN, 1990; CANFIELD und THAMDRUP, 1994; HABICHT und CANFIELD, 1997; HABICHT u.a., 1998).

3.1.1.3.3 Oxidation von sedimentären Sulfiden

Bei der Oxidation sedimentärer Sulfide, die durch die Gleichungen 14, 15 und 16 beschrieben werden, kommt es zu vergleichsweise geringen isotopischen Fraktionierungen zwischen dem Sulfid- und Sulfatschwefel.





Während TORAN und HARRIS (1989) anhand von Literaturdaten eine durchschnittliche Fraktionierung von -2...-5.5‰ für die biologisch katalysierte Oxidation von Sulfiden postulieren, konnten TAYLOR und WHEELER (1994) für saure Grubenwässer der westlichen USA zeigen, dass zwischen dem Schwefel in der sulfidischen Ausgangssubstanz und in dem aus der Oxidation hervorgegangenen Sulfat keine isotopische Fraktionierung besteht. Zu gleichen Aussagen kommt Knöller (2000) für die Oxidation sedimentärer Pyrite in Tagebausedimenten des Lausitzer und Mitteldeutschen Braunkohlereviere. Grund dafür ist einerseits eine schnelle vollständige Reaktion, bei der sich keine flüchtigen Zwischenprodukte akkumulieren können, andererseits erfolgt die Oxidation schichtweise, wobei jede Schicht des Sulfidminerals den $\delta^{34}S$ -Gesamtwert repräsentiert.

Die sehr geringe oder oftmals fehlende Fraktionierung ermöglicht es bei dominierendem Beitrag der Sulfide zum Sulfatgehalt der Wässer, den durchschnittlichen $\delta^{34}S$ -Wert der lokal sehr variablen Sulfide anhand des $\delta^{34}S$ -Wertes des gelösten Sulfats festzulegen.

Da hinsichtlich des Reaktionsweges bei der Sulfidverwitterung mittels der $\delta^{34}S$ -Werte keine Aussage abgeleitet werden kann, muss dies über die Betrachtung der $\delta^{18}O(SO_4^{2-})$ -Werte erfolgen.

Dies ist möglich, da sich die Sauerstoffkomponente des Sulfats bei der Oxidation neu konstituieren muss und diese Konstitution in Abhängigkeit von den herrschenden Reaktionsbedingungen von bestimmten Isotopieeffekten (Mischung, Fraktionierung) begleitet ist. Für die Herkunft des Sulfatsauerstoffs kommen Wasser und Luft in Frage. Beide Reservoirs unterscheiden sich erheblich in ihrer isotopischen Zusammensetzung ($\delta^{18}O$ -Wasser -10...-7‰ in Grundwässern Deutschlands, $\delta^{18}O$ -Luft +23‰), so dass der $\delta^{18}O$ -Wert des resultierenden Sulfats maßgeblich durch die relativen Anteile aus beiden Reservoirs definiert wird und einen großen Schwankungsbereich aufweisen kann.

TAYLOR und WHEELER (1994) führten ein allgemeines Isotopenbilanzmodell (Gleichung 17) zur Bestimmung der Sauerstoffanteile aus Luft und Wasser ein.

$$\delta^{18}O_{SO_4^{2-}} = X_{O_2}(\delta^{18}O_{O_2} + \varepsilon_{O_2}) + X_{H_2O}(\delta^{18}O_{H_2O} + \varepsilon_{H_2O}) \quad \text{Gleichung 17}$$

X_{O_2, H_2O} : relative Anteile von Luftsauerstoff und Wasser

ε_{O_2, H_2O} : Anreicherungsfaktoren für Sauerstoff aus Luft und Wasser

Die genaue Bestimmung der Sauerstoffanteile aus Wasser und Luft gestaltet sich schwierig, da die Anreicherungsfaktoren ϵ_{O_2, H_2O} sehr variabel sein können. In einer Zusammenstellung aller in der Literatur verfügbaren Anreicherungsfaktoren für Sauerstoff bei der Sulfatbildung geben VAN STEMPVOORT und KROUSE (1994) für ϵ_{O_2} einen Bereich von 0...-11.4‰ und für ϵ_{H_2O} einen Bereich von 0...+9.7‰ an. Nach TAYLOR u.a. (1984) bzw. TAYLOR und WHEELER (1994) betragen für die mikrobielle Oxidation von Pyrit ϵ_{O_2} -11.2‰ und ϵ_{H_2O} +4.1‰.

Eine weitere Unsicherheit bei der Berechnung der Sauerstoffherkunft nach Gleichung 17 liegt im möglichen Isotopenaustausch der gelösten O_2 -haltigen Schwefelverbindungen mit dem Wasser. Dabei spielt weniger der direkte Austausch des Sulfats mit dem Wasser die entscheidende Rolle, da dieser bei normalen Grundwassertemperaturen und neutralen pH-Werten extrem langsam abläuft (LLOYD, 1968, CHIBA und SAKAI, 1985). Selbst bei einem pH-Wert von 3 würde bei 4°C das Erreichen eines 97%-Gleichgewichtes zwischen SO_4^{2-} und H_2O 50 Mio. Jahre dauern (CHIBA und SAKAI, 1985).

Vielmehr wird der Austausch über die bei der Oxidation entstehenden Zwischenprodukte geregelt. So kann z.B. Sulfit bei niedrigen pH-Werten beschleunigt Sauerstoffisotope mit dem Wasser austauschen, so dass die $\Delta^{18}O(SO_4^{2-}-H_2O)$ -Werte im sauren Milieu größer werden (VAN STEMPVOORT und KROUSE, 1994, TAYLOR und WHEELER, 1994, QURESHI, 1986). Allerdings sind Zwischenprodukte bei niedrigen pH-Werten weniger stabil als im neutralen oder alkalischen Bereich, d.h. Austauschrate und Stabilität zeigen eine gegenläufige pH-Abhängigkeit. Dadurch ist der letztendlich resultierende Austauschereffekt nur schwer zu quantifizieren.

3.1.1.3.4 Verhalten der isotopischen Zusammensetzung von Schwefelverbindungen bei Umsetzung in der Bodenzone

In der ungesättigten Bodenzone kommen verschiedene mikrobiell gesteuerte aber auch zum Teil rein chemische Prozesse vor, die mit einer Transformation von Schwefelverbindungen verbunden sind.

Da der überwiegende Anteil der Schwefeltransformationen im Boden auf mikrobielle Tätigkeit zurückzuführen ist und in Mehrschrittreaktionen mit Änderung der Oxidationszahl abläuft, kann auch bei den meisten dieser Prozesse eine mehr oder weniger große Isotopenfraktionierung erwartet werden. MAYER (1993) nimmt anhand eigener Untersuchungen und Literaturdaten eine eingehende Charakteristik der Isotopenrelevanz einzelner Reaktionsschritte vor, für die Bewertung der Schwefelumsetzungsprozesse im Boden ist aber die Betrachtung der Gesamtfractionierungen der einzelnen Transformations-

reaktionen meistens ausreichend. Aus diesem Grund soll an dieser Stelle auf eine detaillierte Beschreibung von Reaktionsteilschritten verzichtet werden und vielmehr eine zusammenfassende Darstellung der Fraktionierungsfaktoren für Schwefeltransformationen im Boden erfolgen (Tabelle 3).

Tabelle 3: Zusammenstellung der Fraktionierungsfaktoren für Schwefel und Sauerstoff für wesentliche Schwefeltransformationen in der Bodenzone

Transformation	Ausgangsstoff	Produkt	$\epsilon^{34}\text{S}$ (‰)	$\epsilon^{18}\text{O}$ (‰)	Quelle
Dissimilatorische Sulfatreduktion	SO_4^{2-}	H_2S	+3 bis -47	Reduktion	siehe Abschnitt 3.1.1.3.1
Sulfidoxidation	Sulfide, Disulfide	SO_4^{2-}	0 ± 4	Neukonstitution	siehe Abschnitt 3.1.1.3.3
Mineralisation	organische Sulfate	SO_4^{2-}	-8 ± 1	25% Neukonstitution	MAYER (1993)
	Kohlenstoffgebundener Schwefel	SO_4^{2-}	0(...-5)	Neukonstitution	MAYER (1993)
Immobilisierung	SO_4^{2-}	organische Estersulfate	$+4 \pm 1$	+1	MAYER (1993) CHAE und KROUSE (1986) SCHOENAU und BETTANY (1989)
	SO_4^{2-}	Kohlenstoffgebundener Schwefel	-1 ± 1	Reduktion	MAYER (1993) KUSAKABE u.a. (1976) KROUSE und TABATABAI (1986)
Volatilisierung	organischer Schwefel	H_2S , DMS	-5	O_2 nicht beteiligt	NRIAGU und COKER (1978) NRIAGU u.a. (1987)
Lösung	Gips, Anhydrit	SO_4^{2-}	0 ± 1	0 ± 1	THODE und MONSTER (1965)
	Hydroxosulfate	SO_4^{2-}	0 ± 1	0 ± 1	
Fällung	SO_4^{2-}	Gips, Anhydrit	$+2 \pm 1$	$+4 \pm 1$	HOLSER u.a. (1979)
	SO_4^{2-}	Hydroxosulfate	0 ± 1	+1	LLOYD (1967) PIERRE (1985) KNÖLLER (2000)
Adsorption	SO_4^{2-}	Fe-, Mn-, Al-Hydroxide, Tonminerale	$+1 \pm 1$	0 ± 1	VAN STEMPOORT (1989) VAN STEMPOORT u.a. (1990)
Desorption	Fe-, Mn-, Al-Hydroxide, Tonminerale	SO_4^{2-}	0 ± 1	0 ± 1	MAYER (1993) NRIAGU (1974)

3.1.2 Isotopische Untersuchung von an Schwefelumsetzungen beteiligten Redoxpartnern

3.1.2.1 Isotopische Zusammensetzung des gelösten anorganischen Kohlenstoffs

Die in Gleichung 9 (Abschnitt 3.1.1.3.1) dargestellte Gesamtgleichung für die dissimilatorische Sulfatreduktion beinhaltet eine Kopplung von zwei Einzelreaktionen, nämlich die eigentliche Reduktion des Sulfats und die Oxidation der organischen Kohlenstoffverbindungen, bei der CO_2 frei- und dem DIC zugesetzt wird. DIC im Grundwasser entsteht aus gelöstem CO_2 vorwiegend biogener (insbesondere Boden- CO_2) manchmal aber auch geogener Herkunft, das je nach Angebot mit karbonatischem Kohlenstoff in Boden und Aquifer unter Beachtung des Kalk-Kohlensäure-Gleichgewichtes reagiert. Dabei stellen sich pH-abhängige Gleichgewichts-Isotopenfraktionierungen zwischen den gelösten Spezies ($\text{CO}_2(\text{g})$ und H_2CO_3 , HCO_3^- bzw. CO_3^{2-}) ein, die zu einer ^{13}C -Anreicherung des Karbonat-C gegenüber dem CO_2 führen. Die Gesetzmäßigkeiten des Kalk-Kohlensäure-Gleichgewichtes sind in zahlreichen hydrochemischen Lehrbüchern umfassend erläutert (z.B. GARRELS und CHRIST, 1965, STUMM und MORGAN, 1981, NORDSTROM und MUNOZ, 1985). Beispiele für C-Quellen und typische Isotopenwerte sind in Abbildung 11 gezeigt. Für die Herausbildung der Kohlenstoffisotopenzusammensetzung des DIC gibt es verschiedene Modelle in Abhängigkeit von den Verhältnissen im Aquifer und bei der Grundwasserneubildung.

Je nach Situation im Aquifer kann es bei einem starken Einfluss der dissimilatorischen Sulfatreduktion zu einer Verschiebung des $\delta^{13}\text{C}$ -Wertes des DIC zu negativeren Werten kommen.

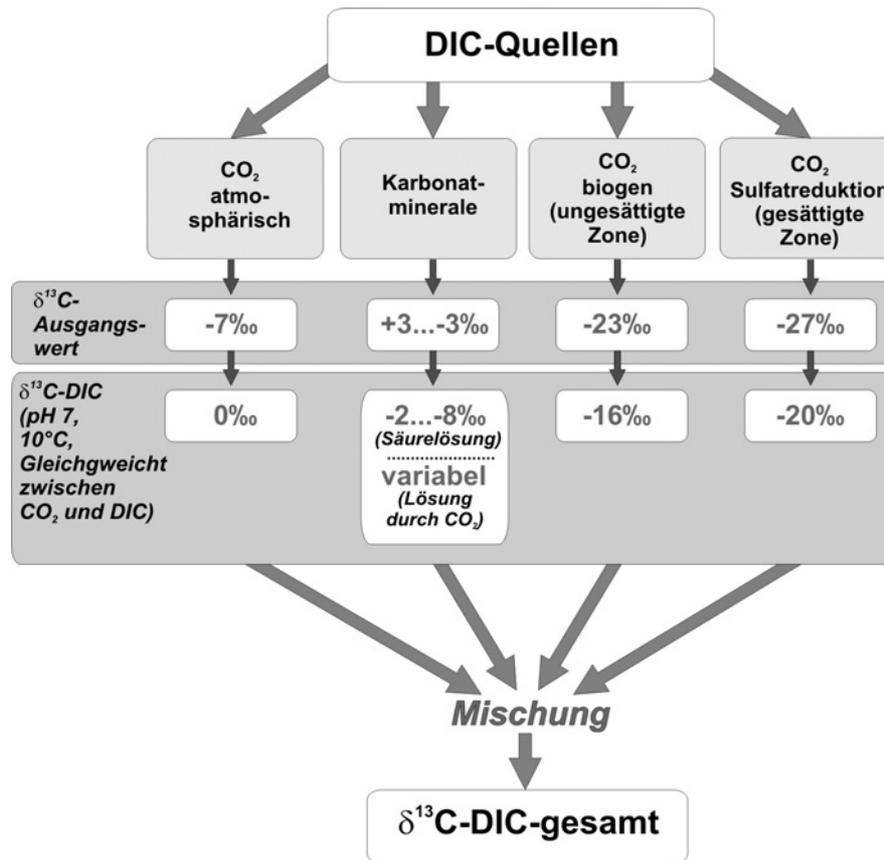
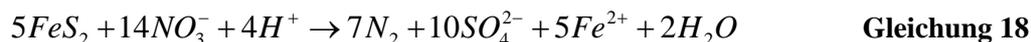


Abbildung 11: DIC-Quellen und ihre $\delta^{13}\text{C}$ -Ausgangswerte. Darüber hinaus sind die $\delta^{13}\text{C}$ -Werte angegeben, die durch die jeweiligen Quellen im DIC verursacht werden

3.1.2.2 Isotopische Zusammensetzung des gelösten Nitrats bei der autotrophen Denitrifikation als Sulfid oxidierenden Prozess

Neben der Oxidation von sedimentärem Disulfidschwefel durch freien Sauerstoff oder dreiwertiges Eisen besteht noch die Möglichkeit der Oxidation durch Nitrat mittels autotropher Denitrifikation. Der Ablauf dieses durch *Thiobacillus denitrificans* vermittelten Prozesses wird in Gleichung 18 beschrieben.



Im Gegensatz zu den in den Gleichungen 14, 15 und 16 (Abschnitt 3.1.1.3.3) erfassten Oxidationsreaktionen kommt es bei der autotrophen Denitrifikation zu keiner Säurefreisetzung.

Die Schwefelisotope im neu gebildeten Sulfat verhalten sich im wesentlichen wie bei der Oxidation durch freien Sauerstoff oder Fe^{3+} , d.h. es treten gegenüber der sulfidischen

Ausgangssubstanz keine relevanten Isotopendiskriminierungen auf. Hinsichtlich der Konstitution der Sauerstoffkomponente im Sulfat liegen aber bislang noch keine eindeutigen Erkenntnisse vor, wie viel O_2 aus dem Nitrat und dem Wasser in das Sulfatmolekül eingebaut wird.

Neben der isotopischen Sulfatzusammensetzung ist auch die isotopische Zusammensetzung des Nitrats durch den Reaktionsablauf beeinflusst. Die Denitrifikation bewirkt ein Ansteigen sowohl der $\delta^{15}N$ - als auch der $\delta^{18}O$ -Werte im Residual- NO_3 entsprechend den Gesetzmäßigkeiten der Rayleigh-Fraktionierung.

Obwohl unter Labor- und Feldbedingungen ein großer Schwankungsbereich für die kinetischen Anreicherungsfaktoren sowohl für N als auch für O in Abhängigkeit von den lokalen Gegebenheiten beobachtet wurde, zeigte sich, dass das Verhältnis der Anreicherungsfaktoren ϵ_O/ϵ_N in nahezu allen Fällen einen konstanten Wert von 0.5 annahm (z.B. OLLEROS, 1983, AMBERGER und SCHMIDT, 1987, BÖTTCHER u.a., 1990). Aus diesem Grunde lässt sich der Prozess der Denitrifikation am so genannten Denitrifikationsvektor mit dem Anstieg 0.5 im $\delta^{15}N$ - $\delta^{18}O(NO_3^-)$ -Diagramm eindeutig identifizieren, vorausgesetzt es liegt ein isotopisch homogenes Nitratreservoir vor.

Spielen zwei oder mehrere isotopisch verschiedene Nitratquellen eine Rolle, wie es oftmals unter natürlichen Bedingungen vorgefunden werden kann, lässt sich ein Denitrifikationstrend nicht mehr eindeutig erkennen. Abbildung 12 gibt einen Überblick über die möglichen Isotopenvariationen in verschiedenen natürlichen und anthropogenen Nitratquellen.

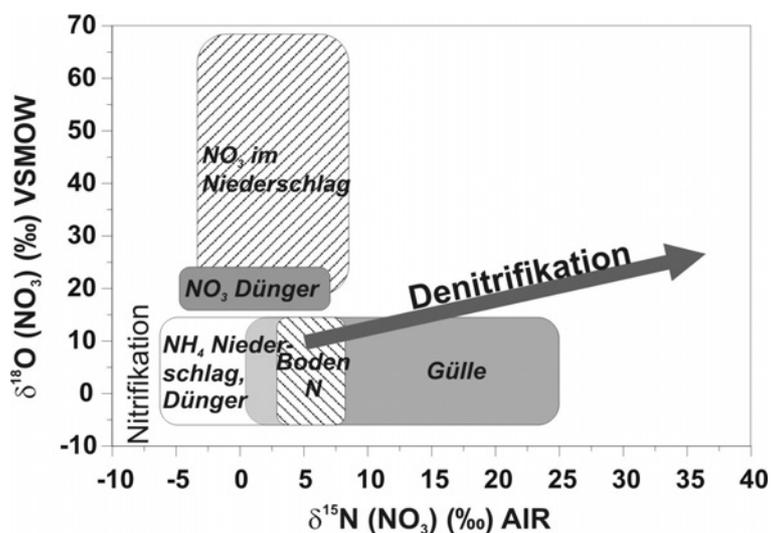


Abbildung 12: Variation der $\delta^{15}N$ - und $\delta^{18}O$ -Werte von verschiedenen natürlichen und anthropogenen Nitratquellen (modifiziert nach KENDALL, 1998)

3.1.3 Angewandte Tracermethoden zur Untersuchung des Wasserkreislaufs

3.1.3.1 Motivation

Es genügt nicht, die hydrochemischen Eigenschaften (Konzentrationsverteilungen) in einem Grundwassermessfeld zu messen, man muss diese auch durch Ermittlung und Verknüpfung von Quellen (Inventare, Herkunft, Prozesse), Senken (Prozesse), Transport und Mischungsvorgängen erklären. Erst die hydrodynamischen Verhältnisse entscheiden, wann ein Stoff in einem Brunnen ankommt bzw. wie lange es dauert, bis eine Kontamination potentiell an einem bestimmten Ort sichtbar wird oder wieder verschwindet. Um diese mit der Bewegung des Wassers verbundenen Prozesse aufzuklären bedient man sich natürlicher Tracer, deren gemessene Konzentration unter Modellannahmen einer definierten Entstehungszeit zugeordnet werden kann.

Die ersten diesbezüglichen Traceruntersuchungen im Raum Mockritz fußen auf Tritiumanalysen, die in wenigen Fällen durch Radiokohlenstoffanalysen ergänzt wurden. Die erhaltene große Wertestreuung liefert sofort den Beweis für eine breite Lauf- bzw. Verweilzeitverteilung, wie sie in ausgedehnten und strukturierten Grundwasserfeldern zu berücksichtigen ist. Es ist jedoch allgemein bekannt und zeigte sich auch hier (vgl. Abschnitt 3.1.3.2), dass Tritium infolge eines ungünstigen Verlaufs der Inputkurve allein nur in günstigen Fällen quantifizierbare Resultate liefern kann. Weiterhin muss erwartet werden, dass insbesondere der für die Sulfatproblematik wichtige Auegrundwasserleiter in Nähe zur Hochfläche auch als Mischungszone fungiert. Diese Funktion wird durch wechselhafte hydraulische Verhältnisse verstärkt. Im Ergebnis muss also mit Mischwässern gerechnet werden, die mit einem Einzeltracer grundsätzlich schlecht aufgeklärt werden können.

Üblicherweise erfolgt die Bewertung von Tritiumgehalten und anderen Umweltracern anhand von einfachen Standardmischungsansätzen für die altersmäßige Zusammensetzung der untersuchten Grundwasserprobe (lumped parameter models, MALOSZEWSKI und ZUBER, 1982) von denen für den Fall diskreter grundwasserflächenferner Filterstrecken, wie sie in Mockritz üblich sind, vor allem das einfache Piston-Flow- und das Dispersionsmodell ggf. in Kombination mit weiteren Ansätzen von Interesse sind. Der gewählte Ansatz muss vom hydrogeologischen Standpunkt her plausibel sein. Seine Richtigkeit lässt sich anhand hinreichend langer Datenreihen überprüfen, was häufig die Möglichkeiten eines zeitlich begrenzten Untersuchungsprogramms übersteigt und zudem konstante hydraulische Bedingungen voraussetzt. Generell ist man deshalb heute bestrebt, Tritium in Kombination

mit weiteren natürlichen Verweilzeitracern anzuwenden. In Mockritz wurden zunächst zusätzlich (zu Tritium) ^{85}Kr -Analysen angestrengt (vgl. Abschnitt 4.6.5), die aber sehr aufwendig und daher nur in sehr geringer Anzahl erhältlich sind und außerdem bei einigen Mockritz-Proben auf präparative Probleme stießen. Daher wurden einige Proben auf ihre FCKW-Gehalte untersucht, die wesentlich einfacher und preisgünstiger zu messen sind (vgl. Abschnitt 4.6.4). Die erhaltenen FCKW-Daten sind nur mit großer Vorsicht interpretierbar, was teilweise an ungünstigen Milieubedingungen (Abbau) und teilweise an unerwarteten Kontaminationen lag. Deshalb wurde in einer weiteren Aktion das als sehr resistent geltende SF_6 einbezogen. Hier wiederum sprechen zu hohe Konzentrationen in den Stichproben gegen eine Eignung von SF_6 als Alterstracer im Untersuchungsgebiet. Letztlich wurden deshalb an einer Messstellenauswahl noch ^3He /Tritium-Verhältnisse bestimmt, die ebenfalls eine Grundwasserdatierung erlauben (vgl. Abschnitt 4.6.3).

Dies führte zu zeitlich versetzten Traceruntersuchungen, wobei bzgl. Tritium zumindest punktuell auch die zeitlichen Veränderungen über einen Zeitraum von ca. 5 Jahren registriert werden konnten.

Standardmäßig wurde bei allen isopenanalytisch untersuchten Wasserproben auch $\delta^{18}\text{O}$ (und z.T. auch δD) bestimmt. Diese Parameter gestatten die Beurteilung eines Grundwasserfeldes hinsichtlich der Varianz der Bildungsverhältnisse der Grundwässer.

3.1.3.2 Tritium

Tritium gehört zu den klassischen isopenhydrologischen Tracern für Grundwasserverweilzeiten und –geschütztheit. Als Bestandteil des Wassermoleküls ist es der einzige Datierungstracer, der den Wasserkreislauf direkt widerspiegelt. Erste Anwendungen begannen in einer Zeit, in der die Konzentration im Niederschlag bereits durch die Freisetzung von Tritium aus oberirdischen Kernwaffentests dominiert wurde und nutzten insbesondere den starken Eintrag durch die oberirdischen Wasserstoffbombenexperimente anfangs der 60er Jahre (Erhöhung der natürlichen Konzentration im Niederschlag um etwa das 300fache, siehe Abbildung 13) und den anschließenden Konzentrationsabfall als willkommene Markierung für neu gebildetes Grundwasser.

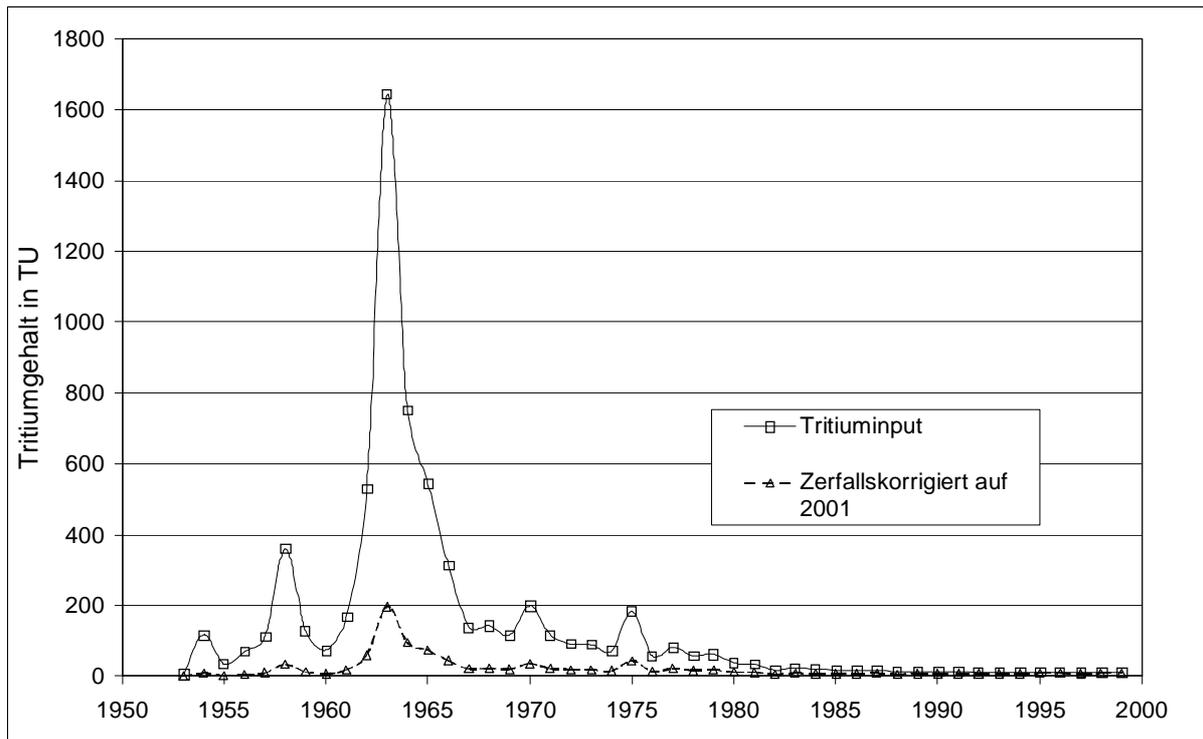


Abbildung 13: Tritiumkonzentration im Niederschlag zur Bildungszeit und theoretische Restkonzentration im Jahre 2001

Dem relativ schnellen Abfall der Konzentration im Niederschlag bis etwa 1982 folgte eine Phase des langsameren Abfalls und der Angleichung an ein quasinatürliches Niveau (bestimmt durch natürliche Konzentration von etwa 5...6 TU sowie einem geringeren Beitrag aus der sonstigen kerntechnischen Erzeugung und Nutzung), das derzeit nahezu erreicht ist. Zeitweilig entsprach der zeitliche Konzentrationsgradient im Niederschlag etwa der Abnahme durch den radioaktiven Zerfall des Tritiums ($T_{1/2} = 12,33$ Jahre), was zu relativ konstanten zerfallskorrigierten mittleren Tritiumgehalten im Niederschlag führte. Seit einigen Jahren ist sie geringer, so dass nun in der zerfallskorrigierten Inputfunktion ein Minimum im Zeitraum um 1994 auftritt. Die geringen Variationen und die zunehmende Mehrdeutigkeit der Zuordnung einer gemessenen Konzentration erschweren die Bewertung jüngerer Grundwässer, zumal längere Messreihen am Grund- und Niederschlagswasser kaum verfügbar sind. Eine bleibende Stärke von Tritium besteht in der Identifikation alter Wässer. Vor 1950 gebildete Grundwässer enthalten im Rahmen der üblichen Messgenauigkeit kein Tritium mehr. Andererseits muss in allen nach etwa 1955 gebildeten Grundwässern (hier als Jungwasser bezeichnet) eine Mindestaktivität enthalten sein, deren Größe vom Messzeitpunkt abhängt. Kann man z.B. infolge der Herkunftsverhältnisse einer Grundwasserprobe annehmen, dass sich die jahreszeitlichen Variationen und Fluktuationen der Tritiumkonzentration des Niederschlags im Grundwasser ausgemittelt haben, so beweist die

Unterschreitung dieser Mindestaktivität (unter Beachtung der Messgenauigkeit und der tatsächlichen Neubildungsverhältnisse) die Anwesenheit von alten Wässern. Dieser Prüfwert ist abhängig vom Zeitpunkt der Probenahme/Messung und ist in Abbildung 14 am Beispiel von Niederschlagswerten von Leipzig (eigenes Labor) gezeigt.

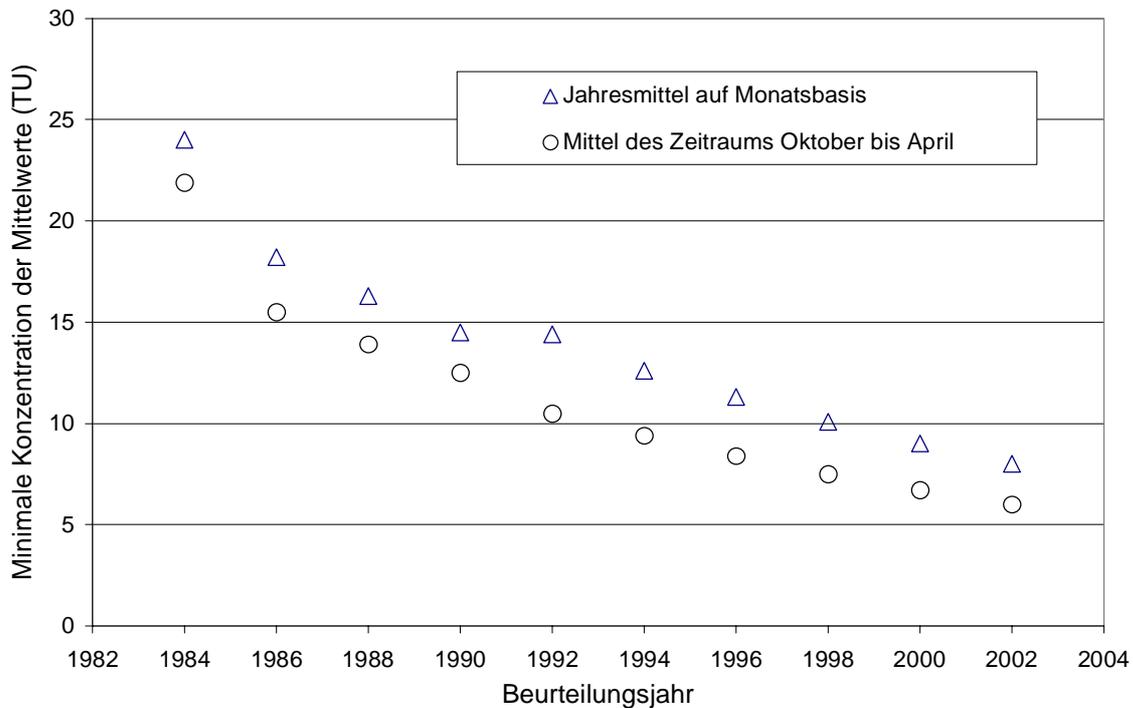


Abbildung 14: Mindesttritiumgehalte in Grundwasserproben, die ausschließlich aus (nicht aus Einzelereignissen stammenden) Jungwässern gebildet wurden für den Fall einer ganzjährigen Grundwasserneubildung sowie des hydrologischen Halbjahres (Station Leipzig)

Weiterhin identifizieren Konzentrationen oberhalb des Rezentniveaus den Beitrag von Wässern aus dem Bildungszeitraum mit hohem Tritiuminput.

3.1.3.3 δD und $\delta^{18}O$

Die isotopische Zusammensetzung des Niederschlagswassers (δD und $\delta^{18}O$) wird primär durch die Herkunft und Bildung des Wasserdampfes und der Wolken und sekundär durch die Bildungsverhältnisse des Niederschlags bestimmt. Nach Erreichen der Erdoberfläche kann ein Teil des Wassers versickern. Dabei teilt sich dem Sickerwasser die Signatur des Niederschlagsereignisses mit. Winterniederschläge sind im Mittel isotopisch leichter als Sommerniederschläge (vgl. Abbildung 15). Weiterhin kann es sich direkt oder indirekt in Gewässern sammeln. Im δD - $\delta^{18}O$ -Plot liegen originäre Niederschlagswässer bzw. davon

abgeleitete Grundwässer auf oder nahe sich als Mittel ergebenden lokalen Niederschlagsgeraden ($\delta D = a \cdot \delta^{18}O + d$), die von der so genannten globalen meteorischen Wasserlinie (GMWL, $\delta D = 8 \cdot \delta^{18}O + 10$) nach CRAIG (1961) zumeist etwas abweicht. Vor allem in stehenden Gewässern können sich die Isotopensignaturen vor allem infolge Verdunstung (in guten Porengrundwasserleitern sind derartige Alterationen unbedeutend) ändern. Eindunstete Wässer nehmen einen Platz auf einer so genannten δD - $\delta^{18}O$ -Eindunstungsgeraden ein, die sich durch bevorzugte ^{18}O -Anreicherung und damit niedrigeren Anstieg a auszeichnet. Auch in der gesättigten Zone sind postgenetische Variationen (Austausch- und Lösungseffekte) möglich, die aber im vorliegenden Betrachtungsfall keine Rolle spielen.

Untersuchungen von δD und $\delta^{18}O$ versprechen also insbesondere dort Nutzen, wo stark variable Infiltrationsverhältnisse vorliegen oder die Grundwasserneubildung durch die Infiltration aus ständigen (Uferfiltrate) oder episodischen (z.B. auch Überflutungen) Gewässern beeinflusst wird. Ebenso sind kurzzeitig fluktuierende $\delta^{18}O$ - oder δD -Werte ein Kennzeichen für geringe oder variable Mischung bzw. die enge Verbindung zu Niederschlagsereignissen. In ausgedehnten Porengrundwasserleitern bilden sich kurzfristige Variationen oder auch „saisonale“ Effekte oft nur im obersten Grundwasserbereich bzw. bei geringen Verweilzeiten ab.

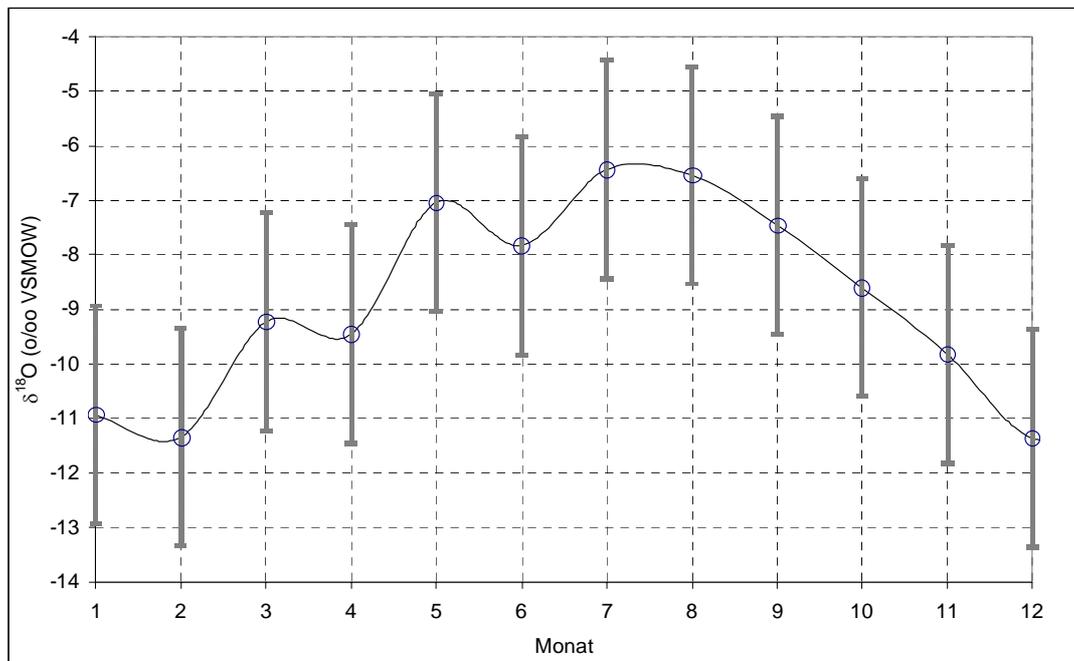


Abbildung 15: Variation von $\delta^{18}O$ im Niederschlag von Leipzig auf der Basis von ungewichteten Monatsmitteln und deren Standardabweichungen für den Zeitraum 1986-1996

3.1.3.4 *Tritiumgeneres Helium-3*

Enthält ein abgeschlossenes System (z.B. ein Grundwasserelement oder eine Wasserprobe) Tritium, so reichert sich sein Zerfallsprodukt, das ^3He , mit der Zeit an. Abgeschlossen ist ein Grundwassersystem diesbezüglich (Akkumulationsbeginn) erst dann, wenn der Kontakt zur Gasphase in der ungesättigten Zone (Austausch, Diffusion) unterbunden ist. Die Gesamtmenge an ^3He lässt sich massenspektrometrisch über den Gehalt des im Wasser gelösten Heliums und das $^3\text{He}/^4\text{He}$ -Verhältniss messen bzw. berechnen. Aus diesem müssen Beiträge von Lufthelium (entsprechend eines temperaturabhängigen Lösungsgleichgewichts zwischen Gasphase und Wasser sowie von Überschüssen/Lufteinschlüssen) und Helium aus der Erdkruste durch Korrekturansätze eliminiert werden. Dies geschieht z.T. mittels Parallelmessung von Neon (Ermittlung des Luftüberschusses in der Probe) und z.T. durch Verwendung von Erfahrungswerten zum Krustenhelium. Aus der Kenntnis des bereits zerfallenen Tritiums ($^3\text{He}_{\text{tri}}$) in Relation zum noch in der Probe befindlichen Tritium ^3H lässt sich die Bildungsdauer des ^3He ermitteln und für Verweilzeitbewertungen verwenden (SCHLOSSER u.a., 1988, 1989, PLUMMER et al., 1998). Auf dieser Basis ergibt sich eine theoretische Grundwasserverweilzeit T_{He} nach

$$T_{\text{He}} = \lambda^{-1} \ln(1 + ^3\text{He}_{\text{tri}}/^3\text{H}) \quad (\lambda = \text{Zerfallskonstante des Tritiums}).$$

Die so ermittelten Alter sind bei einem Piston Flow Modell klar definiert. Bei Mischwässern entspricht T_{He} jedoch nicht dem gewichteten Mittel der Verweilzeiten der Komponenten. Tritiumfreie Wasserkomponenten werden nicht erfasst, da sie weder einen Beitrag zu ^3H noch zu $^3\text{He}_{\text{tri}}$ liefern. Sind solche in einer Probe enthalten, so liefert T_{He} Aussagen über die jüngeren (noch oder ehemals tritiumhaltigen) Komponenten.

3.1.3.5 *FCKW und SF₆*

Die FCKW-Gehalte in der Atmosphäre sind seit rund 50 Jahren bei F12 (CF_2Cl_2) und F11 (CFCl_3) bzw. über 30 Jahren bei F113 ($\text{C}_2\text{F}_3\text{Cl}_3$) bis in die 90er Jahre ständig gewachsen. Bei nicht zu mächtiger ungesättigter Bodenzone geht man davon aus, dass die FCKW-Gehalte in der Atmosphäre denen der Bodenluft näherungsweise gleichen. Die Grundwasserdatierung mit FCKW (OSTER, 1994, PLUMMER und BUSENBERG, 1999) setzt voraus, dass zwischen der Bodenluft und dem sich bildenden Sickerwasser bzw. Grundwasser ein definiertes Konzentrations- und temperaturabhängiges Lösungsgleichgewicht existiert. Die

Zeitabhängigkeit überträgt sich damit auf das Grundwasser und ist Grundlage einer Altersbewertung. Generell muss gesichert sein, dass sich die Tracer im Grundwasser konservativ verhalten und unterirdische Quellen nicht existieren. Bekannt ist, dass FCKW im aeroben Milieu relativ stabil sind, während sie unter reduzierenden Bedingungen Gefahr laufen, abgebaut zu werden. SF_6 gilt hingegen als resistent und zeigt eine stark ansteigende Konzentration in der Atmosphäre (BUSENBERG und PLUMMER, 2000). Grundsätzlich muss der Konzentrationsverlauf in der Luft des Untersuchungsgebietes bekannt sein bzw. einem allgemein bekannten Trend entsprechen. Für das Untersuchungsgebiet lagen keine FCKW-Daten vor, so dass Bewertungen – was ja meist der Fall ist - nur unter Anlehnung an durchschnittliche Verhältnisse durchgeführt werden können. Weiterhin dürfen keine weiteren Quellen (Kontamination bei FCKW und SF_6 , unterirdische Bildungen bei SF_6) wirksam sein.

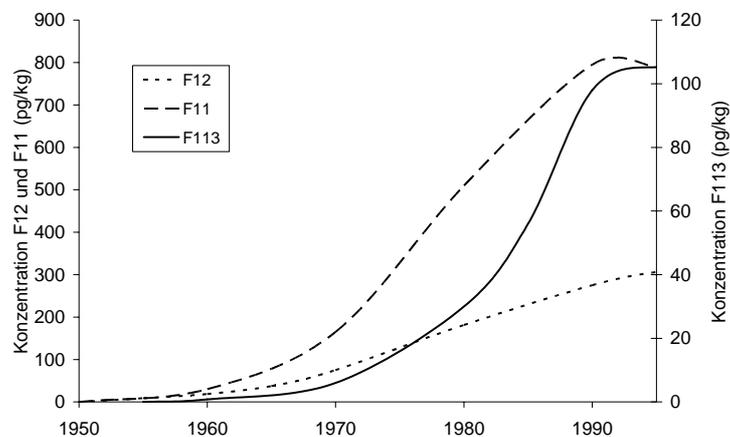


Abbildung 16: FCKW-Konzentrationen im bei 10 °C neu gebildeten Grundwasser (nach PLUMMER und BUSENBERG, 1999)

3.1.3.6 Krypton-85

^{85}Kr ist ein Spaltprodukt von Kernbrennstoffen und gelangt somit in erster Linie aus kerntechnischen Anlagen in die Atmosphäre. Der besondere Wert von ^{85}Kr als Tracer beruht auf seiner Inertgasnatur und dem bis heute anhaltenden Anstieg der atmosphärischen Konzentration. Etwa aus der Schweiz oder dem Schwarzwald und anderen Stationen auf der Welt sind Konzentrationsmessungen bekannt, die als Inputfunktionen bei Grundwasserstudien benutzt werden können. Aus der Messwertstreuung ist aber ersichtlich, dass sich die Bedingungen an einem konkreten Standort (z.B. Nähe von Anlagen, Mischungs- und Transporteffekte in der Atmosphäre) damit nur angenähert beschreiben lassen. Ähnlich wie bei Helium geht man von einem temperaturabhängigen Lösungsgleichgewicht zwischen Bodengas- und Wasserphase aus, das die Kryptonkonzentration im Wasser festlegt.

Korrekturen für Abweichungen müssen nicht angebracht werden, da als Mess- und Bewertungsgröße die spezifische Aktivität ($\text{dpm/cm}^3 \text{ Kr} = \text{Zahl der Zerfälle von } ^{85}\text{Kr je Minute und } 1 \text{ cm}^3 \text{ Kryptongas unter Normalbedingungen}$) dient. Isotopieeffekte können vernachlässigt werden. Wie bei anderen gasförmigen Tracern muss auch bei Krypton die Annahme gemacht werden, dass die Konzentration in der Bodenluft derjenigen in der freien Atmosphäre entspricht bzw. ein schneller Gasaustausch zwischen Bodenluft und Atmosphäre erfolgt. Ist dies z.B. bei mächtiger ungesättigter Zone nicht der Fall, so müssen Korrekturen angebracht werden. Weiterhin setzt die Bestimmungszeit ein, wenn das Grundwasser den Kontakt zur Bodenluft verliert und auch ein diffusiver Austausch nicht mehr stattfindet. Mit einer Halbwertszeit von 10,76 Jahren erschließt sich grundsätzlich ein ähnlicher Datierungszeitraum wie bei Tritium und den FCKW, wobei wie bei den FCKW ein günstiger Verlauf der Inputfunktion vorliegt (LOOSLI und OESCHGER 1978, LOOSLI u.a., 1991, SMETHIE u.a., 1992). Die hier benutzten Inputdaten gehen auf eine persönliche Mitteilung (LOOSLI, H. H., PURTSCHERT, R.) aus dem Physikalischen Institut der Universität Bern zurück, das auch für die Messungen an den Gasextrakten verantwortlich zeichnet. Die spezifische ^{85}Kr -Konzentration lag im Jahre 2000 etwa bei 90 dpm/ml Kr .

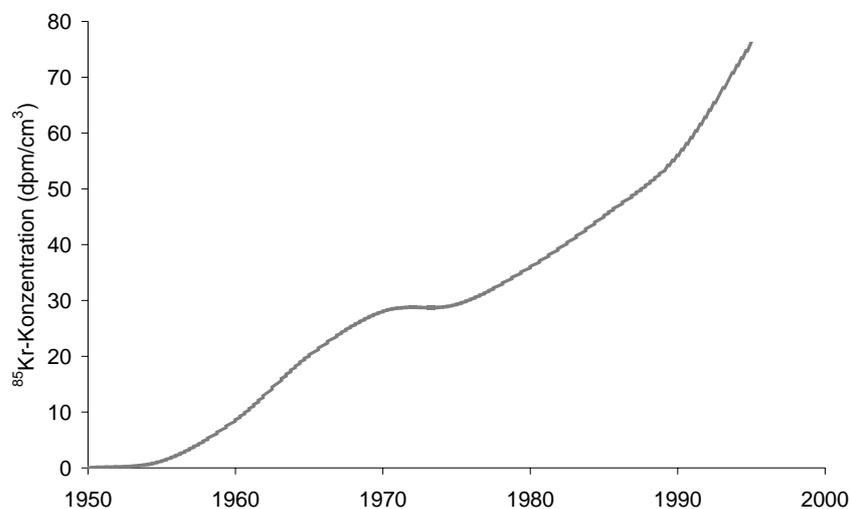


Abbildung 17: ^{85}Kr in der nördlichen Hemisphäre(nach EKWURZEL u.a. 1994, ergänzt)

3.2 Messverfahren

3.2.1 Isotopenbestimmung am gelösten Sulfat

3.2.1.1 Probengewinnung

Die Entnahme von Wasserproben für die Isotopenanalyse folgt den üblichen Richtlinien für die Gewinnung repräsentativer Proben. Die Probe wird am besten in eine gut schließende Polyethylenflasche gefüllt und gespeichert. Um Veränderungen in der Isotopenzusammensetzung der Schwefelverbindungen insbesondere infolge mikrobieller Prozesse zu verhindern, empfiehlt sich die Vergiftung z.B. mit Chloroform (etwa 1 ml) sowie die Fixierung eventuell vorhandenen Schwefelwasserstoffs und gelöster Sulfide als schwer lösliches Zinksulfid, indem man 1-2 Spatelspitzen Zinkacetat hinzufügt. Ist eine Zugabe von Chloroform aus sonstigen Gründen nicht möglich, so muss die Probe unter Kühschrankbedingungen (unter 8 °C) aufbewahrt werden. Die Entnahmemenge an Wasser richtet sich nach dem Sulfatgehalt (u.U. auch nach dem Sulfidgehalt). Üblich sind 0,5 bis 1 l. Aus Handhabungsgründen sollten möglichst wenigstens 10 mg Sulfat zur Verfügung stehen. Die Minimalkonzentration sollte – um den Arbeitsaufwand zu begrenzen - 5 mg Sulfat/l nicht unterschreiten.

3.2.1.2 Präparation des gelösten Sulfats

Das gelöste Sulfat wird als Bariumsulfat fixiert und getrocknet für die weitere Behandlung aufbewahrt. Eine Veränderung des ³⁴S-Gehaltes im Sulfat wird damit ausgeschlossen. Die einzelnen Präparationsschritte sind:

- in Abhängigkeit vom Sulfatgehalt ein Aliquot oder die gesamte Wasserprobe über 0,45µm-Celluloseacetatfilter filtrieren und eingesetzte Wassermenge bestimmen,
- Filtrat durch Zugabe von Salzsäure auf pH-Wert 3,5-4,0 einstellen und auf 70°C erwärmen, um mitgefälltes Karbonat zu entfernen,
- mit 10-20ml heißer 0,5 M Bariumchloridlösung versetzen und 3-4 Stunden bei ca. 70°C stehen lassen,
- Niederschlag über Nacht „altern“ lassen, überstehende wässrige Phase dekantieren und ein Aliquot durch Zugabe von Bariumchloridlösung auf Vollständigkeit der Fällung prüfen,
- Niederschlag über Blaubandfilter vollständig von der wässrigen Phase trennen. Bariumsulfat absorbiert leicht andere Ionen (Fe- und Mn-Hydroxid-Ionen in hoher

Konzentration). Probe sorgfältig neutral (und chloridfrei) waschen. Trocknung im Trockenschrank bei 105°C,

- Veraschung des Filters mit der Probe (Blauband-Filter, Ø 125 mm) durch Erwärmen für 2 Stunden auf 800°C in einem vorher bei 1000°C ausgeglühten Porzellantiegel (Leergewicht bestimmen),
- Sulfatprobe wägen und homogenisieren; Probe in einem Exsikkator oder Trockenschrank aufbewahren,
- zur Kontrolle Ausbeute bestimmen:
 - SO_4^{2-} (mg/l) = $m \cdot 411,6 / V$
 - m = Auswaage an BaSO_4 in mg
 - V = angewandtes Probenvolumen in ml

3.2.1.3 Umsetzung von Sulfiden

Bei ausreichender Konzentration kann auch das Sulfid untersucht werden. Es findet sich im abfiltrierten Rückstand vor der Probenaufbereitung zur Sulfatanalyse. Der Niederschlag wird in einer separaten Destillationsapparatur mit 3n HCl zu Schwefelwasserstoff umgesetzt. Der entstehende Schwefelwasserstoff wird in AgNO_3 -Lösung als Ag_2S fixiert. Dieser Niederschlag wird gewaschen, getrocknet und für die ^{34}S -Analyse aufbewahrt.

3.2.1.4 Bestimmung des $^{34}\text{S}/^{32}\text{S}$ -Verhältnisses

Die Messung des $^{34}\text{S}/^{32}\text{S}$ -Verhältnisses erfolgt am SO_2 on line in einem Isotope Ratio-Massenspektrometer-Gerätesystem (IRMS) mit Continuous Flow-Technik (GIESEMANN *u.a.*, 1994). Das Bariumsulfat wird katalytisch unter Zudosierung von Sauerstoff bei 1020°C in einem Quarzreaktor eines Carlo-Erba-Elementanalysators zu SO_2 umgesetzt und im He-Strom der Ionenquelle des IRMS zugeführt. Außer Bariumsulfat wird auch Silbersulfid als Messsubstanz eingesetzt, wobei die Umsetzung in gleicher Weise erfolgt. Je Analyse (Doppelbestimmung) sind abhängig von der Geräteempfindlichkeit des IRMS-Systems jeweils etwa 350µg BaSO_4 bzw. 250µg Ag_2S erforderlich.

Die Messung der Einzelproben wird durch Labor- und internationale Standards kontrolliert. Die S-Isotopenanalysen werden als $\delta^{34}\text{S}$ -Werte auf den internationalen Referenzstandard VCDT (Vienna Canyon Diabolo Troylite) bezogen. Die Standardabweichung des Analyseergebnisses liegt bei dem beschriebenen Analysenverfahren bei $\pm 0,3\%$.

3.2.1.5 $\delta^{18}\text{O}$ -Bestimmung am gelösten Sulfat

Das $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ -Verhältnis im Sulfat wird am CO durch Umsetzung des Sulfat-Sauerstoffs mit Kohlenstoff bei 1450°C in einem Carbondglass-Keramik-Reaktor unter katalytischem Zusatz von Nickel on line gemessen (KORNEXL *u.a.*, 1999). Helium wirkt als Trägergas zur Überführung des Reaktionsgas CO in die Ionenquelle des IRMS. Die Einwaage beträgt ebenfalls etwa 350µg BaSO₄.

Die Messung der Sulfatproben (Doppelbestimmung) wird durch ein CO-Referenzgas und Standardproben kontrolliert. Die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte werden auf den internationalen Referenzwert von VSMOW (Vienna Standard Mean Ocean Water) bezogen. Die Standardabweichung des Analysenergebnisses liegt bei dem beschriebenen Analysenverfahren bei $\pm 0,5\%$.

3.2.2 Isotopenbestimmung am gelösten anorganischen Kohlenstoff (DIC)

Die Isotopenbestimmung des DIC wird am gefällten Bariumkarbonat durchgeführt. Die Fällung des Karbonats erfolgt unverzüglich nach der Grundwasserprobenahme. Dazu werden in Abhängigkeit vom gemessenen m-Wert etwa 0,5 (m-Wert > 0,5mmol/l) bis 1,0l (m-Wert 0,2...0,5mmol/l) Grundwasser abgefüllt. Die Abfüllung erfolgt so, dass in den Probengefäßen ein Restvolumen von etwa 30ml (bei 0,5l Probe) bis 60ml (bei 1l Probe) verbleibt. Dieses Restvolumen muss augenblicklich nach der Probenahme mit gesättigter Bariumhydroxidlösung aufgefüllt werden. Der hohe pH-Wert der Ba(OH)₂-Lösung bewirkt eine Erhöhung des pH-Wertes der Probe und damit eine Überführung sämtlicher gelöster anorganischer Kohlenstoffspezies in gelöstes Karbonat. Diese CO₃²⁻ wird mit Ba²⁺ zu schwer löslichem BaCO₃ gefällt.

Die Abtrennung des gefällten Karbonats erfolgt im Labor durch Filtration. Nach dem Trocknen und Homogenisieren werden etwa 15mg des Karbonats in ein Reaktionsgefäß (Zweibein) eingewogen. Nachdem der verbleibende freie Schenkel des Zweibeins mit wasserfreier Phosphorsäure befüllt wurde, wird das Glasgefäß evakuiert und anschließend etwa 30min auf 50°C temperiert. Durch Schwenken des Zweibeines wird die Probe mit der Phosphorsäure vermischt und das CO₂ freigesetzt. Ist die Reaktion beendet (keine Gasentwicklung mehr erkennbar), wird das Zweibein an eine Vakuumapparatur angeschlossen, in der das entstandene CO₂ durch Umfrieren gereinigt und in Messröhrchen abgefüllt wird.

Das gereinigte Messgas wird über einen Multiport ins Massenspektrometer (IRMS delta S) überführt und isotopisch gemessen. Das Messverfahren basiert auf einem *Dual-Inlet*-Prinzip, bei dem Probengas und Arbeitsstandardgas abwechselnd ins Massenspektrometer eingeleitet

werden und ein mehrfacher Vergleich der $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ -Verhältnisse der Probe und des Arbeitsstandards erfolgt. Die Ausgabe des Messwertes erfolgt nach Berechnung der relativen Abweichung ($\delta^{13}\text{C}$) vom international festgelegten Standard VPDB (Vienna Pee Dee Belemnite). Der Messfehler beträgt 0,05‰.

3.2.3 Bestimmung der isotopischen Zusammensetzung des gelösten Nitrats

Für die in diesem Projekt untersuchten Nitratproben kam ausschließlich die Silbernitratmethode zum Einsatz, die im Folgenden beschrieben wird.

Da oftmals relativ geringe Nitratkonzentrationen vorliegen und somit große Wassermengen benötigt werden, macht es sich vor Beginn der Präparation erforderlich, das Probenvolumen einzuengen. Dies erfolgt durch die Nitratanreicherung in einer Anionenaustauschersäule. Das fixierte Nitrat wird mittels 3M HCl von der Austauschersäule extrahiert. Die salzsaure Lösung wird mit Silberoxid neutralisiert, wobei überschüssiges Chlorid als AgCl gefällt wird. Eventuell vorhandene weitere Anionen, die insbesondere bei der $\delta^{18}\text{O}$ -Messung stören können (Sulfat, Phosphat), werden durch die Zugabe von BaCl₂-Lösung ausgefällt. Das nach der Abtrennung der Niederschläge verbleibende Filtrat wird zur Entfernung des überschüssigen Ba²⁺ über eine Kationenaustauschersäule gegeben. Die durch diesen Schritt entstehende saure Nitratlösung wird erneut durch Ag₂O neutralisiert. Das nach Filtration, Gefriertrocknung und Homogenisierung vorliegende Silbernitrat wird dann sowohl zu $\delta^{15}\text{N}$ - als auch zur $\delta^{18}\text{O}$ -Bestimmung verwendet.

Die $\delta^{18}\text{O}$ -Bestimmung erfolgt am Messgas CO₂. Das Messgas entsteht durch Reaktion des AgNO₃ mit Graphit bei 820°C in einem evakuierten Quarzröhrchen. Nach kryogener Reinigung des Messgases wird es ins Massenspektrometer (IRMS delta S) überführt und dort nach dem *Dual-Inlet*-Prinzip isotopisch analysiert (vgl. Abschnitt 3.2.2). Die $\delta^{18}\text{O}$ -Messwerte werden auf den Standard VSMOW bezogen.

Die Messung der $\delta^{15}\text{N}$ -Werte wird online im *continuous-flow*-Verfahren an einem Massenspektrometer vom Typ delta C durchgeführt. Als Messgas dient in einem Elementaranalysator erzeugtes N₂. Die $\delta^{15}\text{N}$ -Werte werden auf den Standard AIR bezogen.

Während bei der $\delta^{18}\text{O}$ -Bestimmung des gelösten Nitrats ist ein Messfehler von 0,5‰ zugrunde zu legen ist, beträgt er bei der $\delta^{15}\text{N}$ -Bestimmung 0,2‰.

3.2.4 Bestimmung der isotopischen Zusammensetzung des Wassers

3.2.4.1 $\delta^{18}\text{O}$ -Werte

Die Bestimmung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte erfolgt anhand der Equilibrierungsmethode. Bei dieser Methode werden parallel 48 Wässer (20 Doppelbestimmungen + 8 Standards) in jeweils geschlossenen Systemen mit einem CO_2 ins isotopische Gleichgewicht gebracht. Dazu werden die Proben (4ml) etwa vier Stunden bei konstanter Temperatur geschüttelt. Der pH-Wert des Wassers liegt dabei bei etwa 6.5. Nach der Gleichgewichtseinstellung wird das CO_2 aus jedem System einzeln abgezogen und ins Massenspektrometer überführt. Die Analyse des Messgases erfolgt wiederum mit dem *Dual-Inlet*-Verfahren, der $\delta^{18}\text{O}$ -Wert, der einen Messfehler von 0,1‰ aufweist, wird auf den Standard VSMOW bezogen.

3.2.4.2 δD -Werte

Für die Deuterium-Bestimmung wird ein *online*-Verfahren verwendet, bei dem ein so genanntes H-Device zum Einsatz kommt. Die Wasserprobe (0,5 μl) wird dazu bei einer Temperatur von 800°C durch ein Septum in einen mit granularem Chrom bestückten Ofen injiziert und dort zu H_2 reduziert. Das Messgas H_2 wird unmittelbar nach der Reaktion in das Massenspektrometer (IRMS delta S) eingeleitet und dann nach dem *Dual-Inlet*-Verfahren isotopisch analysiert. Der δD -Wert wird relativ zum Standard VSMOW angegeben. Der Messfehler beträgt 0,8‰.

3.2.4.3 Bestimmung der Tritiumgehalte

Ca 300g Probenwasser werden unter N_2 -Atmosphäre destilliert. Jeweils 250g des Destillats werden zusammen mit 1,25g Na_2O_2 in spezielle Elektrolysezellen gegeben und im Batchprozess elektrolytisch zersetzt. Bei diesem Prozess reichern sich die schweren Isotope des Wasserstoffs (Tritium und Deuterium) im Rückstand an. Je nach Endvolumen (Größe des Rückstandes in der Zelle, ca. 13g) wird bei Tritium eine Aufkonzentrierung (Anreicherung) um etwa das 15-fache erreicht. Der Rückstand wird anschließend zur Rückgewinnung des im NaOH gebundenen Wassers mit PbCl_2 versetzt und soweit möglich bis zur Trockene destilliert. 9g so gewonnenes Wasser werden mit 10ml Ultima Gold gemischt und in einem Flüssigkeitsszintillationsspektrometer vom Typ Quantulus 1220 radiometrisch gemessen. Die Messzeit beträgt standardmäßig 1000 min. Die experimentell bestimmte Nachweisgrenze liegt bei 0,3 TU. Die Kalibrierung der Zählzelle erfolgt mittels einer zertifizierten

Standardlösung SRM 4361C des amerikanischen National Institute of Standards und Technology (NIST).

3.2.5 ^3He , ^{85}Kr und FCKW-Messungen

Bei diesen Tracern wurden nur die Probenahmen durch das UFZ durchgeführt, wobei auf die Technologien und z.T. das Gefäßmaterial der jeweiligen Messlabors zurückgegriffen wurde.

Zur Entnahme von Proben für die ^3He -Messung (Universität Heidelberg) wurde der Förderstrom einer Druckpumpe (Grundfos MP1, dickwandige Schlauchleitung) durch spezielle Weichkupferrohre geleitet. Nach ausreichendem Spülen und Vermindern des Pumpenstroms wurde zunächst das pumpenfernere und danach das pumpennahe Rohrende durch Abquetschen mittels Spezialschneiden verschlossen (Doppelproben).

Die Proben für die **FCKW- und SF_6** -Messungen (Spurenstofflabor Dr. Oster, Wachenheim, vergl. auch OSTER, 1994) wurden in Glasschliffstopfenflaschen (ca. 0,6 l) abgefüllt. Eine entsprechende Glasflasche wird dazu in eine verschließbare Blechdose und beides in einen Eimer gestellt. Per Schlauch (gut durchspült) wird Wasser in die Glasflasche geleitet bis es Dose und Eimer überflutet. Unter Wasser werden dann Glasflasche und Dose nacheinander separat verschlossen. Gefördert wurde meist mittels MP1 und PVC-Schlauchleitung und in zwei Fällen mittels einer batteriebetriebenen Druckpumpe vom Typ Komet (Fa. Vesper).

Für die ^{85}Kr -Analytik wurde eine Gasextraktion im Gelände durchgeführt. Hierzu wurde eine vom Physikalischen Institut der Universität Bern entwickelte Apparatur eingesetzt. Das per MP1 und Schlauchleitung gehobene Wasser wird in einen evakuierten Behälter versprüht, in dem per Absaugpumpe und Steuerung des Abflussregimes ein definierter Füllstandsbereich gehalten wird. Mittels der Vakuumpumpe und eines nachgeschalteten Kompressors wird das sich im oberen Teil des Behälters sammelnde Gas abgepumpt und in eine evakuierte 10l-Stahlflasche (N_2 -Flasche der Fa. Air Liquide) überführt. Je Probe wurden auf diese Weise sicherheitshalber 30...40 l Gas aus rund 1000 Liter Wasser gesammelt, was im Normalfall für mehr als eine Messung ausreicht. Spezielle Tests vor jeder Probennahme sind erforderlich, um eine Kontamination des Messgases mit Luft im Falle etwaiger Leckagen im Unterdrucksystem zu vermeiden bzw. auf ein vertretbares Maß zu beschränken. Die weitere Bearbeitung der Proben in Bern schloss eine Abnahme einer kleinen Probe zur Analyse der im Gas befindlichen Hauptkomponenten (Hydroisotop GmbH, Schweitenkirchen), die Abtrennung und Mengenmessung des Kryptons und die Langzeitmessung der ^{85}Kr -Aktivität in Kleinstzählrohren ein.

3.2.6 Präparation des Bodenschwefels für die Isotopenanalyse

Schwefelverbindungen in Böden sind schon seit über einem halben Jahrhundert Gegenstand intensiver Untersuchungen. Dementsprechend breit ist das Angebot an Fachliteratur, in der Verfahren und Techniken zur chemischen und isotopischen Schwefelpräparation in Böden beschrieben werden. Im Folgenden sind die Fachtexte genannt, die in die Recherche zur Verfahrensauswahl im laufenden Projekt einbezogen wurden. Dabei handelt es sich um die Arbeiten von DAVID *u.a.* (1989), FISCHER (1989), HALL *u.a.* (1988), JOHNSON und NISHITA (1952), KILMER und NEARPASS (1960), KNIEF (1998), KROUSE und TABATABAI (1986), MAYER (1993), MAYNARD *u.a.* (1987), NRIAGU und SOON (1985), ROLLAND *u.a.* (1991), SCHOENAU und BETTANY (1988), SCHOENAU und BETTANY (1989), TABATABAI und BREMNER (1970a), TABATABAI und BREMNER (1970b), TABATABAI (1982) sowie WESTGATE und ANDERSON (1982).

3.2.6.1 Probengewinnung

Die Gewinnung von Boden- und Sedimentproben für die Schwefelisotopenanalyse erfolgte meistens im Zusammenhang mit Rammkernsondierungen und Tiefbohrungen. Die Konservierung des Probenmaterials richtet sich nach den Redoxverhältnissen, aus denen der Boden oder das Sediment entnommen wurden und nach der jeweiligen Fragestellung, der mit der Isotopenbestimmung nachgegangen werden soll.

Das Abfüllen der Probe sollte in dicht verschließbare Kunststoffgefäße (Beutel oder Becher) erfolgen. In jedem Fall empfiehlt sich eine Probenlagerung bei Temperaturen, die gleich oder niedriger als die Bodentemperatur zum Zeitpunkt der Probenahme sind.

Für die Bestimmung des $\delta^{34}\text{S}$ -Wertes des Gesamtschwefels ist keine weitere Konservierung notwendig, da bei möglichen Schwefeltransformationen nach der Probenahme zwar die Isotopenwerte der einzelnen Schwefelspezies verändert werden können, der Wert des Gesamtschwefels aber konstant bleibt. Ebenso wenig ist eine Konservierung bei Proben erforderlich, die aus einem Sauerstoff gesättigten Bereich entstammen. Mögliche Transformationen durch den Zutritt von Luftsauerstoff sind bereits vor der Probenahme erfolgt.

Bei Boden- oder Sedimentproben aus einem reduzierten Milieu ist es aber unerlässlich den Kontakt des Materials mit Luftsauerstoff zu verhindern, um isotopenrelevante Oxidationsreaktionen auszuschließen. Dies wird durch eine unmittelbare Begasung des Probenmaterials mit Inertgasen wie Stickstoff oder Argon erreicht. Darüber hinaus minimiert man die Gefahr von Sekundärreaktionen durch eine tiefgekühlte Lagerung.

3.2.6.2 Präparation des anorganischen Bodensulfats

Die Gewinnung des anorganischen Sulfats wurde mittels Elution durchgeführt. Zur Erfassung des wasserlöslichen Sulfats kam als Elutionsmittel deionisiertes Wasser zum Einsatz. Die Extraktion wurde im Überkopfschüttler vorgenommen, wobei 150g getrocknete Feinerde (<2mm) mit 700ml Elutionsmittel für 18h intensiv geschüttelt wurden.

Die Abtrennung des Eluats erfolgte durch Zentrifugieren und Membranfiltration. Anschließend wurde das gelöste Sulfat auf Anionenaustauschersäulen gesammelt und nach der Remobilisierung als BaSO₄ gefällt (siehe Abschnitt 3.2.1.2).

Die ionenchromatografische Reinigung der Lösung war notwendig, da das Eluat gelöste Huminstoffe und im Falle der Phosphatextraktion auch Phosphat enthielt. Sowohl Huminstoffe als auch Phosphat verunreinigen das für die massenspektrometrische Messung verwendete BaSO₄. Insbesondere die $\delta^{18}\text{O}$ -Messung des Sulfats wird erheblich durch die Gegenwart anderer Sauerstoff führender Komponenten beeinträchtigt.

3.2.6.3 Präparation des anorganischen reduzierten Schwefels

Bodenproben für die Bestimmung des sulfidischen Schwefels müssen ständig unter einer Stickstoffatmosphäre gelagert werden, um eine Rückoxidation bei der Belüftung zu verhindern.

Zur Gewinnung des Monosulfidschwefels wurde die Probe in einem geeigneten Reaktionsgefäß (Abbildung 18) unter Stickstoff mit 6M HCl erwärmt. Das freigesetzte H₂S wurde mit dem Stickstoffstrom in eine mit Zn-Acetat-Lösung gefüllte Vorlagenflasche geleitet und dort als ZnS gefällt. Nach Abschluss der Reaktion wurde das ZnS zu Ag₂S umgefällt, an dem dann direkt der $\delta^{34}\text{S}$ -Wert am Massenspektrometer gemessen werden konnte.

Zur Bestimmung des Disulfidschwefels wurde die monosulfidfreie Probe im Reaktionsgefäß (Abbildung 18) unter einer Stickstoffatmosphäre belassen und mit einer elektrochemisch aus CrCl₃ hergestellten CrCl₂-Lösung 2h unter Wärmezufuhr zur Reaktion gebracht. Das entstehende H₂S wurde mit dem Stickstoffstrom in eine neue Vorlagenflasche überführt. Das aus dem gefällten ZnS hergestellte Ag₂S konnte wiederum direkt am Massenspektrometer gemessen werden.

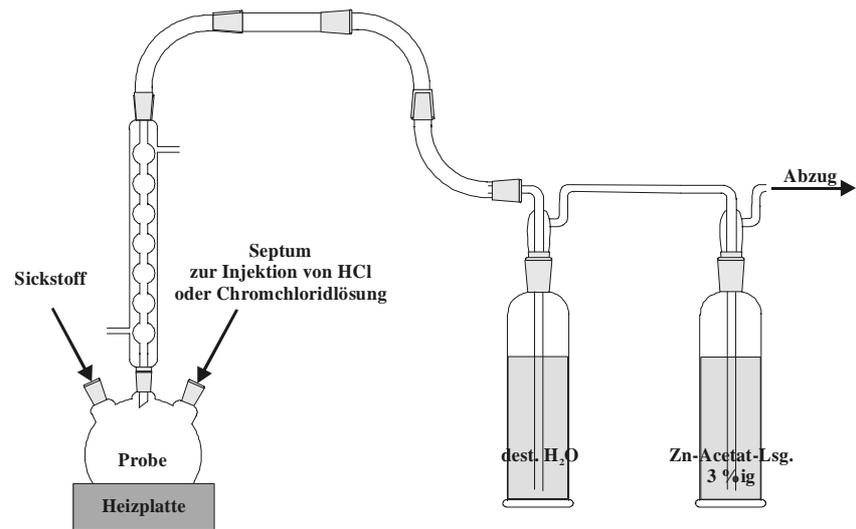


Abbildung 1: Apparatur zur Extraktion von Mono- und Disulfiden aus Boden- und Sedimentproben

4 Ergebnisse der Untersuchungen im Trinkwassereinzugsgebiet Torgau-Mockritz

4.2 Experimentelle Untersuchungsprogramme und Datengrundlage

Die isotopenanalytischen Untersuchungen und sonstigen Aktivitäten des Teilprojektes in Mockritz gliedern sich wie folgt

Grundwasser

- Beteiligung an der umfangreichen Stichtagsbeprobung April 2000 und weiterer Aktionen zur Gewinnung eines Überblicks über die Sulfatverhältnisse im UG, Durchführung aller isotopenspezifischen Probenahmen, Beteiligung an der Einrichtung von Ergänzungsmessstellen insbesondere mittels Rammkerntechnik.
- $\delta^{34}\text{S}$ (Sulfat)-Messungen im Rahmen der Übersichtsbeprobung, der Ergänzung durch ostelbische GWBR an 256 Messpunkten insgesamt, wiederholte Beprobung ausgewählter Messstellen unter besonderer Berücksichtigung des Gütemessnetzes des Wasserwerkes sowie eines ausgewählten Zuflussesektors, Teilnahme an einem Bewirtschaftungsversuch (Studium des Einflusses variierender Grundwasserabsenkung in einem brunnennahen Profil), $\delta^{18}\text{O}$ (Sulfat) an 138 Messpunkten
- $\delta^{13}\text{C}$ -Messungen des anorganischen Kohlenstoffs an allen Messstellen des Gütemessnetzes (zweimal) und des ausgewählten Zuflussesektors (Messprofil) (jeweils einmal), insgesamt 229 Proben
- $\delta^{15}\text{N}$ -, $\delta^{18}\text{O}$ -Messung am gelösten Nitrat an allen gewonnenen Grundwasserproben aus verschiedenen Beprobungskampagnen, die eine ausreichend hohe Nitratkonzentration aufwiesen (>15mg/l), insgesamt 138 Proben.
- Paralleluntersuchungen mittels δD und/oder $\delta^{18}\text{O}$ an den meisten durch UFZ entnommenen Grundwasserproben, Einjahresmessreihe zur Variation in der Weinske, Untersuchung von Standgewässern
- Untersuchungen zur Grundwasserverweilzeit mit natürlichen Radionukliden (Tritiummessungen an über 100 Messpunkten, Ergänzungsuntersuchungen mittels ^3He an 15 Meßpunkten, ^{85}Kr Probenahmen an 7 Messpunkten)
- Orientierende Untersuchungen im Hinblick auf Grundwasserverweilzeiten mittels FCKW (32 Messpunkte) und SF_6

Potentielle Sulfatquellen

- Entnahme und Konservierung von Probenmaterial aus Bohrprofilen (24 Sondierungen, 3 Tiefbohrungen, insgesamt 152 Proben für SO₄-anorg, insgesamt 60 Proben für Sulfid) für die S-Isotopenanalyse. Vor-Ort-Aufarbeitung von Boden- und Sedimentproben für die getrennte Erfassung von Monosulfid- und Disulfidschwefel.
- Isotopenuntersuchungen an durch die WASAG verkippten Gipsen (nördliche Sulfatzone) sowie an deponierten Schlämmen aus der Wasseraufbereitung östlich Mockritz I
- Charakterisierung aktueller sulfathaltiger Düngemittel
- Untersuchungen zur Variation von $\delta^{34}\text{S}$ in Lysimeterabläufen in Abhängigkeit von Bodenart und Düngung (Kooperation mit UFZ Lysimeterstation Falkenberg)
- Sammlung und isotopische Analyse der atmosphärischen Schwefeldeposition an den Standorten Leipzig, Melpitz und Falkenberg

4.2 Isotopische Zusammensetzung von Schwefelquellen im Untersuchungsgebiet Mockritz

Die essentielle Basis für die Beschreibung des Schwefelkreislaufes im Untersuchungsgebiet anhand von Isotopenuntersuchungen ist die genaue Kenntnis über die isotopische Zusammensetzung und die regionale Relevanz der vorliegenden Sulfatquellen. Prinzipiell ist im Mockritzer Gebiet zwischen geogenen und anthropogenen Sulfatquellen zu unterscheiden. Sedimentäre Sulfide in tieferen Bereichen der Aquifersedimente stellen im Wesentlichen die einzige relevante geogene Schwefelquelle des Trinkwassereinzugsgebietes dar. Ihre isotopische Zusammensetzung ist weiter unten bei der Beschreibung der Bodenschwefelspezies ausführlich dargestellt. Bei den anthropogenen Einträgen sind diffuse und punktuelle Quellen zu unterscheiden. Zu den wesentlichen diffusen Einträgen gehören die atmosphärische Schwefeldeposition und die Düngung mit sulfathaltigen Mineraldüngern. Punktuelle Einträge sind insbesondere im unmittelbaren Umfeld von Altstandorten, Altablagerungen und Deponien zu erwarten.

4.2.1 Isotopische Zusammensetzung der atmosphärischen Schwefeldeposition

Die Relevanz der atmosphärischen Schwefeldeposition als Sulfatquelle im Untersuchungsgebiet Mockritz ist zeitlich stark differenziert zu bewerten. Untersuchungen durch den Verbundprojektpartner UFZ-Bodenforschung haben ergeben, dass bis etwa 1989 die Depositionsraten höher als 160kg/ha/a lagen. Nach 1989 ging die Deposition aufgrund von verringerten S-Emissionsraten kontinuierlich zurück, um sich ab 1996 auf einen stabilen Wert von etwa 10kg/ha/a einzupendeln. Der Schwefelentzug durch die Vegetation kann nach BLOEM (1998) bis 40 kg/ha/a betragen, so dass zum jetzigen Zeitpunkt ein negativer S-Saldo vorliegt, das heißt, dem Boden mehr Schwefel durch die landwirtschaftliche Nutzung entzogen wird, als durch atmosphärischen Eintrag zurückkommt. Vor 1989 bestand aber im Boden ein erheblicher S-Überschuss, der zum Teil direkt mit dem Sickerwasser ins Grundwasser verlagert wurde, mehrheitlich aber in verschiedenen Formen im Boden zwischengespeichert wurde.

Die Untersuchung der isotopischen Zusammensetzung der atmosphärischen Schwefeldeposition konnte im Rahmen dieses Projektes nur an den rezenten Einträgen erfolgen. Zu diesem Zweck wurde an drei verschiedenen Standorten, Leipzig, Falkenberg und dem wenige Kilometer westlich des Untersuchungsgebietes gelegenen Melpitz, die Schwefeldeposition gesammelt und isotopisch analysiert. Generell zeigte sich, dass weder zwischen den Messstandorten noch zwischen den verschiedenen Depositionsformen (Gesamtdeposition,

Nassdeposition) signifikante isotopische Unterschiede bestehen. Eine Übersicht der ermittelten Isotopenwerte ist in Tabelle 4 dargestellt.

Tabelle 4: Mittelwerte und Standardabweichungen für die isotopische Zusammensetzung von verschiedenen Formen der atmosphärischen Schwefeldeposition an drei Standorten in Mittel- und Norddeutschland

Messstation:	Falkenberg	Leipzig	Melpitz
$\delta^{34}\text{S-Mittel}_{\text{nass}}$ (‰ VCDT)	+4,4	+4,0	+4,6
Standardabweichung	±1,3	±1,5	±2,6
$\delta^{34}\text{S-Mittel}_{\text{gesamt}}$ (‰ VCDT)	+4,3		
Standardabweichung	±1,1		
$\delta^{18}\text{O-Mittel}_{\text{nass}}$ (‰ VSMOW)	+13,4	+13,2	+12,2
Standardabweichung	±3,8	±3,8	±3,7
$\delta^{18}\text{O-Mittel}_{\text{gesamt}}$ (‰ VSMOW)	+11,2		
Standardabweichung	±4,1		

Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der Nassdeposition liegen sehr stabil in einem Bereich zwischen +4 und +5‰ (VCDT). Auch die Werte für die Gesamtdeposition, die nur an der Station in Falkenberg bestimmt wurden, weisen eine ähnliche Größe auf. Bei den $\delta^{18}\text{O}$ -Werten lässt sich ein isotopischer Bereich zwischen +11 und +13,5‰ erkennen. Die Werte für die Gesamtdeposition in Falkenberg sind geringfügig leichter, als die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte für die Nassdeposition an allen Standorten. Allerdings ist dieser Unterschied aufgrund der großen Standardabweichungen nicht signifikant.

Die zeitlichen Verläufe sowohl der $\delta^{34}\text{S}$ - als auch der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der atmosphärischen Nassdeposition an der Messstation Leipzig sind in Abbildung 19 gezeigt. Bei keiner der beiden Isotopensignaturen lässt sich ein ausgeprägter Jahresgang erkennen. Insgesamt weisen aber die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte eine wesentlich größere Variationsbreite auf. Der im Untersuchungszeitraum beobachtete Schwankungsbereich der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte liegt zwischen -1 und +8‰, der für die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte zwischen +5 und +18‰.

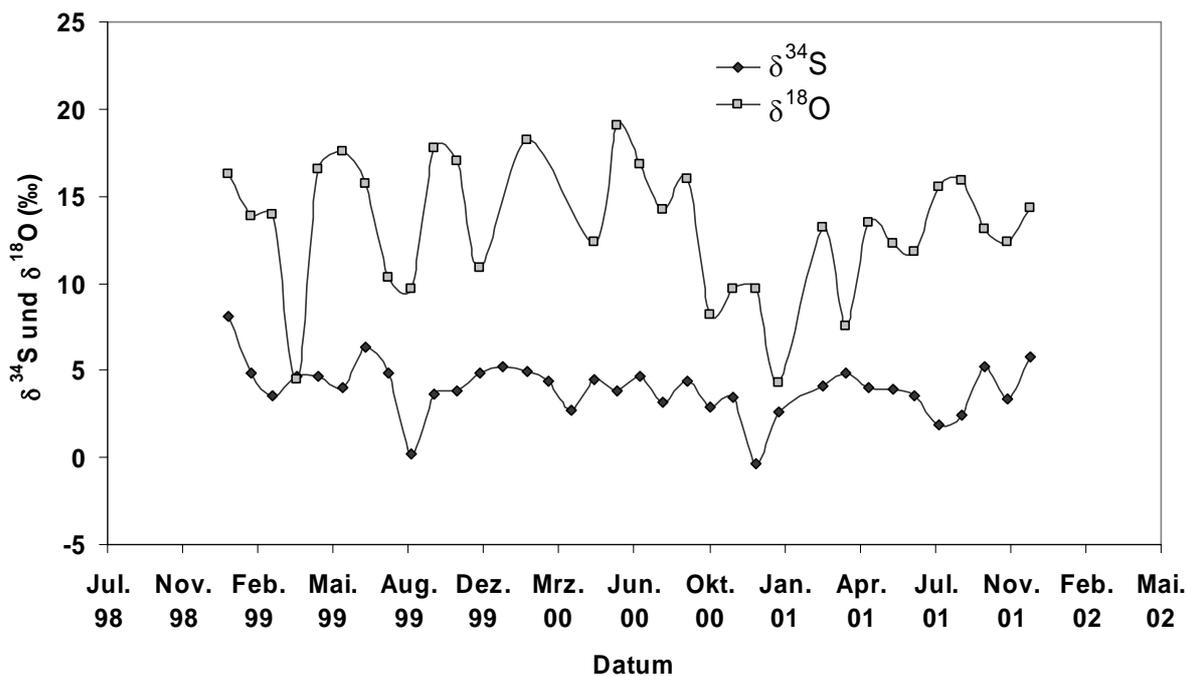


Abbildung 19: Zeitlicher Verlauf der isotopischen Zusammensetzung der atmosphärischen Schwefeldeposition (Nassdeposition) an der Messstation Leipzig

Die Ermittlung der Isotopenwerte der historischen atmosphärischen Deposition gestaltet sich sehr schwierig, da keine direkten Messdaten vorliegen. Die Beschaffenheit der Gesamtdeposition (unterschiedliche Anteile von Trocken- und Nassdeposition) kann erheblichen Einfluss auf ihre isotopische Zusammensetzung haben. Während heute ein Verhältnis Gesamtdeposition/Nassdeposition von etwa 1,1 vorliegt (GAUGER u.a. 2000), d.h. die Gesamtdeposition besteht fast ausschließlich aus Nassdeposition, haben Untersuchungen durch den Verbundprojektspartner UFZ-Bodenforschung am Standort Falkenberg ergeben, dass vor 1990 ein mittleres Verhältnis von 3,3 vorlag. Damit lag der Anteil der trockenen Deposition an der Gesamtdeposition bei etwa 70%. Die Trockendeposition steht in engem Zusammenhang mit der Verbrennung fossiler Rohstoffe (Hausbrand, Kraftwerke), insbesondere Braunkohle. Da die Freisetzung von Schwefelverbindungen bei der Kohleverbrennung von nur geringfügigen isotopischen Fraktionierungen begleitet ist, kann man davon ausgehen, dass die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der historischen Trockendeposition im gleichen Bereich liegen wie die der Ausgangskohle. Die für das Untersuchungsgebiet relevante Braunkohle stammt zu großen Teilen aus dem Mitteldeutschen Braunkohlerevier. HAHNE (1982) ermittelte für den Gesamtschwefel in Braunkohlen aus dem Bornaer Hauptflöz, dem Böhlener Oberflöz und dem Bitterfelder Flöz $\delta^{34}\text{S}$ -Werte zwischen +4,7 und +11,9‰. Diese Werte sind isotopisch positiver als die der rezenten Nassdeposition. Daher ist zu vermuten,

dass die historische atmosphärische Schwefeldeposition im Untersuchungsgebiet aufgrund des größeren Anteils an Trockendeposition geringfügig höhere $\delta^{34}\text{S}$ -Werte aufwies als die rezente Deposition.

Für die Abschätzung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der historischen Deposition gibt es keine Möglichkeit der Bezugnahme auf die Ausgangsmaterialien der Verbrennung. Allerdings wird die isotopische Zusammensetzung des Sulfatsauerstoffs in der atmosphärischen Deposition maßgeblich durch die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des atmosphärischen Wasserdampfs kontrolliert. Da eine signifikante Änderung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Wasserdampfes in den letzten Jahrzehnten auszuschließen ist, kann davon ausgegangen werden, dass die Sauerstoffisotopenwerte der historischen Schwefeldeposition den heute gemessenen entsprechen.

Aus der Auswertung der eigenen Messdaten, der Einbeziehung von Literaturdaten und der Einschätzung der historischen Deposition können für die den atmosphärischen Schwefeleintrag der letzten Jahrzehnte in das Untersuchungsgebiet Mockritz $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von -1 bis +10‰ (VCDT) und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte von +6 bis +18‰ (VSMOW) angenommen werden.

4.2.2 Isotopische Zusammensetzung sulfathaltiger Mineraldünger

Schwefelhaltige Düngemittel können in landwirtschaftlich genutzten Wassergewinnungsgebieten eine wesentliche Sulfatquelle für das Grundwasser darstellen. Aus diesem Grund sollte der Frage nachgegangen werden, inwieweit sich die verschiedenen Formen der applizierten Dünger isotopisch definieren und damit von anderen möglichen Sulfatquellen unterscheiden lassen. Genau wie beim Eintrag durch atmosphärische Deposition, ist bei der Betrachtung der sulfathaltigen Mineraldünger als Sulfatquelle aufgrund des Speichervermögens der Bodenzone nicht nur die rezente sondern auch die historische Applikation relevant. Aus diesem Grund wurden neben der Untersuchung einer Reihe von in den letzten Jahren angewendeten Düngern auch Literaturdaten ausgewertet, die sich auf Düngemittel beziehen, die in den vorangegangenen Jahrzehnten zur Anwendung kamen.

Eine Übersicht der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von sulfathaltigen Mineraldüngern liefert Tabelle 5.

Generell variieren die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der sulfathaltigen Mineraldünger in einem relative großen Bereich zwischen -1 und +12‰ (VCDT). Die einzige Ausnahme bildet der seit Mitte der 90iger Jahre auf dem Markt befindliche Dünger HydroSulfan mit einem $\delta^{34}\text{S}$ -Wert von +22‰. Die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte sind hingegen weit weniger variabel. Sie bewegen sich für alle sulfathaltigen Mineraldünger zwischen +10 und +15‰ (VSMOW).

Tabelle 5: $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von rezent und historisch in Deutschland eingesetzten Düngemitteln

Daten nach MALLÉN (2000)			Daten aus eigenen Untersuchungen		
Düngemittel	Jahr	$\delta^{34}\text{S}$ ‰ VCDT	Düngemittel	Jahr	$\delta^{34}\text{S}$ ‰ VCDT
$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ Gipsverfahren	1938	+10,9	Ferrogranul	1999	+4,4
$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ Gipsverfahren	1988	+11,3	Kieserit	1999	+9,5
$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ gemischt	1985	+8,9	HydroUreaS	1999	+7,1
$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ Sättigungsverfahren	1996	+2,8	Solumas	1999	+10,1
$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ Sättigungsverfahren	1997	-0,8	HydroSulfan	1999	+22,0
Superphosphat	1980	+8,3	K_2SO_4	1999	+5,3
Kalirohsalz	1980	+9,3	Tripel	1999	+12,3
Kamex	1996	+9,8	KAS	1999	+5,0
K 40/50	1996	+9,8	Harnstoff	1999	+0,5
AmSupKa 5-10-16	1996	+4,2	SSA	1999	+5,1
NPK 20-8-8+3	1996	+9,1	SSA fein	1999	+1,5
			SSA grob	1999	+0,2

Oftmals dient der landwirtschaftliche Einsatz sulfathaltiger Düngemittel weniger dem Abbau von eventuell vorhandenen Schwefeldefiziten, vielmehr stellt das Sulfat einen Begleitstoff in den Düngemitteln dar, die die Versorgung der Pflanzen mit den Grundnährstoffen, vor allem mit Stickstoff, gewährleisten sollen. Dieser Umstand verlangt insbesondere Beachtung, da durch den Verbundprojektpartner ZALF-Müncheberg ermittelt wurde, dass zwischen 1977 und 1989 auf einer großen Fläche des Untersuchungsgebietes Mockritz die Stickstoffdüngung zu etwa 1/5 durch Ammoniumsulfat mit einem mittleren Schwefelgehalt von 24% erfolgte. Darüber hinaus kam zur Phosphordüngung eine große Menge Superphosphat mit einem mittleren Schwefelgehalt von 12% zum Einsatz. Durch die Anwendung dieser Düngemittel wurde der durch atmosphärische Deposition verursachte deutlich positive Schwefelsaldo weiter erhöht, so dass es zu einer verstärkten Speicherung von verschiedenen Schwefelspezies in der Bodenzone kam. Vor 1990 kam im Untersuchungsgebiet zum großen Teil Ammoniumsulfat zum Einsatz, welches nach dem Gipsverfahren hergestellt wurde. Daher ist anzunehmen, dass der historische Schwefeleintrag durch Düngung $\delta^{34}\text{S}$ -Werte zwischen +8 und +12‰ aufwies. Seit Ende der 90iger Jahre wurde wieder gezielt Schwefel gedüngt, um den entstandenen negativen Schwefelsaldo im Oberboden zu kompensieren. Dazu wurden vor allem kombinierte Stickstoff/Schwefel-Dünger wie SSA und HydroUreaS verwendet. Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des rezenten Düngemiteleintrages sind demzufolge um 2 bis 5‰ niedriger, als diejenigen im historischen Eintrag durch Mineraldünger.

Neben den mineralischen Düngemitteln können auch organische Dünger (Gülle, Stallmist) zum Einsatz kommen. Allerdings lässt sich aus den Untersuchungsergebnissen von ZALF-Müncheberg schlussfolgern, dass der Schwefeleintrag durch organische Düngung verglichen mit dem Mineraldüngereintrag nur eine geringe Relevanz besitzt.

4.2.2.1 ³⁴S-Signatur des Ablaufs ausgewählter Lysimeter in Falkenberg

Um den Austrag des Schwefels aus der Düngung mit dem Sickerwasser beispielhaft beobachten zu können, wurden ³⁴S-Untersuchung des gelösten Sulfats am Sickerwasserablauf von Lysimetern durchgeführt. Auf dem Gelände des UFZ-Standortes Falkenberg sind verschiedene Lysimeter installiert, die für langjährige Dauerversuche mit unterschiedlichen Bewirtschaftungsstrategien verwendet werden. Dabei handelt es sich um Vollmantellysimeter mit einer Oberfläche von 1m² und einer Tiefe von 1,25m. An einem Teil dieser Lysimeter wurden durch den Projektpartner UFZ- Bodenforschung Düngeversuche mit ausgewählten Schwefeldüngern durchgeführt. Neben den Düngeversuchlysimetern wurden weitere Vergleichslysimeter ohne zusätzliche Schwefeldüngung in die Untersuchung einbezogen. Zur Bewertung des Ausgangszustandes vor Beginn der Düngeversuche mit sulfathaltigen Mineraldüngern wurden die gelösten Sulfate in Sickerwassermischproben (Januar-März 2000) von insgesamt 36 Lysimetern isotopisch untersucht.

Im Einzelnen wurde Sickerwasser aus folgenden Lysimetern gewonnen:

- Lysimeter Bodenartenversuch (24 Lysimeter, Nr. 70...93)
vier Bodenarten (Sand, Lehm, Löß, lehmiger Sand), je zwei verschiedene Bewirtschaftungen (Grünland, Acker), je drei NPK-Düngerstufen (50, 100, 150% der fruchtartenspezifisch empfohlenen Gabemengen)
- Lysimeter Düngeversuch Ackerland (8 Lysimeter, Nr. 37, 40, 45, 48, 53, 54, 100, 101)
Bodenart lehmiger Sand, bis 1996 keine Bewirtschaftung (Dauerbrache), seit 1997 ackerbauliche Bewirtschaftung mit verschiedenen Früchten, ab 2000 Applikation des Schwefeldüngers HydroSulfan
- Lysimeter Düngeversuch Grünland (2 Lysimeter, Nr. 95, 97)
Bodenart lehmiger Sand, seit 1985 differenzierte Grünlandnutzung, ab 2000 Applikation des Schwefeldüngers HydroSulfan
- Lysimeter Dauerbrache (2 Lysimeter, Nr. 104, 105)
Bodenart lehmiger Sand, keine Bewirtschaftung, jährlich ein Pflegeschnitt ohne Abfuhr

Die Sulfatgehalte im Sickerwasser aus diesen Lysimetern und die dazugehörigen $\delta^{34}\text{S}$ -Werte sind in Abbildung 20 dargestellt.

Der Schwankungsbereich der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte aller Sickerwasserproben liegt zwischen +3.5 und +9‰ (CDT). Ein wenig differenziertes Bild zeigt sich bei den Bodenartenlysimetern. Bei diesen Sickerwässern wurden die höchsten $\delta^{34}\text{S}$ -Werte bestimmt. Deutlich niedriger und damit isotopisch klar von den Bodenartenlysimetern unterscheidbar sind $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der Dauerbrache (etwa +4‰). Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der Sickerwässer aus den für den Düngerversuch Ackerland vorgesehenen Lysimetern liegen zwischen den hohen Werte der Bodenarten und den niedrigen Werten der Dauerbrache.

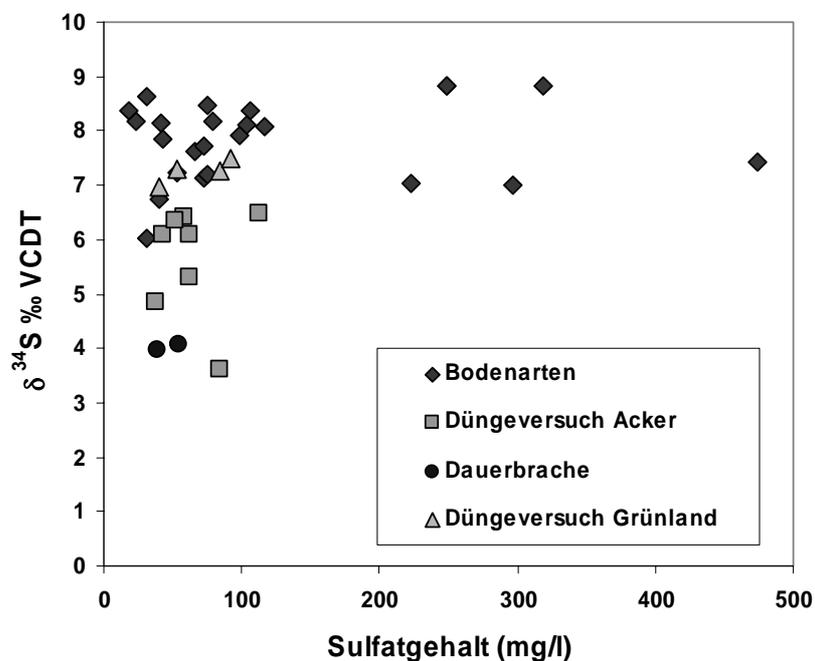


Abbildung 20: Sulfatgehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte in Sickerwasserproben (Januar bis März 2000) aus ausgewählten Lysimetern der Lysimeterstation Falkenberg

Allgemein lässt sich anhand der vorliegenden Daten vermuten, dass eine Bewirtschaftung (d.h. Applikation mineralischer Dünger) generell zu einem Anstieg der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte im Sickerwasser führt. Bei den Lysimetern des Düngerversuches Ackerland ist der Zeitraum der Bewirtschaftung gegenüber den Bodenartenlysimetern vergleichsweise kurz, so dass sich die bei den Bodenarten beobachteten hohen $\delta^{34}\text{S}$ -Werte in den Düngerversuchlysimetern noch nicht einstellen konnten.

Für den Düngeversuch Acker wurden vier verschiedene Mineraldünger verwendet, von denen drei schwefelhaltig und einer praktisch schwefelfrei war (KAS). Bei den drei schwefelhaltigen Mineraldüngern handelte es sich im Einzelnen um Kieserit ($\delta^{34}\text{S}$: +9,5‰), SSA ($\delta^{34}\text{S}$: +5,1‰) und HydroSulfan ($\delta^{34}\text{S}$: +22‰). Die zeitlichen Verläufe der $\delta^{34}\text{S}$ -Entwicklung des Sickerwassersulfats beim Düngeversuch Acker sind in Abbildung 21 dargestellt. Keine zeitliche isotopische Änderung erkennt man bei den Lysimetern, die mit KAS und SSA gedüngt wurden. Dieses Ergebnis war insofern zu erwarten, als dass bei der Verwendung von KAS kein zusätzlicher Schwefeleintrag erfolgt, der das Isotopensignal verändern könnte, und SSA vergleichbare $\delta^{34}\text{S}$ -Werte aufweist, wie das Sickerwassersulfat vor Beginn des Düngeversuchs. Bei den Lysimetern, auf denen Kieserit und HydroSulfan appliziert wurde, war aufgrund der hohen $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der Dünger auch mit einer Erhöhung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des Sickerwassersulfats zu rechnen. Diese Erwartung konnte durch die Versuchsergebnisse bestätigt werden. Aufgrund der stark positiven Isotopensignatur des Düngereintrages wurde der größere Anstieg der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte im Sulfat gegenüber dem Ausgangszustand bei dem HydroSulfan-gedüngten Lysimeter beobachtet.

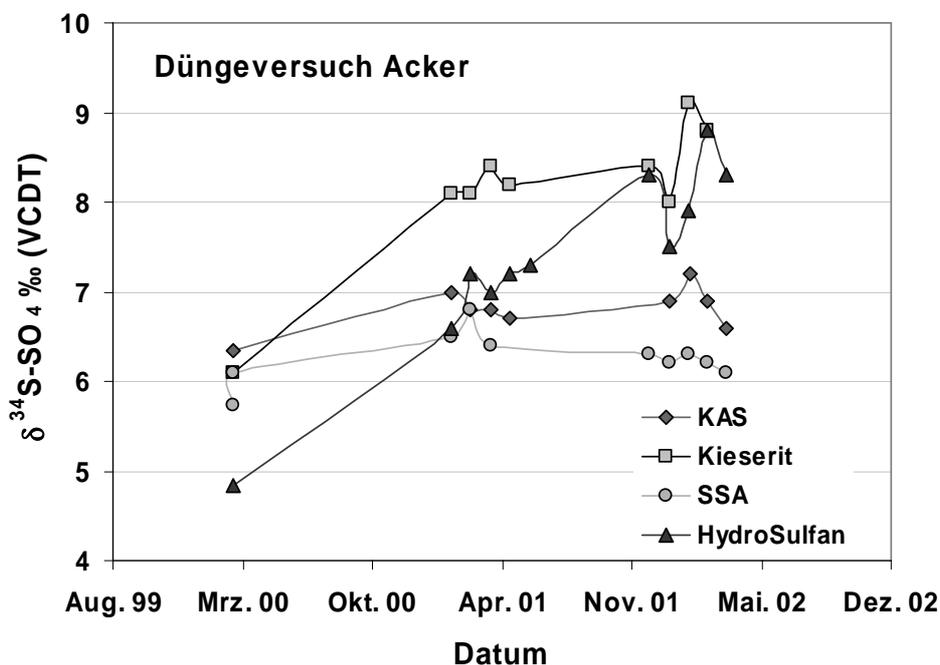


Abbildung 21: Zeitliche Verläufe der isotopischen Schwefelzusammensetzung im Sickerwassersulfat aus Lysimetern der Lysimeterstation Falkenberg, die ackerbaulich bewirtschaftet und mit verschiedenen Mineraldüngern gedüngt wurden

Beim Düngerversuch Grünland wurde nur je ein schwefelfreier (KAS) und schwefelhaltiger Dünger (HydroSulfan) eingesetzt. Die zeitlichen Verläufe der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des Sulfats im Sickerwasserabfluss zeigt Abbildung 22. Genau wie beim Düngerversuch Acker zeigen die mit KAS gedüngten Lysimeter keine zeitlich abhängige signifikante Veränderung der Schwefelisotopensignatur. Ein deutlicher Anstieg der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte ist wiederum bei der Anwendung des isotopisch schweren Düngers HydroSulfan zu erkennen. Allerdings wird der hohe $\delta^{34}\text{S}$ -Ausgangswert des HydroSulfans von +22‰ bei keinem der beiden Düngerversuche im Sickerwasser wieder gefunden.

Die Lysimeter-Düngerversuche haben gezeigt, dass zwar die isotopische Zusammensetzung des Schwefels im Dünger die Isotopie des Sickerwassersulfats signifikant beeinflussen kann, dass aber die Substitution des primären Bodenschwefelinventars durch sekundären Düngereintrag nach zwei Bewirtschaftungsperioden noch nicht abgeschlossen ist. Insbesondere bei Umstellung auf HydroSulfan lassen sich die Erneuerungsprozesse gut verfolgen.

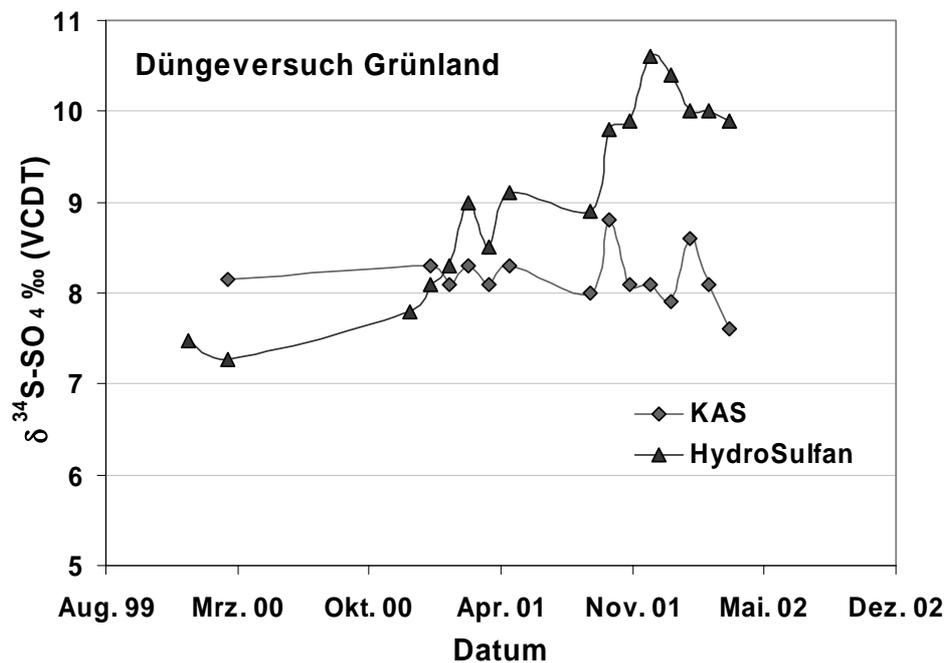


Abbildung 22: Zeitliche Verläufe der isotopischen Schwefelzusammensetzung im Sickerwassersulfat aus Lysimetern der Lysimeterstation Falkenberg mit Grünlandbewirtschaftung, die mit verschiedenen Mineraldüngern gedüngt wurden

4.2.3 Isotopische Zusammensetzung punktueller Sulfatquellen

4.2.3.1 Deponierte Wasseraufbereitungsrückstände am Wasserwerk Mockritz

Im Zuge der Rohwasserveredelung im Wasserwerk Mockritz werden dem geförderten Rohwasser zur Entfernung von Eisen und Mangan je nach den vorliegenden Gehalten variierende Mengen Aluminiumsulfat zugesetzt. Durch Flockung und Sedimentation werden die entstehenden eisenhaltigen Schlämme abgetrennt und anschließend in Deponieteichen unweit des Wasserwerkes abgelagert. Durch den Einsatz von Aluminiumsulfat war zu erwarten, dass es sich bei den abgelagerten Deponieschlämmen um potentielle Sulfatquellen handelt.

Aus diesem Grund wurden je eine Probe feuchter und trockener Deponieschlamm für Elutionsversuche und isotonchemische Untersuchungen genommen.

Die Zusammensetzung der Schlämme wurde mittels Röntgenfluoreszenzanalyse bestimmt. Tabelle 6 zeigt die chemische Zusammensetzung der untersuchten Proben.

Zur Bestimmung der Mobilität des in den Schlämmen enthaltenen Schwefels wurden Elutionsversuche durchgeführt. Dazu wurden je 5g Probenmaterial einerseits mit 100ml kaltem, andererseits mit 100ml heißem destilliertem Wasser für 2 Stunden intensiv gerührt. Es zeigte sich, dass die Temperatur des Elutionsmittels keinen Einfluss auf die Eluierbarkeit des Schwefels besitzt. Die Sulfatgehalte des Eluats lagen für den trockenen Deponieschlamm bei 200mg/l, für den feuchten Schlamm ergaben sich 250mg/l. Ausgehend von den Schwefelgehalten der Festsubstanz und den sich daraus ergebenden maximal möglichen Sulfatkonzentrationen im Eluat (240mg/l für trockenen Schlamm, 315mg/l für feuchten Deponieschlamm) kann ausgesagt werden, dass 80 bis 85% des Schwefels durch die Elution mobilisiert wurde.

Tabelle 6: Chemische Zusammensetzung von Deponieschlämmen des Wasserwerkes Mockritz

	Na ₂ O (%)	MgO (%)	Al ₂ O ₃ (%)	Fe ₂ O ₃ (%)	K ₂ O (%)	CaO (%)
Deponieschlamm	0,029	1,8	7,5	33,5	0,05	24,5
Mockritz	S	SiO₂	Mn	Sr	TiO₂	
trocken	0,16	14,5	2,45	0,083	0,07	
	Na ₂ O (%)	MgO (%)	Al ₂ O ₃ (%)	Fe ₂ O ₃ (%)	K ₂ O (%)	CaO (%)
Deponieschlamm	0,035	1,75	7,0	34,0	0,06	23,0
Mockritz	S	SiO₂	Mn	Sr	TiO₂	
feucht	0,21	13,0	2,25	0,076	0,064	

Aus den Elutionsversuchen ergibt sich der Schluss, dass der Schwefel aus den Deponieschlammern, zumindest im worst-case-Szenario, sehr leicht mobilisierbar ist. Unter natürlichen Bedingungen liegen die Schlämme in kompakter, sehr schlecht wasserdurchlässiger Form vor, so dass eine Elution nur eingeschränkt stattfinden kann. Aus diesem Grund und wegen der ohnehin geringen Schwefelgehalte in den Schlammern hat die Deponie im Rahmen des Untersuchungsgebietes Mockritz nur eine sehr geringe, allenfalls lokale Relevanz als Sulfatquelle.

Die isotopische Untersuchung des in den Eluatn gelösten Sulfats ergab $\delta^{34}\text{S}$ -Werte zwischen 0,5 und 1,9‰ (VCDT).

4.2.3.2 Gipsdeponie auf dem WASAG-Gelände

Auf dem WASAG-Gelände im nordwestlichen Untersuchungsgebiet befindet sich eine Gipsdeponie, deren Ablagerung im Zusammenhang mit der Neutralisationsanlage einer ehemaligen Sprengstofffabrik steht. Im Zuge des Produktionsprozesses wurden zur Stabilisierung des Sprengstoffes große Mengen Schwefelsäure eingesetzt. Die Schwefelsäure wurde nach der Verwendung mit CaO neutralisiert und der anfallende Gips deponiert.

Für die Untersuchung der isotopischen Zusammensetzung des Sulfats, das aus der Gipsdeponie mobilisiert werden kann, wurde nicht das anstehende Sediment, sondern das unmittelbar im Deponiekörper anstehende Grundwasser betrachtet. Damit konnten mögliche isotopische Fraktionierungen, die im Zusammenhang mit der Auflösung des Gipses stehen, von vorn herein eliminiert werden. Deponie-beeinflusstes Grundwasser wurde aus den Messstellen Eln 511/90, Eln 4/93(o) und PB 21/93 gewonnen. Alle drei Messstellen sind durch extrem hohe Sulfatkonzentrationen zwischen 1000 und 1500mg/l charakterisiert. Für die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Sulfats wurde ein Bereich von +7 bis +10‰ (VCDT) beobachtet. Wenig variabel waren die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Sulfats. Für die drei untersuchten Messstellen ergab sich ein konstanter Wert von +6‰ (VSMOW).

Trotz der großen Menge an deponiertem Gips und der relativ leichten Mobilisierbarkeit ist davon auszugehen, dass die Deponie nur einen lokalen Einfluss auf die Sulfatdynamik im Untersuchungsgebiet und keinen Einfluss auf das geförderte Rohwasser besitzt. Dies begründet sich einerseits in den tiefen Grundwasserständen im Deponiebereich, so dass der überwiegende Anteil des Deponiekörpers oberhalb der Grundwasseroberfläche liegt und damit nicht unmittelbar von der Mobilisierung betroffen ist. Andererseits ist ein Transport des

aus der Deponie mobilisierten Sulfats in die Wasserfassungen des Wasserwerks Mockritz aufgrund der regionalen Grundwasserströmungsdynamik nahezu ausgeschlossen.

4.2.4 Zusammenfassende Betrachtung der anthropogenen Schwefeleinträge

Die Ergebnisse der Untersuchung der isotopischen Zusammensetzung von diffusen oder punktuellen anthropogenen Schwefeleinträgen in das Untersuchungsgebiet Mockritz sind in Tabelle 7 zusammengefasst.

Tabelle 7: Bereiche der isotopischen Zusammensetzung von anthropogenen Sulfateinträgen im Untersuchungsgebiet Mockritz

anthropogene Quelle	$\delta^{34}\text{S}$ ‰ (VCDT)	$\delta^{18}\text{O}$ ‰ (VSMOW)
atmosphärische Deposition	-1...+10	+6...+18
sulfathaltige Mineraldünger	-1...+12	+10...+15
Gipsdeponie auf dem WASAG-Gelände	+7...+10	+6

Es zeigt sich, dass die isotopischen Bereiche, die durch die einzelnen anthropogenen Einträge beschrieben werden, deutliche Überlagerungen aufweisen. Aus diesem Grund ist es nicht möglich, anthropogenen Quellen eindeutig anhand ihrer Isotopensignatur zu unterscheiden. Im Folgenden bei der Diskussion der Herkunft des Grundwassersulfats können daher die verschiedenen anthropogenen Einträge nur als eine einheitliche Quelle betrachtet werden.

4.3 Isotopische Zusammensetzung von Bodenschwefelspezies im Untersuchungsgebiet Mockritz

4.3.1 Isotopische Klassifizierung von verschiedenen Bodenschwefelverbindungen im Untersuchungsgebiet Torgau-Mockritz

4.3.1.1 Reduzierter anorganischer Bodenschwefel (Disulfide)

Aus insgesamt 60 Bodenproben aus allen Bereichen der Bodenzone und des Grundwasserleiters konnte Disulfid in für die Untersuchung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte ausreichender Menge gewonnen werden. Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der Disulfide im Untersuchungsgebiet Mockritz überdecken einen sehr großen Streubereich zwischen -48 und -5‰ (VCDT). Die Häufigkeitsverteilung in Abbildung 23 weist kein ausgeprägtes Häufigkeitsmaximum auf. Eine große Anzahl von Proben gruppiert sich aber zwischen -15 und -5‰ bzw. zwischen -30 und -20‰. Extrem leichte Sulfide mit $\delta^{34}\text{S}$ -Werte kleiner als -40‰ stellen eine Ausnahme dar.

Die tiefenabhängige Verteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von Disulfiden (Abbildung 23) lässt eine Gruppierung der Proben in zwei verschiedene isotopische Bereiche erkennen.

Zwischen 5 und 40m unterhalb der Grundwasseroberfläche wurde ein relativ enger isotopischer Streubereich zwischen -30 und -20‰ (VCDT) beobachtet. Bei den Sulfiden in diesem Bereich handelt es sich mit hoher Wahrscheinlichkeit um primäre Bildungen die in engem zeitlichen Zusammenhang mit der Ablagerung der eiszeitlichen Sedimente des Grundwasserleiters stehen. Der kleine Streubereich deutet einerseits auf ein isotopisch relativ homogenes Ausgangssulfat hin, aus dem die primären geogenen Disulfide durch dissimilatorische Sulfatreduktion entstanden sind. Andererseits ist anzunehmen, dass die physiko-chemischen Begleitumstände beim Reduktionsprozess wenig variabel waren, wodurch die Größe der isotopischen Fraktionierung bei der Sulfatreduktion nur geringfügigen Schwankungen unterlag.

Wie in Abbildung 23 ersichtlich ist, zeigen die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte im Bereich der Grundwasseroberfläche und bis etwa 5m darunter eine wesentlich größere Streuung (-48 ... -5‰). Bei diesen Disulfiden handelt sich um sekundäre Bildungen, die insbesondere in den Sulfidisierungshorizonten westlich der Wasserfassung Mockritz I angereichert sind. Als Herkunft des Schwefels, aus dem die Disulfidbildung vollzogen wurde, ist die vertikale Verlagerung von anthropogenen Einträgen bis in reduzierende Bereiche anzunehmen. Die extreme isotopische Streubreite der Disulfide erklärt sich daher weniger durch die schwankenden $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des extern eingetragenen Schwefels, als vielmehr durch die

erhebliche Variabilität der hydro- und bodenchemischen Gegebenheiten, die die isotopische Fraktionierung bei der Sulfatreduktion unmittelbar beeinflussen.

Ein wesentliches Ergebnis der isotopischen Untersuchung der Disulfide ist die Erkenntnis, dass ihre $\delta^{34}\text{S}$ -Werte in keinem untersuchten Fall größer als -5‰ (VCDT) waren.

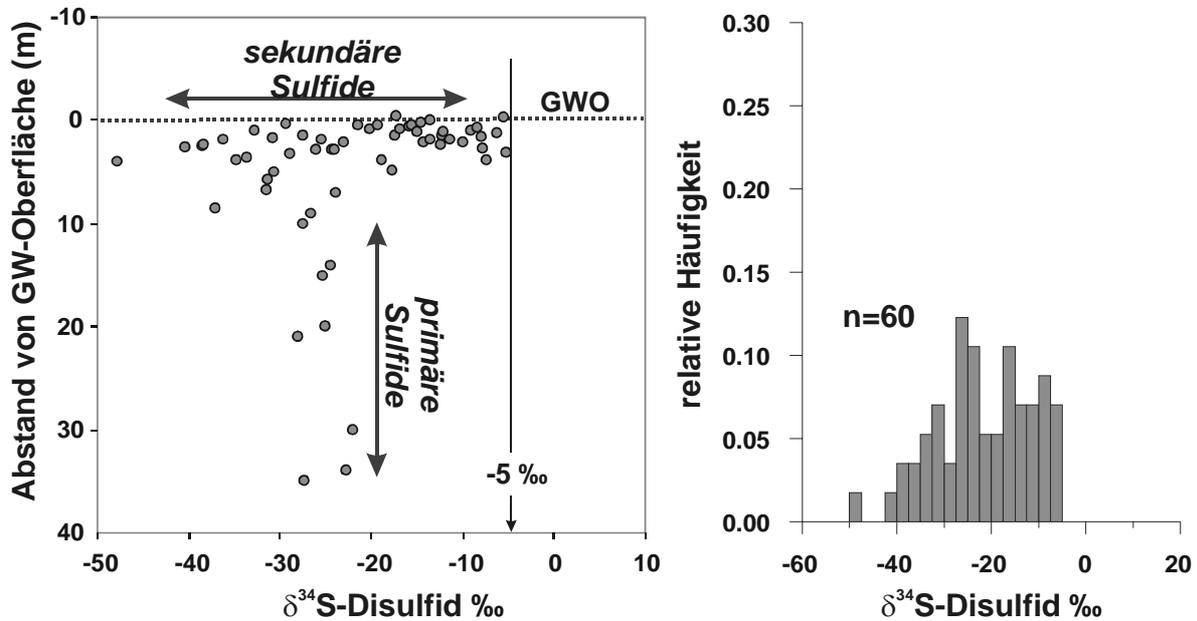


Abbildung 23: Tiefenabhängige Variabilität und relative Häufigkeitsverteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von Disulfiden aus der gesättigten und ungesättigten Zone im Untersuchungsgebiet Mockritz

4.3.1.2 Anorganisches Bodensulfat

4.3.1.2.1 Isotopische Zusammensetzung des Schwefels

Die isotopische Zusammensetzung des Schwefels im anorganischen Bodensulfat wurde an insgesamt 152 Boden- und Sedimentproben aus der gesättigten und ungesättigten Zone durchgeführt. Ebenso wie bei den Disulfiden variieren die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des Bodensulfats innerhalb eines sehr großen Bereiches zwischen -42 und $+18\text{‰}$ (VCDT). Im Gegensatz zu den Disulfiden lässt sich aber in der $\delta^{34}\text{S}$ -Häufigkeitsverteilung des Bodensulfats (Abbildung 24) ein ausgeprägtes Häufigkeitsmaximum bei etwa $+5\text{‰}$ erkennen. Dieses Maximum entspricht ungefähr dem mittleren $\delta^{34}\text{S}$ -Wert der im Abschnitt 4.2.4 beschriebenen externen anthropogenen Einträge. Daraus lässt sich die Schlussfolgerung ableiten, dass das Bodensulfat zu einem sehr großen Anteil aus der Zulieferung von anthropogenen Quellen gebildet wurde. Die tiefenabhängige Variabilität, dargestellt in Abbildung 24, zeigt deutliche Unterschiede der isotopischen Zusammensetzung des Bodensulfats in der ungesättigten und in der gesättigten Zone. Oberhalb der mittleren Grundwasseroberfläche, im ungesättigten Bereich, sind nur unwesentliche Variationen der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte zu erkennen. Das Bodensulfat stammt hier

ausschließlich aus dem Eintrag aus externen anthropogenen Quellen. Unterhalb der Grundwasseroberfläche wird die Schwankungsbreite der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte sprunghaft erheblich größer. Dies begründet sich dadurch, dass das Bodensulfat hier nicht mehr ausschließlich durch die direkte Verlagerung anthropogener Einträge bestimmt wird, sondern vielmehr ein jeweils unterschiedlicher Anteil von isotopisch leichtem Sulfat aus der Sulfidoxidation zugemischt ist. In einigen Proben im gesättigten Bereich ist das Bodensulfat sogar ausschließlich durch Oxidationssulfat dominiert. Bei der Betrachtung des Bodensulfats unterhalb der Grundwasseroberfläche muss berücksichtigt werden, dass eine Verlagerung nicht nur durch Vertikaltransport sondern auch durch die laterale Fließdynamik des Grundwassers erfolgt. In der gesättigten Zone sind, wenn man eine ausreichend lange Equilibrierungszeit (12 - 24 Stunden) voraussetzt, die isotopischen Zusammensetzungen von anorganischem Bodensulfat und dem gelösten Sulfat im unmittelbaren Umgebungsgrundwasser identisch.

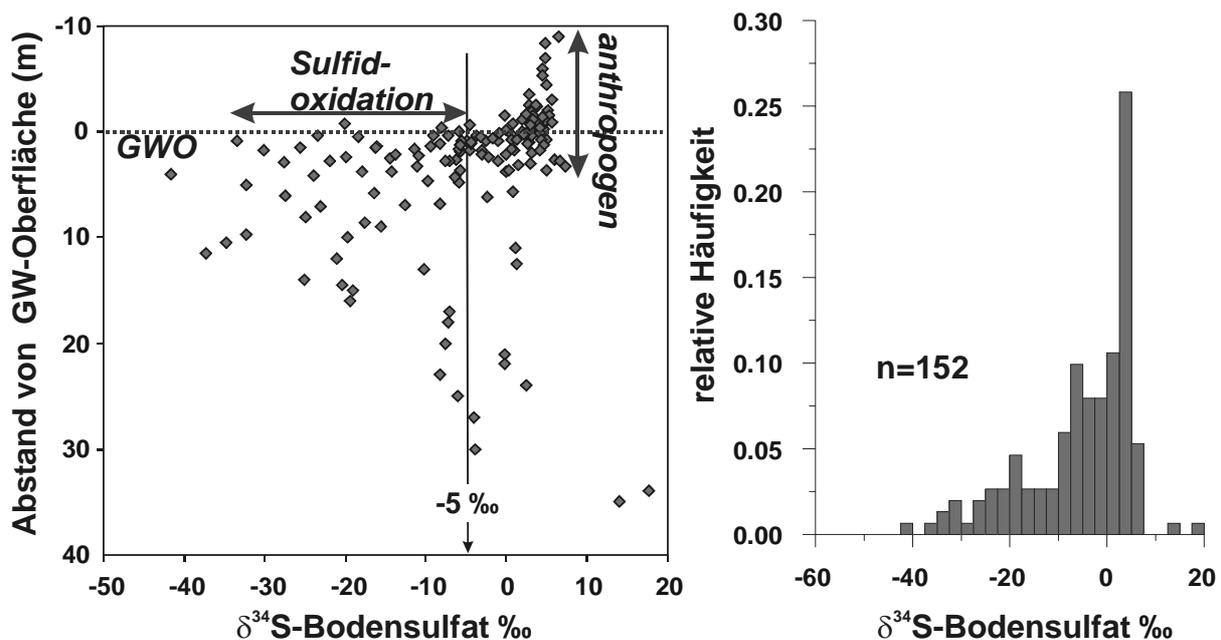


Abbildung 24: Tiefenabhängige Variabilität und relative Häufigkeitsverteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte anorganischen Bodensulfats aus der gesättigten und ungesättigten Zone im Untersuchungsgebiet Mockritz

4.3.1.2.2 Isotopische Zusammensetzung des Sauerstoffs

Aufgrund des hohen präparativen und analytischen Aufwandes der $\delta^{18}\text{O}$ -Bestimmung des Bodensulfats wurde diese Untersuchung nur an 50 der insgesamt über 150 Bodensulfatproben vorgenommen. Die Interpretation der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Bodensulfats gestaltet sich darüber hinaus oftmals durch die erhebliche isotopische Variabilität sehr schwierig. Direkt verlagertes

Sulfat aus anthropogenen Einträgen, als anteiliges Ausgangsmaterial für das Bodensulfat, besitzt von vorn herein schon eine sehr variable isotopische Zusammensetzung des Sauerstoffs. Die Mobilisierung von Sulfat aus dem Pool des reduzierten anorganischen oder organischen Schwefels erzeugt eine weitere Variabilität, die auf die sehr sensiblen Reaktionen der bei der Sulfatbildung auftretenden isotopischen Fraktionierungsgrößen auf Änderungen des physiko-chemischen Milieus zurückzuführen ist. Mischungen zwischen primär eingetragenen und sekundär mobilisiertem Sulfat sind deswegen nur schwer zu quantifizieren.

Einen wesentlichen Einfluss auf die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des aus dem reduzierten Bodenschwefelpool mobilisierten Sulfats hat die isotopische Sauerstoffzusammensetzung des Umgebungswassers im unmittelbaren Bildungsraum (vgl. Abschnitt 3.1.1.3.3). Zur Abschätzung, in welcher Größenordnung die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Porenwassers in der ungesättigten Zone zur Variabilität der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des neu mobilisierten Bodensulfats beitragen können, wurde die isotopische Wasserzusammensetzung an etwa 30 Bodenproben aus verschiedenen Tiefen untersucht. Die tiefenabhängigen Variationen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Bodenwassers sind in Abbildung 25 gezeigt. Die größte Schwankungsbreite der Messwerte ist in oberflächennahen Horizonten zu beobachten. Diese Variabilität kann einerseits durch die saisonalen Schwankungen der isotopischen Zusammensetzung des Niederschlages verursacht sein, andererseits kann die Evaporation von Bodenwasser, insbesondere in den Sommermonaten, einen signifikanten Einfluss haben. Zur Abschätzung des Verdunstungseinflusses wurden bei einem Teil der Proben neben den $\delta^{18}\text{O}$ -Werten auch die δD -Werte des Wassers betrachtet. Die ermittelten Messwerte sind im $\delta^{18}\text{O}$ - δD -Diagramm in Abbildung 26 dargestellt. Die lineare Regression ergab einen Anstieg der Regressionsgeraden von 5,6. Typische lokale Verdunstungsgeraden haben einen Anstieg zwischen etwa 4,5 und 5 (KNÖLLER, 2000; KNÖLLER und STRAUCH, 2002). Abbildung 26 zeigt weiterhin zwei lokale meteorische Wasserlinien (local MWL) von den Messpunkten Leipzig und Bad Lauchstädt, auf denen die saisonal schwankenden isotopischen Zusammensetzungen der Niederschläge der jeweiligen Stationen liegen. Die Anstiege dieser Geraden bewegen sich zwischen 7,1 und 7,5. Der Anstieg der ermittelten Regressionsgeraden ist damit niedriger als der der lokalen MWL und höher als der von typischen Eindunstungsgeraden. Daraus kann abgeleitet werden, dass die Variationen der isotopischen Zusammensetzungen der Bodenwässer durch die Kombination von Verdunstung und saisonal schwankenden Niederschlagseinträgen verursacht sind.

Mit zunehmender Tiefe wird die Variabilität der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Bodenwassers immer geringer (Abbildung 25). Ab etwa 4m Tiefe hat das Porenwasser ein für das lokale Grundwasser typischen $\delta^{18}\text{O}$ -Wert von -9‰ (VSMOW).

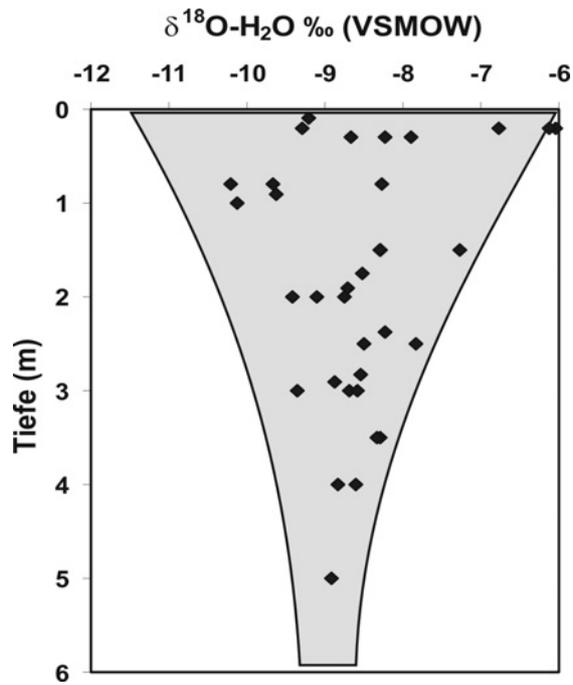


Abbildung 25: Tiefenabhängige Variabilität der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte von Porenwässern aus der ungesättigten Zone im Auenbereich des Untersuchungsgebietes Mockritz

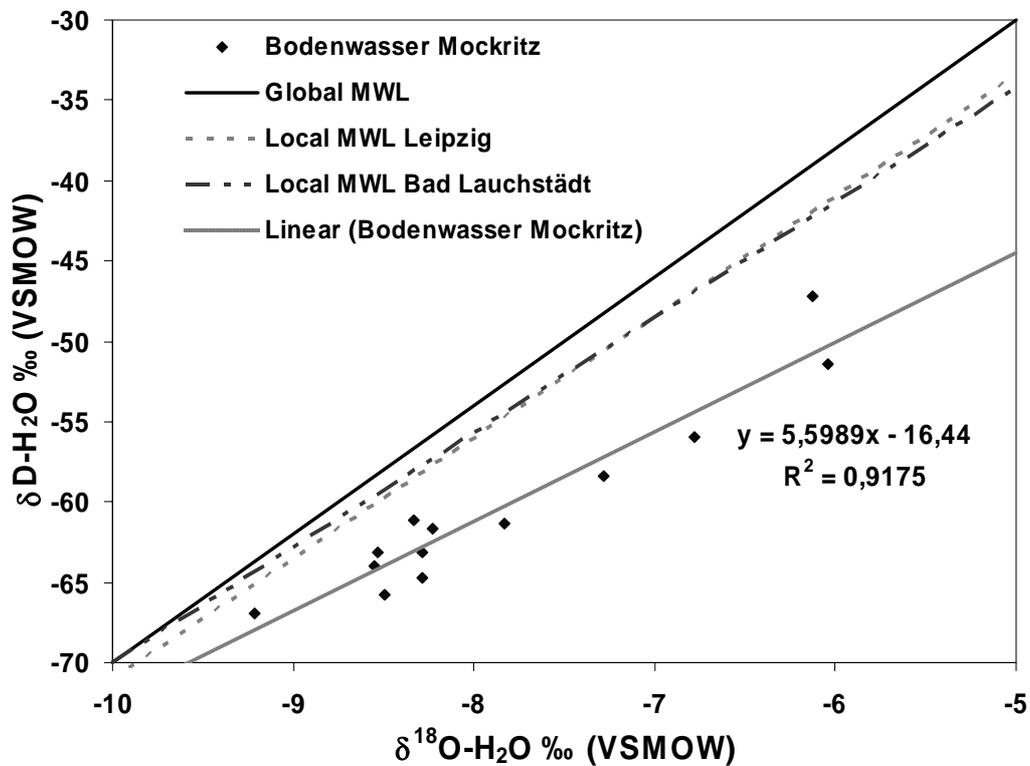


Abbildung 26: Isotopische Zusammensetzung von Porenwässern aus der ungesättigten Zone im Auenbereich des Untersuchungsgebietes Mockritz

Trotz der in den erheblichen Variationen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte begründeten Unsicherheiten kann die Herkunft des anorganischen Bodensulfats anhand seiner isotopischen Zusammensetzung klassifiziert werden (Abbildung 27). Für die 50 hinsichtlich ihrer $\delta^{18}\text{O}$ -Werte untersuchten Bodensulfate kann abgeschätzt werden, dass die direkte Verlagerung von anthropogenen Einträgen, die Oxidation von Sulfiden und die Mineralisation kohlenstoff-gebundenen Schwefels in etwa die gleiche genetische Relevanz besitzen. Durch die Lage der Messwerte zwischen den typischen isotopischen Bereichen in Abbildung 27, die für einige Proben beobachtet wurde, werden Mischungen zwischen Bodensulfaten aus verschiedenen Quellen verdeutlicht.

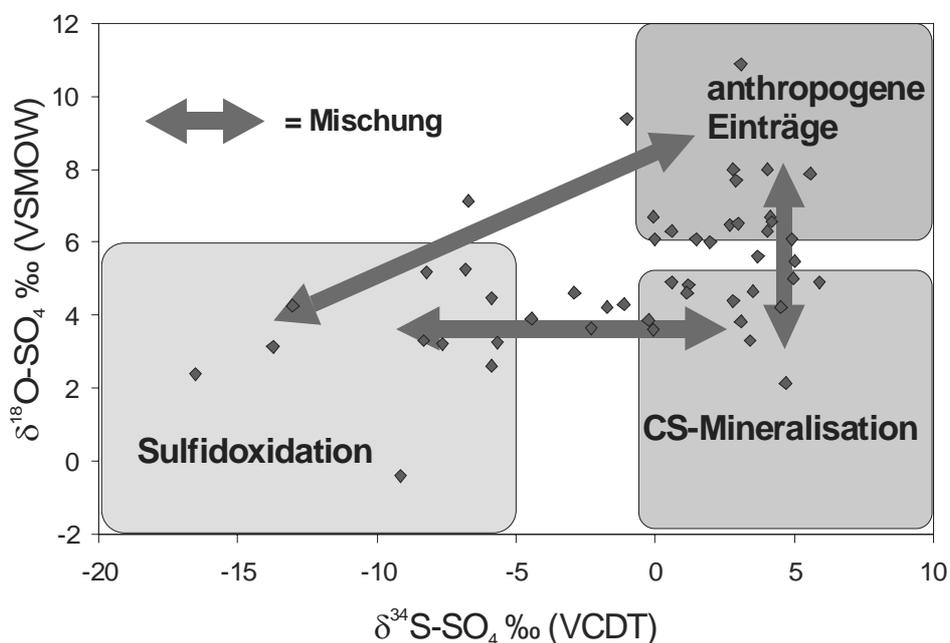


Abbildung 27: Isotopische Zusammensetzung des anorganischen Bodensulfats in Sondierungsproben aus dem Untersuchungsgebiet Mockritz

4.3.2 Isotopische Untersuchung von Sondierungsprofilen

An Sedimentproben aus insgesamt 24 Sondierungsprofilen (bis 7m) und 3 Tiefbohrungen bis zur Quartärbasis (bis 38m) sowohl aus dem Auenbereich als auch aus der Hochfläche wurde die isotopische Zusammensetzung verschiedener Bodenschwefelspezies untersucht. Schwerpunktmäßig wurden das anorganische Bodensulfat und der Disulfidschwefel betrachtet. Aus einigen Proben konnte aber auch Monosulfidschwefel extrahiert und isotopisch charakterisiert werden.

Die Verteilung der Bodenschwefelspezies in den einzelnen Profilen wird maßgeblich durch die Substratvariabilität des Bodens und die davon abhängigen bodenchemischen Parameter definiert. Aufgrund der lithologischen Inhomogenitäten im Untersuchungsgebiet Mockritz war zu erwarten, dass auch für die isotopische Zusammensetzung der Bodenschwefelspezies eine erhebliche Schwankungsbreite zu beobachten ist.

Generell können zwei bodenchemische Extremfälle unterschieden werden: 1. Profile mit vollständig reduzierenden Verhältnissen, die ausschließlich durch reduzierte Schwefelspezies (Mono- und Disulfid, kohlenstoff-gebundener Schwefel) dominiert sind und 2. vollständig oxidierte Bodenprofile in denen der Bodenschwefel hauptsächlich als anorganisches Bodensulfat auftritt. Vollständig reduzierte Profile wurden im Untersuchungsgebiet nicht beobachtet. Bei allen untersuchten Profilen war anorganisches Bodensulfat die häufigste, in wenigen Profilen zumindest die zweithäufigste Schwefelspezies. In Abhängigkeit von der Mächtigkeit und der lithologischen Ausbildung (Tonanteil) der Auelehmbedeckung sowie vom mittleren Grundwasserstand wurden variable Anteile reduzierter Schwefelverbindungen ermittelt.

4.3.2.1 Partiiell reduzierte Bodenprofile

Die höchsten relativen Anteile von reduzierten Schwefelverbindungen am Gesamtschwefelinventar wurden in den Sondierungen S-10 und S-17 im unmittelbaren Umfeld der Rammfiltermessstelle 9507 beobachtet.

Der Bereich, in dem sich die Messstelle 9507 befindet, ist durch eine mächtige Auelehmschicht (>3m) in schluffig-toniger Ausprägung gekennzeichnet. Durch die hohen Grundwasserstände (ca. 1m uGOK) ist davon auszugehen, dass der überwiegende Teil des Auelehms wassergesättigt ist. Diese speziellen lokalen Gegebenheiten ermöglichen die partielle Ausbildung von reduzierenden Verhältnissen und die teilweise Festlegung des vertikal nach unten verlagerten Schwefels in sulfidischer Form.

An den Bodenproben aus den Sondierungen S-10 und S-17 konnten aufgrund der zum Teil hohen Gehalte in einzelnen Horizonten neben den $\delta^{34}\text{S}$ -Werten des anorganischen Sulfats und des Disulfids auch die des Monosulfids bestimmt werden. Im Zusammenhang mit der Isotopenpräparation wurden gleichzeitig die angenäherten Gehalte an den genannten Schwefelspezies ermittelt.

Abbildung 28 zeigt die Profilverläufe der Gehalte und Isotopenwerte für die Sondierung S-10. Grundsätzlich kann ausgesagt werden, dass sowohl Gehalte als auch Isotopenwerte eine deutliche Profildifferenzierung aufweisen. Anorganisches Bodensulfat stellt im Profil

oberhalb von ca. 3m und unterhalb von ca. 4,5m die dominante Schwefelform dar. In einer Tiefe zwischen 3 und 4,5 wird das Gesamtschwefelinventar durch Disulfide dominiert. Darüber hinaus kann dort aber auch eine deutliche Anreicherung von Monosulfiden beobachtet werden.

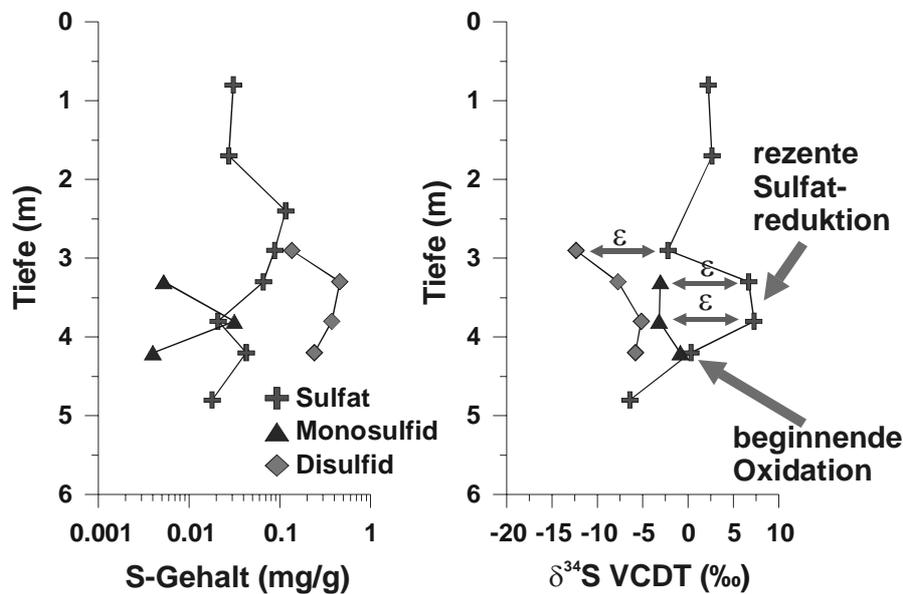


Abbildung 28: Gehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von verschiedenen Bodenschwefelspezies (Sondierung S-10)

Im oberen Abschnitt des Isotopenprofils (bis 2m) (Abbildung 28) zeigt das Sulfat einen leicht positiven $\delta^{34}\text{S}$ -Wert, welcher im Wesentlichen anthropogenen Einträgen zugeordnet werden kann. Im weiteren Profilverlauf lässt sich eine deutliche Differenz zwischen den $\delta^{34}\text{S}$ -Werten des Bodensulfats und den dort auftretenden Monosulfiden erkennen (Abbildung 28). Dieser isotopische Unterschied deutet auf rezente Sulfatreduktion hin, bei der die aus den Sulfaten entstehenden Sulfide um einen bestimmten Fraktionierungsbetrag ($\epsilon \sim 10\text{‰}$) an ^{34}S abgereichert sind. Da die Bildung von Di- aus Monosulfiden ein weitestgehend fraktionierungsloser Prozess ist, zeigt der im Profil beobachtete isotopische Unterschied zwischen beiden Spezies an, dass erstens die isotopische Zusammensetzung des rezent gebildeten Monosulfids nicht konstant ist und dass zweitens zwischen Mono- und Disulfidbildung eine deutliche zeitliche Differenz besteht. Die isotopische Variabilität des Monosulfids kann entweder durch schwankende $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des jeweiligen Ausgangssulfats verursacht sein, oder variable Milieuparameter haben unterschiedlich große Fraktionierungen bei der Sulfatreduktion erzeugt.

Bei einer Tiefe von etwa 4m zeigen Monosulfid und anorganisches Bodensulfat einen annähernd gleichen Isotopenwert (Abbildung 28). Daraus lässt sich ableiten, dass an dieser Stelle eine fraktionierungslose Oxidation stattfindet, d.h. dass im unmittelbaren Betrachtungszeitpunkt das Sulfat hier nicht mehr die primäre sondern die sekundäre Phase darstellt. Bestätigt wird diese Annahme durch die Konzentrationsverläufe. In einer Tiefe von etwa 4m sinken die Sulfidgehalte sprunghaft ab, während die Sulfatgehalte ansteigen. Die Gegenwart des leicht oxidierbaren Monosulfids zeigt aber an, dass der Milieuwechsel zu partiell oxidierenden Bedingungen nur kurz vor der Probnahme erfolgt sein kann.

Unterhalb einer Tiefe von 4m liegt nur noch isotopisch leichtes Sulfat im Profil vor, das seinen Ursprung wahrscheinlich in der Sulfidoxidation hat. Eine Aussage, ob es sich dabei um proximale oder distale Oxidationsherde handelt, kann aber aufgrund der Wechselwirkung des Bodensulfats mit dem instationären Grundwassersulfat nicht getroffen werden.

Allgemein kann aus der Differenzierung des Isotopenprofils abgeleitet werden, dass die Reduktions- und Oxidationshorizonte nicht stationär vorkommen, sondern dass vielmehr von einem dynamischen Verhalten auszugehen ist. Diese Dynamik wird maßgeblich durch sowohl saisonal als auch längerfristig schwankende Grundwasserstände verursacht.

Neben der vertikalen Inhomogenität der isotopischen Zusammensetzung im Sondierungsprofil lässt sich darüber hinaus eine deutliche horizontale Variabilität in lokal sehr eng gefassten Bereichen beobachten. Diese horizontalen Schwankungen werden durch das nur etwa 20m von der Sondierung S-10 entfernte Bodenprofil S-17 verdeutlicht (Abbildung 29).

Während bei S-17 die Monosulfidgehalte in einem vergleichbaren Bereich wie bei S-10 liegen, sind die Gehalte an anorganischem Bodensulfat und an Disulfid deutlich erhöht. Erhebliche Differenzen zwischen beiden Profilen bestehen auch in der vertikalen isotopischen Verteilung. Zwar besteht auch bei S-17 in etwa 4,5m Tiefe eine annähernde isotopische Übereinstimmung zwischen Monosulfid und Sulfat, die auf einen kürzlich erfolgten Milieuwechsel und auf rezente Oxidation schließen lässt, aber im übrigen Profil sind die isotopischen Unterschiede zwischen beiden Spezies deutlich geringer als bei S-17. Dieser Umstand deutet auf veränderte Milieubedingungen hin, die in einer kleineren isotopischen Fraktionierungen bei der dissimilatorischen Sulfatreduktion resultieren. Der isotopische Schwankungsbereich der Disulfide in S-17 ist deutlich größer als bei S-10. Minimale $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von $<-30\text{‰}$ werden bei S-17 unterhalb einer Tiefe von 6m erreicht. In einem vergleichbaren Tiefenbereich konnte bei S-10 kein sulfidischer Schwefel mehr gefunden werden.

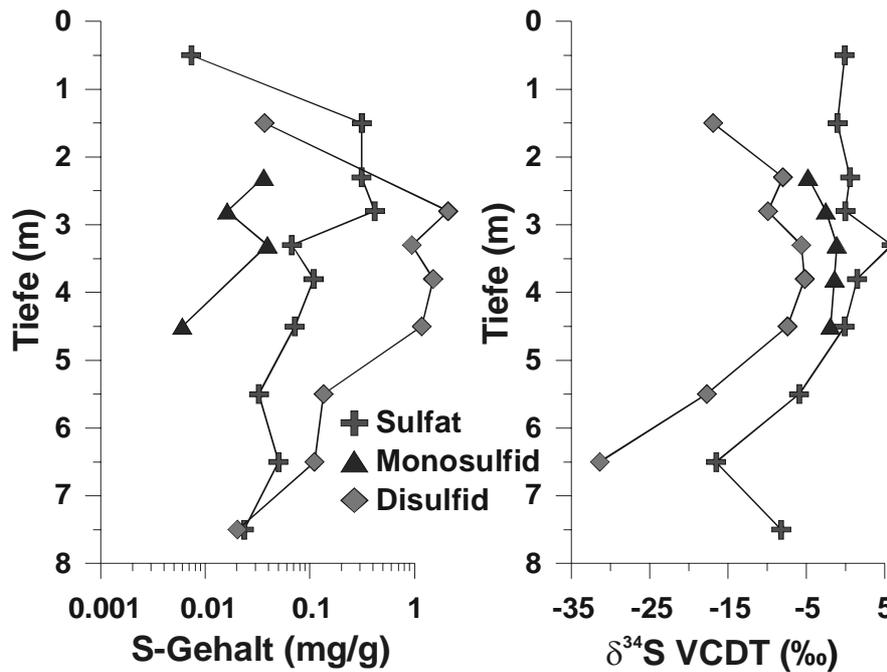


Abbildung 29: Gehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von verschiedenen Bodenschwefelspezies (Sondierung S-17)

4.3.2.2 Oxidierte Bodenprofile

In mehreren Sondierungen im Untersuchungsgebiet Mockritz konnten aufgrund des vorliegenden, durchweg oxidierten Milieus keine reduzierten Bodenschwefelverbindungen gefunden werden. Ein charakteristisches Beispiel für diesen Profiltyp stellt die Sondierung 9514 im Bereich der Wasserfassung Mockritz I dar. In diesem Bereich findet man eine deutlich geringer mächtige Auelehmschicht als bei den Sondierungen S-10 und S-17. Darüber hinaus zeigt der Auelehm hier eine schluffige bis feinsandige Ausbildung. Damit kann freier Luftsauerstoff relativ ungehindert durch das gesamte Profil bis zur Grundwasseroberfläche transportiert werden, wodurch die Herausbildung stabiler reduzierter Verhältnisse verhindert wird. Darüber hinaus enthält das vorliegende Sediment nur geringe Anteile an organischem Material. Dissimilatorische Sulfatreduktion als Schlüsselprozess für die Bildung von sedimentären Sulfiden ist jedoch auf mikrobiell verfügbaren organischen Kohlenstoff als Elektronendonator angewiesen. Damit wird die Sulfidbildung und -anreicherung im Sediment nicht nur durch Sauerstoffzutritt, sondern auch durch den Mangel an metabolisierbarem organischem Kohlenstoff gehemmt.

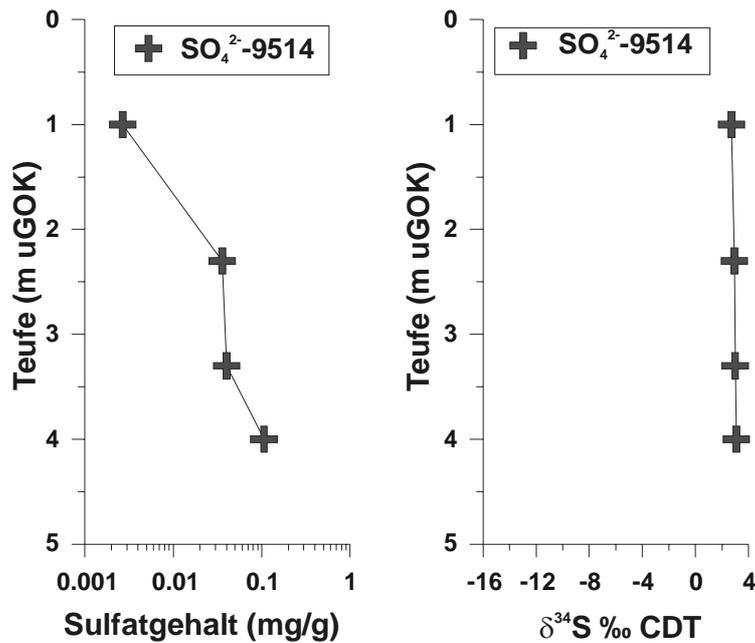


Abbildung 30: Gehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des anorganischen Sulfats (Sondierung 9514)

Die durchweg oxidierten Verhältnisse bedingen einerseits, dass Sulfat die einzige Bodenschwefelspezies im Profil darstellt, andererseits, dass kein isotopische Profildifferenzierung zu beobachten ist (Abbildung 30). Das Sulfat aus den oberen Profilhorizonten mit leicht positiven $\delta^{34}\text{S}$ -Werten, die den Mittelwerten der anthropogenen Einträge entsprechen, wird isotopisch undifferenziert mit dem Sickerwasser in größere Tiefen verlagert und geht in dieser Form ins Grundwasser über.

Die betrachteten Sondierungsbeispiele (S-10, S-17, S-9514) repräsentieren die im Abschnitt 4.3.2 beschriebenen Extremfälle im Untersuchungsgebiet Mockritz. Bei allen anderen Sondierungen liegt das Ausmaß der isotopischen Profildifferenzierung, die durch die Kombination der Prozesse Sulfatreduktion und Sulfidoxidation erzeugt wird, zwischen den dargestellten Beispielen. So lässt sich bei den meisten Sondierungen zwar eine mehr oder weniger ausgeprägte tiefenabhängige Variabilität der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des Sulfats erkennen, korrespondierende sulfidische Phasen lassen sich aber aufgrund ihrer geringen Konzentration nicht für die Isotopenanalyse in ausreichender Menge extrahieren. Allgemein kann aber ausgesagt werden, dass zwischen dem Ausmaß der Profildifferenzierung und der Mächtigkeit bzw. dem Tongehalt des Auelehms eine positive Korrelation besteht.

4.3.2.3 Isotopische Normalprofile

Die oben beschriebenen Beispiele der Sondierungen S-10, S-17 haben die extreme Heterogenität der isotopischen Zusammensetzung der Bodenschwefelspezies verdeutlicht.

Aufgrund dieser, selbst in lokal sehr eng gefassten Bereichen, starken Schwankungen in Kombination mit der Grundwasserfließ- und -mischungsdynamik, können vom Einzelprofil keine Aussagen darüber abgeleitet werden, wie die isotopische Zusammensetzung des gelösten Grundwassersulfats im größeren Maßstab durch Sulfateintrag aus dem jeweiligen Profil beeinflusst wird. Um dennoch regionalere Prognosen über das verlagerte Sulfat vornehmen zu können, wurden isotopische Normalprofile für das Untersuchungsgebiet konstruiert, die generelle Schlussfolgerungen über den Einfluss des Bodenschwefels auf das Grundwassersulfat ermöglichen. Für die Konstruktion der Normalprofile anhand von insgesamt 24 Einzelsondierungen wurden zwei Profiltypen unterschieden. Im Profiltyp 1 wurden alle Sondierungen berücksichtigt, die keine reduzierten Bodenschwefelspezies enthielten (8 Sondierungen). Profiltyp 2 erfasst alle Sondierung, bei denen reduzierte Bodenschwefelspezies in mindestens einem Horizont vorhanden waren (16 Sondierungen). Für beide Profiltypen wurden alle Daten des Untersuchungsgebietes horizontbezogen zusammengefasst und statistisch gemittelt. Die berechneten Normalprofile sind in Abbildung 31 dargestellt.

Wie erwartet zeigt sich beim Profiltyp 1 (ohne Disulfid) die geringste Profildifferenzierung. Bis zu einer Teufe von 3m liegen leicht positive $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des anorganischen Bodensulfats vor, die bezogen auf das gesamte Sondierungsgebiet nur eine sehr geringe Variabilität aufweisen (kurze Fehlerbalken in Abbildung 31). In diesem Bereich erfolgt eine isotopisch undifferenzierte Verlagerung des oberflächlich eingetragenen Sulfats. Unterhalb von 3m, im Bereich des mittleren Grundwasserstandes, erhöht sich deutlich die Variabilität der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte. Dies ist maßgeblich dadurch begründet, dass mit dem Grundwasserstrom isotopisch sehr variables gelöstes Sulfat herantransportiert werden kann, das die Isotopensignatur des anorganischen Bodensulfats definiert.

Wesentlich deutlichere Differenzierungen zeigt das Normalprofil der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des Bodensulfats im Profiltyp 2 (mit Disulfid). Zwar lassen sich im obersten Profilabschnitt ähnlich leicht positive $\delta^{34}\text{S}$ -Werte erkennen, im weiteren Profilverlauf liegen aber deutlich negativere mittlere Werte und eine wesentlich größere Variabilität vor. Das oberflächlich eingetragene Sulfat wird also nicht direkt nach unten verlagert, vielmehr kommt es durch die lokal stark variierenden Wechselbeziehungen von Sulfatreduktion und Sulfidoxidation zu einer signifikanten Differenzierung der Isotopensignatur des anorganischen Bodensulfats.

Noch deutlicher kommt die Differenziertheit des Profiltyps 2 beim $\delta^{34}\text{S}$ -Normalprofil der Disulfide zum Tragen, bei dem eine Variationsbreite von 40‰ zu beobachten ist. Ausgehend von der Annahme, dass es sich um überwiegend sekundäre Bildungen handelt, sind zwei

Faktoren für die große isotopische Streuung verantwortlich. Erstens überträgt sich die isotopische Variabilität der primären Phase (gelöstes Sulfat) auf die sekundäre Bildung und zweitens können wechselnde physiko-chemische Bedingungen, wie sie im Grundwasserschwankungsbereich vorliegen, eine große Streuung der durch Sulfatreduktion verursachten isotopischen Fraktionierung hervorrufen.

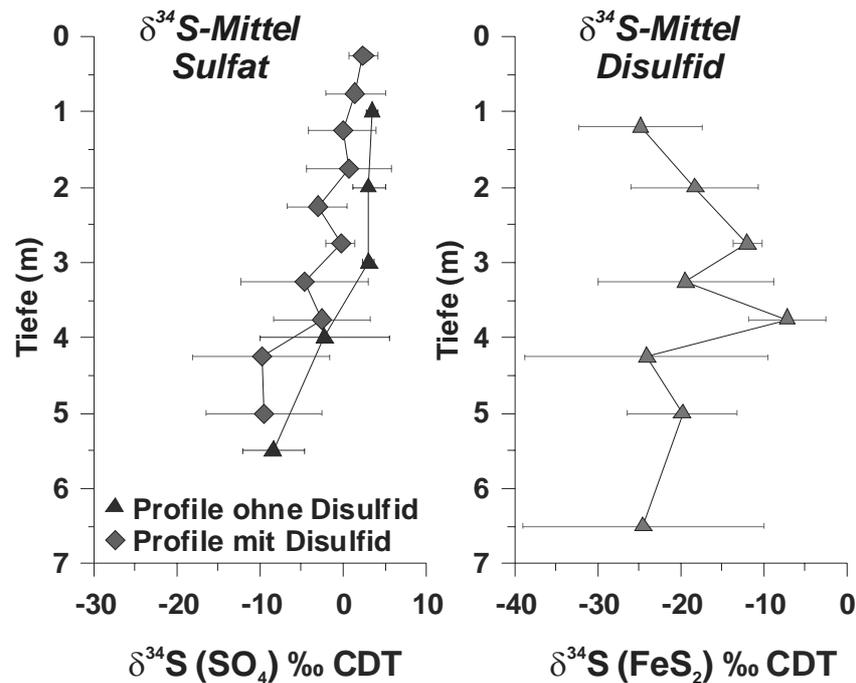


Abbildung 31: Isotopische Normalprofile für Bodensondierung im Testgebiet Mockritz

4.3.3 Isotopische Zusammensetzung des Sulfataustrages aus der Bodenzone

Das wesentliche Ziel der Untersuchungen der isotopischen Zusammensetzung von Bodenschwefelspezies bestand darin, im Rahmen des Untersuchungsgebietes anwendbare Aussagen über die isotopische Zusammensetzung des aus der Bodenzone in das Grundwasser verlagerten Sulfats abzuleiten. Die hauptsächlichen Prozesse die einen Sulfataustrag aus der Bodenzone und einen Sulfateintrag in das Grundwasser verursachen, sind die direkte vertikale Verlagerung von Sulfat aus anthropogenen Einträgen mit temporärer Zwischenspeicherung als anorganisches Bodensulfat, die Mobilisierung von Sulfat durch Oxidation reduzierter anorganischer Schwefelverbindungen und die Mineralisation organisch gebundenen Schwefels.

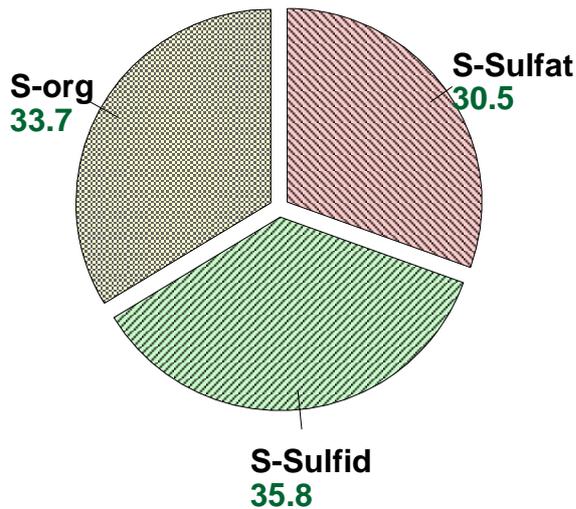


Abbildung 32: Prozentuale Verteilung der drei hauptsächlich sedimentären und Bodenschwefelspezies aus Sondierungsprofilen (ungesättigter Bereich) im Untersuchungsgebiet Mockritz (mittlere prozentuale Anteile ermittelt aus 160 Bodenanalysen durch TU-Dresden)

Die detaillierten Bodenuntersuchungen hinsichtlich der Gehalte an verschiedenen Schwefelspezies im Rahmen des Teilprojektes 3 durch den Verbundprojektpartner TU-Dresden lassen vermuten, dass die drei hauptsächlich sedimentären und Bodenschwefelspezies in etwa zu gleichen prozentualen Anteilen in der ungesättigten Zone des Untersuchungsgebiets vorliegen (Abbildung 32). Daher ist anzunehmen, dass, bezogen auf das gesamte Untersuchungsgebiet, die drei oben genannten verschiedenen Mobilisierungsprozesse eine angenähert gleiche Relevanz besitzen. Aus den Ergebnissen der Bodenuntersuchungen der TU-Dresden war darüber hinaus eine positive Korrelation zwischen sulfidischem und organischem Schwefel zu erkennen. Aus dieser Tatsache lässt sich die Schlussfolgerung ziehen, dass der organische Schwefel durch seine reduzierte Form, nämlich dem kohlenstoff-gebundenen Schwefel, dominiert ist. Damit ist es sehr wahrscheinlich, dass der Sulfataustrag aus der Bodenzone durch Mineralisation von oxidiertem organischem Schwefel (Estersulfate) im regionalen Maßstab des Untersuchungsgebietes nur eine untergeordnete Rolle spielt. Die möglichen isotopischen Zusammensetzungen des durch die verschiedenen Prozesse mobilisierten Sulfats sind in Tabelle 8 zusammengefasst.

Die direkte Sulfatverlagerung ist ein Prozess, der, unabhängig vom Ausmaß der Zwischenspeicherung als Bodensulfat, keine Isotopieeffekte im Sulfat hervorruft (MAYER, 1993; KNIEF, 1998). Aus diesem Grund hat das Sulfat, das aus dem in Abschnitt 4.3.2.2 beschriebenen durchweg oxidierten Profiltyp 1 stammt die gleiche isotopische Zusammensetzung wie die anthropogenen Eintragsquellen mit $\delta^{34}\text{S}$ -Werten zwischen -1 und +11‰ (VCDT) und $\delta^{18}\text{O}$ -Werten zwischen +6 und +18‰ (VSMOW).

Tabelle 8: Isotopische Zusammensetzung des aus der Bodenzone durch verschiedene Prozesse mobilisierten Sulfats unter der Annahme, dass die vorherige Bildung der jeweiligen Bodenschwefelspezies aus den in Abschnitt 4.2.4 spezifizierten anthropogenen Einträge erfolgte

Mobilisierungsprozess	isotopische Zusammensetzung des resultierenden Sulfates	
	$\delta^{34}\text{S}$ ‰ VCDT	$\delta^{18}\text{O}$ ‰ VSMOW
direkte vertikale Verlagerung des anorganischen Bodensulfats aus anthropogenen Quellen	-1...+11	+6...+18
Oxidation von reduzierten anorganischen Schwefelverbindungen	<-5	-2...+6
Mineralisation von kohlenstoffgebundenem Schwefel	-1...+11	-2...+5
Hydrolyse von Estersulfaten	-10...+2	+5...+14

Bei der Oxidation von reduzierten anorganischen Schwefelverbindungen ist ebenfalls keine nennenswerte isotopische Fraktionierung des Schwefels zu beobachten (NAKAI und JENSEN, 1964; TAYLOR u.a., 1984; TORAN und HARRIS, 1989). Somit weisen das Ausgangssulfid und das gebildete Sulfat nahezu gleiche $\delta^{34}\text{S}$ -Werte auf. Wie im Abschnitt 4.3.1.1 gezeigt wurde, sind die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der sedimentären Sulfide im gesamten Untersuchungsgebiet negativer als -5‰ (VCDT). Damit lässt sich das Sulfat aus der Sulfidoxidation anhand seiner Schwefelisotopensignatur eindeutig von den isotopisch deutlich positiveren Sulfaten aus der direkten Verlagerung von anthropogenen Einträgen unterscheiden. Die Sauerstoffkomponente im gebildeten Sulfat muss sich entsprechend den im Abschnitt 3.1.1.3.3 beschriebenen Gesetzmäßigkeiten vollständig neu konstituieren. In Abhängigkeit vom Reaktionsmechanismus bei der Oxidation und von der isotopischen Zusammensetzung des Umgebungswassers sind daher $\delta^{18}\text{O}$ -Werte zwischen -2 und +6‰ (VSMOW) zu erwarten. Die isotopischen Fraktionierungen, die im Zusammenhang mit der Mineralisation von organischen Schwefelverbindungen auftreten, sind im Abschnitt 3.1.1.3.4 detaillierter dargestellt. Wenn davon ausgegangen wird, dass die Bildung des kohlenstoffgebundenen

Schwefels aus den anthropogenen Schwefeleinträgen vollzogen wurde, ergibt sich für das Sulfat, das aus dem CS-Pool freigesetzt wurde, ein $\delta^{34}\text{S}$ -Wertebereich von -1 bis +11‰ (VCDT). Da bei der CS-Mineralisation ebenfalls der gesamte Sauerstoff neu in das Sulfatmolekül eingebaut werden muss, liegen die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des mobilisierten Sulfats in einem vergleichbaren Bereich wie bei der Sulfidoxidation. Die Mineralisation (Hydrolyse) von Estersulfaten ist von einer deutlichen Fraktionierung der Schwefelisotope begleitet. Daher ergibt sich im Gegensatz zur CS-Mineralisation ein erheblich veränderter $\delta^{34}\text{S}$ -Wertebereich von etwa -10 bis +2‰ (VCDT). Bei der Hydrolyse der Estersulfate muss maximal $\frac{1}{4}$ des Sauerstoffs neu in das Sulfatmolekül eingebaut werden. Dadurch unterscheiden sich die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des durch diesen Prozess gebildeten Sulfats nicht wesentlich von den anthropogenen Einträgen und liegen in einem Bereich zwischen +5 und +14‰ (VSMOW).

4.4 Isotopische Zusammensetzung von gelösten Bestandteilen im Grund- und Oberflächenwasser des Untersuchungsgebietes Mockritz

4.4.1 Verteilung der Sulfatgehalte im Grundwasser

Die Untersuchung der räumlichen Verteilung der Sulfatgehalte im Grundwasser des Trinkwassereinzugsgebietes Mockritz wurde vorrangig durch die Arbeiten der Verbundprojektspartner HTW-Dresden (Probenahme, Auswertung) und TU-Dresden (hydrochemische Analytik) realisiert. Wesentliche Grundlage für die Erstellung der räumlichen Verteilungsbilder bildete eine Stichtagsbeprobung im Mai 2000, in die mehr als 400 Grundwassermessstellen einbezogen wurden.

Abbildung 33 zeigt die regionale Verteilung der Sulfatgehalte im oberen Pegelniveau, das alle Messstellen von der Grundwasseroberfläche bis 15m unter Geländeoberkante einschließt.

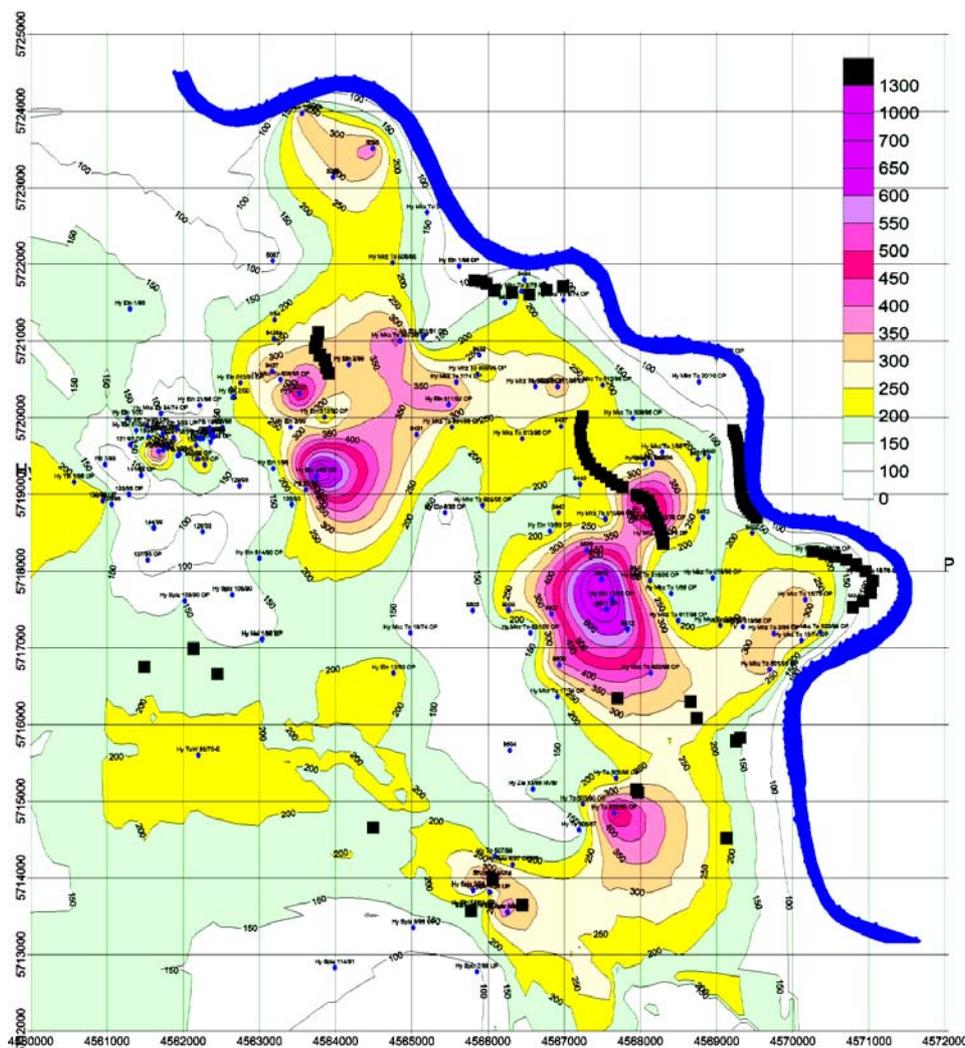


Abbildung 33: Regionale Verteilung der Sulfatgehalte im oberen Pegelniveau (GWO-15m uGOK) im Untersuchungsgebiet Mockritz (Quelle: HTW-Dresden)

Im überwiegenden Flächenanteil des Untersuchungsgebietes liegen die Konzentrationen des gelösten Sulfates unterhalb von 250mg/l. In lokal sehr eng begrenzten Bereichen des oberen Pegelniveaus lassen sich aber Extremkonzentrationen von mehr als 1000mg/l feststellen. Anhand des Verteilungsbildes lassen sich drei Sulfathochlastgebiete erkennen. Die höchsten Konzentrationen werden im zentralen Untersuchungsgebiet, im unmittelbaren westlichen Vorfeld der Wasserfassung Mockritz I erreicht. Ebenfalls sehr hohe Konzentrationen sind im nördlichen Untersuchungsgebiet, insbesondere im südöstlichen Teil des WASAG-Geländes, und im südlichen Untersuchungsgebiet lokal sehr eng begrenzt im Bereich der Gemeinde Süptitz und nordwestlich des Stadtgebietes von Torgau zu finden. Entsprechend ihrer geografischen Lage werden die beiden großflächigen Hochlastgebiete im Norden und in der Mittel des Untersuchungsgebietes als nördliche und zentrale Sulfatzone bezeichnet.

Die gleiche Lage der Sulfathochlastgebiete zeigt sich in der für den Aquiferbereich von 15 bis 35m unter Geländeoberkante (entspricht annähernd dem mittleren Pegelniveau) berechneten Verteilung (HTW-Dresden). Allerdings werden in diesem Tiefenbereich nur noch maximale Sulfatkonzentrationen von 400mg/l gemessen.

Im Verteilungsbild für den Tiefenbereich von 35m unter Geländeoberkante bis zur Aquiferbasis sind die für die beiden oberen Horizonte typischen Hochlastgebiete nicht mehr zu erkennen. In dieser Tiefe liegen die Sulfatkonzentrationen nahezu durchgehend unterhalb von 200mg/l. Lokale Erhöhungen bis 400mg/l lassen sich nur im unmittelbaren Umfeld des Brunnen 17 der Wasserfassung Mockritz I (zentrale Sulfatzone) und im Bereich der Messstelle To502/95 UP (zwischen südlicher und zentraler Sulfatzone) beobachten. In einem schmalen Streifen, der diese beiden Punkte erhöhter Konzentrationen verbindet, sind die Sulfatgehalte gegenüber dem restlichen Untersuchungsgebiet zwar erhöht, erreichen aber in keinem Fall mehr als 250mg/l.

4.4.2 Isotopische Zusammensetzung des gelösten Grundwassersulfats

4.4.2.1 Ermittlung der Herkunft des Grundwassersulfats

In Tabelle 8 sind die isotopischen Zusammensetzungen von Sulfaten zusammengefasst, die durch verschiedene Prozesse aus der Bodenzone mobilisiert und mit dem Sickerwasser ins Grundwasser transportiert werden. Anhand der isotopischen Zusammensetzung des Sulfats aus im Grundwasser sollte versucht werden, den jeweiligen Prozess zu ermitteln und die Relevanz der verschiedenen Mobilisierungsprozesse für das gesamte Untersuchungsgebiet abzuschätzen. Dazu wurden Schwefelisotopenuntersuchungen an 510 Grundwasserproben durchgeführt. Die Proben wurden aus insgesamt 256 Messstellen gewonnen, von denen die

überwiegende Mehrheit mehrfach beprobt wurde. Isotopische Untersuchungen des Sulfatsauerstoffs wurden an 391 Grundwasserproben durchgeführt, die aus 138 Messstellen stammen.

Die generellen Schwankungsbereiche der $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Grundwassersulfats zeigen die Häufigkeitsverteilungen in Abbildung 34.

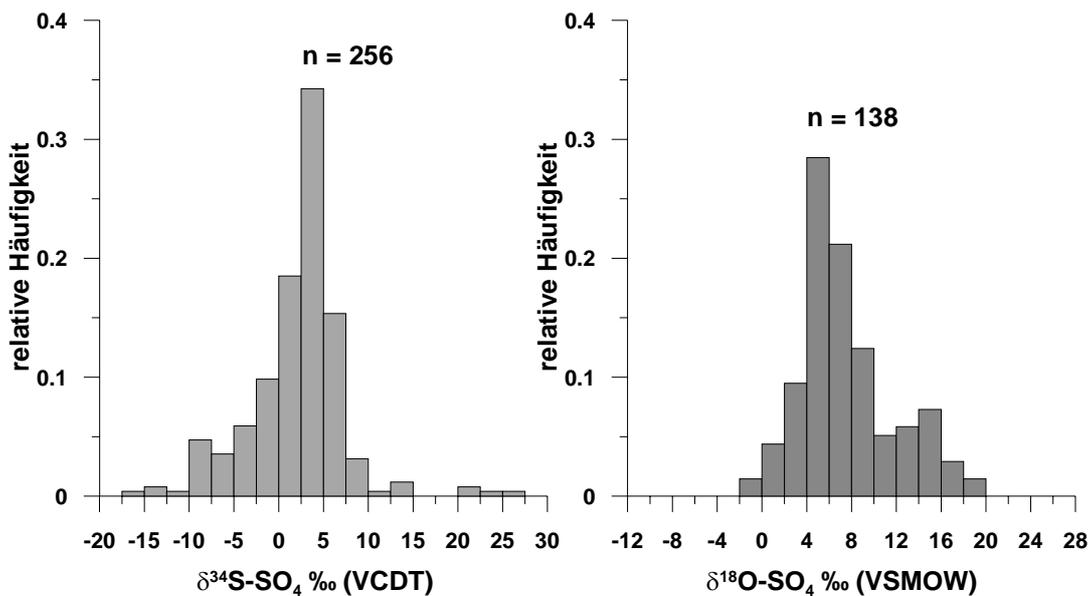


Abbildung 34: Häufigkeitsverteilungen der $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Grundwassersulfats im Untersuchungsgebiet Mockritz. Zur Berechnung wurden die Mittelwerte der einzelnen Messstellen verwendet (für $\delta^{34}\text{S}$: 155 Messstellen GWO und OP, 37 Messstellen MP, 64 Messstellen UP; für $\delta^{18}\text{O}$: 70 Messstellen GWO und OP, 30 Messstellen MP, 38 Messstellen UP)

Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des Grundwassersulfats weisen einen erheblichen Schwankungsbereich (Einzelwerte) zwischen -19 und +37‰ (VCDT) auf. Ein deutliches Häufigkeitsmaximum ist in Abbildung 34 bei +2,5 bis +5‰ zu erkennen. Da das prozessbedingte Fraktionierungsverhalten der Sauerstoffisotope im Sulfat generell nicht so ausgeprägt ist, wie das der Schwefelisotope, zeigen die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Grundwassersulfats auch einen kleineren Schwankungsbereich zwischen -2 und +19‰ (VSMOW). Auch hier ist ein signifikantes Häufigkeitsmaximum zwischen +4 und +8‰ sichtbar. Die Lage der Häufigkeitsmaxima gibt einen ersten allgemeinen Anhaltspunkt über die vorherrschende Herkunft des Grundwassersulfats. Die durch die Häufigkeitsmaxima beschriebenen isotopischen Bereiche entsprechen der isotopischen Zusammensetzung des direkt verlagerten anorganischen Bodensulfats, das primär aus dem diffusen Eintrag aus anthropogenen Quellen stammt (vgl. Tabelle 7).

Ein detailliertes Bild über die Herkunft des Grundwassersulfat liefert die Gegenüberstellung der $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte, die in Abbildung 35 gezeigt ist.

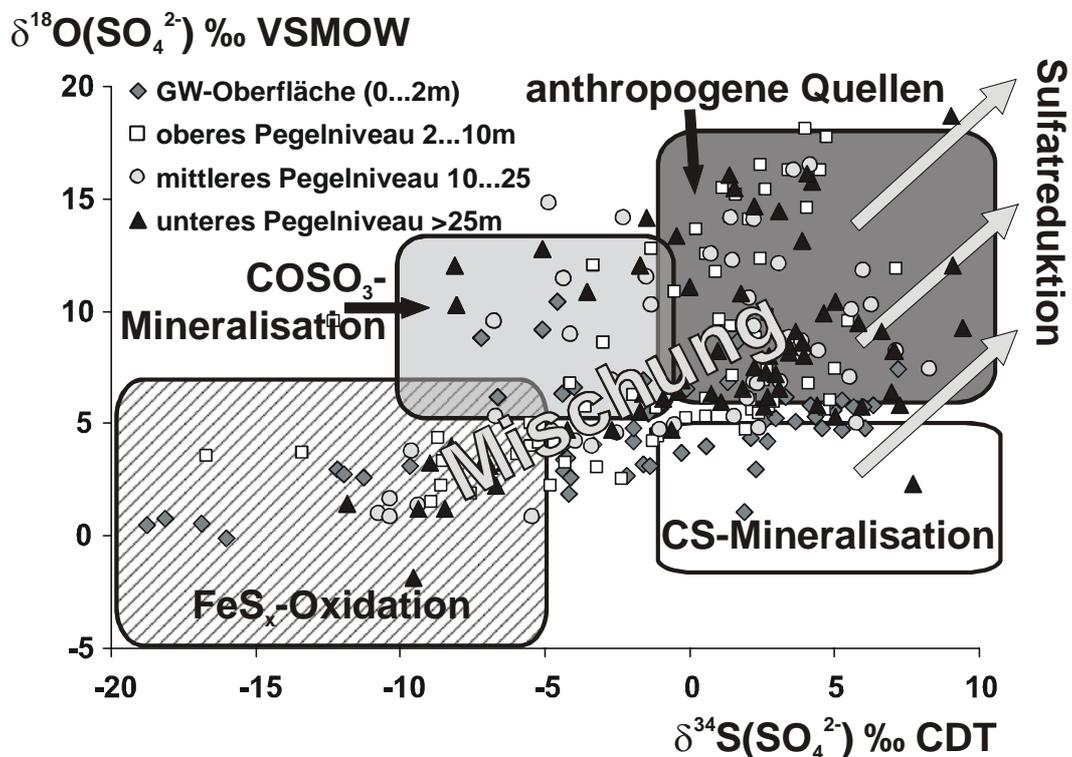


Abbildung 35: Isotopische Zusammensetzung von gelösten Grundwassersulfaten aus dem UG Mockritz (Mittelwerte)

Das Diagramm in Abbildung 35 zeigt die isotopischen Bereiche, die durch die verschiedenen Mobilisierungsprozesse (Tabelle 8) erzeugt werden. Man erkennt, dass sich in jedem der möglichen Bereiche eine unterschiedliche Anzahl von Proben gruppiert. Bei der zusammenfassenden Betrachtung aller Beprobungsniveaus können die meisten Proben durch direkte Verlagerung von Sulfat aus anthropogene Quellen beschrieben werden. Ebenfalls ein sehr großer Anteil der Proben liegt im für Pyritoxidation typischen Feld. Deutlich weniger Proben befinden sich in den isotopischen Bereichen, die der Mobilisierung organischen Schwefels zuzuschreiben sind.

Zwischen den einzelnen Beprobungsniveaus ist keine eindeutige Differenzierung möglich. Jedes der im Diagramm dargestellten Felder beinhaltet eine unterschiedlich große Anzahl von Sulfatproben aus allen möglichen Niveaus. Allerdings zeigt sich, dass Pyritoxidationsbeeinflusste Sulfate in erster Linie von der Grundwasseroberfläche und aus dem oberen Pegelniveau stammen. Ebenso wird Sulfat, welches der Mineralisation von Kohlenstoffgebundenem Schwefel zuzuordnen ist, vorrangig an der Grundwasseroberfläche angetroffen.

Die Gegenüberstellung der $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Sulfats hat teilweise allerdings nur eine eingeschränkte Aussagekraft zur Herkunftsbestimmung jeder einzelnen Sulfatprobe. Ein wesentlicher Prozess, der die ursprünglichen Isotopensignaturen überlagert und damit eine Quellzuordnung erschwert, ist die Mischung. Durch die dynamischen Fließverhältnisse, die überall im Untersuchungsgebiet in allen Beprobungsniveaus auftreten können, kann es zur Mischung von Sulfaten aus isotopisch unterschiedlichen Quellen kommen. Wird z.B. Sulfat aus der Pyritoxidation mit Sulfat gemischt, das aus der atmosphärischen Deposition stammt, hat das resultierende Sulfat eine Isotopensignatur, die der Hydrolyse organischer Sulfate entspricht. Mischungsprozesse werden insbesondere durch die Lage zahlreicher Datenpunkte im $\delta^{34}\text{S}$ - $\delta^{18}\text{O}$ -Diagramm (Abbildung 35) in den Zwischenräumen der definierten isotopischen Quellenbereiche verdeutlicht.

Ein weiterer, die Quellzuordnung erschwerender Prozess ist die dissimilatorische Sulfatreduktion. Diese kann zu einer Erhöhung sowohl des $\delta^{34}\text{S}$ - als auch des $\delta^{18}\text{O}$ -Wertes im gelösten Sulfats führen. Damit wird je nach Ausmaß der Sulfatreduktion die ursprüngliche isotopische Zusammensetzung stark verändert sein, wodurch die Ermittlung der eigentlichen Sulfatquelle unmöglich wird.

Insgesamt liefert die Gegenüberstellung der $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Sulfats nur ein qualitatives Bild zur Einschätzung der Sulfateinträge aus verschiedenen Quellen in das Grundwasser. Wesentlich bedeutsamer für die Analyse des Sulfathaushaltes ist die Fragestellung, welchen Quellen die gegenüber dem Durchschnitt erhöhten Sulfatfrachten zuzuordnen sind. Zu diesem Zweck empfiehlt sich die Gegenüberstellung der Sulfatkonzentrationen und der jeweiligen Isotopensignaturen.

Abbildung 36 zeigt den Zusammenhang zwischen den $\delta^{34}\text{S}$ -Mittelwerten und den entsprechenden mittleren Sulfatgehalten für Grundwasserproben aus dem Untersuchungsgebiet. Darüber hinaus ist der Bereich markiert, der anhand seiner Schwefelisotopensignatur als typisch für Sulfidoxidation angesehen werden kann. In dieser Darstellung wird eine eindeutige konzentrationsabhängige isotopische Differenzierung deutlich. Sehr hohe Sulfatgehalte von mehr als 700mg/l sind weitestgehend durch Sulfat bestimmt, das scheinbar durch die Oxidation sedimentärer Sulfide freigesetzt wurde. Allerdings sind auch einige Proben zu erkennen, die durch deutlich positive $\delta^{34}\text{S}$ -Werte und sehr hohe Sulfatgehalte auffällig sind. Diese Grundwasserproben stammen aus den Messstellen Eln4/93-OP, PB21/93 und Eln511/90, die sich alle im Bereich der Neutralisationsanlage des WASAG-Geländes befinden. Daher ist es sehr wahrscheinlich, dass auch die Elution des dort abgelagerten Gipses lokal sehr hohe Sulfatkonzentrationen erzeugen kann. Mittlere Konzentrationen

(300...700mg/l) können nicht vorrangig einer bestimmten Quelle zugeordnet werden. Hier spielen Sulfidoxidation und die Mobilisierung des anthropogen eingetragenen Sulfats in etwa eine gleichbedeutende Rolle. Niedrige Konzentrationen (<300mg/l) hingegen sind eindeutig durch anthropogenen Quellen dominiert. Auch bei dieser Darstellung müssen eventuelle Mischungsprozesse berücksichtigt werden. Wenn ein Grundwasser mit niedriger Sulfatkonzentration und deutlich positiven $\delta^{34}\text{S}$ -Werten (Sulfat aus anthropogenem Eintrag) mit einem Grundwasser gemischt wird, das sehr hohe Gehalte und negative Isotopenwerte aufweist (Sulfat aus der Pyritoxidation), liegt das resultierende Sulfat in einem mittleren Konzentrations- und Isotopenwertebereich. Daher ist es sehr wahrscheinlich, dass ein großer Teil der in Abbildung 36 dargestellten Grundwasserproben mit mittleren Konzentrationen keine einzelne primäre Sulfatkomponente sondern vielmehr eine sekundäre Sulfatmischung enthält.

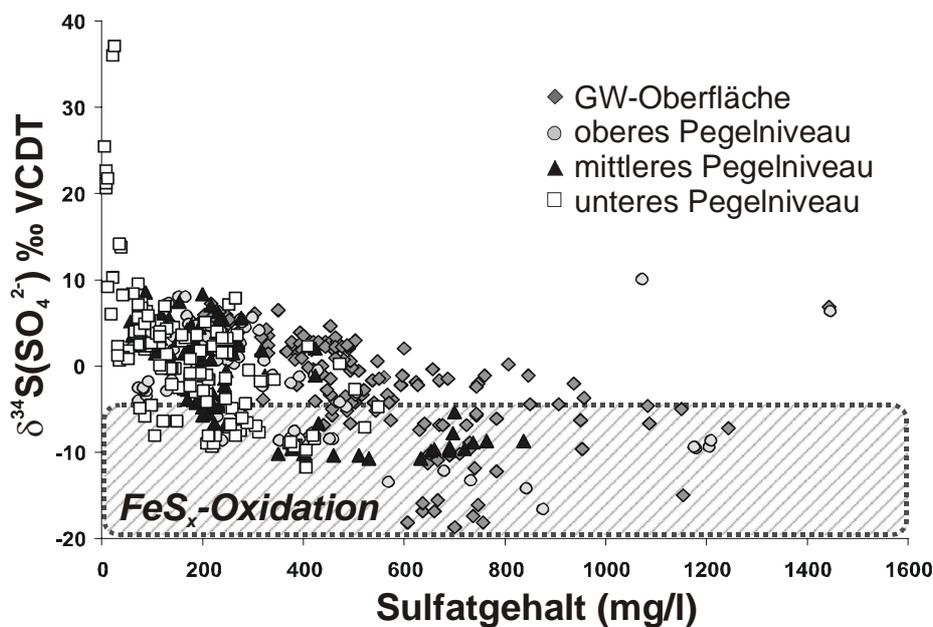


Abbildung 36: Zusammenhang zwischen den Sulfatgehalten und den $\delta^{34}\text{S}$ -Werten in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Mockritz

Einen weniger eindeutigen Befund liefert die Gegenüberstellung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Sulfats und der Sulfatgehalte, die in Abbildung 37 dargestellt ist. Dies liegt in erster Linie daran, dass sowohl die Oxidation sedimentärer Sulfide als auch die Mineralisation von Kohlenstoff-gebundenem Schwefel, der seine primäre Quelle in den anthropogenen Einträgen hat, eine annähernd gleiche Sauerstoffisotopensignatur erzeugen können. Kombiniert man aber die Aussage aus Abbildung 37 mit den Erkenntnissen aus dem $\delta^{34}\text{S}$ - SO_4 -Diagramm (Abbildung 36), wird deutlich, dass bei hohen Sulfatkonzentrationen die Mobilisierung von

C-S aufgrund der vorliegenden $\delta^{18}\text{O}$ -Werte zwar in Erwägung gezogen werden muss, aber wegen der viel zu niedrigen $\delta^{34}\text{S}$ -Werte dennoch weitestgehend ausgeschlossen werden kann. Bei den extrem erhöhten Sulfatkonzentrationen ($>800\text{mg/l}$) erkennt man in Abbildung 37, dass die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Sulfats außerhalb des für Sulfidoxidation typischen Bereiches liegen. $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Sulfats von $>+5$ bis $+10\text{‰}$ (VSMOW) sind charakteristisch für die direkte Verlagerung der anthropogenen Einträge oder für die Hydrolyse organischer Sulfate. Während beim erstgenannten Prozess positive $\delta^{34}\text{S}$ -Werte erzeugt werden, dieser somit auszuschließen ist, können bei der Hydrolyse durchaus Schwefelisotopenwerte von bis zu -10‰ (VCDT) auftreten.

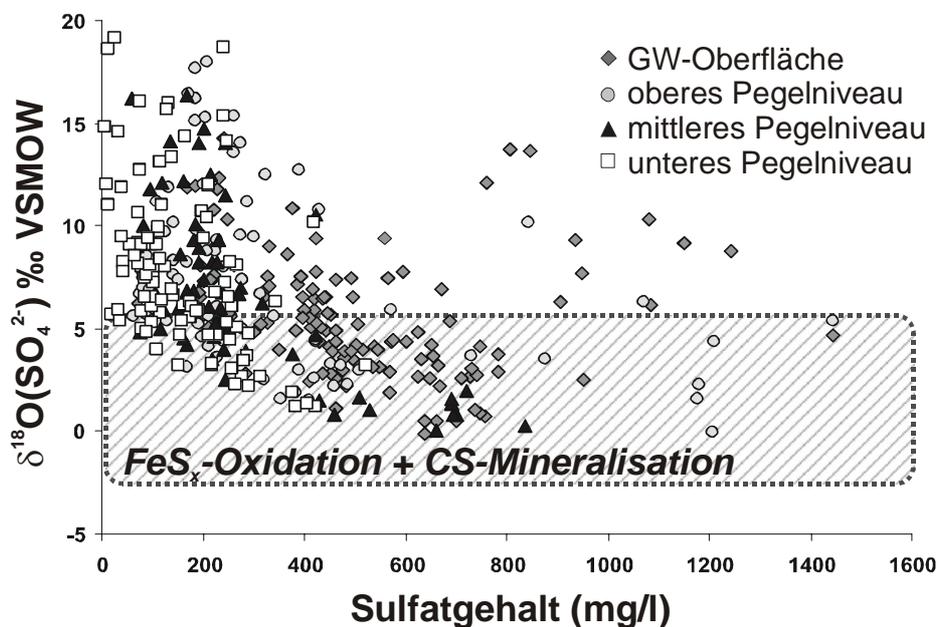


Abbildung 37: Zusammenhang zwischen den Sulfatgehalten und den $\delta^{18}\text{O}\text{-SO}_4$ -Werten in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Mockritz

Abbildung 38 zeigt die Gegenüberstellung von $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werten bei drastisch erhöhten Sulfatgehalten von mehr als 700mg/l . In dieser Darstellung wird deutlich, dass nur etwa die Hälfte der Proben des oberen Konzentrationsbereiches eindeutig der Sulfidoxidation zuzuordnen sind. Für die drei Proben aus den Messstellen Eln4/93-OP, PB21/93 und Eln511/90 bestätigt sich die Herkunft des Sulfats aus der Elution von Gips, der auf der Deponie der Neutralisationsanlage abgelagert wurde. Für eine große Anzahl von Proben lässt sich anhand des Diagramms eine Sulfatherkunft aus der organischen Sulfathydrolyse vermuten. Dies verwundert zunächst insofern, als dass die Untersuchungen des

Projektpartners TU-Dresden ergeben haben, dass organische Estersulfate und deren Mineralisation im Untersuchungsgebiet nur eine sehr unbedeutende Rolle spielen (vgl. Abschnitt 4.3.3). Vier von den Proben, die in diesen isotopischen Bereich fallen sind Einzelbestimmungen für die Messstelle 11/93-OP. Eine weitere Einzelbestimmung für diese Messstelle zeigt einen ähnlich hohen $\delta^{18}\text{O}$ -Wert, liegt aber mit einem $\delta^{34}\text{S}$ -Wert von -14‰ (VCDT) deutlich außerhalb des für die Hydrolyse definierten Bereiches. Da sich die Sulfatgehalte bei den Einzelbestimmungen in einem vergleichbaren Bereich bewegen, erscheint es unwahrscheinlich, dass zwischen zwei Messzeitpunkten ein Wechsel der Sulfatquelle für das in der Messstelle befindliche Sulfat stattfindet. Aus diesem Grund ist zu vermuten, dass für die Messstelle eine isotopisch negative Quelle (sedimentäres Sulfid) relevant ist, dass es sich bei dem Mobilisierungsmechanismus aber um einen Prozess handelt, der ähnlich hohe $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Sulfat erzeugt, wie die Hydrolyse organische Sulfate. Eine Möglichkeit bestünde in der Oxidation der sedimentären Sulfide durch Nitratabbau (autotrophe Denitrifikation). Dies scheint insbesondere deswegen möglich, da die betroffenen Proben nahezu ausschließlich aus dem Bereich der Grundwasseroberfläche stammen, wo ein Nitrateinfluss wahrscheinlicher ist, als in tieferen Horizonten des Grundwasserleiters. Allerdings sind bislang noch keine Untersuchungen hinsichtlich der isotopischen Beeinflussung des Sulfats durch den Nitratsauerstoff publiziert, so dass diese Möglichkeit weder bestätigt noch ausgeschlossen werden kann.

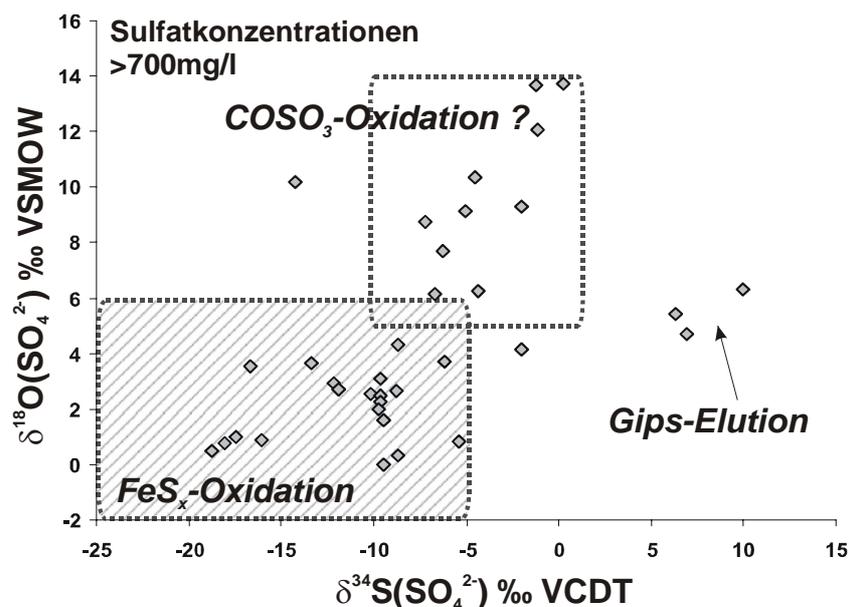


Abbildung 38: $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Sulfats in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Mockritz, deren Sulfatgehalte höher als 700mg/l sind

4.4.2.2 Räumliche Verteilungsmuster der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Grundwassersulfats

Die große Messstellendichte des Untersuchungsgebietes ermöglicht die Erstellung von regionalen Parameterverteilungsbildern mit hoher statistischer Sicherheit. Da an den meisten Messstellen auch Schwefelisotopenuntersuchungen vorgenommen wurden, war es möglich das räumliche Verteilungsmuster der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte zu konstruieren. Das Ziel dieser Untersuchungen bestand darin, die lokale und regionale Relevanz der in ihren Isotopensignaturen verschiedenen Sulfatquellen für das gesamte Untersuchungsgebiet abzuschätzen und eventuell die Dynamik der Sulfatverlagerung nachzuvollziehen.

Abbildung 39 zeigt die Verteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Mittelwerte des gelösten Grundwassersulfats im oberen Pegelniveau (Grundwasseroberfläche bis 10m darunter).

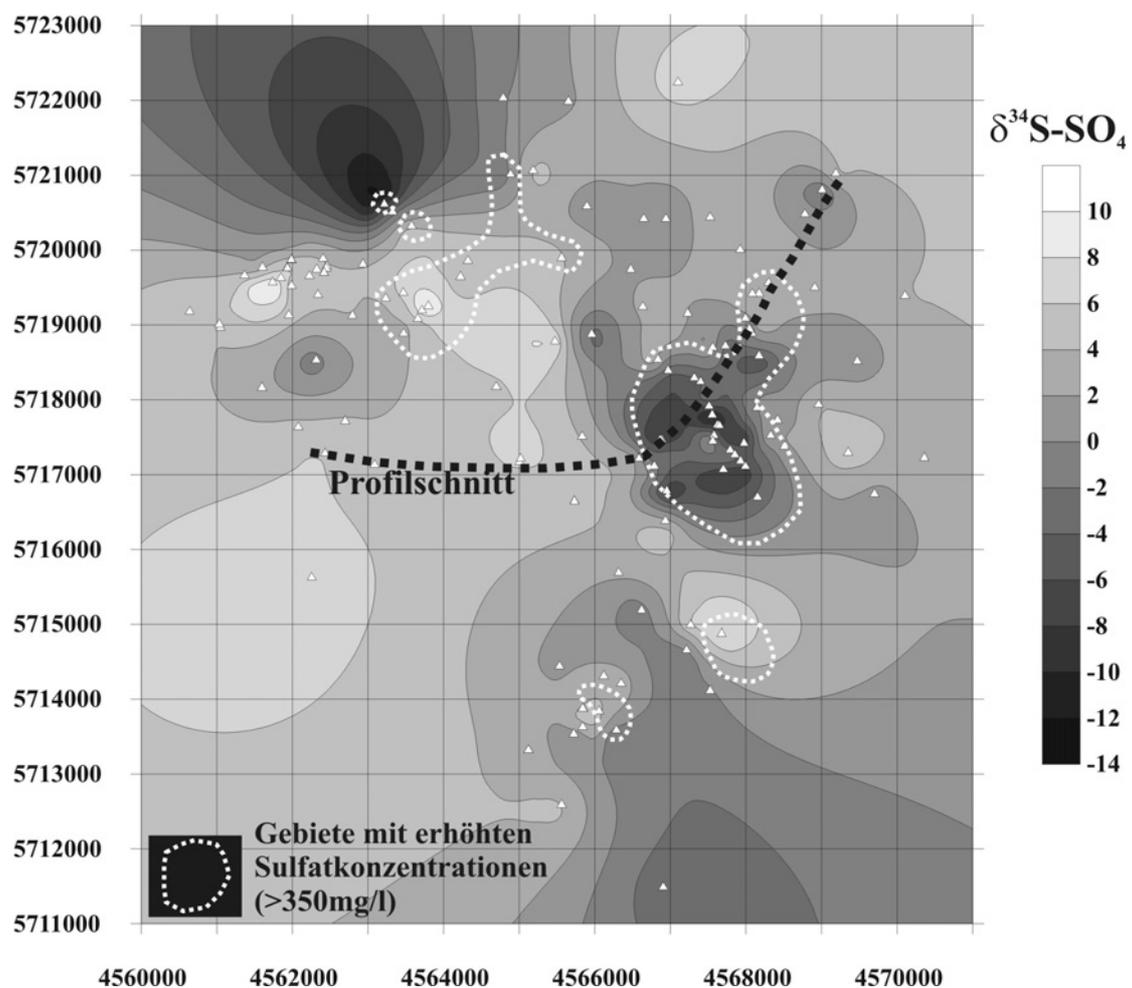


Abbildung 39: Regionale Verteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Grundwassersulfats im oberen Pegelniveau des Untersuchungsgebietes Mockritz (Grundwasseroberfläche bis 10m darunter)

Anhand des Verteilungsbildes kann abgeschätzt werden, dass Sulfat mit leicht positiven $\delta^{34}\text{S}$ -Werten, welches vorrangig aus diffusen anthropogenen Einträgen stammt, eine flächenmäßige Dominanz im oberen Pegelniveau aufweist. Insbesondere im zentralen Untersuchungsgebiet ist aber ein größerer Bereich sichtbar, in denen Sulfat vorherrschend negative $\delta^{34}\text{S}$ -Werte besitzt und damit der Sulfidoxidation zugeordnet werden kann. Dabei besteht eine annähernde Kongruenz zwischen der durch den Projektpartner HTW-Dresden ermittelten zentralen Sulfatzone und dem Ausdehnungsbereich des isotopisch negativen Sulfats.

In der nördlichen Sulfatzone lässt sich diese Kongruenz zwischen den Verteilungen der Isotopenwerte und der Gehalte nicht beobachten. Hier ist den erhöhten Gehalten ein $\delta^{34}\text{S}$ -Wertebereich von -13 bis +10‰ (VCDT) zuzuordnen. Damit kann eine einheitliche Sulfatquelle für die nördliche Sulfatzone ausgeschlossen werden. Im südwestlichen Bereich der nördlichen Sulfatzone (Messstellen Eln4/93-OP, PB21/93 und Eln511/90) liegen deutlich positive $\delta^{34}\text{S}$ -Werte vor, die im Zusammenhang mit der Elution des Gipses stehen, welcher auf dem Gelände der Neutralisationsanlage deponiert wurde. Im mittleren und nordöstlichen Abschnitt der nördlichen Sulfatzone (Messstellen 9428, Eln1/99-OP, 9430 und To507/95-OP) ist gelöstes Sulfat mit leicht positiven $\delta^{34}\text{S}$ -Werten vorzufinden, das wahrscheinlich durch die direkte Verlagerung von anthropogenen Einträgen in das Grundwasser transportiert wurde. Dabei ist jedoch der Mechanismus unklar, durch den die weit über dem Durchschnitt des Untersuchungsgebietes liegenden Sulfatkonzentrationen an den betroffenen Stellen verursacht wurden. $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von -13‰ (VCDT) im gelösten Sulfat der Messstelle 9427 (nordwestlicher Teil der nördlichen Sulfatzone) deuten darauf hin, dass die erhöhten Sulfatgehalte durch Sulfidoxidation verursacht wurden. Allerdings scheint es sich in diesem Fall um ein lokales Phänomen zu handeln. Die durch das räumliche Verteilungsbild in Abbildung 39 suggerierte großflächige Ausdehnung des Sulfidoxidationsbereiches im nordwestlichen Untersuchungsgebiet ist dem zur Konstruktion verwendeten Interpolationsverfahren (Kriging) in Kombination mit den fehlenden Stützstellen geschuldet. Im südlichen Untersuchungsgebiet treten die erhöhten Sulfatkonzentrationen nur in zwei lokal sehr eng gefassten Bereichen auf. In einem der beiden Fälle handelt es sich um die Messstelle To502/90-OP, für die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte von etwa +8‰ ermittelt wurden. Die lokalen Standortgegebenheiten liefern keine Anhaltspunkte für zusätzliche punktuelle Sulfatquellen, weswegen wiederum von der direkten Verlagerung der anthropogenen Einträge ausgegangen werden muss. Allerdings bleibt auch hier unklar, wieso dieser, im Maßstab des Untersuchungsgebietes flächenmäßig dominierender Prozess lokal wesentlich höhere Sulfatkonzentrationen verursacht, als an fast allen anderen Messstandorten.

Der zweite Bereich erhöhter Sulfatkonzentrationen im südlichen Untersuchungsgebiet befindet sich auf dem Gelände der ehemaligen Munitionsfabrik Süptitz. In ähnlicher Weise wie auf dem WASAG-Gelände in der nördlichen Sulfatzone ist hier von einer Mobilisierung der deponierten Sprengstoff-Produktionsrückstände, insbesondere Gips, als lokale Quelle der erhöhten Konzentrationen auszugehen.

Im mittleren Pegelniveau zeigt das $\delta^{34}\text{S}$ -Verteilungsbild eine wesentlich geringere Differenzierung. Die flächenmäßige Dominanz von isotopisch leicht positiven Sulfaten aus anthropogenen Einträgen wird hier noch deutlicher. Zwar existiert im zentralen Untersuchungsgebiet wiederum ein Bereich, der durch isotopische negative Sulfate aus der Sulfidoxidation charakterisiert ist, allerdings beschränkt sich dessen Ausdehnung auf das unmittelbare Umfeld des südlichen Abschnittes der Wasserfassung Mockritz I.

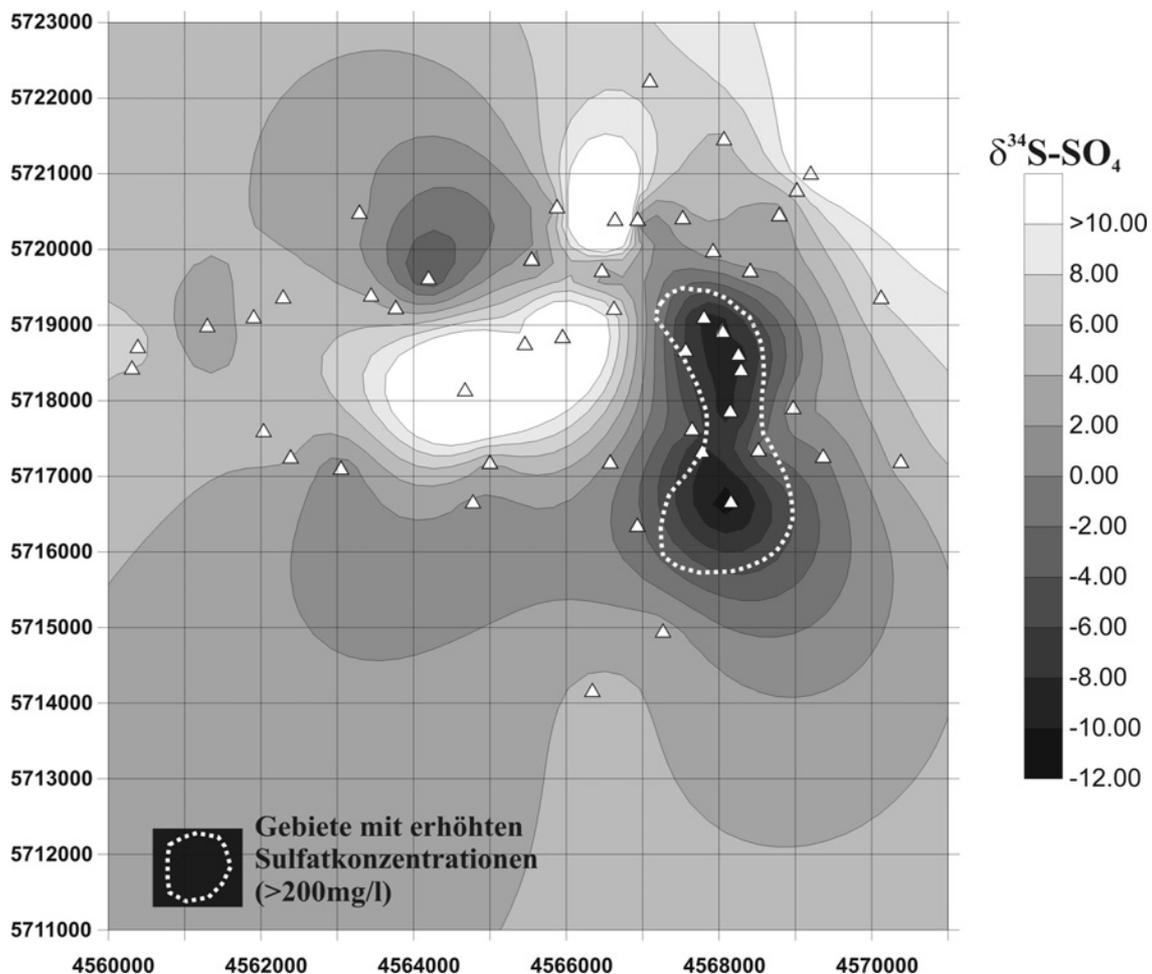


Abbildung 40: Regionale Verteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Grundwassersulfats im unteren Pegelniveau des Untersuchungsgebietes Mockritz (25 bis 55m unter GWO))

Die Verteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte im unteren Pegelniveau ist in Abbildung 40 gezeigt. Dieses Pegelniveau weist gegenüber dem mittleren Niveau wieder eine deutlichere isotopische Differenzierung auf. Es besteht eine Kongruenz zwischen den Sulfat-Hochlastbereichen, die durch HTW-Dresden für diesen Tiefenbereich ermittelt wurden, und den Ausdehnungsarealen der isotopisch negativen Sulfate aus der Sulfidoxidation. Daraus lässt sich ableiten, dass die erhöhten Konzentrationen im unteren Pegelniveau ausschließlich der Sulfidoxidation zuzuordnen sind. Die größere isotopische Differenzierung ergibt sich allerdings weniger aus den Quellvariationen als vielmehr aus einem anderen isotopelevanten Prozess, nämlich der dissimilatorischen Sulfatreduktion. In der Gegenüberstellung der Sulfatgehalte und der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte in Abbildung 36 sind mehrere Proben aus dem unteren Pegelniveau zu erkennen, die durch sehr geringe Sulfatgehalte ($<25\text{mg/l}$) und gleichzeitig sehr positive $\delta^{34}\text{S}$ -Werte (bis $+37\text{‰}$) auffällig sind. Diese Kombination der Parameter ist ein eindeutiges Indiz für das Auftreten dissimilatorischer Sulfatreduktion. Der Reduktionsprozess lässt sich insbesondere im zentralen Untersuchungsgebiet, nordwestlich der Wasserfassung Mockritz I beobachten. Die betroffenen Messstellen sind To20/74-UP, To503/95-UP, Eln6/93-UP. Geologische und geophysikalische Untersuchungen durch HGN-Torgau haben ergeben, dass im Bereich dieser Messstellen Stauhohizonte in den Grundwasserleiter eingeschaltet sind, die einen vertikalen Transport von oberflächennah generierten Stofffrachten verhindern und damit optimale Reduktionsbedingungen in tieferen Bereichen ermöglichen.

Neben der flächenhaften Verteilung in den einzelnen Pegelniveaus wurde auch die Verteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte in einem Vertikalschnitt durch das zentrale Untersuchungsgebiet betrachtet. Das Verteilungsbild im Profilschnitt ist in Abbildung 41 dargestellt. Der Vertikalschnitt befindet sich im Messprofil, das annähernd die Grundwasserstrombahn von der Hochfläche durch die Elbtalwanne bis zum Brunnen 17 der Wasserfassung Mockritz I und darüber hinaus zur Elbe nachzeichnet. Die Lage des Schnittes ist in Abbildung 39 angegeben.

Auch in der Schnittdarstellung wird eine flächenmäßige Dominanz der isotopisch leicht positiven Sulfate aus der direkten Verlagerung von anthropogenen Einträgen deutlich. Am westlichen Rand der Elbtalwanne, ca. 1,5km westlich der Fassung Mockritz I sind im oberflächennahen Bereich isotopisch deutlich negative, aus der Pyritoxidation stammende Sulfate zu finden, die in Richtung Wasserfassung zunehmend in tiefere Bereiche abtauchen. Im oberflächennahen Bereich der Wasserfassung selbst liegen wiederum isotopisch positive Sulfate vor. Der isotopische Unterschied zwischen oberflächennah anstehenden Sulfat im Bereich der Wasserfassung und dem Sulfat aus Brunnen 17 legt den Schluss nahe, dass das

mit dem Rohwasser geförderte Sulfat nicht aus dem unmittelbaren Umfeld der Wasserfassung stammt, sondern aus dem westlich vorgelagerten Auenbereich herangezogen wird.

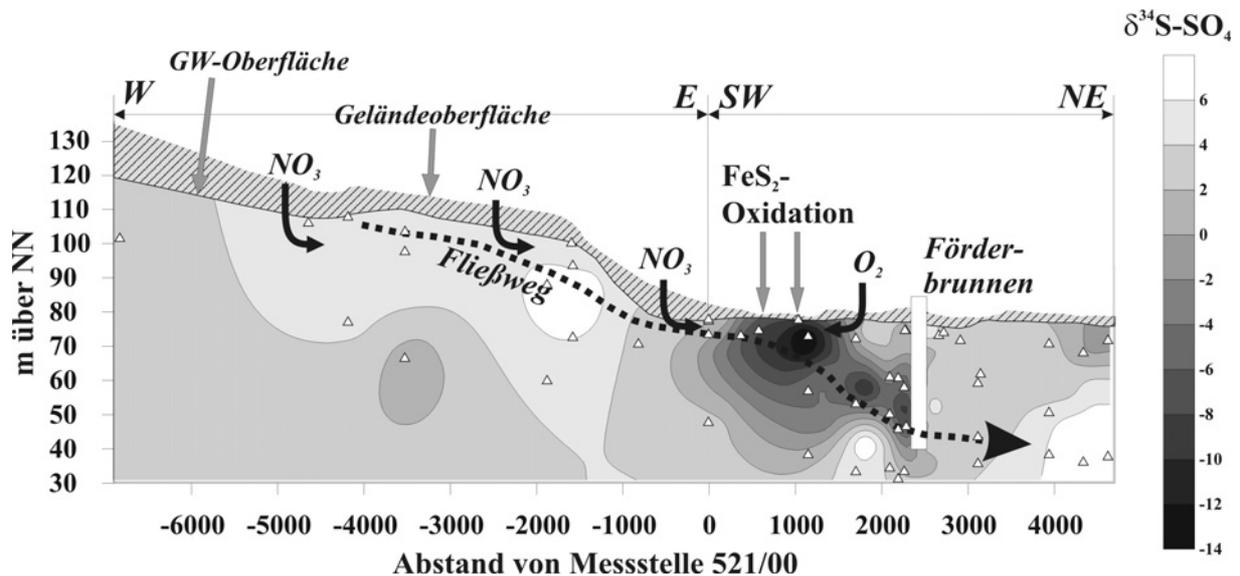


Abbildung 41: Verteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Sulfats im Profilschnitt durch das zentrale Sulfathochlastgebiet des Untersuchungsgebietes Mockritz

Als ein möglicher Mobilisierungsmechanismus des Sulfats wird der Prozess der autotrophen Denitrifikation angenommen. Das von der Hochfläche oberflächennah zuströmende Grundwasser hat dort eine erhebliche, aus der Düngung stammende Nitratfracht aufgenommen. Gelangt dieses Nitrat auf seinem Weg durch die Elbaue in Bereiche mit sekundären Sulfidanreicherungen, kommt es zum autotrophen Abbau des Nitrats bei gleichzeitiger Oxidation des sedimentären Sulfids. Neben dem Eintrag des gelösten Nitrats in sulfidführende Bereiche durch Grundwasserzustrom, kann auch ein Eintrag über nitratreiche Drainagewässer erfolgen, die in einem Grabensystem auf Teilen der Hochfläche gesammelt werden und im Bereich der Sulfidanreicherung westlich der Wasserfassung Mockritz I in die Elbtalwanne gelangen. Das durch die lokale Versickerung dieser Drainagewässer eingetragene Nitrat liefert zusätzliches Oxidationspotenzial für die Sulfatmobilisierung aus den Sulfidanreicherungshorizonten. Hydrochemische Bilanzierungen durch den Projektpartner TU-Dresden haben gezeigt, dass das mit Grund- und Drainagewasser zugeführte Nitrat jedoch nicht ausreicht, um die gemessenen Sulfatkonzentrationen von stellenweise $>1000\text{mg/l}$ zu erzeugen. Aus diesem Grunde ist anzunehmen, dass neben der autotrophen Denitrifikation zusätzlich eine Oxidation durch freien Sauerstoff erfolgt. Die Bodenuntersuchungen im Bereich der Sulfidanreicherungen durch den Projektpartner ZALF-Müncheberg belegen, dass lokal die Auelehmbedeckung sehr gering mächtig ist oder gänzlich

fehlt. An solchen Stellen erhöhter Permeabilität, die darüber hinaus durch sehr geringe Grundwasserflurabstände gekennzeichnet sind, gelangt freier Sauerstoff bis zur Grundwasseroberfläche. Durch Grundwasserfließbewegungen kann der bis dahin noch nicht durch andere Oxidationsprozesse verbrauchte Anteil des aufgenommenen Sauerstoffs in sulfidführende Sedimente transportiert werden und dort eine Sulfatmobilisierung auslösen. Die Beiträge der einzelnen Mobilisierungsmechanismen des Sulfats aus den sekundären Sulfidanreicherungen konnten anhand von Isotopenmethoden allerdings nicht quantifiziert werden. Der derzeitige Kenntnisstand über die isotopische Konstitution des Sulfatsauerstoffs erlaubt keine Unterscheidung des Sulfats, das durch die Oxidation mit freiem Sauerstoff freigesetzt wurde, von dem Sulfat, welches der autotrophen Denitrifikation entstammt.

4.4.2.3 Bewirtschaftungsversuch am Brunnen 17 der Wasserfassung Mockritz I.

Innerhalb der Wasserfassung Mockritz I, in unmittelbarer Nachbarschaft des Brunnen 17, ist eine Versuchsanordnung für die Durchführung eines Bewirtschaftungsversuches installiert worden (Abbildung 42). Als Referenzstandort, bei dem keine künstliche Absenkung des Grundwasserspiegels durchgeführt wurde, diente die Messstelle To 521/00.

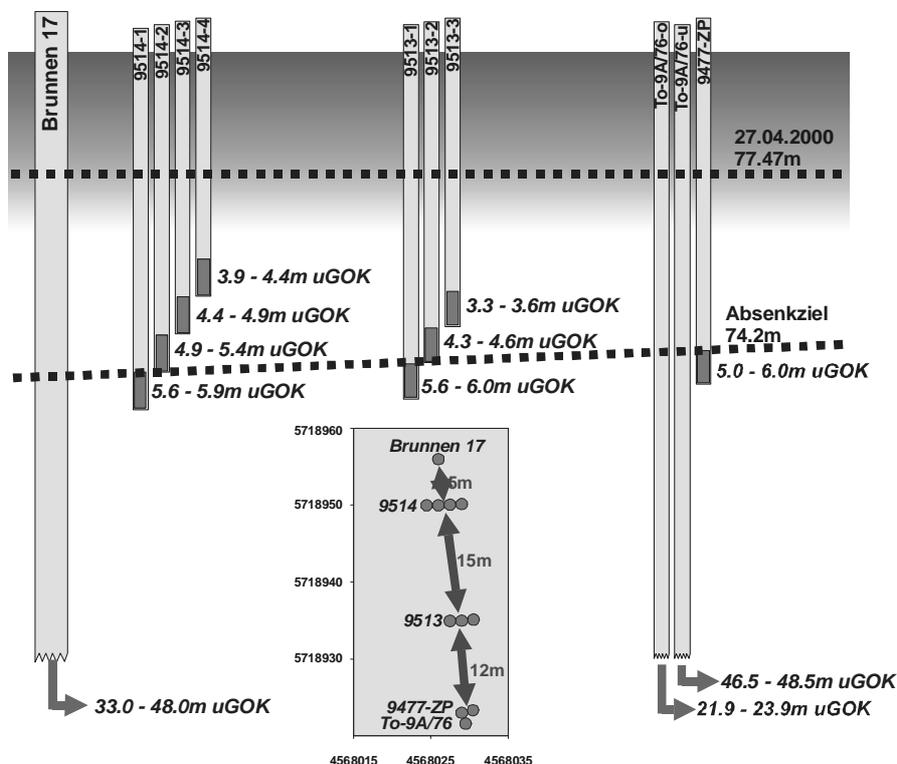


Abbildung 42: Versuchsanordnung zum Bewirtschaftungsversuch am Brunnen 17 der Wasserfassung Mockritz I

Ziel des Bewirtschaftungsversuches war es, die Frage zu klären, ob durch das Wechselspiel von Absenkung des Grundwasserspiegels und Grundwasserwiederanstieg eine Mobilisierung eventuell im Absenktrichter vorhandener Bodenschwefelspezies verursacht wird, die zu einer Erhöhung der Sulfatkonzentrationen im oberflächennahen Grundwasser führt. Zum Erreichen der maximalen Absenkung wurde der Brunnen 17 mit einer Förderleistung von 200m³/h beginnend Mitte Oktober für einen Monat lang betrieben. Nach Abschaltung des Brunnens erfolgte bis zum August 2001 ein Monitoring der isotopischen und hydrochemischen Beschaffenheitsentwicklung in den Messstellen der Versuchsanordnung.

Die zeitlichen Verläufe der Sulfatgehalte, $\delta^{34}\text{S}$ -Werte und Wasserstände für die Messstellengruppen 9513 und 9514 sowie für die Einzelmessstellen der Gruppe To9A/76 sind in Abbildung 43 dargestellt.

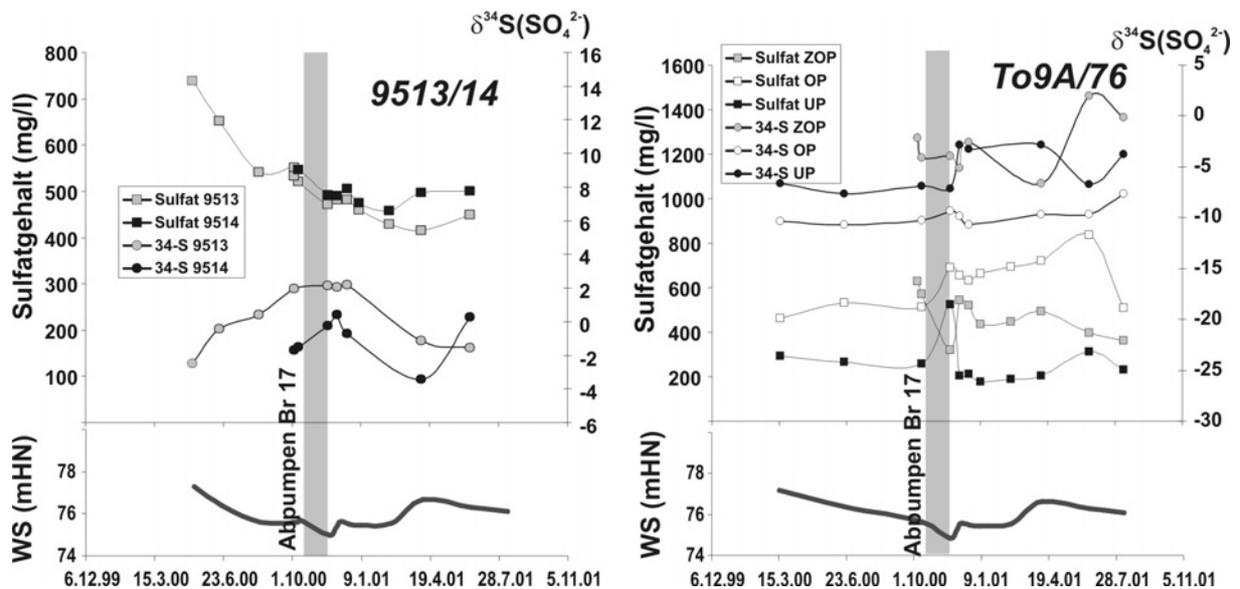


Abbildung 43: Zeitliche Verläufe der Sulfatgehalte, der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte und der Wasserstände in Messstellen der Versuchsanordnung zum Bewirtschaftungsversuch Mockritz

Bei der Betrachtung der Messstellegruppen 9513 und 9514 deutet sich bis unmittelbar nach Ende des Abpumpens von Brunnen 17 eine Korrelation zwischen Wasserständen und den Sulfatgehalten dahingehend an, dass mit sinkendem Grundwasserspiegel eine Abnahme der Gehalte an gelöstem Sulfat erfolgt. Es ist daher davon auszugehen, dass bis zum genannten Zeitpunkt im oberflächennahen Grundwasser eine stabile Konzentrationsschichtung vorliegt und dass mit sinkendem Wasserstand zunehmend geringere Sulfatgehalte in den ortsfesten Filterbereich der Messstellen gelangen. Im gleichen Zeitraum steigen bei sinkendem Wasserstand die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Sulfats kontinuierlich an. Neben der Konzentrationsschichtung ist daher auch eine Schichtung der isotopischen Sulfatzusammensetzung

anzunehmen. Im Gegensatz zum kontinuierlichen Verhalten bei der Grundwasserabsenkung ist nach dem Abschalten des Brunnen 17 und dem einsetzenden Wiederanstieg keine eindeutige Korrelation zwischen Wasserstand und Sulfatgehalten bzw. isotopischer Sulfatzusammensetzung vorhanden. Dieser Umstand legt die Vermutung nahe, dass die Anhebung des Wasserspiegels außer durch tiefen Zustrom auch durch lokale Grundwasserneubildung und oberflächennahen Lateralzustrom vollzogen wird und somit Wässer mit variierenden Sulfatgehalten und isotopischen Zusammensetzungen in die Filterbereiche der jeweiligen Messstellen gelangen.

Das Verhalten der Sulfatgehalte und isotopischen Sulfatzusammensetzungen in den Messstellen der Gruppe To 9A/76 zeigt keine eindeutige Abhängigkeit vom Wasserstandsverlauf. Lediglich die oberflächennahe Messstelle ZOP zeigt bis zum Ende des Abpumpens das gleiche Absinken der Sulfatgehalte wie die Messstellen 9513 und 9514. Ansonsten zeigen die Werte für die Messstelle ZOP im Beobachtungszeitraum variable Verläufe, die durch den variierenden Einfluss von oberflächennah lateral zuströmenden Wässern mit unterschiedlichen Sulfatgehalten und isotopischen Zusammensetzungen begründet sind. Die beiden tieferen Messstellen der Gruppe To9A/76 zeigen bis zum Beginn des Abpumpens sowohl in den Gehalten als auch in der Isotopie ein indifferentes Verhalten. Während des Brunnenbetriebes kommt es in beiden Messstellen zu einem sprunghaften Anstieg der Sulfatkonzentrationen und bei der Messstelle UP zu einer signifikanten Verschiebung des $\delta^{34}\text{S}$ -Wertes. Nach dem Abschalten des Brunnen stellen sich bei UP die Ausgangssulfatgehalte unmittelbar wieder ein, während bei OP der Ausgangswert erst wieder im August 2001 erreicht wird. Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte zeigen nach dem Abschalten der Pumpen ein zeitunabhängiges variables Verhalten, wobei UP in stärkerem Maße betroffen ist als OP.

Abbildung 44 zeigt die Gegenüberstellung von Sulfatgehalten und $\delta^{34}\text{S}$ -Werten für alle Proben des Bewirtschaftungsversuches und des Referenzstandortes 521. Im Diagramm lassen sich im Wesentlichen vier Datenpunktgruppierungen zusammenfassen. Die Proben aus den Messstellen der Gruppe 521 stellen die Sulfatgrundbelastung dar, die mit dem landseitigen Grundwasserzustrom von der Hochfläche in die Elbaue transportiert wird. Die Datenpunkte für die oberflächennahen Messstellen des Bewirtschaftungsversuches zeigen eine große Streubreite, die durch das oben beschriebene Schichtungsverhalten und durch variablen Lateralzustrom verursacht wird. Eine *in situ*-Oxidation von Disulfid kann für diese Proben als Sulfatquelle ausgeschlossen werden. Eindeutig durch Sulfidoxidation dominiert ist das Sulfat in der Messstelle To9A/76 OP. Relativ einheitliche $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Sulfats lassen auf eine isotopisch homogene Quelle schließen, die aber zeitlich variabel emittiert und somit

schwankende Sulfatgehalte hervorruft. Aufgrund der hydrochemischen Gegebenheiten muss auch im Fall dieser Messstelle eine *in situ*-Oxidation ausgeschlossen werden. Die eigentliche Sulfidquelle ist im Auenbereich westlich der Fassung I zu vermuten, wobei das Sulfat über laterale Zuströmung in den Filterbereich gelangt (vgl. Abschnitt 4.4.2.2). Die Proben aus der Messstelle To9A/76-UP und dem Brunnen 17 können durch eine Mischung aus durch Sulfidoxidation beeinflussten Wässern (To9A/76-OP) und der landseitigen Sulfatgrundbelastung beschrieben werden. In Abhängigkeit von der Fließdynamik im tieferen Bereich, die u. a. maßgeblich durch den Brunnenbetrieb beeinflusst wird, liegen schwankende Mischungsanteile vor, die für die beobachteten Streuungen der Gehalte und isotopischen Zusammensetzungen verantwortlich sind.

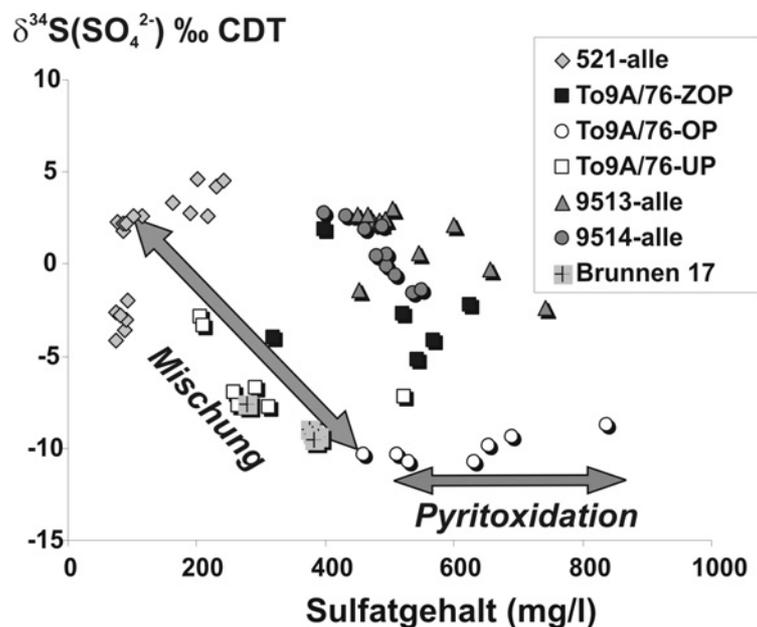


Abbildung 44: Sulfatgehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte in Proben aus Messstellen der Versuchsanordnung zum Bewirtschaftungsversuch und des Referenzstandortes Mockritz

Als allgemeines Ergebnis kann aus dem Bewirtschaftungsversuch abgeleitet werden, dass Grundwasserschwankungen im Nahbereich oberhalb der Brunnengalerie und die damit verbundenen hydro-geochemischen Prozesse nicht für die erhöhten Sulfatkonzentrationen im Brunnenwasser verantwortlich sind. Vielmehr erfolgt ein lateraler Zustrom von stark sulfathaltigen Wässern, die ihre Sulfatfracht im Auenbereich westlich der Wasserfassung aufnehmen.

4.4.3 Isotopische Zusammensetzung des gelösten Sulfats in Oberflächenwässern des Untersuchungsgebietes Mockritz

Die Wechselwirkung von Oberflächengewässern mit dem Aquifer, insbesondere in Form von Oberflächenwasserinfiltration, kann erheblichen Einfluss auf die hydrochemische Beschaffenheit des Grundwassers haben. Um die möglichen Auswirkung der Infiltration auf den Sulfat-haushalt des Grundwasserleiters abschätzen zu können, wurden die Stand- und Fließgewässer des Untersuchungsgebietes hinsichtlich des gelösten Sulfats isotopenanalytisch untersucht. Sämtliche Messdaten der Sulfatgehalte, der $\delta^{34}\text{S}$ - und der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Sulfats sind in den Häufigkeitsverteilungen (Abbildung 45) zusammengefasst.

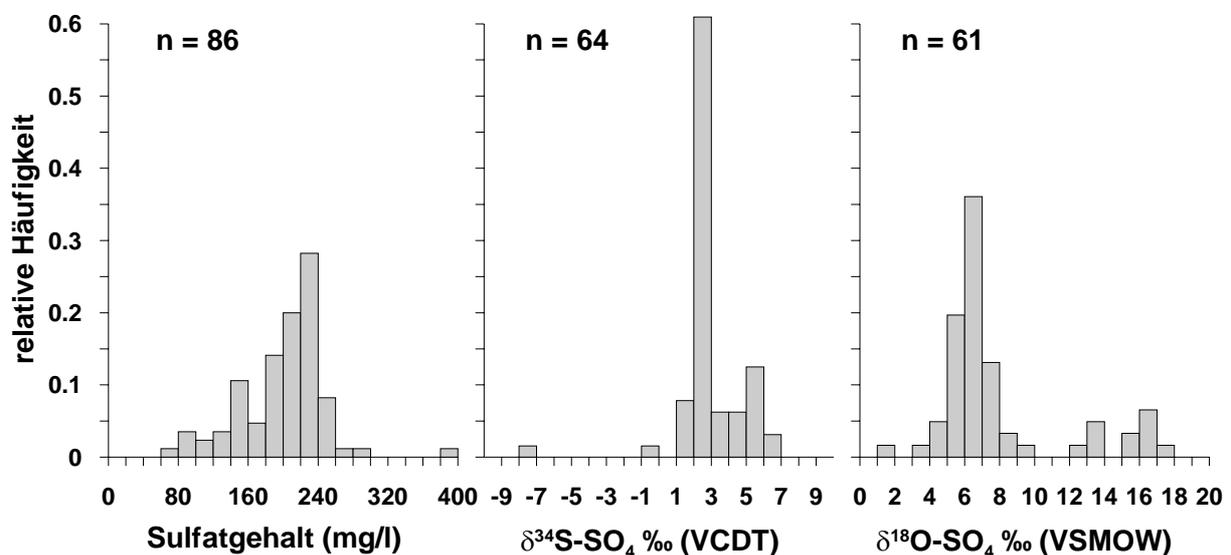


Abbildung 45: Häufigkeitsverteilungen der Sulfatgehalte, der $\delta^{34}\text{S}$ - und der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Sulfats in Oberflächenwässern des Untersuchungsgebietes Mockritz

Die überwiegende Mehrheit der Wasserproben aus den Oberflächengewässern (76 von insgesamt 86 analysierten Proben) beinhaltet weniger als 240mg/l gelöstes Sulfat. Höhere Gehalte bis maximal 380mg/l wurden im Juni 2000 an verschiedenen Probenahmestellen der Weinske ermittelt. Da die Probenahme nach einer längeren Trockenperiode erfolgte, ist anzunehmen, dass die gegenüber dem Durchschnitt erhöhten Sulfatgehalte durch verdunstungsbedingte Aufkonzentration erzeugt wurden. Insgesamt ist aber aufgrund der relativ niedrigen SO_4 -Gehalte ein untergeordneter Beitrag des Oberflächenwassersulfats auf die Sulfatfracht des Grundwassers zu erwarten.

Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des Oberflächenwassersulfats stellen sich größtenteils sehr homogen dar. Dies kommt in dem ausgeprägten Häufigkeitsmaximum bei etwa +2 bis +3‰ (VCDT) in Abbildung 45 zum Ausdruck. Bis auf eine Ausnahme sind alle bestimmten $\delta^{34}\text{S}$ -Werte leicht

positiv. Damit lässt sich das Sulfat allgemein auf anthropogenen Eintrag zurückführen. Die in der Nähe der Messstelle 9511-OP gewonnene Oberflächenwasserprobe (9511-Senke) hat einen wesentlich niedrigeren $\delta^{34}\text{S}$ -Wert von -7‰ (VCDT). Dieser entspricht dem $\delta^{34}\text{S}$ -Wert des Grundwassers in der benachbarten Messstelle und dem mittleren $\delta^{34}\text{S}$ -Wert der im unmittelbaren Umfeld befindlichen Sulfidanreicherungen. Die Herkunft dieses Sulfats lässt sich demzufolge eindeutig auf Kommunikation mit dem Grundwasser und vorangegangene Sulfidoxidation zurückführen.

Im Gegensatz zu den $\delta^{34}\text{S}$ -Werten zeigen die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Oberflächenwassersulfats eine heterogenere Verteilung und einen größeren Schwankungsbereich von +1 bis +19‰ (VSMOW). Der niedrige Wert von +1‰ ist wiederum dem Entnahmepunkt 9511-Senke zuzuordnen und bestätigt die Annahme der Sulfidoxidation als Sulfatquelle dort. Ansonsten zeigt die Häufigkeitsverteilung zwei abgrenzbare Bereiche mit erhöhten Häufigkeiten (+4...+9‰; +13...+17‰). Obwohl anhand der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte eine einheitliche Quelle angenommen werden kann, legt diese bimodale Verteilung der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte eine Differenzierung in zwei verschiedenen Quellen oder Mobilisierungsmechanismen nahe.

Wie bereits im Abschnitt 4.2.1 ausführlich dargestellt sind $\delta^{18}\text{O}$ - SO_4 -Werte von ca. +15‰ (VSMOW) durchaus typisch für die atmosphärische Sulfatdeposition. $\delta^{18}\text{O}$ -Werte von +4 bis +7‰ deuten auf die Mobilisierung von im Boden gespeicherten Schwefel hin, wobei es sich sehr wahrscheinlich um eine Sulfatmischung aus der Desorption von anorganischem Bodensulfat und der Mineralisation von Kohlenstoff-gebundenem Schwefel handelt. Während also hohe $\delta^{18}\text{O}$ -Werte auf direkten atmosphärischen Eintrag hindeuten, ist bei den mittleren $\delta^{18}\text{O}$ -Werten davon auszugehen, dass bereits eine Wechselwirkung des Oberflächenwassers mit oberen Bodenschichten stattgefunden haben muss.

Die deutlich positiven $\delta^{18}\text{O}$ -Werte wurden ausschließlich in Weinskeproben gemessen, wobei hier auch wiederum nur die Proben aus dem Zeitraum von Ende November bis Anfang Februar betroffen sind. In dieser Zeit sind die Grundwasserstände allgemein sehr niedrig, so dass die Exfiltration von Grundwasser in die Weinske stark zurückgeht. Die Speisung des Flusses erfolgt dann in erster Linie durch das Ablassen eines großflächigen Standgewässers südlich von Torgau (Großer Teich), für den vorrangig die atmosphärische Deposition als Sulfatquelle anzunehmen ist. Die Sulfatkonzentrationen der Nassdeposition reichen jedoch nicht aus, um die in der Weinske gemessenen Sulfatgehalte zu erklären. Allerdings deuten $\delta^{18}\text{O}$ - H_2O -Werte im Wasser des Großen Teiches von -2‰ (VSMOW) auf eine erhebliche Eindunstung hin, so dass es durchaus zu einer Aufkonzentrierung des Sulfates bis in die gemessenen Bereiche kommen kann.

In der übrigen Zeit des Jahres, wenn die Grundwasserstände im Allgemeinen deutlich höher sind, erfolgt in stärkerem Maße Grundwasserexfiltration in die Weinske. Damit wird dem Fluss ein größerer Anteil von Sulfat zugeführt, das aus der Bodenzone mobilisiert wurde und damit niedrigere $\delta^{18}\text{O}$ -Werten aufweist.

4.4.4 Isotopische Zusammensetzung des gelösten Nitrats

Bei der Beschreibung des $\delta^{34}\text{S}$ -Profilschnitts (Abbildung 41) durch die zentrale Sulfatzone in Abschnitt 4.4.2.2 wurde bereits angedeutet, dass Sulfidoxidation durch autotrophe Denitrifikation vermutlich eine wesentliche Rolle bei der Sulfatmobilisierung spielt.

Mit Hilfe der isotopischen Zusammensetzung des gelösten Nitrats ($\delta^{15}\text{N}\text{-NO}_3$, $\delta^{18}\text{O}\text{-NO}_3$) wurde versucht, diesen Prozess eindeutig zu identifizieren. Wie bereits im Abschnitt 3.1.2.2 ausführlich dargestellt wurde, kommt es in einem gegenüber Nitratnachlieferung geschlossenen System bei der autotrophen Denitrifikation im noch nicht reduzierten Nitrat zu einer zunehmenden Anreicherung von ^{15}N und ^{18}O . Da sich gleichzeitig durch den Abbauprozess die Nitratgehalte kontinuierlich verringern, müsste sich die autotrophe Denitrifikation durch eine negative Korrelation sowohl der $\delta^{15}\text{N}$ - als auch der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Nitrats mit den jeweiligen Nitratgehalte äußern. Abbildungen 46 und 47 zeigen die Gegenüberstellungen der Isotopenwerte mit den Nitratgehalten.

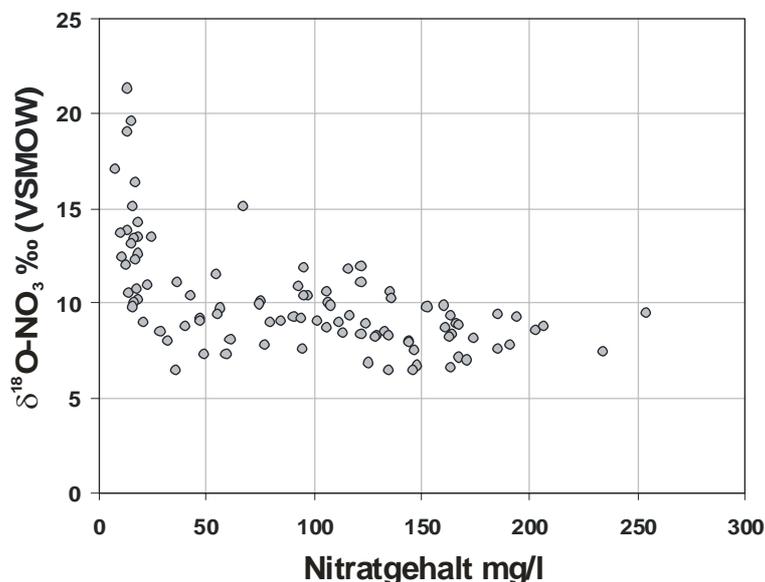


Abbildung 46: Zusammenhang zwischen den Nitratgehalten und den $\delta^{18}\text{O}$ -Werten des gelösten Nitrats in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Mockritz

Das $\text{NO}_3\text{-}\delta^{18}\text{O}$ -Diagramm (Abbildung 46) zeigt für einen großen Nitrat-Konzentrationsbereich (25 bis 250mg/l) eine vergleichbare Schwankungsbreite der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte zwischen +7 und +12‰ (VSMOW). Unterhalb einer Nitratkonzentration von 25mg/l ist ein deutliche Ansteigen der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte bis auf über +20‰ (VSMOW) zu beobachten. Dieses Verhalten, für sich betrachtet, könnte als Indiz für das Ablaufen des Nitratabbauprozesses gewertet werden.

Im $\text{NO}_3\text{-}\delta^{15}\text{N}$ -Diagramm (Abbildung 47) ist ein statistisch signifikantes Ansteigen der $\delta^{15}\text{N}$ -Werte bei niedrigen Konzentrationen nicht zu erkennen. Jedoch lässt sich eine Konzentrationsabhängigkeit der isotopischen Schwankungsbereiche feststellen. Die größte Variation der $\delta^{15}\text{N}$ -Werte liegt bei niedrigen Nitratgehalten vor. Bei Gehalten zwischen etwa 50 und 150mg/l schwanken die $\delta^{15}\text{N}$ -Werte im Bereich von +3 bis +13‰ (AIR). Bei höheren Konzentrationen scheint sich der Stickstoffisotopenwert bei ca. +7‰ einzupendeln.

Die $\delta^{15}\text{N}$ -Variabilität im mittleren und hohen Konzentrationsbereich wird ausschließlich durch die isotopische Variationsbreite der Nitratquellen definiert (vgl. Abschnitt 3.1.2.2). D.h. die Nitratkonzentrationen sind weniger durch Nitratabbau als vielmehr durch unterschiedlich stark emittierende Quellen oder Verdünnungen bestimmt. Im niedrigen Konzentrationsbereich deuten die vereinzelt deutlich erhöhten $\delta^{15}\text{N}$ -Werte an, dass neben Konzentrationsverdünnung auch Denitrifikation stattfindet.

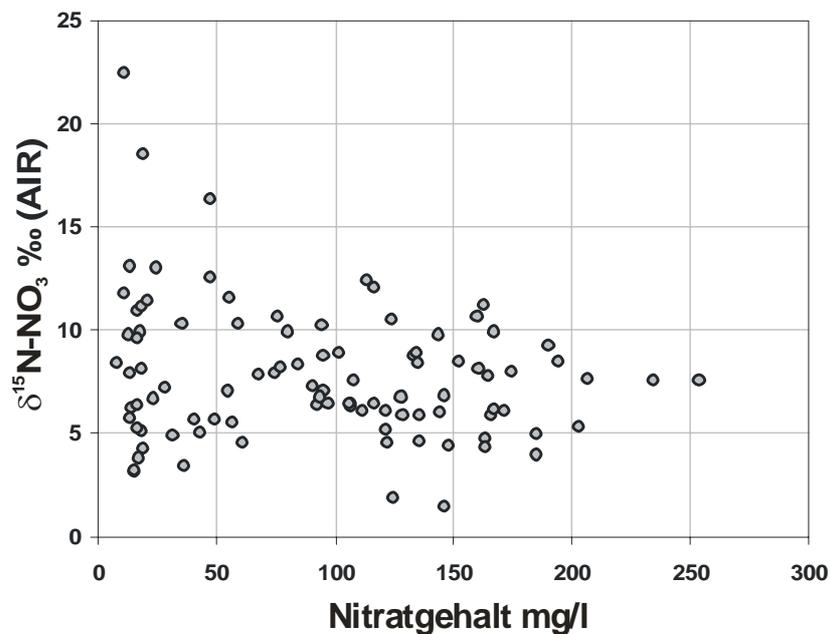


Abbildung 47: Zusammenhang zwischen den Nitratgehalten und den $\delta^{15}\text{N}$ -Werten des gelösten Nitrats in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Mockritz

Die lokal auftretende Denitrifikation sollte sich im $\delta^{15}\text{N}$ - $\delta^{18}\text{O}$ -Diagramm (Abbildung 48) durch das Vorliegen eines so genannten Denitrifikationsvektors erkennen lassen. Abbildung 48 zeigt deutlich, dass sich für die überwiegende Mehrheit der Proben kein denitrifikationsbeeinflusstes Nitrat beschreiben lässt. Lediglich bei den Grundwassermessstellen To516/96-OP und To520/96-OP sowie bei der Wasserprobe aus der Sondierung S-23W scheinen die Isotopendaten auf einem Denitrifikationsvektor zu liegen. Allerdings ist dieser Befund nicht eindeutig, da die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des dort vorliegenden Nitrats mit +10 bis +12‰ in dem Variationsbereich liegen, der für nahezu den gesamten Konzentrationsbereich beobachtet wurde.

Die übrigen Proben gruppieren sich in einem Bereich, der typisch für die Mineralisation von Bodenstickstoff ist. Ursache für die vorliegende Gruppierung der Datenpunkte kann einerseits ein gänzlich Fehlen des Denitrifikationsprozesses sein, andererseits ist eine ständige Nachlieferung von frischem, isotopisch unverändertem Nitrat möglich, so dass die beim Nitratabbau zu erwartende Isotopenverschiebung überlagert wird. Im Hauptsulfidoxidationsbereich (Abbildung 41) selbst konnten keine Nitratproben gewonnen werden. Ein Grund dafür könnten die hohen Geschwindigkeiten des Abbauprozesses sein. Damit beschränkt er sich im Übergangsbereich Hochfläche/Aue auf sehr schmale und hinsichtlich ihrer Position zeitlich sehr variable Zonen, so dass der unmittelbare Zugang zu geeigneten Proben erschwert ist.

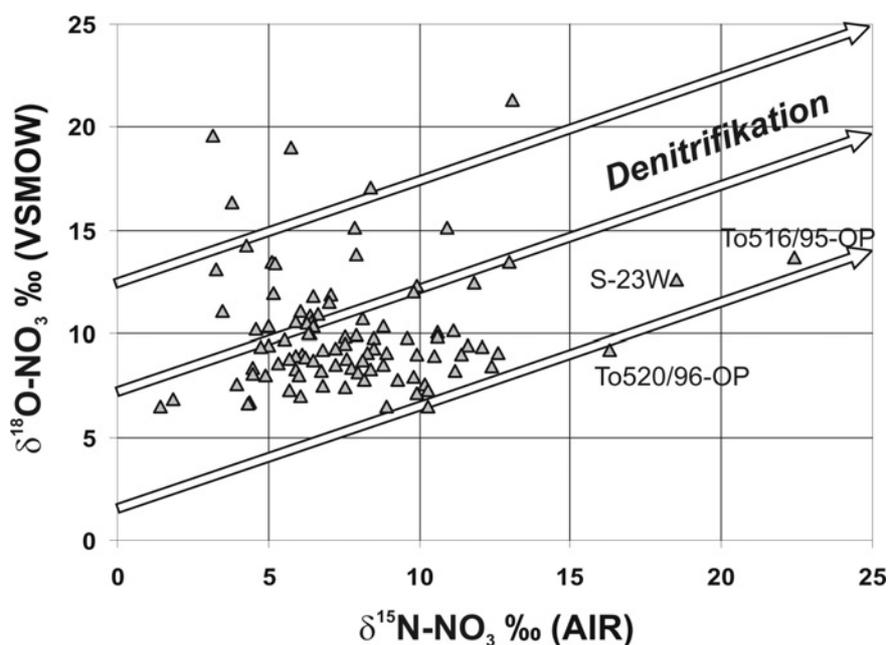


Abbildung 48: Gegenüberstellung von $\delta^{15}\text{N}$ und $\delta^{18}\text{O}$ des gelösten Nitrats in Grund- und Oberflächenwässern des Untersuchungsgebietes Mockritz

4.4.5 Isotopische Zusammensetzung des im Grundwasser gelösten anorganischen Kohlenstoffs (DIC)

Da Kohlenstoff als Redoxpartner an Schwefelumsetzungen beteiligt ist (Abschnitt 3.1.2.1), können ^{13}C -Isotopenuntersuchungen zusätzliche Informationen über bestimmte Details des Schwefelkreislaufs liefern. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der isotopischen Untersuchung des bei der dissimilatorischen Sulfatreduktion freigesetzten CO_2 . Aber auch der indirekte Einfluss verschiedener Kohlenstoffumsetzungen auf Schwefeltransformationen kann isotopisch nachvollzogen werden. So lässt sich zum Beispiel die Oxidation organischen Kohlenstoffs durch freien Sauerstoff als energetisch günstigere Konkurrenzreaktion zur Sulfidoxidation anhand von $\delta^{13}\text{C}$ -Messungen besser charakterisieren.

Im Untersuchungsgebiet Mockritz wurden an mehr als 200 Grundwasserproben $\delta^{13}\text{C}$ -Messungen des DIC vorgenommen.

Der $\delta^{13}\text{C}$ -Wert des DIC im Gleichgewicht mit gasförmigem CO_2 hängt vom pH-Wert und damit von der Karbonatspeziesverteilung in der Lösung ab, da zwischen $\text{CO}_2(\text{g})$ und H_2CO_3 , HCO_3^- bzw. CO_3^{2-} unterschiedliche Gleichgewichtsfraktionierungen wirksam werden. Aufgrund der unterschiedlichen pH-Werte der untersuchten Proben hat der direkte Vergleich der $\delta^{13}\text{C}$ -DIC-Werte oft wenig Aussagekraft. Um dennoch die Vergleichbarkeit zu gewährleisten, wurden die pH-bedingten Unterschiede in der C-Speziesverteilung und die damit verbundenen verschiedenen isotopischen Fraktionierungen eliminiert. Dies erfolgte dadurch, dass für jede Probe der $\delta^{13}\text{C}$ -Wert des im isotopischen Gleichgewicht mit dem DIC befindlichen gasförmigen CO_2 entsprechend des jeweiligen pH-Wertes berechnet wurde. Für die Berechnung wurden zwei vereinfachende Annahmen gemacht: Erstens wurde die Karbonatspeziesverteilung nach dem Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht ohne Berücksichtigung der jeweiligen Aktivitätskoeffizienten durchgeführt und zweitens wurde eventuell vorhandenes Überschuss- CO_2 vernachlässigt, d.h. der gemessene wurde dem Gleichgewichts-pH-Wert gleichgesetzt. Der $\delta^{13}\text{C}$ -Wert des Gleichgewichts- CO_2 lässt sich mit Gleichung 19 ermitteln. Da bei keiner der Proben der pH-Wert über 8.2 lag trägt gelöstes Karbonat nicht zum DIC. Die Betrachtung von H_2CO_3 und HCO_3^- ist demzufolge für die Berechnung ausreichend.

$$\delta^{13}\text{C}_{\text{CO}_2(\text{g})} = \delta^{13}\text{C}_{\text{DIC-gemessen}} - (X_{\text{H}_2\text{CO}_3} \varepsilon_{\text{H}_2\text{CO}_3} + X_{\text{HCO}_3^-} \varepsilon_{\text{HCO}_3^-}) \quad \text{Gleichung 19}$$

- X_i : relative Anteile von H_2CO_3 und HCO_3^- am DIC
 $\varepsilon_{\text{HCO}_3^-}$: $\varepsilon(\text{HCO}_3^- - \text{CO}_2) = +9.28\text{‰}$ (13°C; MOOK u.a., 1974)
 $\varepsilon_{\text{H}_2\text{CO}_3}$: $\varepsilon(\text{H}_2\text{CO}_3 - \text{CO}_2) = -1.11\text{‰}$ (13°C; VOGEL u.a., 1970)

Abbildung 49 stellt die tiefenabhängige Variabilität der $\delta^{13}\text{C}$ -Werte des Gleichgewichts- CO_2 dar. Die größte Schwankungsbreite der $\delta^{13}\text{C}$ -Werte zeigt sich erwartungsgemäß im Bereich der Grundwasseroberfläche. Hier kommt der Einfluss des gegenüber den biogenen Bildungen isotopisch deutlich schwereren atmosphärischen CO_2 zum Tragen. Mit zunehmender Tiefe nimmt die Zumischung der atmosphärischen Komponente immer mehr ab, die isotopische Variationsbreite wird durch die steigende Dominanz des biogenen Anteils eingeschränkt. Dennoch lassen sich die $\delta^{13}\text{C}$ -Werte in größeren Tiefen nicht allein durch Oxidation organischer Substanz erklären. CO_2 aus diesem Prozess hätte einen $\delta^{13}\text{C}$ -Wert zwischen etwa -24 bis -21‰ (VPDB). Höhere $\delta^{13}\text{C}$ -Werte sind sehr wahrscheinlich durch den Einfluss von CO_2 verursacht, das aus der Auflösung von in der Sedimentmatrix enthaltenen Karbonatmineralen stammt.

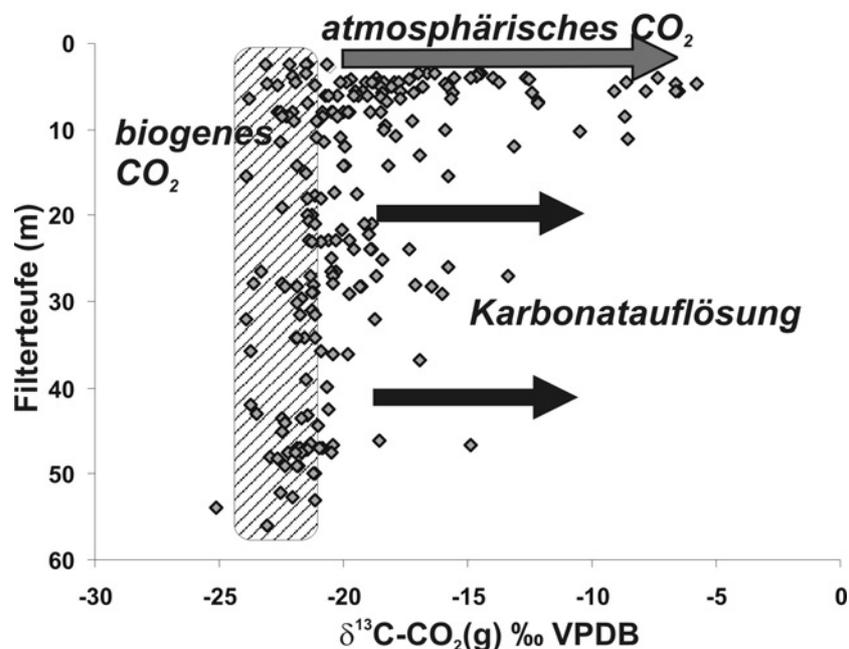


Abbildung 49: Abhängigkeit des $\delta^{13}\text{C}$ -Wertes des DIC-Gleichgewichts- CO_2 von der beprobten Filtertiefe in Grundwasserproben aus dem Untersuchungsgebiet Mockritz

Der Zusammenhang zwischen den DIC-Gehalten und den dazugehörigen $\delta^{13}\text{C}$ -Werten des Gleichgewichts- CO_2 ist in Abbildung 50 gezeigt. Auch sind wieder die größten Variabilitäten im oberen Pegelniveau zu verzeichnen. Die Streuung der Datenpunkte im mittleren und unteren Pegelniveau bewegt sich etwa in der gleichen Größenordnung.

Die Variabilität wird durch verschiedene Prozesse verursacht. Gleich bleibend geringe DIC-Gehalte und ansteigende $\delta^{13}\text{C}$ -Werte sind ein Indiz für den Einfluss des atmosphärischen CO_2 . Dieser Prozess tritt natürlich bevorzugt im oberen Pegelniveau auf. Ebenfalls vorherrschend im oberen Niveau ist der Einfluss von verstärkter biologischer Aktivität sichtbar, die im Zusammenhang mit mikrobiellen Umsetzungen in der ungesättigten Zone steht. Dieser Prozess verursacht durch Erhöhung des CO_2 -Partialdruckes ein Ansteigen der DIC-Gehalte bei konstanten sehr leichten $\delta^{13}\text{C}$ -Werten. Durch die Grundwasserfließdynamik kann es im oberen Niveau zur Mischung von DIC aus den beiden isotopisch verschiedenen Quellen kommen, wodurch die generelle große Variabilität der Werte weiter erhöht wird. Die Auflösung von Karbonaten führt zu einer Erhöhung sowohl der DIC-Gehalte als auch der $\delta^{13}\text{C}$ -Werte. Dieser Prozess kann in begrenztem Umfang im mittleren und unteren Pegelniveau vermutet werden.

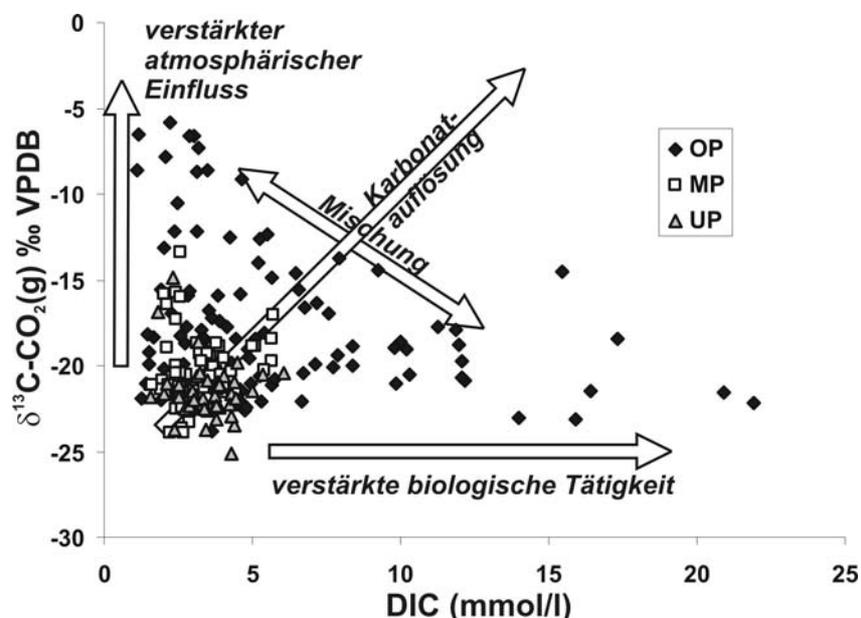


Abbildung 50: Zusammenhang zwischen den DIC-Gehalten und den $\delta^{13}\text{C}$ -Werten des DIC-Gleichgewichts- CO_2 in Grundwasserproben aus dem Untersuchungsgebiet Mockritz

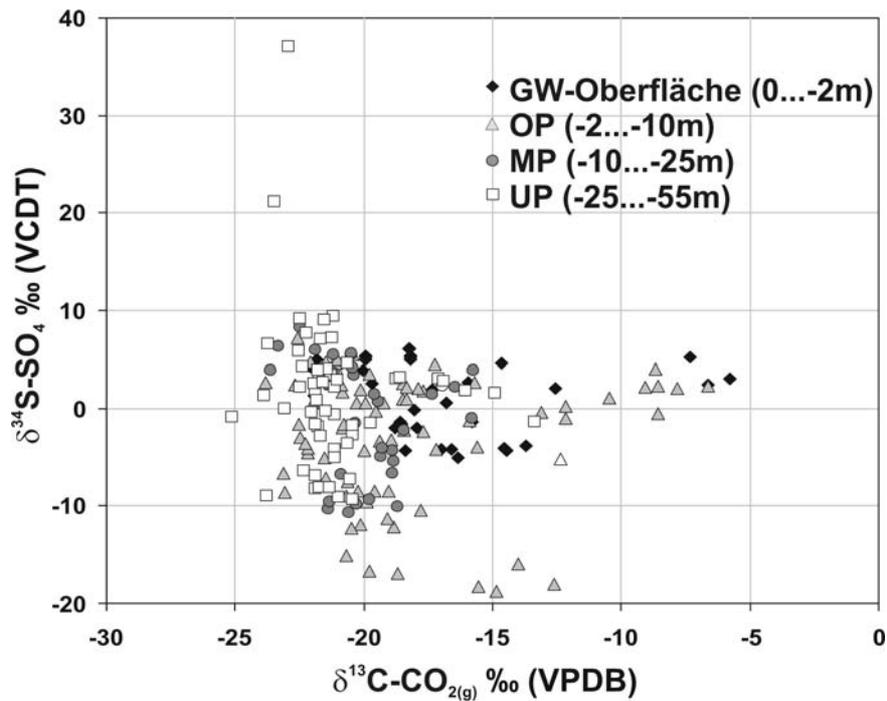


Abbildung 51: Gegenüberstellung der $\delta^{13}\text{C}$ -Werte des DIC-Gleichgewichts- CO_2 und der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Sulfats in Grundwasserproben aus dem Untersuchungsgebiet Mockritz

Um den Bezug des DIC zu den Schwefelumsetzungen herstellen zu können, wurden die $\delta^{13}\text{C}$ -DIC den $\delta^{34}\text{S}$ - SO_4 -Werten gegenübergestellt. Das resultierende Diagramm ist in Abbildung 51 dargestellt. In keinem der Beprobungshorizonte lässt sich eine eindeutige Korrelation zwischen den Parametern erkennen. Zwar zeigen die anhand ihrer hohen $\delta^{34}\text{S}$ -Werte als sulfatreduktionsbeeinflusst identifizierten Proben auch sehr niedrige $\delta^{13}\text{C}$ -Werte, doch liegen diese Werte höher als die für dissimilatorische Sulfatreduktion zu erwartenden -27‰ (VPDB) (Abschnitt 3.1.2.1). Wenn man die Variationsbreite der Schwefelisotope als Bewertungskriterium für Prozessabläufe im Schwefelkreislauf zu Grunde legt, dann führt die fehlende Korrelation von $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{13}\text{C}$ -Werten zu der Vermutung, dass sich die reaktive Überschneidung von Schwefel- und Kohlenstoffkreislauf im Untersuchungsgebiet Mockritz zumindest im Grundwasserbereich nicht nachhaltig auf die Schwefeldynamik auswirkt.

4.5 Zusammenfassung der Ergebnisse und Schlussfolgerungen aus den Untersuchungen der stabilen Isotope im Untersuchungsgebiet Mockritz

Die Zielstellung der Untersuchung der stabilen isotopischen Zusammensetzung von gelösten Bestandteilen in Grund-, Oberflächen und Niederschlagswässern sowie von Schwefelverbindungen in Sedimenten und Böden im Untersuchungsgebiet Mockritz bestand in der Detailanalyse des Schwefelkreislaufes. Schwerpunkte waren dabei die Identifizierung verschiedener Schwefelquellen und ihres lokal und zeitlich variierenden Beitrages für die Sulfatfracht im Grundwasser, die Beschreibung und Quantifizierung von isotopenrelevanten Schwefeltransformationsprozessen wie Sulfidoxidation, Sulfatmischung und Sulfatreduktion, sowie das Erkennen von Prozessüberlagerungen. Darüber hinaus sollte versucht werden, die Verknüpfung des Schwefelkreislaufs mit anderen Stoffkreisläufen, wie die des Stickstoffs und Kohlenstoffs, eingehender zu charakterisieren.

Aus den Untersuchungsergebnissen ließen sich folgende allgemeine Erkenntnisse ableiten:

- Für das Untersuchungsgebiet Mockritz kommen drei hauptsächliche externe Schwefelquellen in Frage, atmosphärische Deposition, sulfathaltige Mineraldünger und punktuelle Altablagerungen (Gipsdeponien ehemaliger Munitions- und Sprengstofffabriken). Eine eindeutige isotopische Unterscheidung der einzelnen Quellen ist aber aufgrund der sich überschneidenden Wertebereiche nicht möglich.
- Der über Jahrzehnte eingetragene Schwefel wurde in der Bodenzone in Form von verschiedenen Schwefelspezies zwischengespeichert. Zu diesen Schwefelspezies zählen anorganisches Bodensulfat, sedimentäre Sulfide und organische Schwefelverbindungen (Kohlenstoff-gebundener Schwefel, organische Estersulfate). In Bereichen der Elbtalwanne, die durch hohe Grundwasserstände und mächtige Auelehmbedeckung charakterisiert sind konnten sich großflächige Sulfidanreicherungshorizonte ausbilden.
- Die Mobilisierung der verschiedenen Bodenschwefelspezies ist mit verschiedenen großen isotopischen Fraktionierungen verbunden. Damit ergibt sich für den Sulfataustrag aus der Bodenzone in das Grundwasser ein sehr breiter isotopischer Schwankungsbereich.
- Der Sulfateintrag in das Grundwasser des Untersuchungsgebiets vollzieht sich maßgeblich über diffusen vertikalen Stofftransport. Punktuelle Quellen, wie die Gipsdeponien, besitzen nur einen eng gefassten lokalen Einfluss.
- Im regionalen Maßstab ist das Untersuchungsgebiet von isotopisch leicht positiven Sulfaten dominiert, die hauptsächlich der Mobilisierung von anorganischem Bodensulfat und der Mineralisation von Kohlenstoff-gebundenem Schwefel zugeordnet

werden können. Insbesondere im zentralen Untersuchungsgebiet gibt es aber großflächige Bereiche, die isotopisch negatives Sulfat aus der Pyritoxidation enthalten.

- Die deutlich erhöhten Sulfatkonzentrationen im Grundwasser sind mehrheitlich auf Sulfidoxidation zurückzuführen. Ausnahmen bilden lokal extrem hohe Konzentrationen, die durch die Elution des Gipses aus den Gipsdeponien erzeugt werden. Alle anderen möglichen Mobilisierungsprozesse können scheinbar maximal mittlere Sulfatgehalte hervorrufen.
- Die Grundwasserfließdynamik ist für umfangreiche Mischungsprozesse in allen Grundwasserhorizonten verantwortlich. Dadurch wird die isotopische Sulfatzusammensetzung stellenweise erheblich beeinflusst, so dass eine eindeutige Quellzuordnung erschwert wird. Veränderungen der ursprünglichen isotopischen Sulfatzusammensetzung durch dissimilatorische Sulfatreduktion sind nur in geringem Umfang im unteren Pegelniveau relevant.

Bezogen auf das konkrete Sulfatproblem im Rohwasser aus dem südlichen Strang der Wasserfassung Mockritz I konnten insbesondere auch aus dem Bewirtschaftungsversuch folgende Aussagen abgeleitet werden:

- Das Sulfat, welches für die erhöhten Konzentrationen im geförderten Wasser verantwortlich ist, stammt eindeutig aus der Oxidation sedimentärer Sulfide.
- Da im unmittelbaren Umfeld der Wasserfassung oberflächennah keine sedimentären Sulfide vorhanden sind, ist eine *in situ*-Oxidation auszuschließen. Anhand der regionalen $\delta^{34}\text{S}$ -Verteilung konnte aber der Oxidationsherd etwa 1-2km südwestlich der Wasserfassung Mockritz I lokalisiert werden.
- Der eigentliche Oxidationsmechanismus konnte nicht entschlüsselt werden. Obwohl zwingende isotopische Beweise fehlen, kann aber davon ausgegangen werden, dass neben der Oxidation durch freien Sauerstoff die autotrophe Denitrifikation des durch landwirtschaftliche Düngung eingetragenen Nitrats eine erhebliche Rolle bei der Sulfatmobilisierung spielt.

4.6 Grundwasserdynamik und –kommunikation

4.6.1 Tritiumuntersuchungen

4.6.1.1 Allgemeine Beziehungen zwischen Tritium und Sulfat

Im vorangegangenen Kapitel wurde bereits auf die Bedeutung hydrodynamischer Prozesse bei der Ausbildung der Sulfatverteilung im Grundwasser von Mockritz hingewiesen. Nachfolgend soll auf Ergebnisse und Erfahrungen bei Untersuchungen mit Hilfe der im Kapitel 3 umrissenen Verweilzeittracer eingegangen werden.

Anhang XI enthält sämtliche gemessenen Tritiumgehalte für die im Sulfatprojekt näher betrachteten Schwerpunktbereiche von Mockritz. In Vervollständigung des Datenbestandes zum Einzugsgebiet Mockritz enthält Anhang XII weitere Messwerte, die bei speziellen und in dieser Arbeit nicht diskutierten Untersuchungen zur Grundwasserschichtung im Bereich der Rüstungsaltest Elsnig erhalten wurden.

Bereits aus dem Datensatz von 1995/96 (vgl. Abbildung 52) ergibt sich der Schluss, dass Grundwässer der Auenmessstellen mit sehr kleinen Tritiumgehalten mit hoher Wahrscheinlichkeit eine geringe Mineralisation und daher auch sehr niedrige Sulfatgehalte aufweisen. Es sind dies die Wässer, denen nach Tritium eine höhere mittlere Verweilzeit (im Sinne von Tritium) zuzuordnen ist. Solche Wässer befinden sich in Mockritz erwartungsgemäß bevorzugt im mittleren und tieferen Teufenniveau. Umgekehrt lassen „Auewässer“ in größerer Teufe und mit sehr niedriger Mineralisation einen niedrigen Tritiumgehalt erwarten (z.B. To 512/96 UP). Ständig sehr niedrige Sulfatgehalte in unterster Position sprechen weiterhin für ein bleibend niedriges Tritiumniveau und erübrigen Wiederholungsmessungen.

Bereits 1991/92 wurde an mehreren Grundwasserproben aus Mockritz auch der Radiokohlenstoff am DIC untersucht. Darunter befinden sich drei Messstellen (To 10/74 UP, To 20/74 UP und To 15/76 UP) im Grenzbereich Tertiär-Quartär mit Filterteufen von 63 bis 71 m unter Gelände (9 bis 22 m NN). ^{14}C -Gehalte von nur 24,5...33 pMC gegenüber ≥ 60 pMC in höher liegenden tritiumarmen Wässern beweisen zusätzlich zum fehlenden Tritium, dass in tieferen Lagen des Untersuchungsgebietes ein altes Wasser zu erwarten ist. Es gibt somit im untersuchten Gebiet keinerlei Anhaltspunkte für den Aufstieg von sulfathaltigem (und gar jüngerem) Wasser aus dem Liegenden.

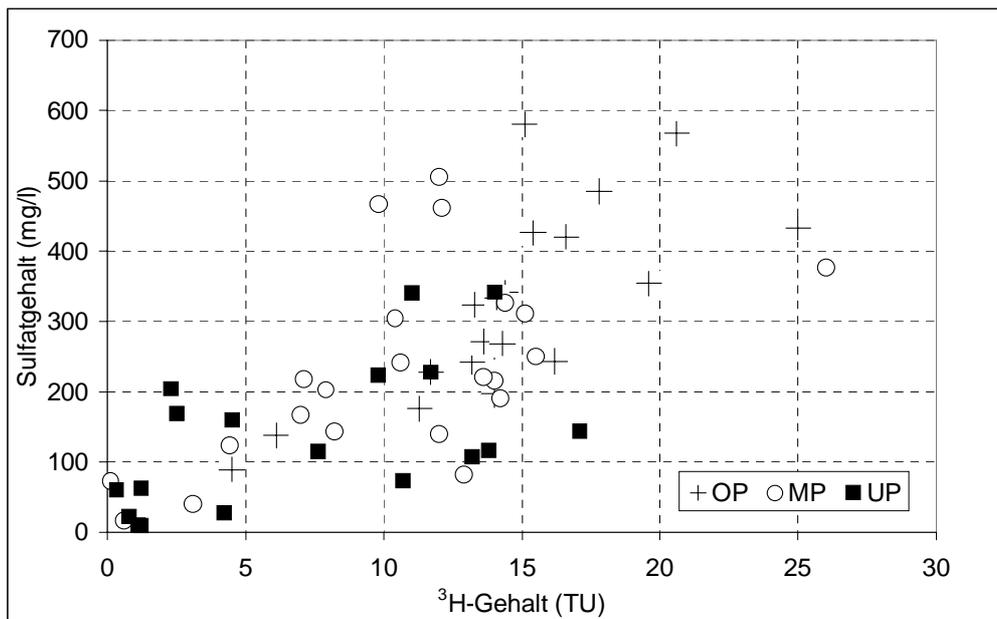


Abbildung 52: Sulfatgehalte und Tritiumkonzentrationen von Grundwasserproben aus dem Gütemessnetz des Wasserwerkes Mockritz in Messkampagnen von 1995 und 1996

Zahlreiche tiefere Grundwassermessstellen von Mockritz enthalten demzufolge nach Abbildung 52 mehr oder weniger viel Wasser aus dem Bildungszeitraum vor 1955. Dies betrifft mit hoher Wahrscheinlichkeit (zumindest) Proben mit ^3H -Gehalten < 8 TU. Andererseits treten auch in einigen tieferen Aquiferpositionen erhöhte Sulfatgehalte auf. In diesem Fall wurden stets auch höhere Tritiumgehalte (meist > 8 TU) gemessen. Für die Probengruppe mit > 15 TU, die vor allem im oberen bis mittleren Teufenbereich vorkommt, sind höhere Sulfatgehalte die Regel. Aus den ^3H -Werten sind Neubildungen oder Neubildungsanteile aus der Zeit vor 1982 deutlich erkennbar.

4.6.1.2 Verbreitung älterer Wässer

In den Abbildungen 53 bzw. 54 ist die räumliche ^3H -Konzentrationsverteilung für MP- und UP-Positionen aus dem Gütemessnetz für den Messzeitraum 1995/1996 bzw. 1999 dargestellt. Zusammenhängende Gebiete mit < 5 TU (dies ist ein sicherer Indikator für Beteiligung tritiumfreier Wässer oder zumindest solcher aus der Zeit vor 1960) wurden durch gestrichelte Linien umgrenzt, wobei die wirkliche Ausdehnung infolge Messwertmangel nicht überall sicher festzustellen ist. Man erkennt, dass solche Wässer das UP-Niveau der näheren westlichen und südlichen Umgebung (Aue) von Mockritz I beherrschen. Der durchschnittliche Sulfatgehalt liegt unter 100 mg/l. Weiter im Nordwesten (To 504/95 UP, To 505/95 UP) und im Süden (To 502/95 UP, 9499 UP) wurden im UP höhere ^3H - und

demzufolge auch vergleichsweise höhere Sulfatgehalte gemessen. Dies sind demzufolge die Zonen, in denen jüngere Wässer verstärkt in der Nähe der Aquiferbasis vorkommen.

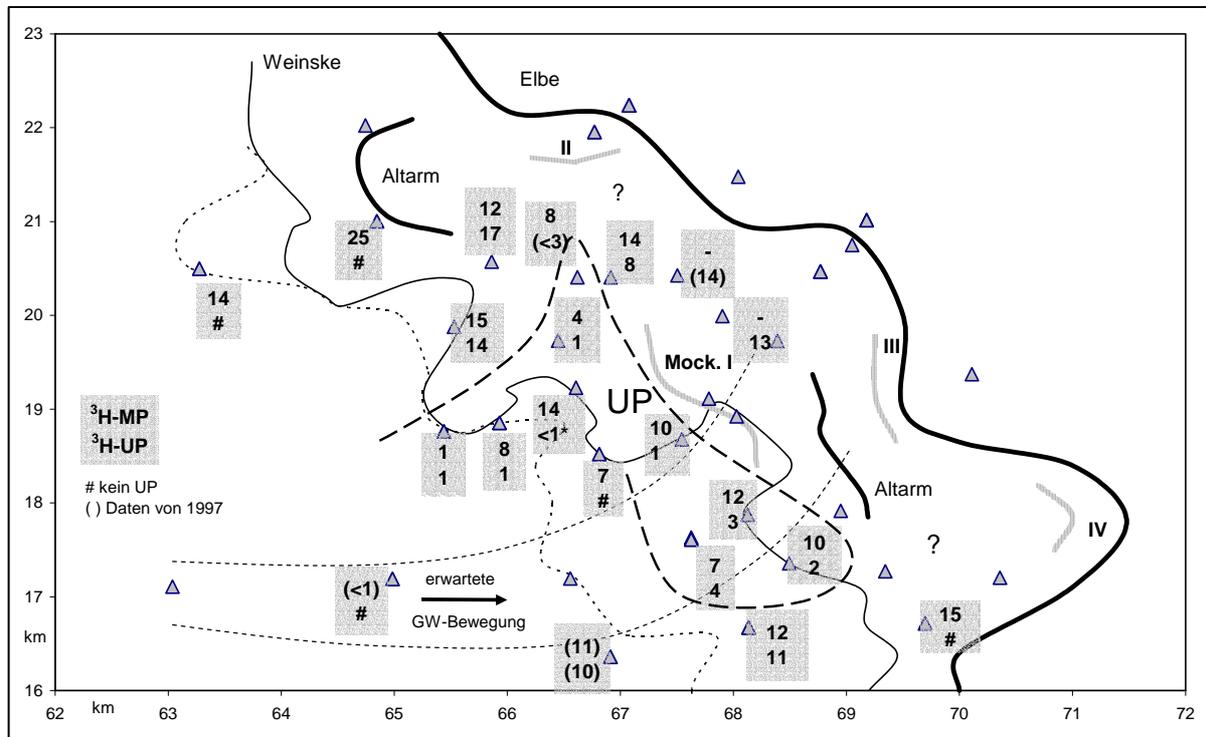


Abbildung 53: Verteilung der Tritiumgehalte in den unteren Messniveaus, nachgewiesene Altwasseranteile im UP gestrichelt umrandet, (Zahlen in TU, Datenbasis 1995/96 bzw. 1997)

In der Darstellung für 1999 sind auch im MP-Niveau Bereiche (im Norden bei To 511/96 MP, im Westen bei Eln 6/93 MP und To 503/95 MP und im Süden bei To 517/96 MP und To 502/95 MP) mit Altwasserführung erkennbar, die vordem nicht definitiv sichtbar waren oder die sich zwischenzeitlich entwickelt haben. Diese Gebiete im MP sind zusammen mit dem Altwasser führenden UP somit die Bereiche, die (derzeit) nicht zum Sulfatproblem beitragen. Im Bereich östlich der Fassung I bis zur Elbe (Abschnitt To 510/96...To 518/96) werden die brunnennahen Tiefenprofile weitgehend durch ausgeglichene Tritiumgehalte im Rezentniveau bestimmt. In Elbnähe (To 20/76) tritt jedoch eine deutliche Schichtung auf, die sich auf der ostelbischen Seite (To 22/76) fortsetzt. Dieser Befund wird als Indiz für einen langsamen Zuzug (aktiv oder noch aus Zeiten höherer Förderraten) von ostelbischem Grundwasser im unteren Aquiferbereich gewertet, der mit Annäherung an die Fassung Mockritz I zunehmend unter Jungwassereinfluss (Uferfiltrate oder lokale Bildungen) gerät. Ein ähnlicher Befund wurde bereits 1991 festgestellt, als allerdings noch eine weit höhere Förderrate vorlag.

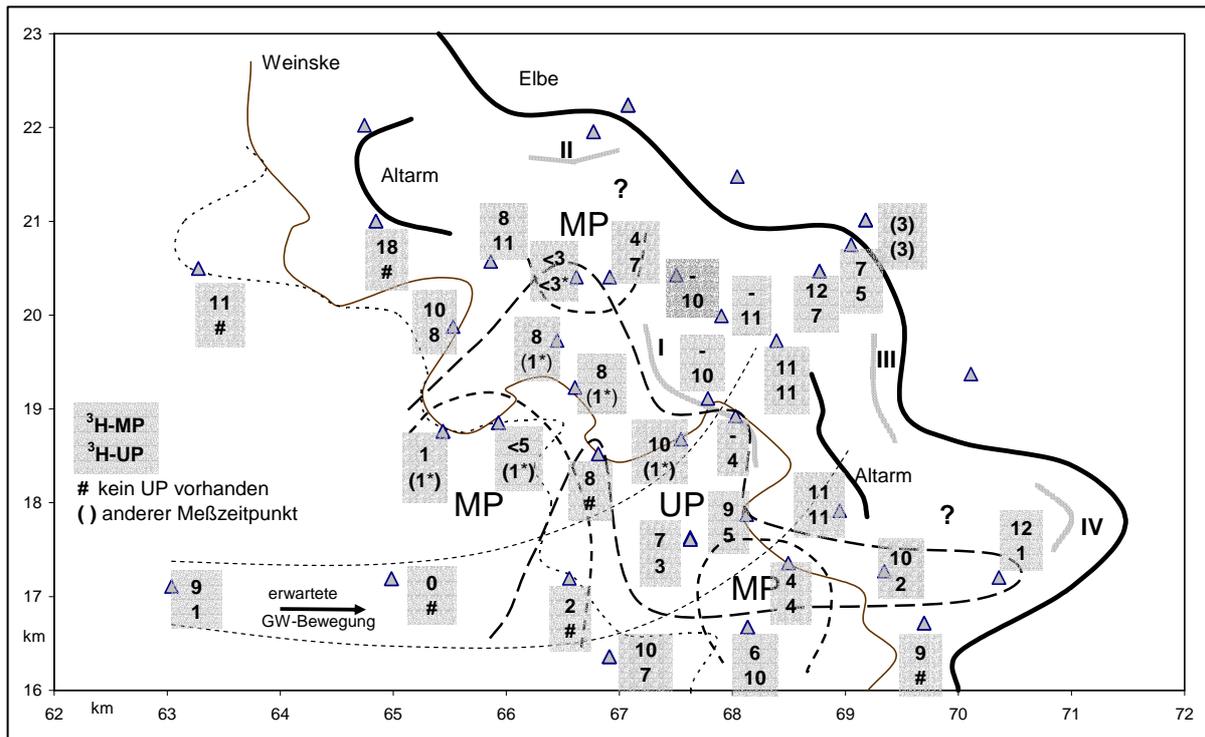


Abbildung 54: Verteilung der Tritiumgehalte im tieferen Grundwasser, breiter gestrichelte Linie umschließt UP-Wässer mit ≤ 5 TU, enger gestrichelte Linie weist Gebiete aus, in denen Altwässer auch im MP vorkommen (Zahlen in TU, Datenbasis 1999...2001, Zahlen mit * aus früheren Messungen und hydrochemischen Eigenschaften abgeleitet)

4.6.1.3 Verteilung entlang von Vertikalschnitten

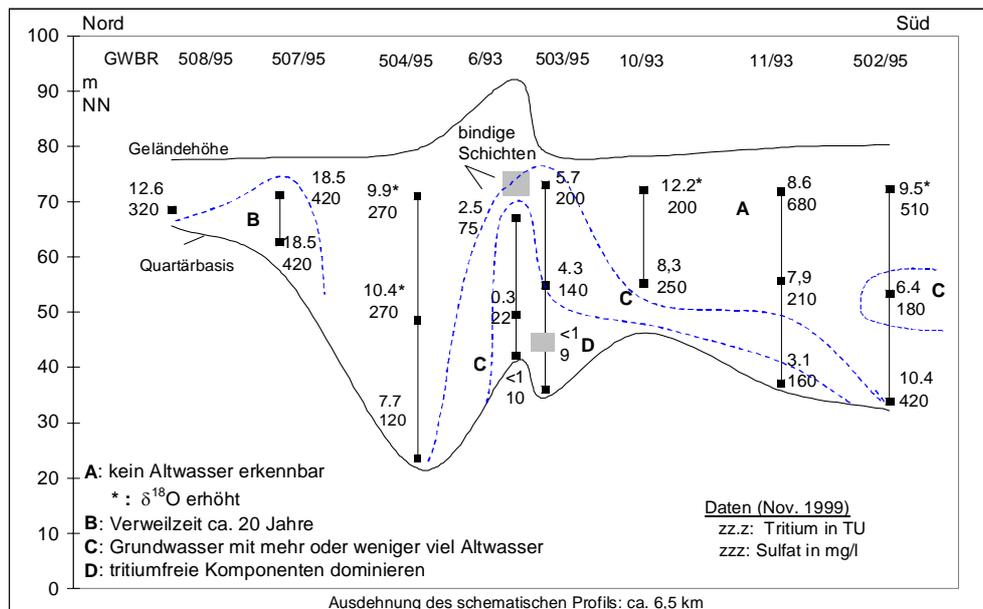


Abbildung 55: Verteilung von Tritium- und Sulfatgehalten in einem schematischen N-S-Vertikalschnitt nahe des westlichen Auenrandes mit Abgrenzung von Bereichen mit nachgewiesener Altwasserbeteiligung (Daten vom November 1999)

Abbildung 55 gibt einen schematischen Schnitt entlang des Auenrandes wider. Bei genereller Fließrichtung etwa von West nach Ost muss der Großteil des sich in Richtung Fassung I bewegenden Grundwassers diesen Schnitt passieren. Man erkennt in der Mitte des Bildes im Bereich Eln 6/93 und To 503/95 MP und UP das höhere mittlere Grundwasseralter, das durch die angedeuteten bindigen Horizonte im Tiefenprofil begünstigt wird. Auf beiden Seiten befinden sich Zonen, in denen jüngere und z.T. (To 502/95) stark sulfathaltige Wässer bis weit in die Tiefe vorgedrungen sind. Bemerkenswert ist das Tritiumminimum im MP des Tiefenprofils von To 502/95.

In einem zweiten Schnitt (Abbildung 56) folgt man ungefähr einer aus den Grundwasserisohypsen abgeleiteten scheinbaren Strombahn. Man erkennt, dass die Trajektorie mit stark wechselnden hydrogeologischen Verhältnissen verbunden ist. Auch anhand von Tritium ist eine durchgehende (geschichtete) Strömung nicht festzustellen. Mit nachlassender Stauerbedeckung setzt ab To 521/00 UP ein Anstieg der ^3H -Konzentration im unteren Teufenbereich ein, der eine steigende Zumischung von jüngerem und sulfatreicherem Wasser anzeigt, wobei in To 516/96 UP immer noch ein Mischwasser vorliegt. Im OP-Niveau wächst die Sulfatkonzentration nach Erreichen der Aue zunächst stark an (Eln 11/93 OP). Dieser hohe Gehalt setzt sich im Schnittbild nach Osten hin jedoch nicht fort sondern verlagert sich in größere Tiefen (To 516/96 MP). Eine solche Diskontinuität besteht auch bei $\delta^{18}\text{O}$, worauf später eingegangen wird.

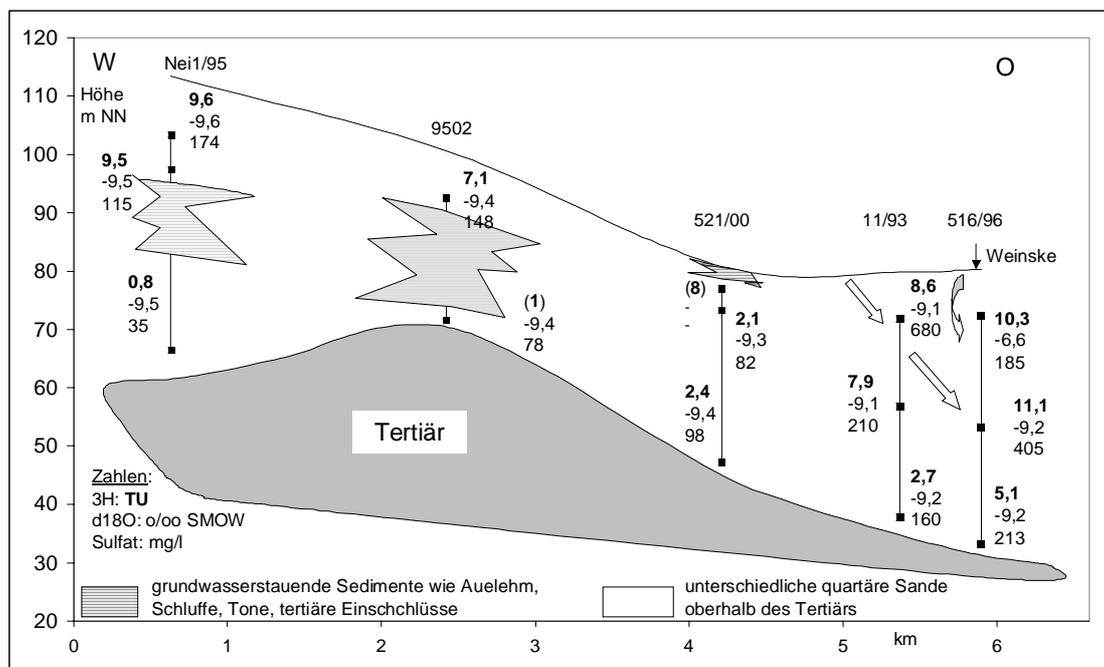


Abbildung 56: Schematische Darstellung der Verteilung von Tritium und Sulfatgehalten in einem W-O-Vertikalschnitt, (Datenbasis 1999, ergänzt durch spätere Messungen)

4.6.1.4 Zeitliche Variationen

Zur Ableitung von Verweilzeiten aus Tritiumdaten sind fast immer Zeitreihen erforderlich. Diese konnten im vorliegenden Projekt grundsätzlich nur sehr verkürzt zur Verfügung stehen. Neben den (z.T. nicht deckungsgleichen) Datensätzen von 1995/96 und 1999 liegen aber für einige Messstellen noch weitere Messwerte vor. Wegen der hier zu erwartenden stärkeren zeitlichen Veränderungen sind vor allem Messstellen mit einem hohen Tritiumgehalt interessant. So genügen die für die Messstelle To 507/95 MP (1996:ca. 26 TU, ständig etwa 400 mg SO₄/l) vorliegenden Werte einem Piston-Flow-Ansatz mit einer mittleren Verweilzeit von ca. 20 Jahren.

Im Vergleich von 1999 mit 1995/96 wurde in den meisten OP-Messstellen im Mittel ein Abfall der Tritiumgehalte im Rahmen der Erwartungen sowie ein leichter Rückgang der Sulfatgehalte registriert. In einigen UP- und MP-Messstellen traten jedoch z.T. drastische Veränderungen auf. In Tabelle 9 sind diejenigen Fälle herausgestellt, in denen der Prüfwert für die augenscheinliche Altwasserbeteiligung über- oder unterschritten wird bzw. ein klarer Trend vorhanden ist. Bei Verlust an Altwassersignifikanz ist der Sulfatgehalt 1999 angestiegen, bei Zunahme ist er z.T. drastisch gesunken. Aus diesem Verhalten zeigt sich einerseits wiederum die enge Kopplung des Sulfatproblems mit Jungwässern (oberflächennahe Bildungen begrenzter Migrationszeit). Andererseits kann die starke Reaktion des Sulfatgehaltes als Mischungsphänomen im Wechselspiel unterschiedlich ausgestatteter Grundwasserkomponenten gewertet werden und nicht im Sinne einer zwischenzeitlich etwa erfolgten Veränderung der Einträge. Sehr wahrscheinlich spielen hier auch Veränderungen im hydraulischen Regime eine Rolle, so dass in den betroffenen Bereichen eine zuverlässige Grundwasserdatierung mittels Messreihen kaum möglich ist.

Tabelle 9: ³H- und Sulfatmesswerte für GWBR mit signifikanten Veränderungen zwischen 1995/96 und 1999 sowie einer sichtbaren Altwasserbeteiligung

GWBR	Mittlere Filterteufe (m u. Gel.)	³ H 1995/1996* (TU)	³ H 1999 (TU)	Sulfat 1995/1996* (mg/l)	Sulfat 1999 (mg/l)
To 502/95 MP	27	12.0	6.4	506	188
To 503/95 MP	24	8.2	4.3	144	136
To 504/95 UP	56	14	7.7	342	118
To 511/96 MP	32	14.2*	3	190*	131
To 512/96 MP	28	7.9*	2.5	203*	59
To 513/96 MP	26.5	4.4*	7.9	124*	244
To 516/96 UP	47	2.6*	5.1	169*	213
To 517/96 MP	28	10.4*	4.1	305*	200
To 517/96 UP	47	2.3*	3.7	204*	213
Eln 10/93 MP	23	7.0	8.3	167	250

Nachfolgend sind die Veränderungen in zwei Messstellen explizit dargestellt. In To 513/96 MP wachsen ^3H - und Sulfatgehalt zwischen 1996 und 2000 kontinuierlich an, bis die Sulfatkonzentration schließlich sogar den leicht sinkenden Gehalt im OP übersteigt. Der UP bleibt unverändert. Gegenüber früher gelangte zunehmend jüngeres Wasser in das MP-Niveau, was auch hydraulisch begründbar sein sollte.

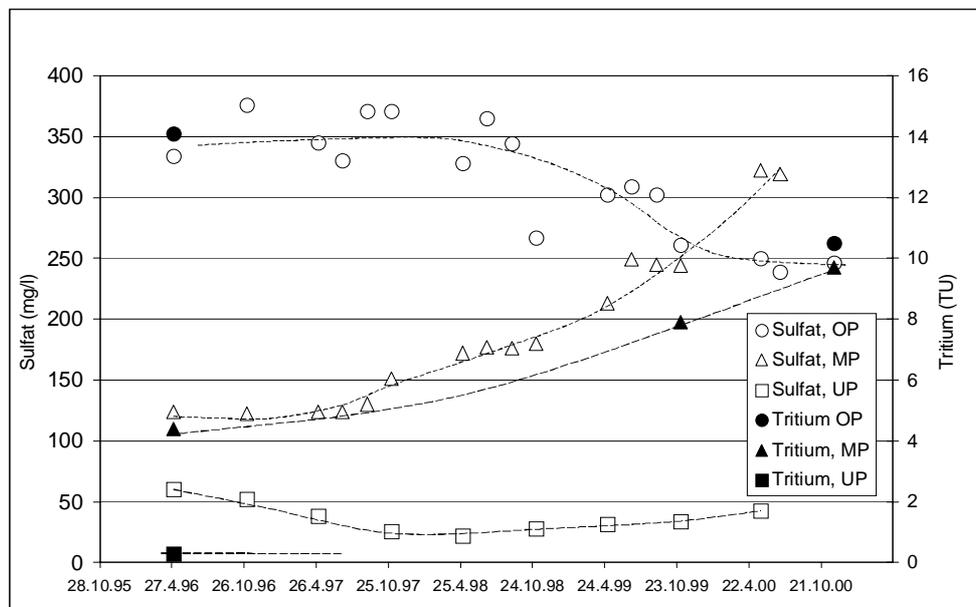


Abbildung 57: Zeitliche Entwicklung von Sulfatgehalt und Tritium in der Messstelle 513/96 (Sulfatgehalte teilweise nach FWV Elbaue-Ostharz GmbH)

In 502/95 MP verändern sich die Sulfatgehalte im MP und UP entgegengesetzt. Der von sehr hohem Sulfatniveau ausgehende Abfall im MP wird von stark sinkenden Tritiumgehalten begleitet. Hingegen ist der Sulfatanstieg in To 502/96 UP ausgehend von mittleren Sulfatgehalten durch \pm gleich bleibend hohe Tritiumgehalten reflektiert. Die Angleichung von OP und UP suggeriert eine gemeinsame Sulfatquelle. Dies kann anhand von $\delta^{34}\text{S}$ nicht bestätigt werden. Zwischen 1996 und 2000 stieg $\delta^{34}\text{S}$ in To 502/95 OP von ca. -5‰ auf -2‰ ... -3‰ an. In der gleichen Periode sank $\delta^{34}\text{S}$ of To 502/95 UP von ca. -3‰ auf $\leq -8\text{‰}$. Dieses Verhalten zeigt, dass für den Sulfathaushalt in den beiden Horizonten verschiedene Quellen wirksam sind.

Eine qualitativ analoge Entwicklung nahm die nordwestlich an 502/95 anschließende Messstelle To 517/96 MP. Hier ist der Abfall des Tritiums in den „Altwasserbereich“ noch deutlicher. In To 517/96 UP wächst Tritium auf immer noch niedrigem Niveau wobei der Sulfatgehalt im Untersuchungszeitraum kaum Veränderungen (die aber noch zu erwarten sind) aufwies. Auch in der Messstelle To 516/96 UP nördlich von To 502/95 sind der Tritium-

und der Sulfatgehalt gewachsen. Der MP ist hingegen durch starke Fluktuationen im Sulfatgehalt mit zuletzt steigenden Werten gekennzeichnet.

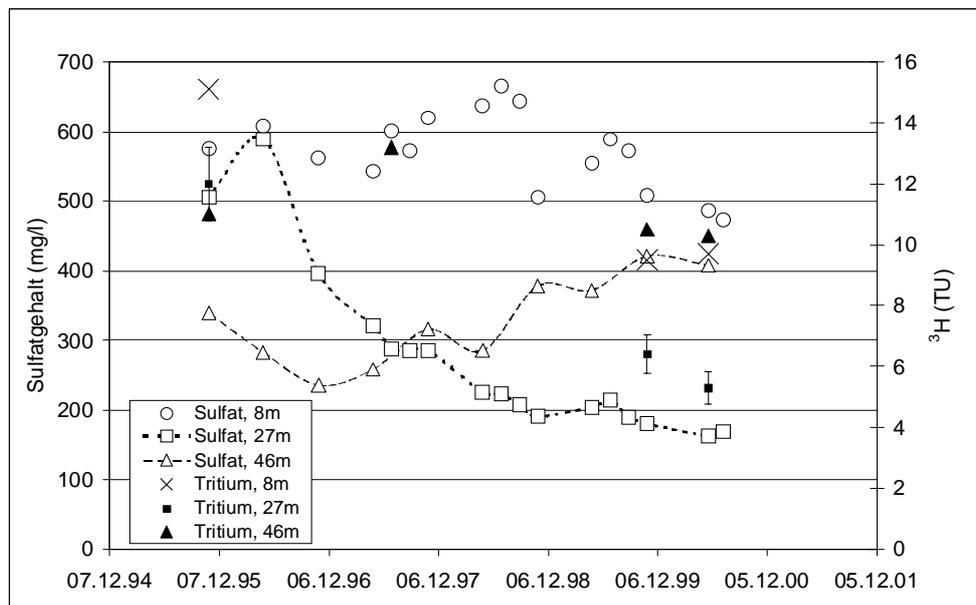


Abbildung 58: Zeitliche Entwicklung von Sulfatgehalt und Tritium in der Messstelle 502/95 (Sulfatgehalte teilweise nach FWV Elbaue-Ostharz GmbH, mittlere Filterteufen bezogen auf Geländeoberkante)

Die Beispiele zeigen, dass auch über der Basis des quartären Aquifers keine stationären Verhältnisse vorliegen müssen und somit die Verbreitungskarte (Abbildung 54) ebenfalls Veränderungen erfahren kann.

4.6.2 Variationen von δD und $\delta^{18}O$

In Mockritz lassen morphologische Differenzen unterschiedliche Versickerungsbilanzen zwischen Hochfläche und Aue erwarten, zumal der Auebereich noch durch Stand- (ständig oder zeitweilig wasserführende Altarme der Elbe, episodische kleinräumige Wasseransammlungen am Fuß der Hochfläche) als auch Fließgewässer (Weinske/Schwarzer Graben, Elbe) tangiert wird. Dies sollte sich auch in Variationen von δD und $\delta^{18}O$ ausdrücken.

Für die Elbe existiert eine $\delta^{18}O$ -Messreihe von 1993-1997 (TRETTIN u.a., 1999). Nach dieser liegt $\delta^{18}O$ im Mittel bei etwa $-9,2\text{‰}$. Der Höchstwert wurde mit $-8,5\text{‰}$ gemessen.

Eine Infiltration von Elbewasser in das Untersuchungsgebiet kann bei Hochwässern erfolgen. Da ihr der Aufstau des Grundwassers entgegenwirkt, sollte diese aber nur den elbnahen Teil der Aue betreffen. Des Weiteren treten starke Hochwässer bevorzugt im Frühjahr auf und sind in diesem Falle mit eher niedrigen δ -Werten verbunden.

Im Falle arbeitender Brunnengalerien Mockritz II und/oder IV erfolgt eine Uferfiltratgewinnung, die >75 % des Rohwassers betragen kann (GRISCHEK und NEITZEL, 1998). Von Mockritz I wird angenommen, dass sehr wenig oder kein Elbewasser die Fassung erreicht.

Da die Weinske das Untersuchungsgebiet quert, kommt sie potenziell für eine Kommunikation mit dem Grundwasser in Frage. Sie empfängt ihr erstes Wasser als Schwarzer Graben aus den Niederungsgebieten westlich von Torgau und reguliert im Bypass den Wasserstand des Großen Torgauer Teiches. Somit kann sie von dort mit hochgradig eingedunstetem Wasser beaufschlagt werden. Am 6.10.2000 wurden am Teichwasser $-2,33$ $\delta^{18}\text{O}$ -‰ bzw. $-28,0$ δD -‰ gemessen. Wenn das Wasser zum Fischfang im Herbst partiell abgelassen wird, kann ein Impuls an angereichertem Wasser das Untersuchungsgebiet erreichen.

In 2000 wurden $\delta^{18}\text{O}$ -Meßwerte von verschiedenen Positionen entlang der Weinske im Untersuchungsgebiet erhoben, die in Abbildung 59 zusammenfassend dargestellt sind. Die Messwerte beziehen sich auf sehr unterschiedliche Wasserführung, die von Stagnation bis hin zu hohen Wasserständen reicht. Danach sind die höchsten Werte im Herbst zu erwarten.

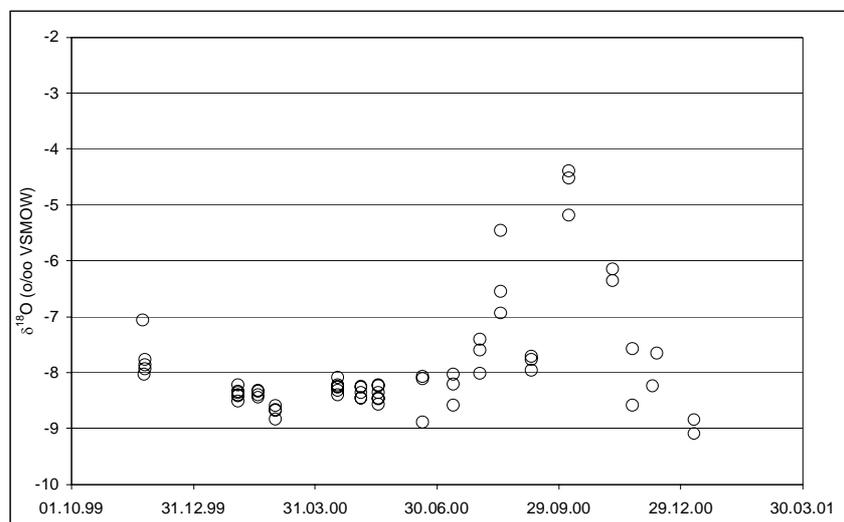


Abbildung 59: $\delta^{18}\text{O}$ in Wasser der Weinske, gemessen an verschiedenen Punkten (Lage der Messpunkte siehe Anhang II)

Die insgesamt an Grundwässern erhobenen Messwerte sind Anhang V, VII und XII zu entnehmen. Die Untersuchungen stützen sich vornehmlich auf $\delta^{18}\text{O}$. δD wurde nur zur allgemeinen Charakterisierung der Wässer gemessen.

Eine räumliche Übersicht über die erhaltenen $\delta^{18}\text{O}$ -Verhältnisse im oberflächennahen Grundwasser unter Zugrundelegung von Messungen aus dem Zeitraum April/Mai 2000 zeigt Abbildung 60. Danach ist der gesamte zentrale Westteil des Gebietes durch $\delta^{18}\text{O}$ -Werte unter -9‰ gekennzeichnet. Dies gilt auch für tiefere Grundwassermessstellen. Erst in der Aue treten Zentren mit weit höheren Werten hervor. Dies sind vor allem Gebiete nahe den Messstellen To 514/96, To 518/96 und To 509/95. Da die Graphik auf einmaligen Werten beruht, werden zeitliche Variationen in ihr nicht erfasst.

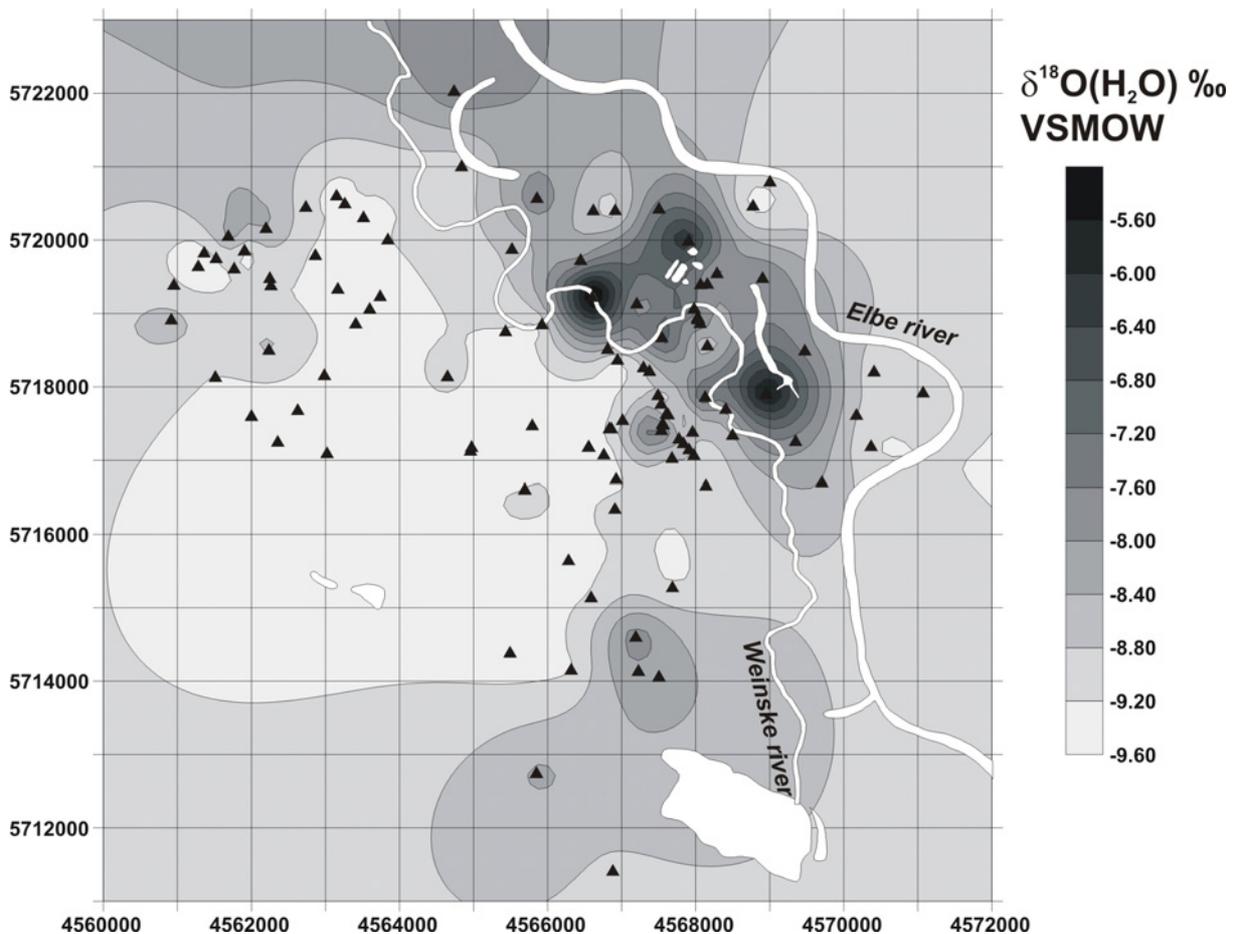


Abbildung 60: Flächenhafte Verteilung von $\delta^{18}\text{O}$ -Werten im oberen Teufenniveau (April/Mai 2000)

Der Zusammenhang zwischen δD und $\delta^{18}\text{O}$ ist in Abbildung 61 dargestellt. Die Wertepaare fitten eine Verdunstungsgerade. Man erkennt daraus, dass Eindunstungseffekte die hauptsächliche Ursache der hohen δ -Werte sein müssen. Zusätzlich wirkt eine weitere Variation, die auf Veränderungen/Unterschieden in den Bildungsverhältnissen der Grundwässer im Einzugsgebiet zurückzuführen ist.

So ergab die Analyse von 15 Sickerwasserproben von März und Oktober 2000 $\delta^{18}\text{O}$ -Werte im Bereich $-9,5$ bis $-6,9\text{‰}$ (Mittelwert $-8,7\text{‰}$). Dies bedeutet, dass in der Aue über Versickerung gebildete und oberflächennah entnommene Grundwasserproben auch Werte über -9‰ annehmen können. Die z.T. viel höheren Werte in einigen Grundwassermessstellen können sie nicht erklären.

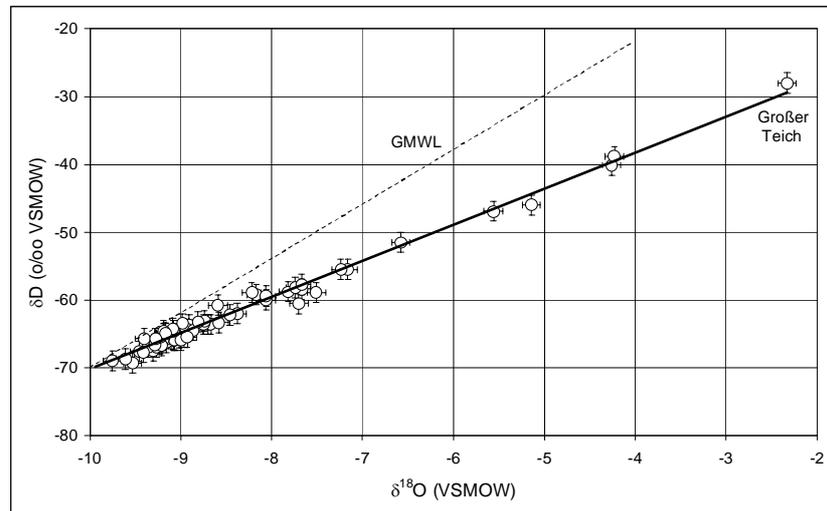


Abbildung 61: δD - $\delta^{18}\text{O}$ -Plot für Grundwasserproben aus Auemessstellen in Mockritz sowie einer Probe aus dem Großen Teich

Systematische Untersuchungen zur δ -Variation in Grundwassermessstellen wurden nicht durchgeführt, jedoch liegen für viele Messstellen mehrere Messwerte vor.

Grundsätzlich liegen die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte der tritiumarmen Wässer in den Auemessstellen unter -9‰ . Sie sind also genetisch (herkunftsmäßig) eher mit den Grundwässern des Hochflächengebietes verbunden, als mit Bildungen in der Aue. Wie bereits ausgeführt wurde, sind sie vornehmlich an die tieferen Niveaus gebunden.

Die höchste $\delta^{18}\text{O}$ -Varianz ($-9,6$ bis $-4,3\text{‰}$) ist erwartungsgemäß an den Bereich rezenter Tritiumgehalte gekoppelt. Dies betrifft nicht nur den oberflächennahen Bereich. So wurden signifikant erhöhte $\delta^{18}\text{O}$ -Werte auch in 504/95m (bis $-7,8\text{‰}$), 509/95m (bis $-7,5\text{‰}$), To 511/96 MP (bis $-8,3\text{‰}$), To 513/96 MP (bis $-8,3\text{‰}$), To 515/96 MP (bis $-6,5\text{‰}$), To 518/96 (MP: bis -7 und UP: bis $-7,9\text{‰}$) und To 8/76 (MP: $-5,7$, UP: $-7,4\text{‰}$) gemessen. Darunter befinden sich die drei dunklen Zentren in Abbildung 60, in denen also auch eine Tiefenausdehnung stattfindet. In der Nähe aller drei Zentren befinden sich Oberflächengewässer, so dass diese als Quellen betrachtet werden müssen.

In Abbildung 62 sind für drei in $\delta^{18}\text{O}$ besonders auffällige Messstellen an der Weinske alle aus dem Zeitraum 1996 bis 2000 verfügbaren Daten nach Beprobungsmonaten geordnet

dargestellt. Die höchsten Werte fallen eindeutig mit der Herbstzeit (November) zusammen. Das entspricht der Zeitspanne, in der auch in der Weinske ähnlich hohe Werte erwartet werden (vgl. Abbildung 59). Da alle drei Messstellen unmittelbar am Flussufer liegen, bedeutet dies den Nachweis einer Infiltration von Weinskewasser, die bei 515/96 sogar den MP-Bereich erfasst. Bei anderen Messstellen wie To 504/95 MP, To 505/95 OP, To 511/96 MP und To 513/96 OP+MP ist ein zeitlicher Zusammenhang der dort vorhandenen (schwächeren) Variationen infolge der größeren Entfernung zur Weinske (oder Teufe) sowie der geringen Datenzahl nicht herzustellen. Es muss aber davon ausgegangen werden, dass dieses Gebiet ebenfalls durch die Weinske beeinflusst wird.

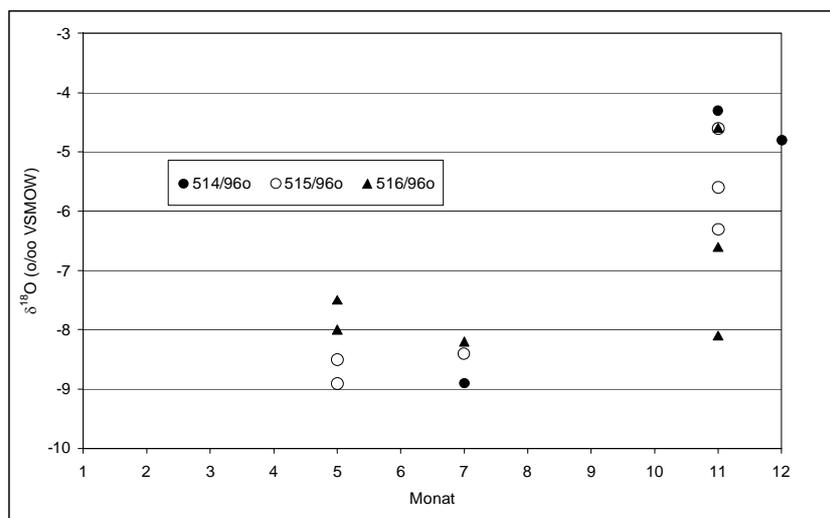


Abbildung 62: Zwischen 1996 und 2000 gemessene $\delta^{18}\text{O}$ -Werte für Grundwassermessstellen entlang der Weinske, geordnet nach dem Entnahmemonat

Die fehlende oder geringe Korrelation zwischen Tritium und $\delta^{18}\text{O}$ im Rezentbereich kann anhand von Tiefenprofilen gut demonstriert werden (z.B. To 519/96 OP/MP/UP: 11 TU,-4,2‰ / 11 TU,-7,2‰ / 11 TU,-8,2‰). Eine spezielle Korrelation besteht jedoch zwischen hohen $\delta^{18}\text{O}$ -Werten und dem Sulfatgehalt. Da die in den Fließ- (Weinske) wie auch Standgewässern (Altarme) nachgewiesenen Sulfatgehalte nur rund 200 mg/l betragen, muss sich dies auf die Grundwässer mit hohem $\delta^{18}\text{O}$, die ja einen hohen Anteil an Fremdwasser enthalten müssen, ebenfalls auswirken. Dies wird durch Abbildung 63 bestätigt. Abbildung 60 ist deshalb kein Pendant zur Sulfatverteilung (Abbildung 39, Abschnitt 4.4.1), die die Zonen hoher Sulfatgehalte hervorhebt.

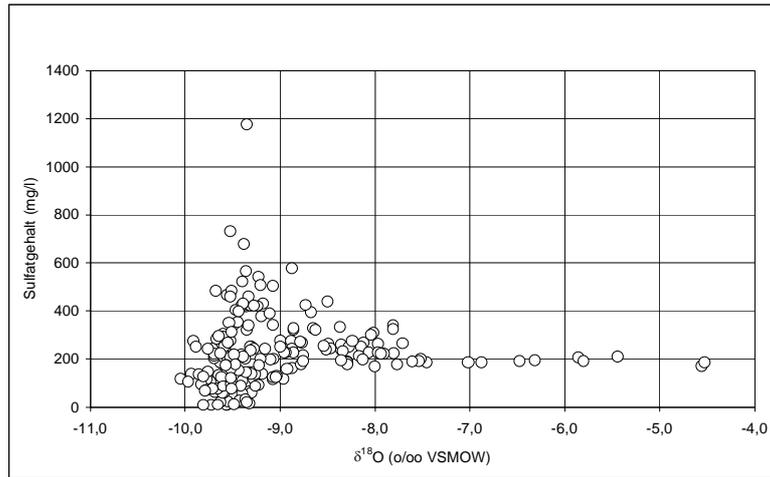


Abbildung 63: Sulfatgehalte und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte von Grundwasserproben, alle Daten 1995-2000

4.6.3 Grundwasseruntersuchungen mit Helium-3

Von den 15 analysierten Proben, vornehmlich aus mittleren und tieferen Teufenpositionen, lieferten 13 auswertbare Ergebnisse. Bei zwei Proben (To 9A/76 OP und To 9A/76 UP) ergeben sich rechnerisch negative Konzentrationen von ^3He -Komponenten, so dass eine sinnvolle Auswertung unmöglich bzw. fragwürdig wird. To 9A/76 OP weist die höchste Neonkonzentration von allen Proben auf. Bei To 9A/76 UP ist hingegen der Heliumgehalt maximal.

Wie erwartet ergibt sich für die einzige Probe aus dem OP (To 502/95 OP) auch die niedrigste Verweilzeit. Darüber hinaus ergeben sich relativ gering variierende T_{He} -Modellalter (19...27 Jahre). Bei To 502/95 liegt das Modellalter für den MP über dem des UP, was nach der bisherigen Diskussion zu dieser Messstelle nicht überrascht.

Da die zugehörigen Tritiumgehalte bei einigen Proben unter dem Erwartungsbereich für ausschließliche Grundwasserbildungen aus Jungwässern (Probewert 7 TU) liegen und daher tritiumfreie Anteile wahrscheinlich sind, so widerspiegeln die T_{He} -Werte in diesen Fällen nur die Aufenthaltszeit der jüngeren Komponenten. Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass solche Anteile auch in weiteren Proben verdeckt enthalten sind.

Bei Gültigkeit des Piston-Flow-Ansatzes für die gesamte Probe muss die ermittelte Tritiumkonzentration $^3\text{He}_{\text{tri}}+^3\text{H}$ im Rahmen der Mess- und Modellunsicherheiten mit dem zum postulierten Bildungszeitpunkt (Messzeitpunkt- T_{He}) erwarteten Niederschlagswert übereinstimmen. Allerdings waren die 70er Jahre durch starke Variationen in der Inputfunktion gekennzeichnet. Dennoch ist in Abbildung 64 klar zu erkennen, dass bei den meisten Proben der hypothetische ^3H -Anfangsgehalt $^3\text{He}_{\text{tri}}+^3\text{H}$ unter der laut

Tritiuminputkurve erwarteten Konzentration für eine homogene Probe dieses Alters liegt. Dies betrifft auch einige der Proben mit Tritiumgehalten im Rezentniveau. Das einfache Piston Flow Modell ist somit bei ihnen nicht anwendbar. Übliche Mischungsrechnungen lassen sich prinzipiell ausführen, wenn man die Summenwerte ${}^3\text{He}_{\text{tri}}+{}^3\text{H}$ mittels einer nicht zerfallskorrigierten Tritiuminputfunktion auswertet. Der Ansatz eines Dispersionsmodells (Programm Multis nach RICHTER und SZYMCZAK, 1992) war nicht erfolgreich.

Tabelle 10: Messwerte und abgeleitete Daten einer Grundwasserbeprobung vom September 2001

GWBR	${}^4\text{He}$ Nml/g	${}^3\text{He}/{}^4\text{He}$	Neon Nml/g	${}^3\text{He}_{\text{tri}}$ TU	${}^3\text{H}$ TU	${}^3\text{He}_{\text{tri}}+{}^3\text{H}$ TU	T_{He} Jahre	Sulfat mg/l
Eln 10/93 MP	$6,01 \cdot 10^{-8}$	$2,10 \cdot 10^{-6}$	$2,30 \cdot 10^{-7}$	20,8	7,7	28,5	23,3	201
Eln 11/93 MP	$5,38 \cdot 10^{-8}$	$2,15 \cdot 10^{-6}$	$2,15 \cdot 10^{-7}$	18,9	6,5	25,4	24,2	214
Eln 11/93 UP	$8,09 \cdot 10^{-8}$	$1,31 \cdot 10^{-6}$	$2,24 \cdot 10^{-7}$	13,5	3,8	17,3	26,9	140
To 502/95 OP	$6,27 \cdot 10^{-8}$	$1,44 \cdot 10^{-6}$	$2,51 \cdot 10^{-7}$	2,95	9,8	12,75	4,7	377
To 502/95 MP	$1,37 \cdot 10^{-7}$	$9,05 \cdot 10^{-7}$	$2,26 \cdot 10^{-7}$	19,9	6,0	25,9	26,0	221
To 502/95 UP	$1,30 \cdot 10^{-7}$	$9,48 \cdot 10^{-7}$	$2,20 \cdot 10^{-7}$	20,7	8,3	29,0	22,2	407
To 504/95 UP	$1,37 \cdot 10^{-7}$	$9,43 \cdot 10^{-7}$	$2,29 \cdot 10^{-7}$	21,4	8,5	29,9	22,4	128
To 514/96 MP	$6,10 \cdot 10^{-8}$	$2,56 \cdot 10^{-6}$	$2,23 \cdot 10^{-7}$	33,9	9,8	43,7	26,6	193
To 516/96 MP	$6,39 \cdot 10^{-8}$	$2,33 \cdot 10^{-6}$	$2,31 \cdot 10^{-7}$	29,5	9,1	38,6	25,7	351
To 516/96 UP	$1,97 \cdot 10^{-7}$	$5,97 \cdot 10^{-7}$	$2,26 \cdot 10^{-7}$	16,9	4,7	21,6	27,1	224
To 517/96 MP	$1,38 \cdot 10^{-7}$	$8,51 \cdot 10^{-7}$	$2,24 \cdot 10^{-7}$	17,5	5	22,5	26,8	232
To 9499 MP	$5,95 \cdot 10^{-8}$	$2,16 \cdot 10^{-6}$	$2,43 \cdot 10^{-7}$	19,8	10,2	30,0	19,2	259
To 9499 UP	$6,46 \cdot 10^{-8}$	$2,03 \cdot 10^{-6}$	$2,13 \cdot 10^{-7}$	25,4	7,7	33,1	25,9	196
To 9A/76 OP	$7,43 \cdot 10^{-8}$	$1,66 \cdot 10^{-6}$	$3,02 \cdot 10^{-7}$		10,4			
To 9A/76 UP	$3,17 \cdot 10^{-7}$	$1,97 \cdot 10^{-7}$	$2,43 \cdot 10^{-7}$		3,0			

Nimmt man vereinfachend ein Zweikomponentenmodell mit einer tritiumfreien Komponente an, so müsste der Anteil der letzteren in einigen Proben deutlich dominieren. Die diesbezügliche Kombinationsrechnung mit den Parametern ${}^3\text{H}$ und $({}^3\text{He}_{\text{tri}}+{}^3\text{H})$ bestätigt dies. Sie gibt nur für To 502/95 OP keine Lösung. Auch bei 9499 MP ist ein geringer Altwasseranteil möglich. Bei To 502/95 MP liegt der Altwasseranteil (65...75 %) deutlich über dem von To 502/95 UP (um 20 bzw. auch 60 % sind rechnerisch zulässig). Im Vergleich zur Variation der Mischungsanteile unterscheiden sich die Verweilzeiten der jüngeren Komponenten insgesamt wenig (18...28 Jahre, meist aber 20...24 Jahre). Sie liegen damit etwas unter den ${}^3\text{He}/{}^3\text{H}$ -Altern. Eine signifikante Korrelation zwischen den so berechneten Alt- bzw. Jungwasseranteilen und den Sulfatgehalten ist nicht ableitbar.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass für die beprobten mittleren und unteren Teufenlagen das Vorkommen von Wasserkomponenten im Altersbereich 20-30 Jahre typisch ist. Dieses befindet sich wahrscheinlich zumeist in Mischung mit deutlich älteren und vermutlich tritiumfreien Komponenten. Keinesfalls handelt es sich etwa bei den bereits diskutierten Messstellen To 502/95 UP oder To 504/95 UP um sehr junge Grundwässer.

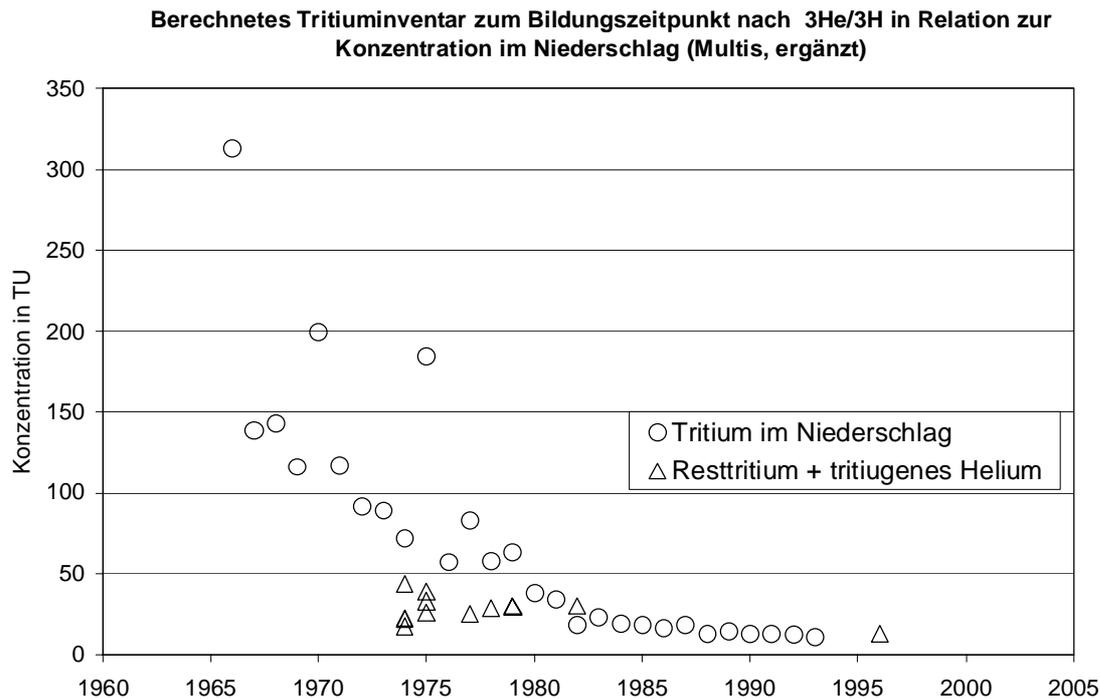


Abbildung 64: Tritiumgehalte im Niederschlag (Datenbasis Multis, ergänzt, Jahresmittel) und berechneter Gesamttritiumgehalt ($^3\text{He}_{\text{tri}}+^3\text{H}$) in Abhängigkeit von der kalendarischen bzw. der nach $^3\text{He}/^3\text{H}$ berechneten Bildungszeit

4.6.4 Fluorchlorkohlenwasserstoffe (FCKW) und SF_6

Alle FCKW- und SF_6 -Daten sind im Anhang XIII aufgelistet. Stellvertretend für die Oberflächenwässer liegt ein Datensatz für die Weinske vor. Diese Messwerte entsprechen bei F11 und F113 etwa den Erwartungen für Wässer mit Atmosphärenkontakt (in diesem Bericht benutzte Inputwerte: OSTER, 2002, persönliche Mitteilung). Bei F12 und SF_6 liegen die gemessenen Gehalte etwas bzw. deutlich oberhalb des Erwartungsbereichs.

4.6.4.1 Kontaminationsprobleme

In Abbildung 65 sind die auf Gleichgewichtskonzentrationen bezogenen FCKW-Gehalte dargestellt. Wegen der Temperaturabhängigkeit des Austauschgleichgewichts gibt es dabei eine gewisse Unschärfe. Man erkennt aber, dass nicht alle FCKW-Gehalte der Grundwässer innerhalb des Erwartungsbereichs (unterhalb des Gleichgewichtswertes) liegen. Z.T. treten stark überhöhte F12-Gehalte ohne erkennbaren räumlichen Zusammenhang über mehrere Kilometer vor allem den oberen und mittleren Aquiferbereich auf. Bei To 502/95 MP ist die zunächst festgestellte Überhöhung in der Wiederholungsmessung 4 Monate später verschwunden. Bei To 502/95 OP wird sie bestätigt. Grundsätzlich führt das Auftreten überhöhter Konzentrationen im Untersuchungsgebiet zur Verunsicherung, zumal ja

offensichtlich nicht von einer kleinräumigen Kontamination ausgegangen werden kann und auch andere Messstellen verdeckt belastet sein könnten (z.B. To 505/95 MP). Alternativ zu einem „echten Grundwassereffekt“ wurden auch die Möglichkeiten einer Kontamination bei der Probenahme und/oder Analytik diskutiert, für die aber keinerlei Anhaltspunkte gefunden wurden. In den Ergänzungsmessstellen in Torgau-Ost (vgl. Anhang XIII) wurden im landseitigen Grundwasser keine überhöhten Werte festgestellt, was aber vielleicht an der geringen Messpunktzahl liegt. ToO506/91 MP (6/3) bezeichnet eine Messstelle, in der nach früheren Erkenntnissen (MALLÉN, 2000) nur Uferfiltrate der Elbe zu erwarten sind. Zusätzlich zu F12 ist hier auch der F113-Gehalt stark erhöht.

4.6.4.2 Abbauprobleme

Allgemein erwartet man entsprechend der Luft- und Gleichgewichtskonzentrationen im Wasser für den Bereich der letzten 40 Jahre einen Quotienten aus den Konzentrationen von F11- und F12 zwischen 1 und 2,5. Ist $[F12] \geq [F11]$, so besteht der begründete Verdacht, dass entweder eine Degradation von F11 gegenüber F12 oder eine Kontamination mit F12 erfolgt sein muss. Nur bei etwa 25 % der Messungen ist $[F12]/[F11] < 1$. Zu ihnen gehören die wenigen Proben mit höheren Nitratgehalten (9499 OP, MP, 9502 OP, To 517/96 OP). Diese Übereinstimmung ist ein indirektes Indiz für Abbauprozesse, die angesichts reduzierender Verhältnisse, wie sie im Mockritzer Auengrundwasser verbreitet vorliegen, nicht unerwartet kommen.

Der höchste F113-Gehalt (0,75 pmol/l) in Mockritz wurde in To 516/96 UP gemessen. Der Wert liegt sogar über dem F12-Gehalt, was die Annahme einer Kontamination unterstützt.

Im Übrigen sind signifikante F113-Gehalte stets mit signifikanten F12- und F11-Gehalten korreliert. Unter diesen Proben befinden sich alle mit höherer Nitratkonzentration. Die meisten F113-Werte liegen jedoch unabhängig von der Filterteufe nahe der Nachweisgrenze.

4.6.4.3 Verweilzeitaussagen

Nach den bisherigen Überlegungen lassen sich die FCKW-Daten im Hinblick auf Verweilzeitaussagen nur in Auswahl und mit Vorsicht diskutieren. In Abbildung 66 sind die F12-Konzentrationen für Messstellen mit weniger als 3 pmol/l gegenüber den Tritiumgehalten aufgetragen.

Proben aus dem untersten Teufenniveau liegen mit einer Ausnahme (To 502/95 UP) im F12-Konzentrationsbereich bis 0,5 pmol/l. Dies entspräche nach dem Piston-Flow-Ansatz einer Verweilzeit von mindestens 30 Jahren. Weiterhin liegen in dieser Wertegruppe auch die Wässer aus höheren Niveaus, die anhand der relativ niedrigen Tritiumgehalte eine

Altwasserbeteiligung erkennen lassen (vergl. $^3\text{He}/^3\text{H}$). Das höhere Modellalter gegenüber den aus $^3\text{He}/^3\text{H}$ abgeleiteten Verweilzeiten erscheint grundsätzlich plausibel, da letztere nur die jüngere Komponente betreffen, die in unterschiedlichem Maße mit altem (tritium- und auch F12-freiem) Wasser verdünnt wird. Der Verdünnungsgrad würde jedoch insbesondere in Fällen mit F12-Konzentrationen nahe der Nachweisgrenze (9499 UP, To 521/00 UP, To 517/96 MP, UP, Eln 11/93 MP) höher sein, als man es nach Tritium bzw. $^3\text{He}/^3\text{H}$ (vergl. Abbildung 64) erwarten würde.

Speziell bei den Proben mit mehr als 2 pmol/l (To 505/95 MP, To 515/96 MP, To 517/96 MP, 9499 OP, MP) ist das Ergebnis eines relativ jungen Wassers (nach Piston-Flow 10-18 Jahre) glaubwürdig (kein Anzeichen für eine Kontamination), zumal bei drei der Messstellen deutliche $\delta^{18}\text{O}$ -Fluktuationen als Zeichen erhöhter Dynamik beobachtet wurden.

Bei den nitratreichen Proben ergeben bei 9499 im MP alle drei FCKW ein übereinstimmendes Piston-Flow-Alter von ca. 15 Jahren ($T_{3\text{He}} = 19 \text{ a}$). Im OP wurden bei F11 die gleichen, bei F12 und F113 aber höhere Konzentrationen gemessen. Bei 9502o erhält man nur für F11 und F12 jeweils ein Modellalter von ca. 24 Jahren, jedoch ist die Tritiumkonzentration für den sich daraus ergebenden Bildungszeitraum um 1975 zu niedrig.

Zusätzlich zu den Messwerten sind in Abbildung 66 die Erwartungskonzentrationen unter Annahme eines Dispersionsmodells (Dispersionsmodell Db=C-fr-case, Programm Multis nach RICHTER u.a. (1993) und Vorgabe von Diffusionskoeffizienten (0,05 für geringe bis 3 für starke Dispersion) bzw. mittleren Verweilzeiten (70, 50, 40, 30, 20 und 10 Jahre) eingezeichnet. Man erkennt daraus, dass es für einen großen Teil der Datenpaare durchaus eine Lösung nach diesem gegenüber dem Piston-Flow-Ansatz realistischeren Modell gibt, wobei jedoch auch der Dispersionskoeffizient in weiten Grenzen variieren muss. In den meisten Fällen liegt die mittlere Verweilzeit oberhalb von 30 Jahren. Dies betrifft auch einige der oberflächennahen Messstellen wie To 501/95 OP, To 507/95 OP, To 511/96 OP, To 512/96 OP oder Eln 11/93 OP zu. Es ist daher sehr wahrscheinlich, dass auch bei F12 ein Abbau nicht zu vernachlässigen ist.

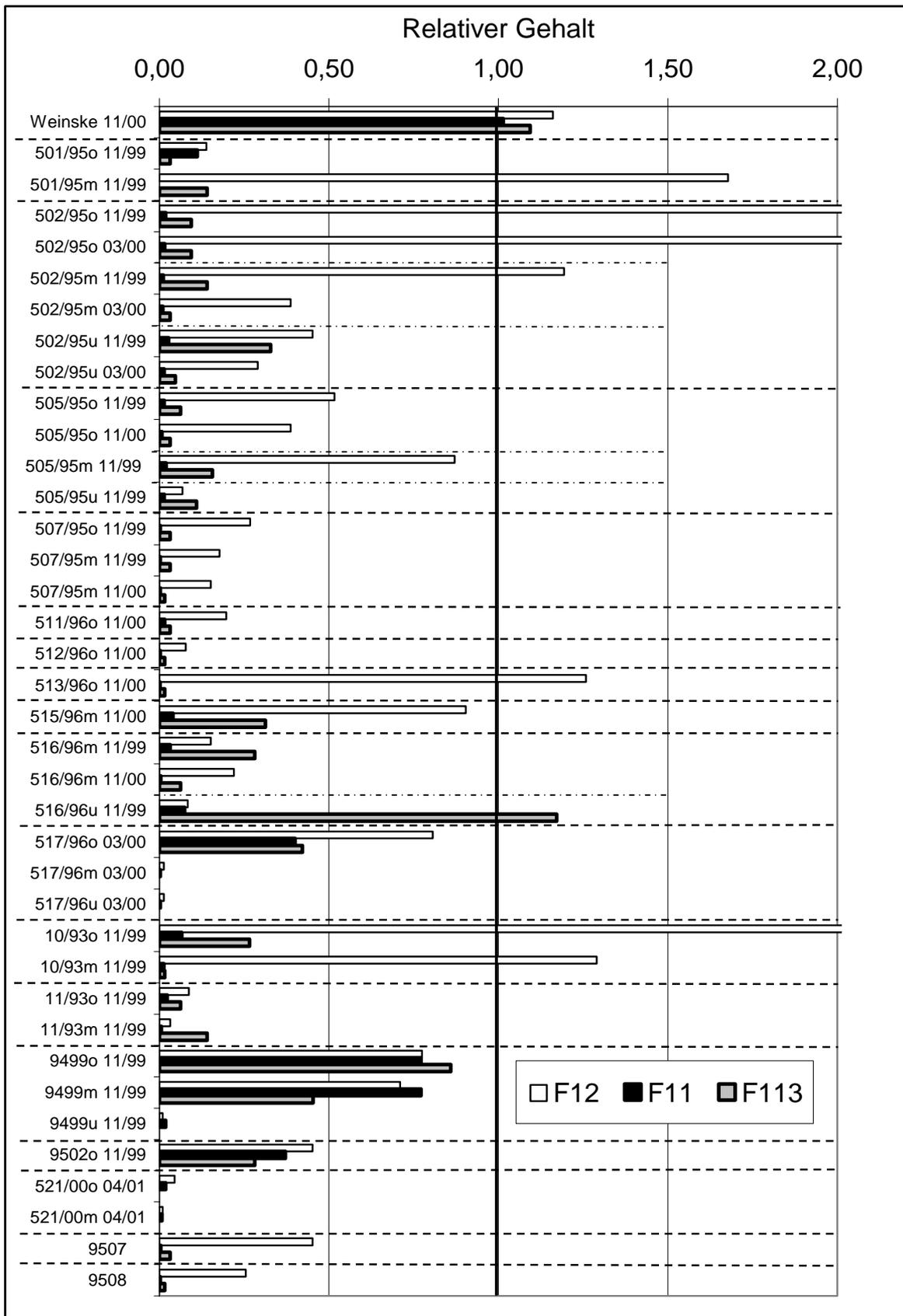


Abbildung 65: Relative FCKW-Gehalte in Wasserproben aus dem Gebiet Mockritz

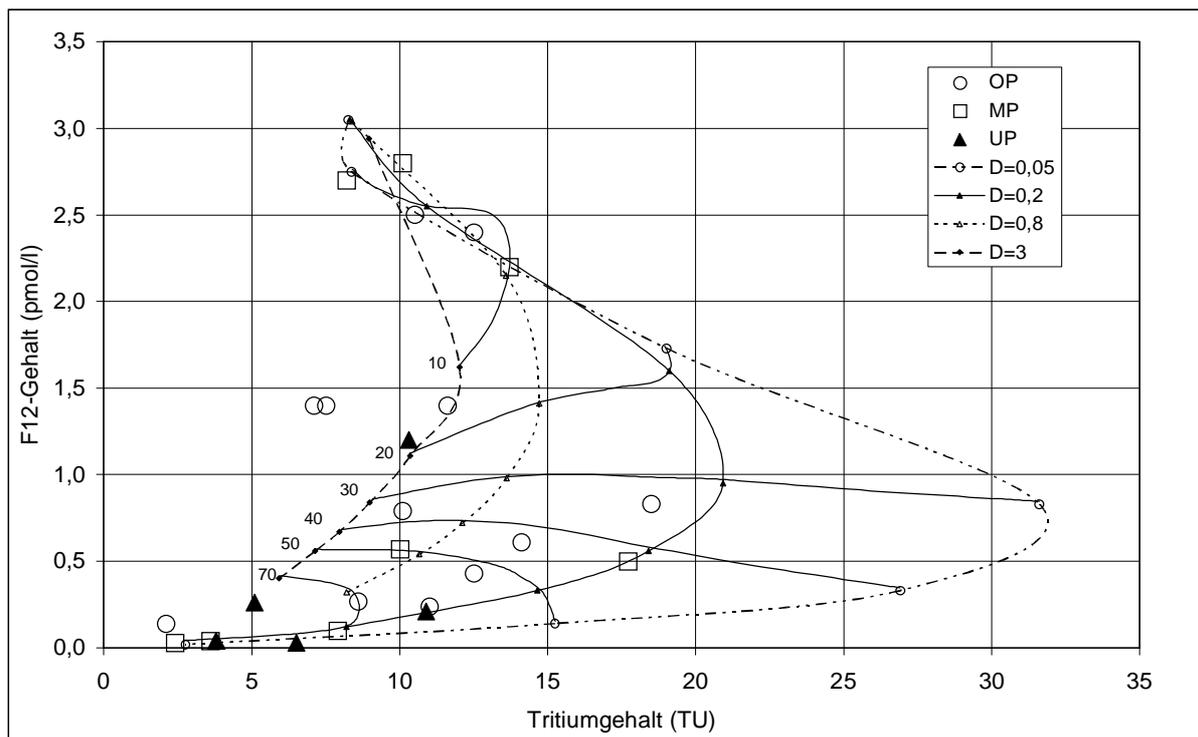


Abbildung 66: Gegenüberstellung von F12- und Tritiumgehalten unter Kennzeichnung der Teufenstufe. Eingezeichnet sind Linien theoretischer Werte in Abhängigkeit vom Dispersionsparameter (D im Bereich von 0,001 bis 5) bzw. der mittleren Verweilzeit (10...70 Jahre) für ein Dispersionsmodell, Berechnungsgrundlage 1999.

4.6.4.4 SF₆

Hinsichtlich SF₆ wurden die erwarteten Gleichgewichtswerte von rund 2 fmol/l in jeder der 9 untersuchten Grundwassermessstellen von Mockritz deutlich überschritten. Die betroffenen Messstellen sind über ein größeres Gebiet verteilt, so dass kein Anhaltspunkt für eine lokale Kontamination besteht. Eine Korrelation mit Auffälligkeiten bei chemischen Parametern inklusive der FCKW wurde nicht festgestellt. Der Maximalwert von 41 fmol/l wurde in einer sehr flachen aber nach oben mit bindigen Sedimenten abgedeckten Grundwassermessstelle (9508) gemessen. Lediglich die Messstelle To 514/94 in Torgau-Ost zeigt SF₆-Werte im Erwartungsbereich und eine plausible Tiefenverteilung. Damit ist eine Alterseinordnung der Grundwässer von Mockritz mittels SF₆ zumindest im oberen (vornehmlich untersuchten) Teufenbereich kaum möglich. Als typische Kontaminationsquellen für SF₆ gelten Transformatoren in Umspannwerken. Ein solches befindet sich ca. 700 m südöstlich der Messstelle To 502/95. Es ist aber eher unwahrscheinlich, dass dieses auch für die erhöhten Werte etwa in der entfernten Messstelle 507/95 verantwortlich ist. Ob auch das ehemalige Flachglaswerk als einziger nahe gelegener Industriebetrieb (nahe To 501/95) beachtet werden muss, ist unbekannt. Eine natürliche unterirdische SF₆-Produktion ist theoretisch ebenfalls

möglich, wird aber eher in kristallinen Gesteinen erwartet (BUSENBERG und PLUMMER, 2000). Letztlich bleibt die Herkunft des überschüssigen SF₆ im UG Mockritz wie auch die der überhöhten FCKW-Gehalte im Rahmen dieser Arbeit ungeklärt.

4.6.5 Krypton-85

Tabelle 11 zeigt die typische relative Zusammensetzung einer aus Grundwasser extrahierten Gasprobe. Es dominiert in der Regel N₂ gefolgt von CO₂ und Argon. Eine Ausnahme ist To 502/95o. Durch die erhöhte CO₂-Konzentration wurde die vorgegebene Gasmenge schnell erreicht (hohe Gasausbeute mit 65 ml/l Wasser). Durch sie erscheinen auch die relativen Stickstoff- und Argongehalte erniedrigt. Methan ist insofern ein Problemstoff, da es kryotechnisch schwer abtrennbar ist und verbrannt werden muss.

Tabelle 11: Daten zu Grundwasserbeprobungen mit Gasextraktion (Bestimmung der Gaszusammensetzung durch Hydroisotop GmbH)

Messstelle	Datum	Mittlere Gasausbeute	H ₂	O ₂	N ₂	Ar	CO ₂	CH ₄	⁸⁵ Kr	³ H
		ml G./l W.	Vol.%	Vol.%	Vol.%	Vol.%	Vol.%	Vol.%	dpm/cm ³	TU
To 507/95 OP	11.10.00	27	n.b.	< 0,03	73,2	1,25	25,6	< 0,001		17,6
To 507/95 MP	11.10.00	27	n.b.	< 0,02	79,7	1,33	18,6	0,02		17,7
To 502/95 OP	24.03.00	65	n.b.	0,02	31,1	0,66	67,9	0,26		9,7
To 502/95 MP	24.03.00	32	n.b.	< 0,02	74,1	1,38	24,6	0,10		5,3
To 502/95 MP	24.03.00	33	n.b.	< 0,01	66,6	1,35	31,4	0,54		10,3
To 517/96 OP	27.03.00	30	n.b.	< 0,01	55,3	1,40	43,1	0,09		10,5
To 517/96 MP	27.03.00	36	n.b.	< 0,01	66,1	1,24	31,4	1,10		3,6
To 517/96 UP	27.03.00	34	n.b.	0,05	74,2	1,20	24,3	0,22		3,8
To 505/95 UP	22.07.97	23,8	0,002	0,037	80,9	0,85	14,5	< 0,1	0,4 ± 0,2	14,1
To 502/95 UP	22.07.97	24,6	0,083	0,013	78,6	1,47	20,5	0,20	7 ± 0,7	13,2
ToO 514/95 UP	23.07.97	27,4	0,071	0,01	65,3	1,30	32,3	1,90	ca. 2	10,1
ToO 507/91 UP (I 7/5)	23.07.97	29,4	0,044	0,012	68,0	1,00	31,4	0,03	4,2 ± 0,7	6,1

Bei den Proben von 1997 fällt ein z.T. sehr geringer ⁸⁵Kr-Gehalt auf, der angesichts der Tritiumwerte im Rezentniveau überrascht hat. Hier zeigte sich deutlich die Notwendigkeit der korrelativen Betrachtung verschiedener Verweilzeittracer. Für die Proben von 2000 liegen aus labortechnischen Gründen bisher keine Daten vor.

Beispielhaft sei im Folgenden lediglich die Messstelle 502/95u betrachtet (1997: 13,2 TU, 7 dpm/g). Die individuelle Auswertung anhand eines Piston-Flow-Ansatzes beträgt maximal 16 Jahre bei Tritium und ca. 23 Jahre bei ⁸⁵Kr. Den Widerspruch kann man versuchen, durch günstigere Modelle zu lösen, die eine kombinierte Auswertung beider Tracer ermöglichen. Benutzt man einen Zweikomponentenansatz (zwei parallele Piston-Flow-Komponenten), so

erhält man eine jüngere Komponente mit einem Modellalter von 15...19 Jahren (Anteil an der Probe von 40...50 %) und eine ältere Komponente mit einem Modellalter von > 40 Jahren. Andererseits kann man auch ein Dispersionsmodell mit einer kontinuierlichen Verweilzeitverteilungsfunktion versuchen. In diesem Falle ergibt sich eine mittlere Verweilzeit im Bereich 30...35 Jahren. Wichtig ist aus den beiden letzten Ansätzen die Feststellung, dass die Probe im Mittel deutlich älter sein muss als man allein aus Tritium schließen könnte und dass man von einem Mischwasser ausgehen muss (auch ^{85}Kr allein ergibt nicht die richtige Lösung).

4.6.6 Schlussfolgerungen aus den Untersuchungen zur Grundwasserdynamik

Die Traceruntersuchungen zur Grundwasserbewegung und zu Mischungsprozessen haben ergeben, dass

- höhere Sulfatgehalte im Grundwasser stets mit der Anwesenheit von Jungwässern verknüpft sind und diese folglich nicht von weither (z.B. auch Tiefenwasser, auenferne Gebiete) herantransportiert werden
- insbesondere in vielen Messstellen im mittleren und unteren Aquiferniveau unter der Aue derzeit von Mischwässern unter Einbindung von Komponenten höherer Verweilzeit (im Sinne von Tritium) auszugehen ist
- andererseits aber auch Teile dieser tieferen Bereiche veränderlichen Migrationsprozessen unterworfen sein können, denen in der hydrodynamischen Modellierung nachgegangen werden sollte
- zeitliche Veränderungen im Sulfatgehalt von Grundwassermessstellen auch im Hinblick auf veränderte Mischungsverhältnisse diskutiert werden müssen
- die Parallelanwendung mehrerer Tracer in ausgedehnten und strukturierten Grundwasserreservoirs grundsätzlich erforderlich ist, auch wenn die Harmonisierung der Ergebnisse wie in Mockritz (Heterogenität der Verhältnisse, Instabilitäten im hydraulischen Regime) schwierig sein kann
- sich die hydrogeologische Grundstruktur des Gebietes (Aue, Hochfläche) sich auch in der $\delta^{18}\text{O}$ -Verteilung abbildet, wobei Oberflächenwasserinfiltrationen in der Aue besonders hervortreten und bei der Bewertung der Sulfatverteilung im Grundwasser unter der Aue nicht vernachlässigt werden kann
- FCKW und SF_6 in Mockritz als Verweilzeittracer nur eingeschränkt oder gar nicht geeignet sind, wobei nur ein Teil der Ursachen (Abbau unter anaeroben Verhältnissen) bekannt ist

5 Isotopenuntersuchungen im Trinkwassereinzugsgebiet Bramstedt

Der überwiegende Anteil der Grundwasseruntersuchungen im Trinkwassereinzugsgebiet Bramstedt wurde durch den Verbundprojektpartner TU-Hamburg-Harburg realisiert. Das isotopenanalytische Untersuchungsprogramm wurde in einem wesentlich geringeren Umfang betrieben, als im Untersuchungsgebiet Mockritz. Dies ist einerseits darin begründet, dass in Bramstedt kein vordergründiges Sulfatproblem im geförderten Rohwasser existiert und es daher aus isotopenanalytischer Sicht vorrangig darum ging, den vorliegenden Ist-Zustand zu definieren. Andererseits spielt der, verglichen mit dem UG Mockritz, in der geografischen Lage begründete wesentlich größere logistische Aufwand eine nicht unwesentliche Rolle bei der Festlegung des Umfangs des Untersuchungsprogramms.

5.1 Allgemeine Aussagen zum Untersuchungsgebiet

Die in diesem Abschnitt dargelegten Fakten, stellen nicht den Inhalt eigener Untersuchungsergebnisse dar, sondern beziehen sich zusammenfassend auf Erkenntnisse, die aus den Arbeiten des Projektpartners TU-HH gewonnen wurden.

Der Wasserversorgungsverband Wesermünde-Süd betreibt mit dem Wasserwerk Häsebusch derzeit 10 Vertikalfilterbrunnen, die Grundwasser aus dem gespannten dritten Grundwasserstockwerk aus einer Tiefe zwischen 21 und 132m uGOK fördern.

Die genehmigte Fördermenge beträgt 4,9 Mio. m³/a. Gefördert werden derzeit 2,5 Mio. m³/a, wobei aufgrund der Wasserbedarfsprognose eine Erhöhung der Fördermenge auf 3,2 Mio. m³/a in den nächsten Jahren geplant ist. Mit dem Wasserwerk Häsebusch werden die Samtgemeinde Hagen sowie Teile der Samtgemeinden Hambergen und Beverstedt und Teile der Gemeinden Loxstedt und Schwanewede mit Trinkwasser versorgt. Die Aufbereitung des Grundwassers erfolgt in einem einzigen Wasserwerk.

Naturräumlich gesehen befindet sich das Untersuchungsgebiet im Bereich der Wesermünder Geest, einem westlichen Teilgebiet der zwischen Bremen, Bremerhaven und Stade liegenden Stader Geest. Das Gebiet ist morphologisch wenig gegliedert und weist Geländehöhen bis ca. +17m NN auf. Im Bereich der Fassungsanlagen liegen diese bei ca. +9m NN. Im Norden des Untersuchungsgebiets schließen sich an die Geest Moor- und Marschgebiete an. Die Geländehöhen fallen zu den Niederungsgebieten bis auf ca. +1m NN ab.

Im Westen wird das Untersuchungsgebiet durch den Vorfluter Drepte, im Osten von der Gackau begrenzt. In den Niederungen der Drepte und Gackau liegen Hoch bzw.

Niedermoortorfe vor. Beide Vorfluter entwässern zur Weser hin, die ca. 20 km westlich des Untersuchungsgebiets liegt.

Die grundwasserleitenden Schichten bestehen aus den pleistozänen Sanden und den tertiären Kaolinsanden. Die Aquiferbasis bilden die Glimmertone der Langenfelder Schicht. Lokal können die grundwasserleitenden Schichten durch eingelagerte Geschiebemergelschichten in bis zu vier Grundwasserstockwerke (westlicher Fassungsbereich) untergliedert sein.

Der oberflächennahe Aquifer (1.GWST) weist eine Mächtigkeit von 2 – 3 m auf und ist ungespannt. Dieser Grundwasserleiter ist ausschließlich im Fassungsbereich ausgebildet. Ein direkter hydraulischer Kontakt zwischen oberflächennahem und den anderen grundwasserführenden Schichten konnte bis jetzt noch nicht nachgewiesen werden. Als Hauptaquifer werden das 2. – 4. Grundwasserstockwerk betrachtet. Trotz lokal zwischengelagerter Geschiebemergelschichten, handelt es sich um einen einheitlichen Grundwasserleiter mit Mächtigkeiten zwischen 15 und 150 m. Im Bereich der Fassung steht dieser Hauptaquifer unter gespannten Verhältnissen. In denen Bereichen, in denen die oberflächennahen GW-stauenden Schichten fehlen liegt er als freier GW-Leiter vor.

Der Grundwasserflurabstand beträgt im Mittel ca. 9 bis 10 m.

Die Landnutzung im Einzugsgebiet besteht aus Forstwirtschaft, Landwirtschaft, Sandabbau, Altablagerungen und Bebauung.

Die sandigen landwirtschaftlich genutzten Böden weisen bei einer Sickerrate von ca. 200 mm/a eine große bis sehr große Nitratauswaschungsgefährdung auf. Neben der starken Nitratbelastung des oberflächennahen Grundwassers sind Grundwasserbeschaffenheitsprobleme durch Versauerungserscheinungen und erhöhte Sulfatgehalte mit zunehmendem Trend in Teilbereichen des Einzugsgebietes vorhanden. Vermutet werden das Vorhandensein von heterotropher und autotropher Denitrifikation als auch die Auswaschung aus Altablagerungen.

Die Sulfatkonzentrationen im geförderten Rohwasser haben sich in den letzten 10 Jahren um durchschnittlich 15mg/l erhöht. Mit Maximalwerten von 60mg/l liegen sie aber noch erheblich unter den durch die EU-Trinkwasserverordnung empfohlenen Parameterrichtwerten für Sulfat.

Im Einzugsgebiet des Wassereinzugsgebiets Häsebusch werden 82 Grundwassermessstellen unterhalten, die in unterschiedlichen Tiefenbereichen verfiltert sind. Damit erlaubt das vorhandene Messnetz eine engmaschige räumliche Untersuchung der hydrochemischen und isotopischen Grundwasserbeschaffenheit. Die Lage der Messstellen ist in der topografischen Übersichtskarte des Untersuchungsgebietes im Anhang III dargestellt.

5.2 Messprogramm

Eine Bestandsaufnahme der isotopischen Variationen der Wässer und der darin gelösten Bestandteile wurde durch eine Probenahme aller verfügbaren Messstellen im April 2000 realisiert. Dabei wurden die isotopischen Zusammensetzungen des Wassers ($\delta^{18}\text{O}$ und δD) und des gelösten Sulfats ($\delta^{34}\text{S}$, teilweise $\delta^{18}\text{O}$) an allen Proben (74) ermittelt. Im Rahmen dieser Probenahmekampagne erfolgte die Bestimmung der Tritiumgehalte (29), der $\delta^{13}\text{C}$ -Werte des DIC (18) und der $\delta^{15}\text{N}$ -Werte des gelösten Nitrats (17) an ausgewählten Proben.

Zur Untersuchung der isotopischen Zusammensetzung von sedimentären Bodenschwefelspezies wurden Boden- und Sedimentproben aus dem Bohrmaterial gewonnen, das durch die Tiefbohrungen der neu errichteten Grundwassermessstellen PB89 und PB90 gefördert wurde. Für die isotopischen Bodenuntersuchungen wurden von jeder der beiden Bohrungen aus jeweils 8 verschiedenen Tiefen Proben präpariert und analysiert. Dabei stand die Bestimmung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der sedimentären Sulfide und der anorganischen Bodensulfate im Mittelpunkt des Interesses.

In eine zweite Probenahme im April 2001 wurden insbesondere die neu errichteten Messstellen PB89 und PB90 mit je zwei Filtertiefen und der im Abstrom befindliche Brunnen HB13 einbezogen. An den gewonnenen Grundwasserproben wurden die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Sulfats und die Tritiumgehalte bestimmt. Darüber erfolgte an Messstellen, die höhere Nitratgehalte enthielten, eine erneute Analyse der isotopischen Zusammensetzung des gelösten Nitrats.

5.3 Ergebnisse

5.3.1 Isotopische Zusammensetzung des Wassers ($\delta^{18}\text{O}$, δD , ^3H)

Abbildung 67 zeigt der Gegenüberstellung aller gemessenen $\delta^{18}\text{O}$ - und δD -Werte. Die erhaltenen Wertebereiche entsprechen den Erwartungen, gemäß der regionalen Verteilungsmuster in Deutschland, mit typischen Werten um $-7,7\text{‰}$ bei $\delta^{18}\text{O}$ bzw. -51‰ bei δD . Nahezu alle Werte für die Grundwässer liegen in unmittelbarer Nähe der globalen meteorischen Wasserlinie im Bereich zwischen -7‰ und -8‰ bzw. -54‰ und -48‰ und streuen damit wenig. Die weit höheren Werte des Oberflächenwassers aus der „Schmidtschen Grube“ lassen sich zwanglos mit partieller Eindampfung erklären. Es gibt keine isotopischen Hinweise auf signifikante Beteiligung von Meerwässern.

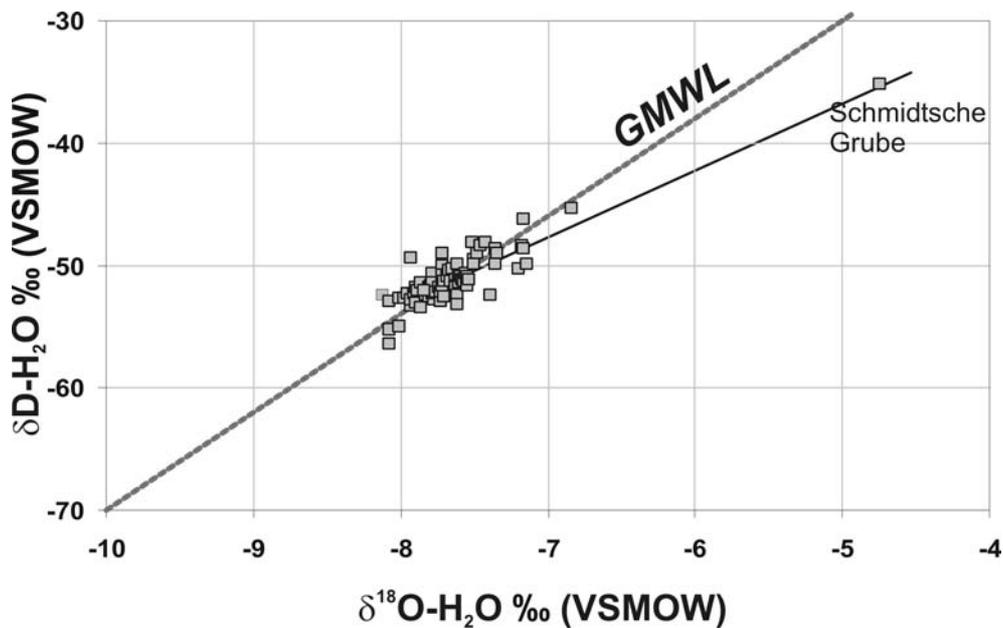


Abbildung 67: Gegenüberstellung von $\delta^{18}\text{O}$ - und δD -Werten in Wasserproben aus dem Untersuchungsgebiet Bramstedt

Die Tritium-Messungen in Auswahl ergaben – wie zu erwarten war - das Vorkommen von Grundwässern sehr unterschiedlicher Entstehungszeit (Abbildung 68). Im oberen Teufenbereich um 10 m dominieren zunächst Wässer mit Tritiumgehalten um 10 TU, die den rezenten Gehalten nahe kommen sollten (es liegen keine Niederschlagsmessreihen vor) oder leicht darüber liegen. Mit zunehmender Filtertiefe treten die Merkmale für eine höhere Verweilzeit deutlich hervor, indem einerseits der Anteil von Bildungen aus der Zeit vor ca. 20 Jahren erkennbar wird (Höchstwert 45 TU) und andererseits Mischwässer mit mehr oder weniger hohem Anteil an tritiumfreien Wässern (Alter > ca. 50 Jahre) auftreten. Entsprechend fördern auch die Brunnen ein Mischwasser, und selbst in eine Tiefe von 110m gelangen anteilig noch tritiumhaltige Wässer.

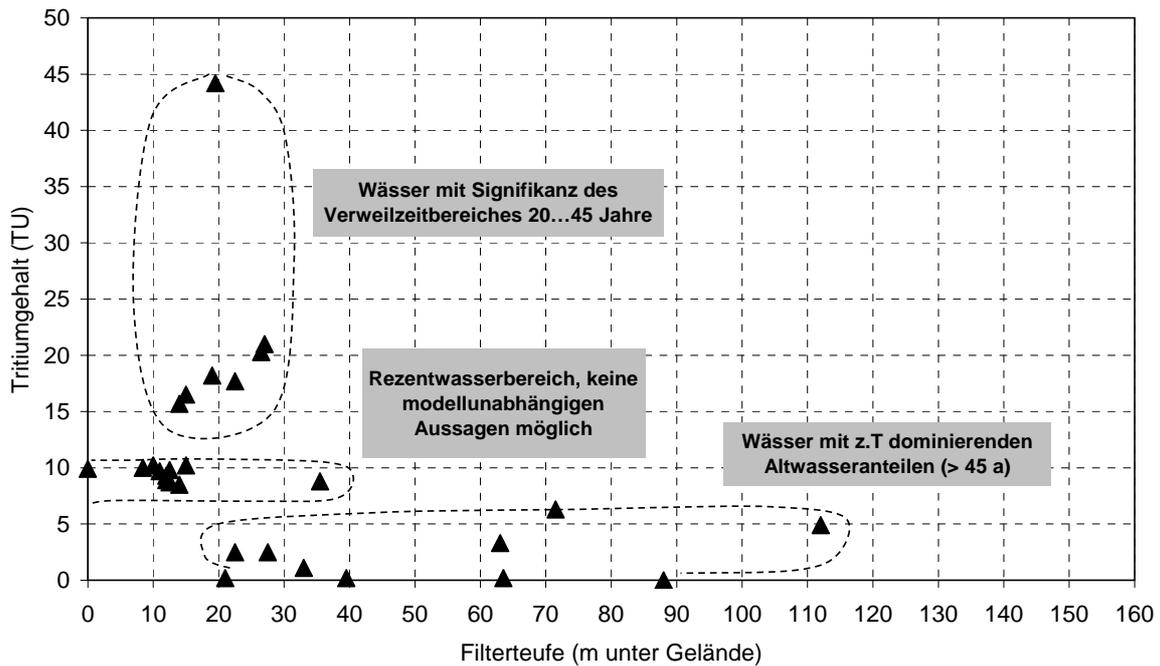


Abbildung 68: Tritiumgehalte als Funktion der Filterteufe in Bramstädter Grundwässern

5.3.2 Isotopische Zusammensetzung gelöster und sedimentärer Schwefelspezies

Die isotopische Untersuchung des anorganischen Bodensulfats hat eine offensichtliche Zweiteilung der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte ergeben. Während in oberflächennahen Horizonten isotopisch leicht positive Bodensulfate gefunden wurden, sind in tiefen Bereichen deutlich negative $\delta^{34}\text{S}$ -Werte anzutreffen. Genau wie im Untersuchungsgebiet Mockritz sind die isotopisch positiven Sulfate anthropogenen Einträgen zuzuordnen, die in der Bodenzone zwischengespeichert wurden. Negative Isotopenwerte stehen im Zusammenhang mit der Oxidation von sedimentären Sulfiden in der gesättigten Zone, wobei es zunächst zu einer Überführung der Oxidationsprodukte in den gelösten Zustand und dann zu einer Sulfatadsorption an die Sedimentmatrix kommt.

Sedimentäre Sulfide lagen bei der Bohrung PB89 in für die Isotopenanalyse ausreichender Menge nur folgenden Teufen vor: 17-18m (PB89/13), 38-39m (PB89/15) und 47-48m (PB89/16). Bei der Bohrung PB90 wurde nur in zwei untersuchten Proben ausreichend Disulfid gefunden: 32-33m (PB90/20) und 52-53m (PB90/22). Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des Disulfids aus PB89 liegen in einem deutlich negativen, aber für sedimentäre Disulfide typischen Bereich von -15...-19.3‰ CDT. Um etwa 10‰ höher liegen die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der Disulfide aus der Bohrung PB90, für die sich Messwerte von -7.8 und -9.6‰ ergaben. Die tiefenabhängige

Variabilität der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des anorganischen Bodensulfats und des Disulfids sind in Abbildung 69 dargestellt.

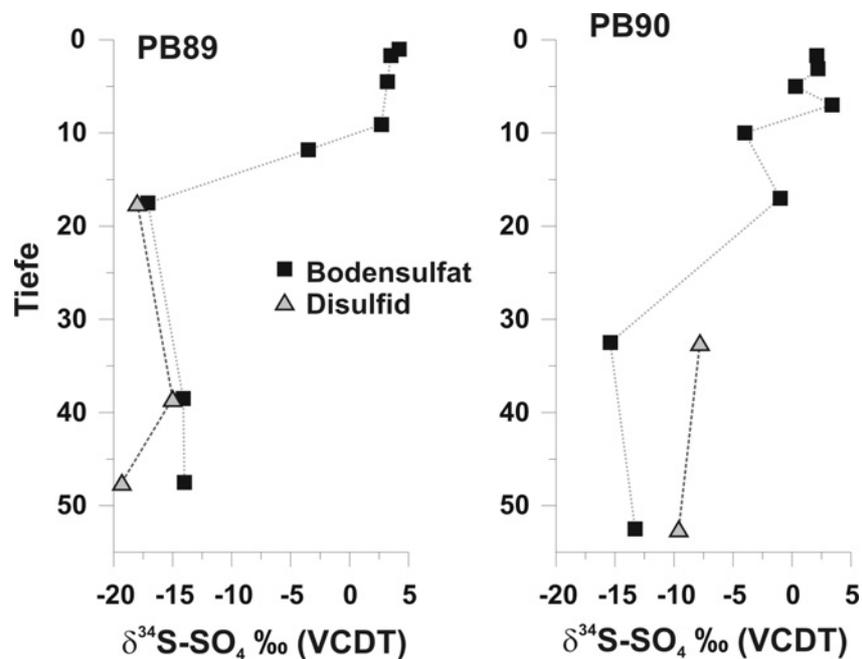


Abbildung 69: Tiefenabhängige Variabilität der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des anorganischen Bodensulfats und des Disulfids in Bodenproben aus den Bohrungen PB89 und PB90 des Untersuchungsgebietes Bramstedt

Der Schwefel im gelösten Sulfat weist eine große Isotopenvariabilität zwischen -15 und + 47‰ (VCDT) auf. Der extrem hohe Isotopenwert von +47‰ und die sehr geringe Sulfatkonzentration (fast 0mg/l) bei PB49 sind Ausdruck für ein fortgeschrittenes Stadium der dissimilatorischen Sulfatreduktion in dieser Messstelle. Die meisten Werte liegen jedoch relativ gleichverteilt zwischen -13 und +5‰ (VCDT). Eine einfache Beziehung zwischen $\delta^{34}\text{S}$ und den Sulfatgehalten ist in Abbildung 70 nicht zu erkennen.

Die Gegenüberstellung von $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werten des gelösten Sulfats in Abbildung 71 liefert ebenfalls keine eindeutige Korrelation. Die Schwankungsbreite der $\delta^{18}\text{O}$ -Werte von +2 bis +10‰ (VSMOW) kann nahezu im gesamten Variationsbereich der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte angetroffen werden.

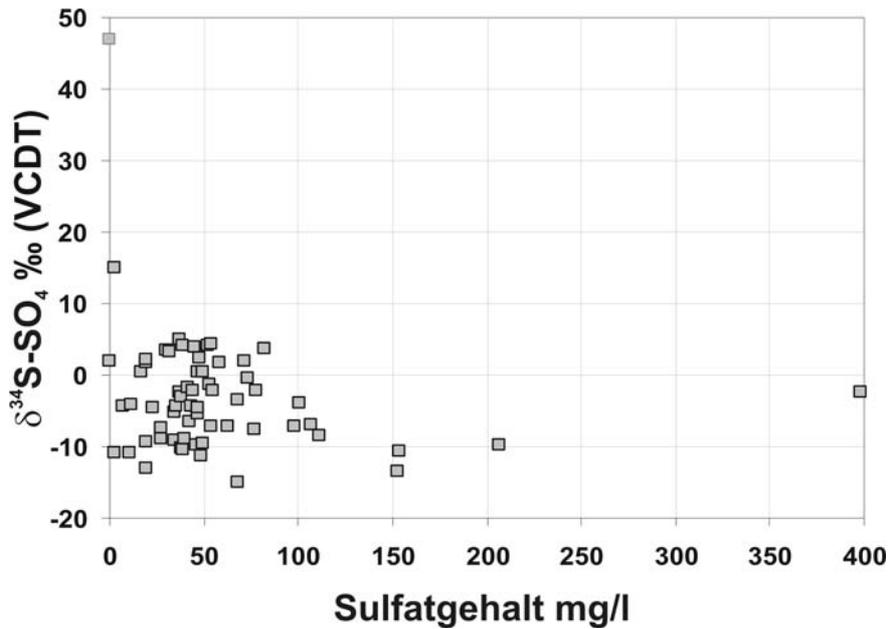


Abbildung 70: Zusammenhang zwischen den Sulfatgehalten und den $\delta^{34}\text{S}$ -Werten in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes Bramstedt

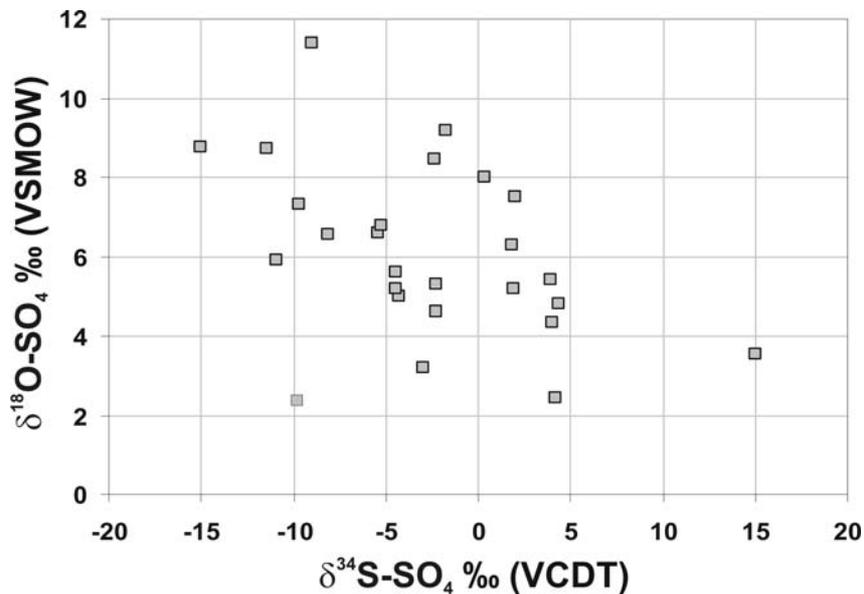


Abbildung 71: Gegenüberstellung von $\delta^{34}\text{S}$ - und $\delta^{18}\text{O}$ -Werten des gelösten Grundwassersulfats im Untersuchungsgebiet Bramstedt

Genau wie im Untersuchungsgebiet Mockritz sind auch hier einige Proben, die anhand ihrer $\delta^{34}\text{S}$ -Werte eindeutig der Sulfidoxidation zugeordnet werden können, durch unerwartet hohe $\delta^{18}\text{O}$ -Werte auffällig. Zwar sollten die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des gelösten Sulfats in Bramstedt ohnehin aufgrund der positiveren $\delta^{18}\text{O}$ -Werte des Wassers um etwa 1,5 bis 2‰ höher liegen als in Mockritz, $\delta^{18}\text{O}$ - SO_4 -Werte von über 8‰ (VSMOW) können aber bei der Sulfidoxidation

durch freien Sauerstoff oder Fe^{3+} kaum erreicht werden. Deswegen müsste man auch hier wieder den Prozess der autotrophen Denitrifikation in Erwägung ziehen.

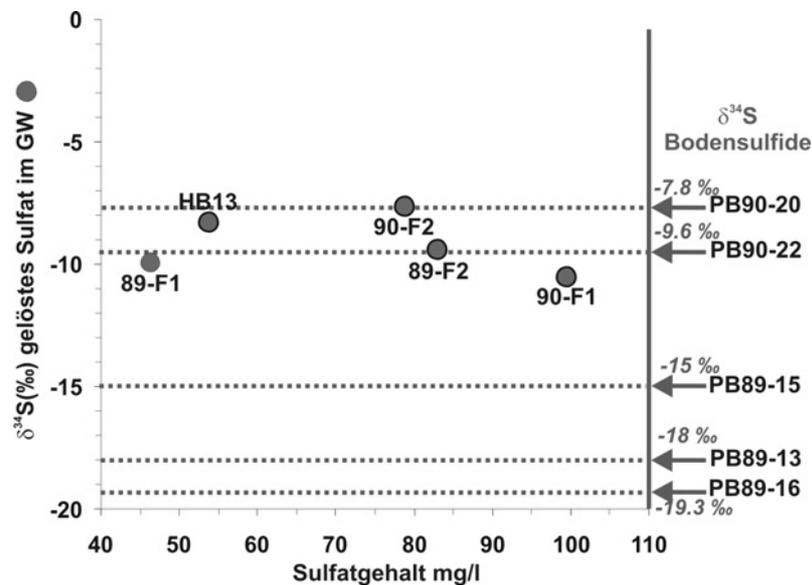


Abbildung 72: Gegenüberstellung der Sulfatgehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte in den Grundwasserproben der Messstellen PB89, 90, HB13 im Untersuchungsgebiet Bramstedt. Weiterhin sind im Diagramm die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der sedimentären Sulfide der Bohrungen PB89 und 90 dargestellt.

Abbildung 72 zeigt die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte für Grundwasserproben, die aus den neu errichteten Messstellen gewonnen wurden. Im gleichen Bereich wie die Sulfidwerte liegen bei der Messstelle PB90 auch die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte des gelösten Sulfats. (F1 -10.4‰, F2 -7.5‰). Diese Werteübereinstimmung legt die Vermutung nahe, dass das vorliegende gelöste Sulfat aus der Oxidation von Sulfiden aus der unmittelbaren Nachbarschaft stammt. Allerdings zeigt Abbildung 73, dass ein großer Teil der Grundwasserproben im Untersuchungsgebiet Bramstedt einen ähnlichen Wertebereich abdeckt. Somit ist zwar prinzipiell belegt, dass bei der Messstelle PB90 sedimentäres Sulfid als Hauptsulfatquelle durchaus in Frage kommt. Eine *in situ*-Oxidation lässt sich jedoch nicht beweisen.

Bei der Messstelle PB89 besteht ein deutlicher Unterschied zwischen den Isotopensignaturen des gelösten Sulfats und der sedimentären Sulfide. Zwar lässt sich aufgrund der negativen Isotopenwerte des Sulfats (PB89-F1 -9.8‰, F2 -9.3‰) auch hier Sulfidoxidation als Hauptquelle vermuten, eine *in situ*-Oxidation kann aber aufgrund der deutlichen isotopischen Differenzen ausgeschlossen werden.

Insgesamt sind, wie auch in Mockritz mit einer ähnlichen Datenspreizung, die Quellenbezüge sehr heterogen. Nach den bisherigen Erfahrungen ist aber anzunehmen, dass die Werte unter -5‰ weitgehend durch Beiträge aus der Sulfidoxidation zu erklären sind.

5.3.3 Isotopische Zusammensetzung weiterer gelöster Bestandteile (DIC, NO₃)

Aufgrund der allgemein sehr niedrigen pH-Werte sind die Grundwässer im Untersuchungsgebiet Bramstedt relativ bikarbonatarm. Die $\delta^{13}\text{C}$ -Werte des DIC schwanken in einem Bereich von -25 bis -10‰ (VPDB). Wie in Abbildung 73 zu erkennen ist, besteht eine statistisch signifikante Abhängigkeit der $\delta^{13}\text{C}$ -Werte von den jeweiligen pH-Werten. Im pH-Bereich zwischen 4.3 und 8.2, in dem alle untersuchten Proben liegen, besteht der DIC nur aus den beiden Karbonatspezies H_2CO_3 und HCO_3^- , für die jeweils spezifische Gleichgewichtsfractionierungen mit dem gasförmigen CO_2 existieren (siehe Abschnitt 3.1.1.3.4). Da die relativen Anteile von H_2CO_3 und HCO_3^- pH-abhängig schwanken, besteht auch eine lineare Abhängigkeit der Gesamtfractionierung zwischen gasförmigen CO_2 und dem DIC. Aus der sichtbaren Korrelation in Abbildung 73 kann man daher ableiten, dass für die DIC-Bildung im Untersuchungsgebiet Bramstedt im Wesentlichen von einer DIC-Quelle auszugehen ist. Die $\delta^{13}\text{C}$ -Werte dieses CO_2 liegen bei etwa -24‰ (VPDB), was auf eine Herkunft aus der mikrobiellen Oxidation bodenorganischer Substanz schließen lässt.

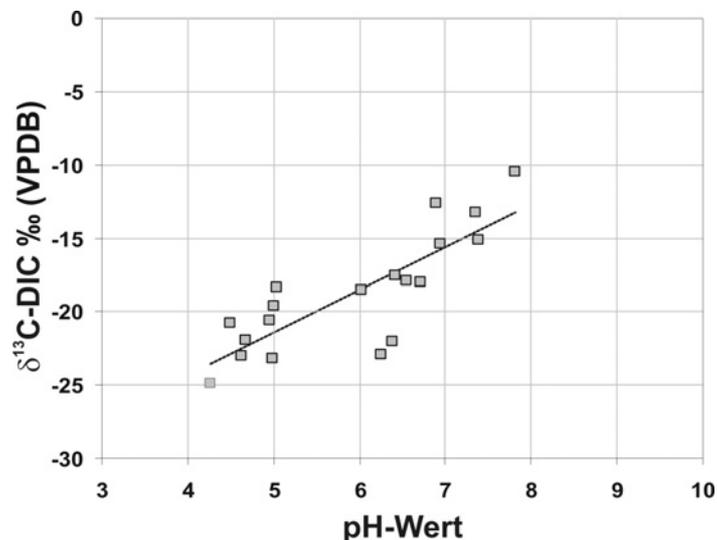


Abbildung 73: Zusammenhang zwischen pH-Werten und $\delta^{13}\text{C}$ -Werten des DIC in Grundwasserproben aus dem UG Bramstedt

$\delta^{15}\text{N}$ -Werte des gelösten Nitrats wurden nur in einigen Proben mit ausreichend hohem Nitratgehalt gemessen. Daten liegen auch deshalb nur für den Teufenbereich bis 20m vor.

Generell schwanken die $\delta^{15}\text{N}$ -Werte im Untersuchungsgebiet zwischen -1 und +14‰ (AIR). Abbildung 74 macht deutlich, dass zwischen den Nitratgehalten und den jeweiligen $\delta^{15}\text{N}$ -Werten kein erkennbarer Zusammenhang besteht.

Bei der überwiegenden Mehrheit der Proben entsprechen die $\delta^{15}\text{N}$ -Werte dem Erwartungsbereich für Nitrat aus bodenorganischem Stickstoff (bis etwa 8‰). Die Werte über 10‰ deuten allerdings auf einen organischen Düngereintrag hin. Das Vorkommen des Prozesses der autotrophen Denitrifikation im Untersuchungsgebiet kann anhand der Isotopendaten weder bestätigt noch ausgeschlossen werden.

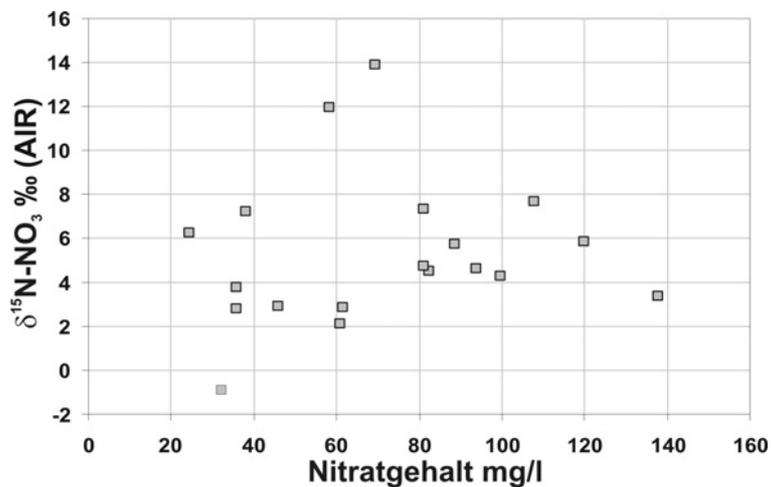


Abbildung 74: Gegenüberstellung der Nitratgehalte und der dazugehörigen $\delta^{15}\text{N}$ -Werte für Grundwasser aus dem UG Bramstedt

6 Allgemeine Schlussfolgerungen

Die Zielstellung der Untersuchung der isotopischen Zusammensetzung von gelösten Bestandteilen in Grund-, Oberflächen und Niederschlagswässern sowie von Schwefelverbindungen in Sedimenten und Böden im Untersuchungsgebiet Mockritz bestand in der Detailanalyse des Schwefelkreislaufes. Schwerpunkte waren dabei die Identifizierung verschiedener Schwefelquellen und ihres lokal und zeitlich variierenden Beitrages für die Sulfatfracht im Grundwasser, die Beschreibung und Quantifizierung von isotope relevanten Schwefeltransformationsprozessen wie Sulfidoxidation, Sulfatmischung und Sulfatreduktion, sowie das Erkennen von Prozessüberlagerungen. Darüber hinaus sollte versucht werden, die Verknüpfung des Schwefelkreislaufs mit anderen Stoffkreisläufen, wie die des Stickstoffs und Kohlenstoffs, eingehender zu charakterisieren. Schließlich sollte mittels natürlicher Isotopentracer ein Beitrag zum Verständnis der aus der Bewegung des Grundwassers resultierenden Sulfattransportprozesse und -verteilungen geleistet werden.

Dementsprechend müssen sich die Untersuchungen in vier zusammenhängende Komplexe gliedern:

- die isotope analytische Charakterisierung potentieller Sulfatquellen
- die Ergänzung und Charakterisierung des Sulfatverteilungsmusters im Grundwasser durch ein auch statistisch gesichertes Isotopenmuster
- die Beweisführung bezüglich der Relevanz von Prozessen, die zu hohen Sulfatkonzentrationen führen (Hypothesenbeweis)
- die Charakterisierung des Grundwasserreservoirs bezüglich Herkunft und Bewegung des Wassers

Dieses Konzept erfordert einen experimentellen Aufwand, der zwar stark von der Kompliziertheit der standortlichen Bedingungen abhängt aber auch nicht mit einigen wenigen Messungen abgetan werden kann.

Im vorliegenden Fall wurden in beiden Testgebieten die wesentlichen für die aufgetretenen höhere Sulfatkonzentrationen verantwortlichen Prozesse ermittelt und zugeordnet. Der dabei getriebene Aufwand war in Mockritz auch infolge der komplizierteren Gesamtsituation höher als in Bramstedt, wobei Mockritz auch als Testobjekt für unterschiedliche Tracermethoden betrachtet wurde.

Mit Abschluss aller Teilprojekte wird ein Wissensstand erreicht sein, der die Frage aufwirft, wie die Daten bzw. die sich als unikal erwiesenen Techniken auch in der Zukunft genutzt werden können. In allen Grundwasserressourcen vollziehen sich im Verlauf ihrer Nutzung mehr oder weniger große Veränderungen, die nur dann gut vorausgesagt werden können,

wenn sich die Bewirtschaftungs- und sonstigen Randbedingungen nicht ändern. In Mockritz wird die Nutzung der derzeit nicht ausgelasteten Förderkapazitäten auch künftig stark von der Nachfrage nach Fernwasser abhängen. Unabhängig davon werden bereits jetzt Möglichkeiten einer qualitätsverbessernden Produktionsweise diskutiert. Man kann demzufolge auch für die Zukunft nicht von stabilen Verhältnissen ausgehen. Große Bemühungen wurden in den Aufbau effektiver Monitoringsysteme investiert. Grundwassermonitoring erfasst in den meisten Wassergewinnungsgebieten vorwiegend hydraulische und chemische Daten. Isotope werden bisher fast ausschließlich in Projekten mit Forschungscharakter eingesetzt.

Da das Sulfatproblem eine wesentliche Ursache in der Sulfidoxidation an einem Standort hat, der einige km von der Wasserfassung entfernt ist, gibt es sowohl eine aktive als auch eine passive Strategie zur Problembeseitigung. Bei der aktiven Strategie geht es um die Unterbindung des Oxidationsprozesses. Auch hier kann man ursächlich wirksam werden, indem man die landwirtschaftlich eingetragene Nitratmenge drastisch reduziert, oder man beschränkt sich auf die symptomatische Herangehensweise, bei der versucht wird, die Nitratfracht durch geeignete technische Maßnahmen um die sedimentären Sulfidanreicherungen zu leiten. Beide Maßnahmen scheinen aus politischen oder wirtschaftlichen Gründen schlecht realisierbar. Günstiger wäre die Anwendung der passiven Strategie, die den Oxidationsprozess nicht zu unterbinden versucht. Hier könnte durch ein geeignetes Förderregime der Anteil an stark sulfathaltigem landseitigem Grundwasser zurückgedrängt und zunehmend durch gering sulfatbelastetes Elbe-Uferfiltrat ersetzt werden. Es wäre unseres Erachtens wertvoll, den Effekt oder Erfolg künftiger Bewirtschaftungsmaßnahmen wie auch allgemein von Veränderungen im Sulfatgehalt des Rohwassers nicht nur über die Konzentrationen sondern auch anhand der Isotopensignaturen zu verfolgen und zu bewerten. Für $\delta^{34}\text{S-SO}_4$ kommen hier vor allem ausgewählte Förderbrunnen in Frage.

Im Zusammenhang mit den festgestellten Veränderungen im tieferen Grundwasser im Bereich der Messstelle To 502/95 (oder auch To 513/96) bietet sich die Einbeziehung von Tritium als zusätzlicher Indikator an. $\delta^{18}\text{O}$ hat sich als empfindlicher Oberflächenwasserindikator erwiesen und sollte zwar nicht im normalen Grundwassermonitoring wohl aber bei etwaigen Spezialuntersuchungen zu dieser bisher relativ wenig beachteten Problematik einbezogen werden.

7 Literatur

- AMBERGER, A. und H.L. SCHMIDT (1987): Natürliche Isotopengehalte von Nitrat als Indikatoren für dessen Herkunft. - *Geochimica et Cosmochimica Acta* 51, 2699-2705
- BERNER, R.A. (1970): Sedimentary pyrite formation. - *American Journal of Science* 268, 1-23
- BERNER, R.A. (1971): *Principles of chemical sedimentology*. - McGraw-Hill, New York, 240 S.
- BLOEM, E.M. (1998): Schwefel-Bilanz von Agrarökosystemen unter besonderer Berücksichtigung hydrologischer und bodenphysikalischer Standorteigenschaften. – Dissertation TU Braunschweig, Landbauforschung Völkenrode, Sonderheft 192
- BÖTTCHER, J.; STREBEL, O.; VOERKELIUS, S. und H.L. SCHMIDT (1990): Using isotope fractionation of nitrate-nitrogen and nitrat-oxygen for evaluation of microbial denitrification in a sandy aquifer. - *Journal of Hydrology* 114, 413-424
- BÖTTCHER, M.E.; SMOCK, A.M. und H. CYPIONKA (1998): Sulfur isotope fractionation during experimental precipitation of iron(II) and manganese(II) sulfide at room temperature. – *Chemical Geology* 146, 127-134
- BUSENBERG, E. und L.N. PLUMMER (2000): Dating young groundwater with sulfur hexafluoride: Natural and anthropogenic sources of sulfur hexafluoride. – *Water Resources Research* 36, 3011-3030
- CANFIELD, D.E. und B. THAMDRUP (1994): The production of ^{34}S -depleted sulfide during bacterial disproportionation of elemental sulfur. - *Science*, 1973-1975
- CHEA, Y.M. und H.R. KROUSE (1986): Alteration of sulfur-34 natural abundance in soil by application of feedlot manure. - *Soil Science Society of America Journal* 50, 1425-1430
- CHIBA, H. und H. SAKAI (1985): Oxygen isotope exchange rate between dissolved sulfate and water at hydrothermal temperatures. - *Geochimica et Cosmochimica Acta* 49, 993-1000
- CRAIG, H. (1961): Isotopic variations in meteoric waters. - *Science* 133, 1702-1703
- DAVID, M.B., MITCHELL, M.J., ALDCORN, D. und R.B. HARRIS (1989): Analysis of sulfur in soil, plant and sediment materials: sample handling and use of an automated analyzer. - *Soil Biol. Bioche.* 21, 119-123
- EISSMANN, L. und T. LITT (1994): *Das Quartär Mitteleuropas – Ein Leitfaden und Exkursionsführer*. - Altenburger Naturwissenschaftliche Forschungen, Heft 7, Altenburg

- EKWURZEL, B., SCHLOSSER, P., SMETHIE Jr., W.M., PLUMMER, N., BUSENBERG, E., MICHEL, L., WEPPERINIG, R. und M. STUTE (1994): Dating of shallow groundwater: Comparison of the transient tracers $^3\text{H}/^3\text{He}$, chlorofluorocarbons, and ^{85}Kr . - Water Resources Research 30, 1693-1708
- FISCHER, M. (1989): Schwefel-Vorräte und -Bindungsformen süddeutscher Waldböden in Abhängigkeit von Gestein und atmogener Schwefel-Deposition. Forstliche Forschungsberichte München 100
- FOLTAN, W. (1996): 50 Jahre Fernwasserversorgung für den mitteldeutschen Raum. - Wasserwirtschaft Wassertechnik, 6/96, 18-24
- FOLTAN, W. (1999): Trinkwasser für den mitteldeutschen Raum durch Fernwasserversorgung aus der Elbaue und dem Ostharz. - Handbuch Wasserversorgungs- und Abwassertechnik, Bd. 2, 6. Ausgabe, Essen, 167-226
- FRITZ, P.; BASHARMAL, G.M.; DRIMMIE, R.J.; IBSEN, J. und R.M. QURESHI (1989): Oxygen isotope exchange between sulphate and water during bacterial sulfate reduction. - Chemical Geology (Isotope Geoscience Section) 79, 99-105
- GARRELS, R.M. und C.L. CHRIST (1965): Solutions, Minerals, and Equilibria. - Harper und Row, New York, 450 S.
- GAUGER, T., KÖBLE, R. und ANSHELM, F. (2000): Kritische Luftschadstoff-Konzentration und Eintragsraten sowie ihre Überschreitung für Wald und Agrarökosysteme sowie nahe waldfreie Ökosysteme. Teil 1: Deposition Loads 1987-1989 und 1993-1995. – Bericht 29785079, Institut für Navigation, Universität Stuttgart
- GIESEMANN, A., JÄGER, H. J., NORMANN, A. L., KROUSE, H. R. und W.A. BRAND (1994): On Line Sulphur Isotope Determination using an Elemental Analyser Coupled to a Mass-Spectrometer. - Anal. Chem. 66, 2816-2819
- GRISCHEK, T. und P. NEITZEL (1998): Identifizierung von Strömungsprozessen mittels hydrochemischer Verfahren. - In: NESTLER u.a. (Hrsg.): Wassergewinnung in Talgrundwasserleitern im Einzugsgebiet der Elbe. UFZ-Bericht Nr. 7/1998, ISSN 0948-9452, 52-58
- GRISCHEK, T., NEITZEL, P., ANDRUSCH, T., LAGOIS, U. und W. NESTLER (1997): Verhalten von EDTA bei der Untergrundpassage und Ausweisung von Infiltrationszonen an der Elbe. - Vom Wasser 89, 261-282
- HABICHT, K.S. und D.E. CANFIELD (1997): Sulfur isotope fractionation during bacterial sulfate reduction in organic-rich sediments. - Geochimica et Cosmochimica Acta 61, 5351-5361

- HABICHT, K.S.; CANFIELD, D.E. und J. RETHMEIER (1998): Sulfur isotope fractionation during bacterial sulfate reduction and disproportionation of thiosulfate and sulfite. - *Geochimica et Cosmochimica Acta* 62, 2585-2595
- HAHNE, H. (1982): Zur Verteilung und Genese von Sulfiden in Braunkohlen. – Unveröffentlichter Abschlußbericht, Bergakademie Freiberg, 119 S.
- HALL, G.E.M., PELCHAT, J.C. und J. LOOP (1988): Separation and recovery of various sulphur species in sedimentary rocks for stable sulphur isotopic determination. - *Chem. Geol.* 67, 35-45
- HARRISON, A.G. und H.G. THODE (1958): Mechanism of the bacterial reduction of sulphate from isotope fractionation studies. - *Transactions of the Faraday Society* 54, 84-92
- HOEFS, J. (1997): Stable isotope geochemistry. - Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg; New York, 201 S.
- HOLSER, W.T.; KAPLAN, I.R.; SAKAI, H. und I. ZAK (1979): Isotope geochemistry of oxygen in the sedimentary sulfate cycle. - *Chemical Geology* 25, 1-17
- HOLT, B.D.; KUMAR, R. und P.T. CUNNINGHAM (1981): Oxygen-18 study of the aqueous-phase oxidation of sulfur dioxide. - *Atmospheric Environment* 15, 557-566
- HOLT, B.D.; KUMAR, R. und P.T. CUNNINGHAM (1982): Primary sulfates in atmospheric sulfates: Estimation by oxygen isotope ratio measurement. - *Science* 217, 51-52
- HORSCH, H., RING, I. und F. HERZOG (Hrsg.) 2001: Nachhaltige Wasserbewirtschaftung und Landnutzung. Methoden und Instrumente der Entscheidungsfindung und –umsetzung. -Metropolis-Verlag, Marburg 2001, 488S
- JOHNSON, C.M. und H. NISHITA (1952): Microestimation of sulfur in plant materials, soils, and irrigation waters. - *Anal. Chem.* 24, 736-742
- JØRGENSEN, B.B. (1990): A thiosulfate shunt in the sulfur cycle of marine sediments. – *Science* 249, 152-154
- KAPLAN, I.R. und S.C. RITTENBERG (1964): Microbiological fractionation of sulphur isotopes. – *Journal Gen. Microbiology* 34, 195-212
- KEMP, A.L.W. und H.G. THODE (1968): The mechanism of the bacterial reduction of sulphate and of sulphite from isotope fractionation studies. - *Geochimica et Cosmochimica Acta* 32, 71-91
- KENDALL, C. (1998): Tracing nitrogen sources and cycling in catchments. - In: KENDALL, C. und J.J. MCDONNELL (Hrsg.), *Isotope tracers in catchment hydrology*, Elsevier, Amsterdam, New York, Tokio, 519-576

- KEPPLER, A. (1996): Hydrogeologische, hydrochemische und isopenhydrologische Untersuchungen an den Oberflächen- und Stollenwässern im Grimselgebiet, Schweiz. - GSF-Bericht 4/96, Neuherberg
- KILMER, V.J. und D.C. NEARPASS (1960): The determination of available sulfur in soils. - Soil Sci. Soc. Am. Proc. 24, 337-340
- KNIEF, K. (1998): Isotopenbiogeochemische Untersuchungen über Umsetzungsprozesse des Schwefels in Agrarökosystemen mittels der stabilen Isotope ^{34}S und ^{18}O . - Dissertation Universität München, UFZ-Bericht Nr. 12/1998, 174 S.
- KNÖLLER, K. (2000): Anwendung stabiler Umweltisotope zur Bewertung hydrochemischer Zustände und Prozesse in Folgelandschaften des Braunkohlebergbaus. - Dissertation Universität Leipzig, UFZ-Bericht Nr. 33/2000, 153 S.
- KNÖLLER, K., STRAUCH, G. (2002): The application of stable isotopes for assessing the hydrological, sulfur, and iron balances of acidic mining lake ML111 (Lusatia, Germany) as a basis for biotechnological remediation. - Water, Air and Soil Pollution: Focus 2, 3-14
- KORNEXL, B. E., GEHRE, M., HÖFLING, R. und R.A. WERNER (1999): On-line $\delta^{18}\text{O}$ Measurements of Organic and Inorganic Substances. - Rapid Commun. Mass Spectrom. 13, 1685-1693
- KROUSE, H.R. (1980): Sulphur isotopes in our environment. - In: Fritz, P. und J. Ch. Fontes (Hrsg.), Handbook of environmental isotope geochemistry, Vol. 1: The terrestrial environment A, Elsevier, Amsterdam, New York, 435-471
- KROUSE, H.R. und J.W. CASE (1983): Sulphur isotope ratios in water, air, soil and vegetation near Teepee Creek gas plant, Alberta. - Water, Air, and Soil Pollution 15, 11-28
- KROUSE, H.R. und M.A. TABATABAI (1986): Stable sulfur isotopes. - In: Tabatabai, M.A. (Hrsg.), Sulfur in agriculture, Agronomy Monograph 27, 169-205
- KROUSE, H.R.; LEGGE, A.H. und H.M. BROWN (1984): Sulphur gas emissions in the boreal forrest: the West Whitecourt case study: V. Stable sulphur isotopes. - Water, Air, and Soil Pollution 22, 321-347
- KRÜGER, P. (1967): Die Verteilung der Schwefelisotopen in sedimentären Eisensulfiden unter Berücksichtigung der Redoxbeziehungen im Bildungsraum. - Dissertation Bergakademie Freiberg, Zentrales Geologisches Institut, Berlin, 177 S.
- KUSAKABE, M.; RAFTER, T.A.; STOUT, J.D. und T.W. COLLIE (1976): Sulphur isotopic variations in nature: 12. Isotopic ratios of sulphur extracted from some plants, soils, and related materials. - New Zealand Journal of Science 19, 433-440

- LANGMUIR, D. (1997): Aqueous environmental geochemistry. - Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 600 S.
- LLOYD, R.M. (1967): Oxygen-18 composition of oceanic sulfate. - Science 156, 1228-1231
- LLOYD, R.M. (1968): Oxygen isotope behavior in the sulfate-water-system. - Journal of Geophysical Research 73/18, 6099-6110
- LOOSLI, H.H. und H. OESCHGER (1978): ^{39}Ar -, ^{14}C - and ^{85}Kr -measurements in groundwater samples. - In: Isotope Hydrology 1978, Proceedings Int. Sympos., IAEA, Vienna 1978, 949-961
- LOOSLI, H.H., LEHMANN, B.E. und G. DÄPPEN (1991): Dating by radionuclides. - In: PEARSON u.a. (Hrsg.), Applied Isotope Hydrology – A case study in Northern Switzerland, Studies in Environmental Science 43, Elsevier, 1991, 153-174
- MACNAMARA, J. und H.G. THODE (1950): Comparison of the isotopic composition of terrestrial and meteoric sulfur. - Physical review 156, 307-308
- MALLÉN, G. (2000): Isotopenanalytische Charakterisierung hydrodynamischer und biogeochemischer Prozesse im Uferfiltrat und landseitigen Grundwässern der Torgauer Elbtalwanne unter besonderer Berücksichtigung der Herkunft und Umwandlungen von Kohlenstoff- und Schwefelspezies. - Dissertation Universität Leipzig, UFZ-Bericht Nr. 9/2000, 191 S.
- MALOSZEWSKI, P. und A. ZUBER (1982): Determining the turnover time of groundwater systems with the aid of environmental tracers. 1. Models and their applicability. - Journal of Hydrology 57, 207-231.
- MAYER, B. (1993): Untersuchungen zur Isotopengeochemie des Schwefels in Waldböden und neu gebildetem Grundwasser unter Wald. - Dissertation, Ludwig-Maximilians-Universität München, 179 S.
- MAYER, B.; FRITZ, P.; PRIETZEL, J. und H.R. KROUSE (1995): The use of stable sulfur and oxygen isotope ratios for interpreting the mobility of sulfate in aerobic forest soils. – Applied Geochemistry 10, 161-173
- MAYER, B., PAWELLEK, F., VEIZER, J., HEINZER, C. und S. BOLLWERK (1999): Isotopengeochemische Untersuchungen im Bereich des Wasserwerkes Käfertal der Rhein-Neckar AG. – Abschlussbericht zum Forschungsvorhaben, Ruhr-Universität Bochum, 84 S.
- MAYNARD, D.G., KALRA, Y.P. und F.G. RADFORD (1987): Extraction and determination of sulfur in organic horizons of forest soils. - Soil Sci. Soc. Am. J. 51, 801-806

- MIZOTA, C. und A. SASAKI (1996): Sulfur isotope composition of soils and fertilizers: Differences between northern and southern hemispheres. - *Geoderma* 71, 77-93
- MOOK, W.G.; BOMMERSON, J.C. und W.H. STAVERMAN (1974): Carbon isotope fractionation between dissolved bicarbonate and gaseous carbon dioxide. - *Earth and Planetary Science Letters* 22, 169-176
- MÜLLER, A. (1988): Das Quartär im mittleren Elbegebiet zwischen Riesa und Dessau. - Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle
- NAKAI, N. und M.L. JENSEN (1964): The kinetic isotope effect in the bacterial reduction and oxidation of sulfur. - *Geochimica et Cosmochimica Acta* 28, 1893-1912.
- NESTLER, W., WALTHER, W., JACOBS, F., TRETTIN, R. und K. FREYER (1998): Wassergewinnung in Talgrundwasserleitern im Einzugsgebiet der Elbe. – UFZ-Bericht Nr. 7/1998, ISSN 0948-9452, Leipzig, 204 S.,
- NEWMAN, L.; KROUSE, H.R. und V.A. GRINENKO (1991): Sulphur isotope variations in the atmosphere. - In: KROUSE, H.R. und V.A. GRINENKO (Hrsg.), *Stable isotopes: Natural and anthropogenic sulphur in the environment*, SCOPE 43, John Wiley and Sons, Chichester, New York, 133-176
- NORDSTROM, D.K. und J.L. MUNOZ (1985): *Geochemical Thermodynamics*. – Benjamin/Cummings, Menlo Park, California, 465 S.
- NRIAGU, J.O. (1974): Fractionation of sulfur isotopes by sediment adsorption of sulfate. - *Earth Planetary Science Letters* 22, 681-692
- NRIAGU, J.O. und R.D. COKER (1978): Isotopic composition of sulphur in precipitation within the Great Lake basin. - *Tellus* 30, 365-375
- NRIAGU, J.O. und Y.K. SOON (1985): Distribution and isotopic composition of sulfur in lake sediments of northern Ohio. - *Geochimica et Cosmochimica Acta* 49, 823-834
- NRIAGU, J.O.; HOLDWAY, D.A. und R.D. COKER (1987): Biogenic sulfur and the acidity of rainfall in remote areas of Canada. - *Science* 237, 1189-1192
- OHMOTO, H. und R.O. RYE (1979): Isotopes of sulfur and carbon. - In: Barnes, H.L. (Hrsg.), *Geochemistry of hydrothermal ore deposits*, Wiley, New York, 509-567
- OLLEROS, T. (1983): Kinetic isotope effects of the enzymatic splitting of arginine and nitrate; A contribution to the explanation of the reaction mechanisms. - Dissertation Technische Universität München-Weihenstephan, 158 S.
- OSTER, H. (1994): Datierung von Grundwässern mittels FCKW: Voraussetzungen, Möglichkeiten und Grenzen. - Dissertation, Institut für Umwelphysik, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, 121 S.

- PIERRE, C. (1985): Isotopic evidence for the dynamic redox cycle of dissolved sulphur compounds between free and interstitial solution in marine salt pans. - *Chemical Geology* 53, 191-196
- PLUMMER, L.N. und E. BUSENBERG (1999): Chlorofluorocarbons. - In: COOK, P. und A. HERCZEG (Hrsg.), *Environmental Tracers in Subsurface Hydrology*, Kluwer Academic Press Chapter 15, 441-478,
- PLUMMER, L.N., BUSENBERG, E., DRENKARD, S., SCHLOSSER, P., EKWURZEL, B., WEPPERINIG, R., MCCONNELL, J.B. und R.L MICHEL (1998): Flow of river water into a karstic limestone aquifer – 2. Dating the young fraction in groundwater mixtures in the Upper Floridan aquifer near Valdosa, Georgia. - *Applied geochemistry* 13, 1017-1043
- PRICE, F.T. und Y.N. SHIEH (1979): Fractionation of sulfur isotopes during laboratory synthesis of pyrite at low temperatures. - *Chemical Geology* 27, 245-253
- QURESHI, R.M. (1986): The isotopic composition of aqueous sulphate - A laboratory investigation. - Dissertation Universität Waterloo, 353 S.
- RAFTER, T.A. (1967): Oxygen isotopic composition of sulphates-part I: A method for the extraction of oxygen and its quantitative conversion to carbon dioxide for isotope radiation measurement. - *New Zealand Journal of Science* 10, 493-510
- REES, C.E. (1973): A steady-state model for sulphur isotope fractionation in bacterial reduction processes. - *Geochimica et Cosmochimica Acta* 37, 1141-1162
- RICHTER, J. SZYMCZAK, P., ABRAHAM, T. und H. JORDAN (1993): Use of combinations of lumped parameter models to interpret groundwater isotopic data. - *Journal of Contaminant Hydrology* 14, 1-13
- RICHTER, J. und P. SZYMCZAK (1992): MULTIS – Ein Computerprogramm zur Auswertung isotopehydrologischer Daten auf der Grundlage gekoppelter konzeptioneller Boxmodelle. - Bergakademie Freiberg, Lehrstuhl für Hydrogeologie.
- ROLLAND, W., GIESEMANN, A., FEGER, K.-H. und H.-J. JÄGER (1991): Use of stable S isotopes in the assessment of S turnover in experimental forested watersheds in the Black Forest, Southwest Federal Republic of Germany. - *Proceedings International Symposium on the use of stable isotopes in plant nutrition, soil fertility and environmental studies*, Wien (IAEA), 593-598
- SCHLOSSER, P., STUTE, M., DÖRR, H., SONNTAG, C. und K.O. MÜNNICH (1988): Tritium/³He dating of shallow groundwater. - *Earth and Planetary Science Letters* 89, 353-362
- SCHLOSSER, P., STUTE, M., SONNTAG, C. und K.O. MÜNNICH (1989): Tritogenic ³He in shallow groundwater. - *Earth and Planetary Science Letters* 94, 245-254

- SCHOENAU, J.J. und J.R. BETTANY (1988): A method for determining sulfur-34 abundance in soil and plant sulfur fractions. - *Soil Sci. Soc. Am. J.* 52, 297-300
- SCHOENAU, J.J. und J.R. BETTANY (1989): ³⁴S natural abundance variations in prairie and boreal forest soils. - *Journal of Soil Science* 40, 397-413
- SMETHIE, W.M., SOLOMON, D.K., SCHIFF, S.L. und G.G. MATHIEU (1992): Tracing groundwater flow in the Borden aquifer using Kr-85. – *Journal of Hydrology* 130, 279-297
- STUMM, W. und J.J. MORGAN (1981): *Aquatic Chemistry*. - 2. Aufl. John Wiley und Sons, New York, 780 S.
- TABATABAI, M.A. (1982): Sulfur. - In: Page u.a. (Hrsg.), *Methods of soil analysis, Part II. Agronomy Monograph* 9, 501-538
- TABATABAI, M.A. und J.M. BREMNER (1970a): An alkaline oxidation method for determination of total sulfur in soils. - *Soil Sci. Soc. Am. Proc.* 34, 62-65
- TABATABAI, M.A. und J.M. BREMNER (1970b): Comparison of some methods for determination of total sulfur in soils. - *Soil Sci. Soc. Am. Proc.* 34, 417-420
- TAYLOR, B.E. und M.C. WHEELER (1994): Sulfur- and oxygen isotope geochemistry of acid mine drainage in the Western United States. - In: ALPERS, C.N. und D.W. BLOWES (Hrsg.), *Environmental geochemistry of sulfide oxidation*, American Chemical Society Symposium Series 550, Washington D.C., 481-514
- TAYLOR, B.E., WHEELER, M.C. und D.K. NORDSTROM (1984): Isotope composition of sulfate in acid mine drainage as measure of bacterial oxidation. - *Nature* 308, 538-541
- TGU – Technologieberatung Grundwasser und Umwelt GmbH (1997): Aktualisierung der Geohydraulischen und Schadstoffmodellierung für den Rüstungsstandort Torgau, Heft 1 und 2. - Abschlussbericht MOST-Projekt „Rüstungsaltnast WASAG Elsnig“, Erfurt
- THODE, H.G. (1991): Sulphur isotopes in nature and the environment: An overview. - In: KROUSE, H.R. und V.A. GRINENKO (Hrsg.), *Stable isotopes: Natural and anthropogenic sulphur in the environment*, SCOPE 43, John Wiley and Sons, Chichester, New York, 1-26
- THODE, H.G. und J. MONSTER (1965): Sulfur isotope geochemistry of petroleum, evaporites and ancient seas. - In: YONG, A. und GALLEY, J.E. (Hrsg.), *Fluids in subsurface environments*, *Memoir American Association of Petroleum Geologists* 4, 367-377
- THODE, H.G., MACNAMARA, J. und COLLINS, C.B. (1949): Natural Variations in the isotopic content of sulphur and their significance. - *Canadian Journal of Research* B27, 40-47

- TORAN, L. und R.F. HARRIS (1989): Interpretation of sulfur and oxygen isotopes in biological and abiological sulfide oxidation. - *Geochimica et Cosmochimica Acta* 53, 2341-2348
- TRETTIN, R., GRISCHEK, T., STRAUCH, G., MALLÉN, G. und W. NESTLER (1999): The usability and usage of ^{18}O and chloride as natural tracers for bank filtrate at the middle river Elbe. - *Isotopes in Environmental and Health Studies* 35, 331-350.
- TROFIMOV, A. (1949): Isotopic composition of sulphur in meteorites and in terrestrial objects. - *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* 66, 181-184
- VAN STEMPVOORT, D.R. (1989): The use of stable isotope techniques to investigate the sulphur cycle in upland forests of Central and Southern Ohio. - Dissertation, University of Waterloo
- VAN STEMPVOORT, D.R. und H.R. KROUSE (1994): Controls of $\delta^{18}\text{O}$ in sulfate. Review of experimental data and application to specific environments. - In: ALPERS, C.N. und D.W. BLOWES (Hrsg.), *Environmental geochemistry of sulfide oxidation*, American Chemical Society Symposium Series 550, Washington D.C., 447-480
- VAN STEMPVOORT, D.R.; REARDON, E.J. und P. FRITZ (1990): Fractionation of sulfur and oxygen isotopes in sulfate by soil sorption. - *Geochimica Cosmochimica Acta* 54, 2817-2826
- VAN STEMPVOORT, D.R.; WILLS, J.J. und P. FRITZ (1991): Aboveground vegetation effects on the deposition and cycling of atmospheric sulfur: Chemical and stable isotope evidence. - *Water, Air, and Soil Pollution* 60, 55-82
- VOGEL, J.C.; GROOTES, P.M. und W.G. MOOK (1970): Isotope fractionation between gaseous and dissolved carbon dioxide. - *Zeitschrift Physik* 230, 255-258
- VOLK, M., HERZOG, F., SCHMIDT, T. und S. GEYLER (2001): Der Einfluss von Landnutzungsänderungen auf die Grundwasserneubildung. - In HORSCH, H. u.a. (Hrsg.), *Nachhaltige Wasserbewirtschaftung und Landnutzung – Methoden und Instrumente der Entscheidungsfindung und –umsetzung*. Metropolis-Verlag, Marburg 2001, 147-164.
- WANG, Q. und J.W. MORSE (1996): Pyrite formation under conditions approximating those in anoxic sediments I. Pathway and morphology. - *Marine Chemistry* 52, 99-121
- WESTGATE, L.M. und T.F. ANDERSON (1982): Extraction of various forms of sulfur from coal and shale for stable isotope analysis. - *Anal. Chem.* 54, 2136-2139
- WILKIN, R.T. und H.L. BARNES (1996): Pyrite formation by reaction of iron monosulfides with dissolved inorganic and organic sulfur species. - *Geochimica et Cosmochimica Acta* 60, 4167-4179

8 Danksagung

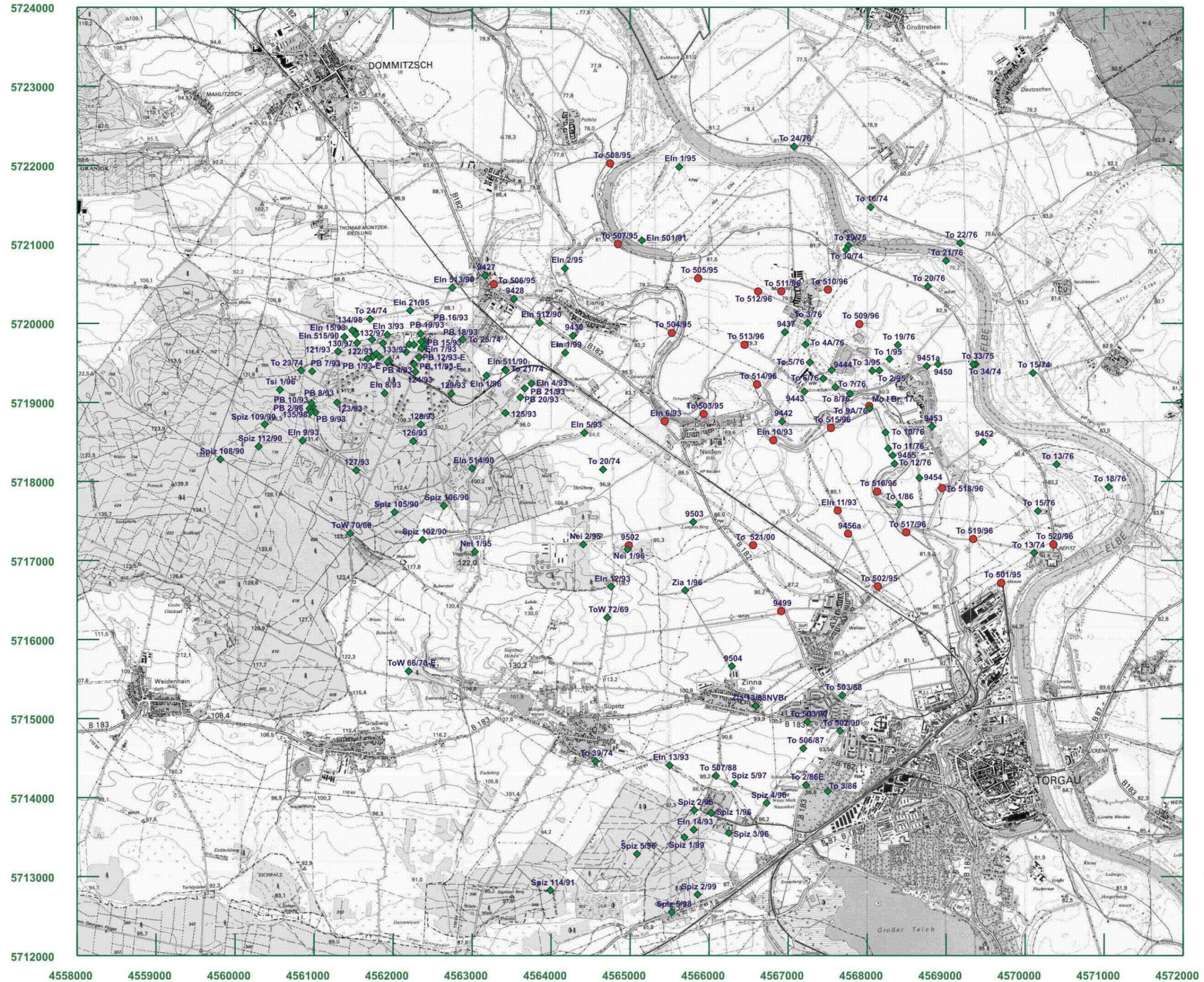
Die Autoren danken dem Bundesministerium für Bildung und Forschung für die Gewährung der Forschungsmittel sowie namentlich Frau Horak und Frau Bernhardt vom Projektträger des BMBF für Wassertechnologie und Entsorgung, Außenstelle Dresden, für die stets hilfreiche und verständnisvolle Betreuung des Projekts.

Unser Dank gilt allen Kollegen und Kolleginnen der anderen Verbundprojektteilnehmer für die stets konstruktive und oftmals arbeitsteilige Zusammenarbeit, ohne die das Verbundprojekt nicht durchführbar gewesen wäre. Namentlich seien hier Herr Dr. Grischek und Herr Dr. Schmalz (beide TUD), Herr Herlitzius (HTW), Herr Nuber (TUHH) und Herr Richter (UFZ) besonders hervorgehoben. Unser besonderer Dank gilt Herrn Prof. Nestler, der die sehr aufwändige Koordination des Verbundprojektes und der Erstellung des Handbuches „Sulfat im Grundwasser“ übernahm. Den Mitarbeitern der Fernwasserversorgung Elbaue-Ostharz GmbH, Frau Ende und Herrn Krüger, haben wir u.a. für die oftmalige Unterstützung bei Feldarbeiten und die Bereitstellung hydrochemischer Analysendaten zu danken. Nicht zuletzt aber gebührt unser Dank den zahlreichen Kolleginnen und Kollegen aus der Sektion Hydrogeologie und den Isotopen- und Messlabors des UFZ für aufschlussreiche wissenschaftliche Diskussionen und die engagierte und zuverlässige Durchführung der zahlreichen Probenpräparationen und Messungen wie auch z.T. für ihre Mitwirkung an Feldeinsätzen. Stellvertretend seien hier Frau Berner, auch als zeitweilige direkte Projektmitarbeiterin, Frau Blümel, Herr Gehre, Herr Kowski, Frau Neuber, Frau Peris, Frau Reichert, Frau Schäfer und Herr Dr. Strauch hervorgehoben. Herrn Dr. Weise (AG Isotopenhydrologie des UFZ) und Herrn Dr. Oster (Wachenheim) danken wir für hilfreiche Unterstützung bei der Durchführung der ^3He - bzw. FCKW-Untersuchungen. Frau Glauche von der Finanzabteilung des UFZ danken wir für die finanztechnische Projektbetreuung.

ANHANG

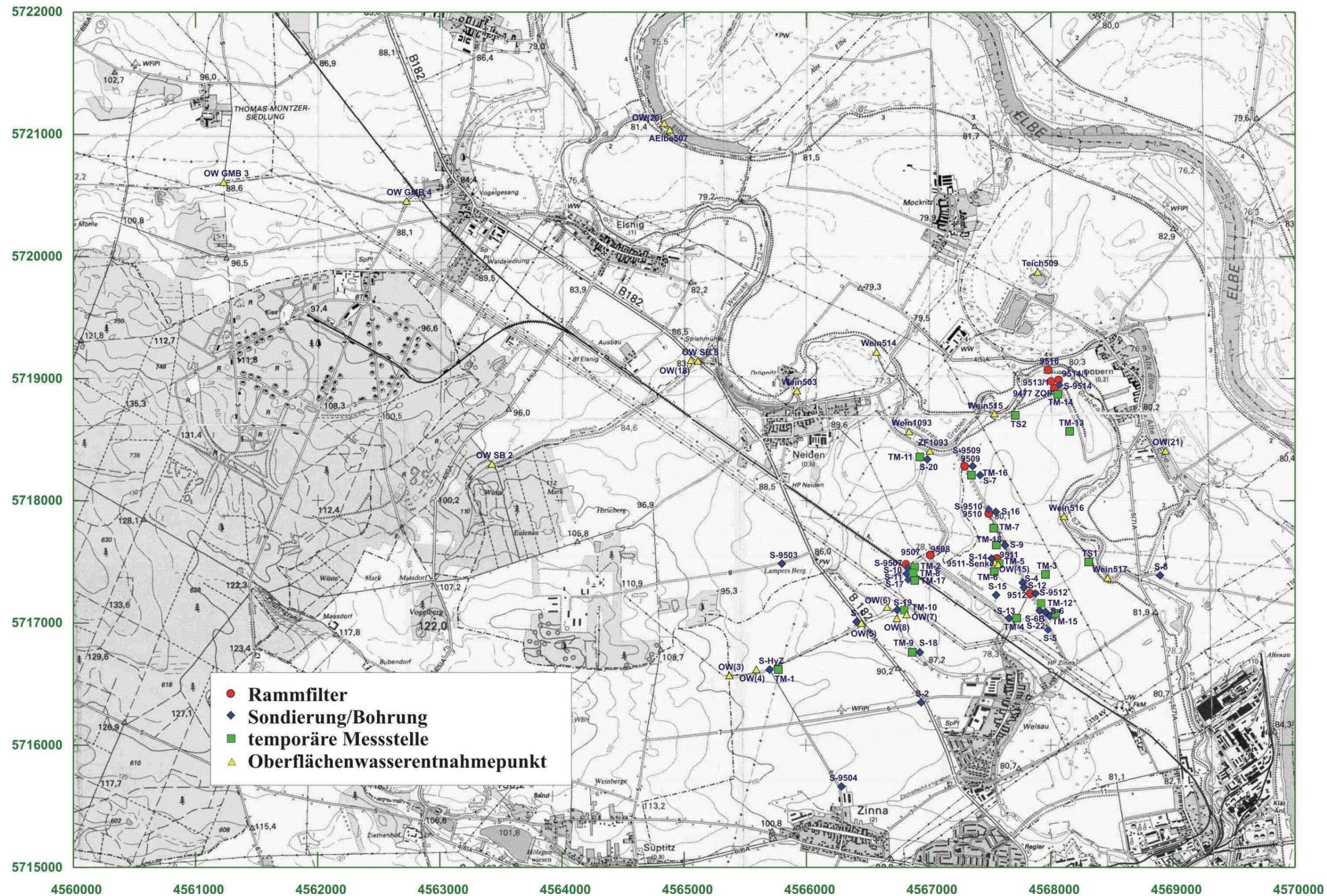
Anhang I: Lage der Grundwassermessstellen im Untersuchungsgebiet Mockritz	II
Anhang II: Lage der Rammfilter, Sondierungspunkte, temporären Messstellen und Oberflächenwasserentnahmepunkte im Untersuchungsgebiet Mockritz.....	III
Anhang III: Lage der Grundwassermessstellen und Wasserschutzzonen im Untersuchungsgebiet Bramstedt	IV
Anhang IV: Bezeichnung und Ausbaudaten von Grundwassermessstellen und Oberflächenwasserentnahmepunkten im Untersuchungsgebiet Mockritz.....	V
Anhang V: Messwerte stabiler Isotope im Grundwasser, Gütemessnetz Mockritz.....	XI
Anhang VI: Messwerte stabiler Isotope im Grundwasser von Altpegeln, Mockritz	XV
Anhang VII: Messwerte stabiler Isotope von Wässern aus Rammfiltern, Mockritz	XX
Anhang VIII: Messwerte Feldparameter, Nitrat- und Sulfatgehalte Rammfilter Mockritz (chemische Analysen durch UFZ, ergänzt durch TUD)	XXII
Anhang IX: Tritiummesswerte von Grundwasserproben aus Mockritz.....	XXIV
Anhang X: Ergänzende Isotopengehalte im Grundwassermessprogramm WASAG-Elsnig	XXVI
Anhang XI: FCKW und SF ₆ -Messwerte von Grundwässern, Mockritz und Torgau-Ost.....	XXVII
Anhang XII: Messwerte stabiler Isotope, temporäre Grundwassermessstellen Mockritz, Tiefenangaben beziehen sich auf Grundwasseroberfläche	XXVIII
Anhang XIII: Messwerte Feldparameter, Nitrat- und Sulfatgehalte, temporäre Grundwassermessstellen Mockritz (chemische Analysen durch UFZ, ergänzt durch TUD)	XXIX
Anhang XIV: Messwerte stabiler Isotope, Oberflächenwasser Mockritz.....	XXX
Anhang XV: Messwerte Feldparameter und Hauptionen Oberflächenwässer Mockritz..	XXXII
Anhang XVI: Sulfatgehalte und δ ³⁴ S-Werte Lysimeterproben Falkenberg.....	XXXIV
Anhang XVII: Messwerte stabiler Isotope, Boden- und Sedimentproben Mockritz	XXXVI
Anhang XVIII: Messwerte stabiler Isotope und von Tritium in Grund- und Oberflächenwässern Bramstedt.....	XXXIX

Anhang I: Lage der Grundwassermessstellen im Untersuchungsgebiet Mockritz

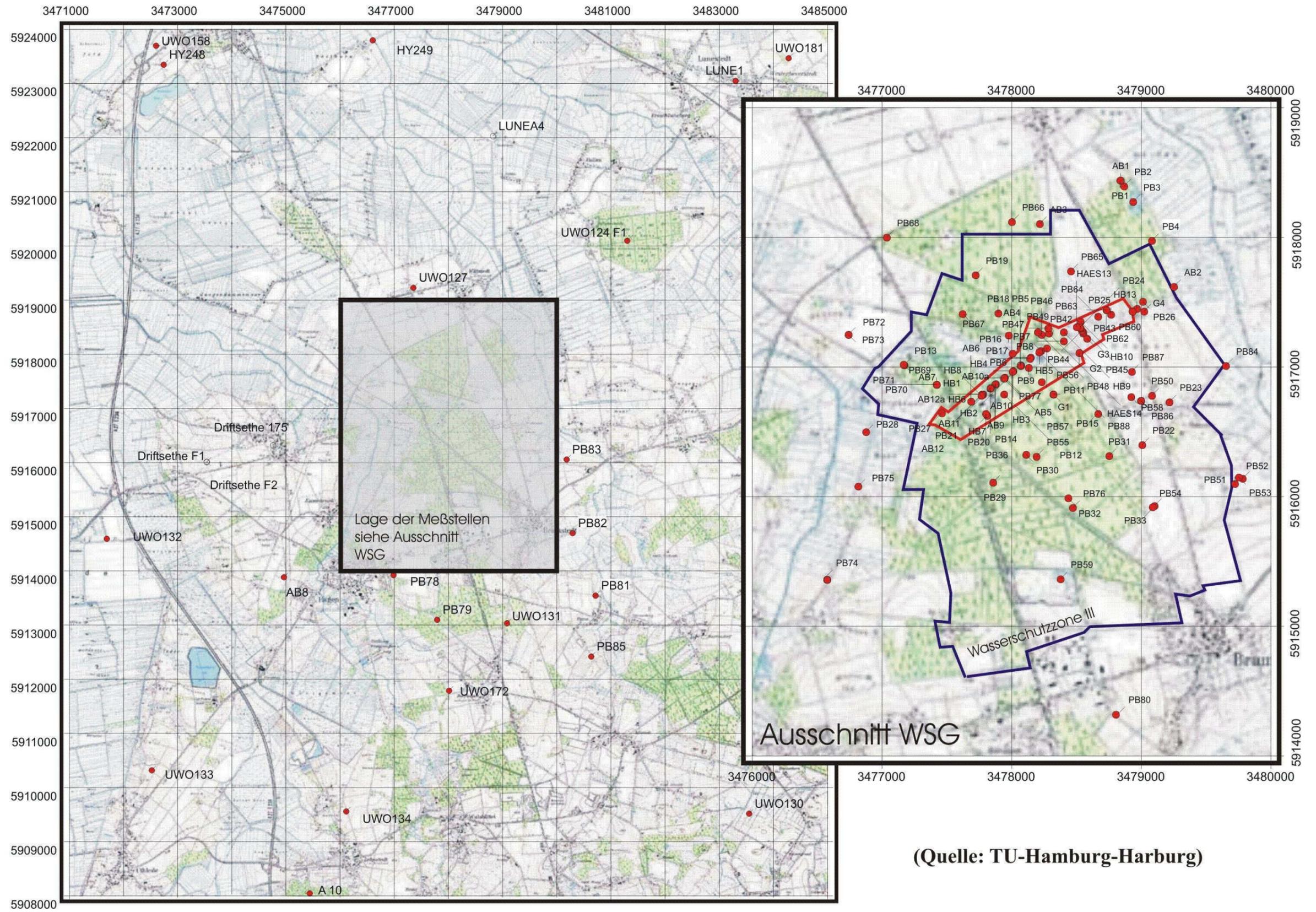


- ◆ Altpegel
- Messstellen des Gütemessnetzes

Anhang II: Lage der Rammfilter, Sondierungsbohrung, temporären Messstellen und Oberflächenwasserentnahmepunkte im Untersuchungsgebiet Mockritz



Anhang III: Lage der Grundwassermessstellen und Wasserchutzzonen im Untersuchungsgebiet Bramstedt



(Quelle: TU-Hamburg-Harburg)

Anhang IV: Bezeichnung und Ausbaudaten von Grundwassermessstellen und Oberflächenwasserentnahmepunkten im Untersuchungsgebiet Mockritz

Messstelle/Messpunkt	Filteroberkante unter GOK m	Geländeoberkante (GOK) mNN
Messstellen des Gütemessnetzes		
9499 OP	14,0	88,8
9499 MP	24,0	88,8
9499 UP	53,0	88,8
9502 OP	7,0	100,6
9502 MP	28,0	100,6
Eln 10/93 OP	5,9	79,2
Eln 10/93 UP	22,5	79,2
Eln 11/93 OP	6,9	79,8
Eln 11/93 MP	22,9	79,8
Eln 11/93 UP	41,5	79,8
Eln 6/93 OP	23,6	92,1
Eln 6/93 MP	41,3	92,1
Eln 6/93 UP	48,7	92,1
To 501/95 OP	5,8	81,2
To 501/95 UP	16,5	81,2
To 502/95 OP	7,0	80,3
To 502/95 MP	26,0	80,3
To 502/95 UP	45,4	80,3
To 503/95 UP	42,0	79,0
To 503A/95 MP	23,1	79,0
To 503B/95 OP	4,9	79,0
To 504/95 UP	55,1	79,5
To 504A/95 MP	30,0	79,5
To 504B/95 OP	7,8	79,5
To 505/95 UP	43,2	79,1
To 505A/95 MP	23,6	79,1
To 505B/95 OP	5,9	79,1
To 506/95 UP	31,1	79,8
To 506A/95 OP	7,8	79,8
To 507/95 UP	14,4	78,0
To 507A/95 OP	5,8	78,0
To 508/95	8,1	77,6
To 509/96 OP	7,4	79,2
To 509/96 MP	27,0	79,2
To 509/96 UP	48,0	79,2
To 510/96 OP	7,0	77,0
To 510/96 MP	27,1	77,0
To 510/96 UP	46,1	77,0
To 511/96 OP	11,1	80,1
To 511/96 MP	31,1	80,1
To 511/96 UP	51,7	80,1
To 512/96 OP	9,7	80,2
To 512/96 MP	27,1	80,2
To 512/96 UP	47,1	80,2
To 513/96 OP	9,2	79,5
To 513/96 MP	25,5	79,5
To 513/96 UP	44,1	79,5
To 514/96 OP	7,0	78,0
To 514/96 MP	24,1	78,0
To 514/96 UP	38,1	78,0
To 515/96 OP	5,6	77,4
To 515/96 MP	28,1	77,4
To 515/96 UP	52,1	77,4
To 516/96 OP	7,1	79,3
To 516/96 MP	26,1	79,3
To 516/96 UP	46,0	79,3
To 517/96 OP	9,1	80,7
To 517/96 MP	27,2	80,7
To 517/96 UP	45,7	80,7
To 518/96 OP	8,1	80,7
To 518/96 MP	27,2	80,7
To 518/96 UP	45,6	80,7
To 519/96 OP	7,0	80,5
To 519/96 MP	25,0	80,5
To 519/96 UP	42,1	80,5
To 520/96 OP	8,1	81,2

Messstelle/Messpunkt	Filteroberkante unter GOK m	Geländeoberkante (GOK) mNN
To 520/96 MP	29,1	81,2
To 520/96 UP	51,2	81,2
To 521/00 OP	7,5	80,9
To 521/00 UP	33,2	80,9
Messstellen des Altpegelnetzes		
121/93 OP	10,8	102,6
121/93 UP	28,5	102,4
122/93	4,7	95,8
123/93 OP	9,5	114,7
123/93 MP	24,2	114,7
123/93 UP	37,5	114,7
124/93 OP	8,5	98,4
124/93 UP	25,0	98,5
125/93	6,0	95,9
126/93	8,0	109,1
127/93 OP	7,0	125,4
127/93 UP	27,3	125,6
128/93	10,0	102,0
129/93	10,3	98,0
130/97	5,0	98,6
132/97 OP	3,7	94,2
132/97 UP	11,0	94,2
133/97	8,8	96,5
134/98 OP	8,0	96,1
134/98 UP 1	21,5	96,1
134/98 UP 2	21,5	96,1
135/98	12,0	118,0
9427	10,0	79,2
9428	12,0	81,7
9430	11,0	83,7
9437	12,0	79,3
9442	18,0	79,8
9443	12,0	79,8
9444	30,0	79,0
9450	11,0	80,1
9451a	18,0	79,9
9452	11,0	80,8
9453	12,0	78,3
9454	18,0	80,8
9455	12,0	80,5
9456a	27,3	78,3
9477ZOP	5,7	79,9
9503	17,0	87,7
9504	22,0	94,1
Brunnen Muna	0,0	88,1
Eln 1/95 OP	6,0	78,0
Eln 1/95 UP	14,0	78,0
Eln 1/96	12,8	93,1
Eln 1/99 OP	5,0	84,0
Eln 1/99 UP	33,0	84,0
Eln 12/93 OP	20,1	108,1
Eln 12/93 UP	48,2	108,1
Eln 13/93 OP	1,3	89,4
Eln 14/93 OP	4,9	88,0
Eln 14/93 UP	19,0	88,0
Eln 15/93 OP	2,1	94,8
Eln 15/93 UP	33,0	94,8
Eln 2/95	5,1	78,8
Eln 21/95 OP	2,1	87,8
Eln 21/95 UP	19,1	87,8
Eln 3/93 OP	3,1	93,7
Eln 3/93 OP-E	2,8	93,2
Eln 3/93 UP	14,2	93,7
Eln 4/93 OP	12,8	88,2
Eln 4/93 MP	37,0	88,2
Eln 4/93 UP	59,3	88,2
Eln 5/93	15,1	85,9
Eln 501/91 OP	4,0	77,2
Eln 501/91 UP	13,5	77,2
Eln 511/90	11,7	92,5
Eln 512/90 OP	6,8	84,5

Messstelle/Messpunkt	Filteroberkante unter GOK m	Geländeoberkante (GOK) mNN
Eln 512/90 UP	23,8	84,5
Eln 513/90 OP	5,9	84,3
Eln 513/90 UP	25,9	84,3
Eln 514/90 OP	14,9	103,7
Eln 514/90 UP	29,8	103,7
Eln 515/90 OP	4,9	98,0
Eln 515/90 MP	16,0	98,0
Eln 515/90 UP	25,0	98,0
Eln 7/93 OP	6,3	93,2
Eln 7/93 UP	13,9	93,2
Eln 8/93 OP-E	9,5	106,5
Eln 8/93 UP	84,0	106,5
Eln 9/93 MP	30,0	131,4
Eln 9/93 UP	49,2	131,4
Mo I Br. 17	33,0	79,5
Nei 1/95 OP	10,0	113,6
Nei 1/95 MP	15,7	113,4
Nei 1/95 UP	47,0	113,5
Nei 1/96	2,0	102,2
Nei 2/95	7,0	112,3
PB 1/93-E	11,0	98,8
PB 1/96	4,8	96,8
PB 10/93	7,7	115,4
PB 11/93-E	9,0	96,9
PB 12/93-E	9,0	97,0
PB 14/93	8,1	95,0
PB 15/93	7,1	94,4
PB 16/93	6,1	92,7
PB 17/93	7,1	92,9
PB 18/93	6,7	92,9
PB 19/93	6,6	92,7
PB 2/96	6,3	115,5
PB 20/93	12,2	89,0
PB 21/93	11,6	88,2
PB 3/93	9,6	99,0
PB 4/93	3,7	93,3
PB 5/93-E	5,8	97,9
PB 7/93	4,2	110,7
PB 8/93	7,7	115,4
PB 9/93	9,2	117,1
Spiz 1/96 OP	2,0	88,5
Spiz 1/99	3,0	89,3
Spiz 102/90 OP	5,7	115,8
Spiz 102/90 UP	38,7	115,8
Spiz 105/90 OP	8,9	116,0
Spiz 105/90 UP	33,9	116,0
Spiz 106/90	12,0	113,6
Spiz 108/90 OP	10,0	134,6
Spiz 108/90 UP	33,0	134,6
Spiz 109/90 OP	19,9	134,4
Spiz 109/90 UP	43,1	134,4
Spiz 112/90 OP	10,8	134,9
Spiz 112/90 UP	49,7	134,9
Spiz 114/91	17,7	91,9
Spiz 2/96 OP	3,5	89,6
Spiz 2/96 UP	10,5	89,5
Spiz 2/99 OP	2,0	89,1
Spiz 2/99 UP	6,0	89,1
Spiz 3/96 OP	2,0	86,6
Spiz 3/96 UP	10,0	86,4
Spiz 4/96	7,3	87,1
Spiz 5/96 OP	2,7	90,2
Spiz 5/96 UP	10,0	90,2
Spiz 5/97 OP	9,0	87,9
Spiz 5/97 UP	35,0	88,0
Spiz 5/98	2,0	87,6
To 1/86 OP	11,0	80,3
To 1/86 UP	16,3	80,3
To 1/95	6,0	77,7
To 10/76 OP	20,0	80,7
To 10/76 MP	35,0	80,7

Messstelle/Messpunkt	Filteroberkante unter GOK m	Geländeoberkante (GOK) mNN
To 10/76 UP	49,5	80,7
To 11/76 OP	19,9	80,9
To 11/76 MP	30,8	80,9
To 11/76 UP	46,5	80,9
To 12/76 OP	19,7	81,1
To 12/76 MP	35,4	81,1
To 12/76 UP	46,3	81,1
To 13/74 OP	13,0	81,1
To 13/74 UP	23,0	81,1
To 13/76 OP	9,5	80,2
To 13/76 UP	26,9	80,2
To 15/74 OP	12,0	80,3
To 15/74 MP	54,0	80,3
To 15/74 UP	61,5	80,3
To 15/76 Br	16,2	80,9
To 15/76 OP	9,7	80,9
To 15/76 UP	25,1	80,9
To 16/74 OP	22,0	79,7
To 16/74 UP	42,8	79,7
To 18/76 OP	9,1	80,9
To 18/76 UP	44,8	80,9
To 19/76 OP	19,9	79,1
To 19/76 MP	35,6	79,1
To 19/76 UP	43,4	79,1
To 2/86E OP	8,0	87,2
To 2/86E UP	13,0	87,2
To 2/95	4,0	78,0
To 20/74 OP	2,2	92,0
To 20/74 MP	15,0	92,0
To 20/74 UP	68,5	92,0
To 20/76 OP	8,5	79,2
To 20/76 MP	28,6	79,2
To 20/76 UP	40,9	79,2
To 21/74 UP	43,3	92,4
To 21/76 OP	10,5	78,6
To 21/76 MP	25,5	78,6
To 21/76 UP	42,5	78,6
To 22/76 OP	8,0	79,7
To 22/76 MP	28,0	79,7
To 22/76 UP	42,0	79,7
To 23/74 OP	21,0	110,2
To 23/74 UP	27,0	110,2
To 24/74 OP	4,3	91,9
To 24/74 UP	19,8	91,9
To 24/76 OP	9,8	79,0
To 24/76 MP	29,8	79,0
To 24/76 UP	49,9	79,0
To 25/74	2,0	89,6
To 29/75	27,0	79,0
To 3/76 OP	20,0	79,1
To 3/76 MP	33,0	79,1
To 3/76 UP	45,7	79,1
To 3/86 OP	7,0	85,7
To 3/86 UP	11,5	85,7
To 3/95	4,0	77,2
To 30/74	27,0	78,7
To 33/75	27,0	80,1
To 34/74	27,0	80,2
To 39/74 OP	28,0	94,5
To 39/74 UP	81,3	94,5
To 4A/76 OP	20,0	79,4
To 4A/76 UP	50,0	79,4
To 5/76 OP	20,4	79,6
To 5/76 UP	47,5	79,6
To 502/90 OP	23,6	95,9
To 502/90 MP	38,8	96,0
To 503/88 OP	15,2	90,1
To 503/88 UP	24,6	90,1
To 503/90 OP	23,4	97,9
To 503/90 UP	59,6	97,9
To 506/87	19,0	92,7

Messstelle/Messpunkt	Filteroberkante unter GOK m	Geländeoberkante (GOK) mNN
To 507/88	18,0	88,8
To 6/76 OP	20,6	79,8
To 6/76 MP	34,8	79,8
To 6/76 UP	48,0	79,8
To 7/76 OP	21,2	80,1
To 7/76 UP	47,2	80,1
To 8/76 OP	19,7	79,8
To 8/76 MP	34,8	79,8
To 8/76 UP	45,1	79,8
To 9A/76 OP	21,9	79,9
To 9A/76 UP	46,5	79,9
ToW 66/70-E	9,0	115,1
ToW 70/69 OP	20,0	122,8
ToW 72/69 OP	16,0	110,4
ToW 72/69 UP	34,0	110,4
Tsi 1/96 OP	8,0	122,6
Tsi 1/96 UP	16,8	122,5
Zia 1/96	11,8	91,9
Zia 13/88NVBr	22,6	97,7
Rammfilter		
9507	5,5	78,6
9508	4,2	78,8
9509	3,0	78,8
9510	4,0	80,2
9511 OP	0,0	77,7
9511 UP	0,0	77,7
9512	4,0	80,1
9513/1	5,0	79,7
9513/2	4,5	79,6
9513/3	3,4	79,6
9514/1	5,0	79,6
9514/2	4,0	79,6
9514/3	3,2	79,6
9514/4	2,2	79,5
9516	4,4	78,2
To 521/00 OP1	3,6	81,0
To 521/00 OP2	3,2	81,0
Oberflächenwassermesspunkte		
9511-Senke		
AEIbe507		
OW GMB 3		
OW GMB 4		
OW SB 2		
OW SB 3		
OW(15)		
OW(18)		
OW(20)		
OW(21)		
OW(3)		
OW(4)		
OW(5)		
OW(6)		
OW(7)		
OW(8)		
Teich509		
Wein1093		
Wein503		
Wein514		
Wein515		
Wein516		
Wein517		
ZF1093		
Temporäre Messstellen		
TM-1		
TM-10		
TM-11		
TM-12		
TM-13		
TM-14		
TM-15		
TM-16		

Messstelle/Messpunkt	Filteroberkante unter GOK m	Geländeoberkante (GOK) mNN
TM-17		
TM-18		
TM-2		
TM-3		
TM-4		
TM-5		
TM-6		
TM-7		
TM-8		
TM-9		
TS1		
TS2		

Anhang V: Messwerte stabiler Isotope im Grundwasser, Gütemessnetz Mockritz

Messstelle	Niveau	Datum	$\delta^{18}\text{O}-\text{H}_2\text{O}$	$\delta\text{D}-\text{H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N}-\text{NO}_3$	$\delta^{18}\text{O}-\text{NO}_3$	$\delta^{34}\text{S}-\text{SO}_4$	$\delta^{18}\text{O}-\text{SO}_4$	$\delta^{13}\text{C}-\text{DIC}$
9456a	OP	29.11.1999	-9,3	-65,7	n.b.	n.b.	-6,4	3,2	-15,8
		26.05.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-6,4	n.b.	n.b.
		13.07.2000	-9,3	-67,8	n.b.	n.b.	-8,2	4,0	-15,3
9499	OP	29.11.1999	-9,2	-64,6	7,8	8,3	4,7	5,6	-17,6
		29.11.1999	-9,2	-64,9	n.b.	n.b.	-0,9	6,1	-19,8
		26.05.2000	-8,9	n.b.	8,5	9,3	5,1	n.b.	n.b.
	MP	29.11.1999	-9,6	-68,7	8,0	8,2	5,5	7,0	-16,3
		26.05.2000	-9,6	n.b.	8,3	9,1	3,3	n.b.	n.b.
		24.09.2001	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	1,5	n.b.	n.b.
	UP	30.11.1999	-9,4	-67,7	n.b.	n.b.	7,2	5,8	-18,3
		26.05.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-1,3	n.b.	n.b.
		26.05.2000	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	3,7	n.b.	n.b.
9502	OP	13.07.2000	-9,5	-68,1	9,9	7,1	7,1	11,9	-19,5
		17.07.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-9,0	n.b.	n.b.
		17.07.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-9,2	n.b.	n.b.
		19.06.2001	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	8,0	7,4	n.b.
	MP	30.11.1999	-9,5	-67,6	9,3	7,8	n.b.	7,0	-19,9
		26.05.2000	-9,5	n.b.	9,8	7,9	6,3	n.b.	n.b.
		13.07.2000	-9,4	-69,1	n.b.	n.b.	9,4	9,2	-18,7
19.06.2001	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	6,4	5,0	n.b.		
Eln 10/93	OP	22.11.1999	-8,1	-59,4	n.b.	n.b.	4,1	14,5	-19,9
		10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,5	n.b.	n.b.
		26.05.2000	-8,5	n.b.	n.b.	9,8	-0,1	5,2	n.b.
		09.04.2001	-8,2	n.b.	12,6	9,1	5,7	3,1	n.b.
	UP	22.11.1999	-9,3	-66,6	n.b.	n.b.	-6,8	9,5	-16,9
		10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-6,8	n.b.	n.b.
		26.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-7,0	2,5	n.b.
24.09.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-5,7	n.b.	n.b.		
Eln 11/93	OP	22.11.1999	-9,1	-64,6	n.b.	n.b.	-12,3	9,5	-20,0
		17.02.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-5,2	4,1	n.b.
		17.02.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-5,3	3,4	n.b.
		17.02.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,5	n.b.
		17.02.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-5,5	4,0	n.b.
		15.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-5,9	3,6	n.b.
		26.05.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-13,4	3,7	n.b.
		13.07.2000	-9,0	-65,5	n.b.	n.b.	-16,7	3,5	-20,3
		09.04.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-8,7	4,4	n.b.
	19.06.2001	-8,9	n.b.	n.b.	n.b.	-14,2	10,2	n.b.	
	MP	22.11.1999	-9,1	-64,2	n.b.	n.b.	-4,4	11,4	-12,7
		15.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-3,4	4,0	n.b.
		26.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-4,8	4,6	n.b.
		13.07.2000	-9,3	-66,0	n.b.	n.b.	-6,7	5,3	-13,3
		19.06.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-4,5	3,5	n.b.
		24.09.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-5,5	n.b.	n.b.
	UP	22.11.1999	-9,2	-65,5	n.b.	n.b.	-3,6	10,8	-14,3
15.03.2000		n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-2,7	4,7	n.b.	
26.05.2000		n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,2	n.b.	
19.06.2001		-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-2,5	5,9	n.b.	
24.09.2001		-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	-2,2	n.b.	n.b.	
Eln 6/93	OP	26.05.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	8,4	n.b.	n.b.
	MP	26.05.2000	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	10,3	n.b.	n.b.
	UP	26.05.2000	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	22,7	n.b.	n.b.
Mo I Br. 17	UP	17.07.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-9,4	n.b.	n.b.
		24.11.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-9,5	-1,9	n.b.
		09.04.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-6,9	6,1	n.b.
		22.05.2001	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-7,1	4,4	n.b.
		19.06.2001	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-7,6	2,7	n.b.
To 501/95	OP	22.11.1999	-8,4	-62,0	n.b.	n.b.	0,9	11,7	-17,6
		26.05.2000	-8,4	n.b.	n.b.	n.b.	1,5	7,1	n.b.
	UP	22.11.1999	-8,5	-62,2	n.b.	n.b.	0,7	12,5	-15,8
26.05.2000	-8,8	n.b.	n.b.	n.b.	0,7	n.b.	n.b.		

Messstelle	Niveau	Datum	$\delta^{18}\text{O}-\text{H}_2\text{O}$	$\delta\text{D}-\text{H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N}-\text{NO}_3$	$\delta^{18}\text{O}-\text{NO}_3$	$\delta^{34}\text{S}-\text{SO}_4$	$\delta^{18}\text{O}-\text{SO}_4$	$\delta^{13}\text{C}-\text{DIC}$
To 502/95	OP	22.11.1999	-8,9	-63,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,2	3,0	-18,9
		24.03.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,3	2,5	<i>n.b.</i>
		10.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		26.05.2000	-9,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-4,8	2,2	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	-8,8	-65,0	7,4	<i>n.b.</i>	-4,3	3,2	-19,8
	24.09.2001	-8,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
	MP	22.11.1999	-9,3	-67,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,3	10,2	-8,6
		24.03.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-0,5	4,9	<i>n.b.</i>
		10.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		26.05.2000	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,5	4,6	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	-9,4	-67,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,7	6,9	-15,6
	24.09.2001	-9,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
	UP	22.11.1999	-9,1	-65,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,1	10,2	-15,9
		24.03.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,5	1,2	<i>n.b.</i>
		10.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
26.05.2000		-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-11,9	1,4	<i>n.b.</i>	
24.09.2001		-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
To 503/95	UP	24.11.1999	-9,3	-67,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	21,2	12,1	-15,1
		26.05.2000	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	20,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	24.11.1999	-9,3	-66,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,4	14,1	-14,8
		26.05.2000	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	OP	24.11.1999	-9,1	-65,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,3	12,0	-13,7
		26.05.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 504/95	UP	26.11.1999	-8,7	-63,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	0,0	11,0	-16,8
		10.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	7,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		26.05.2000	-8,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,4	8,4	<i>n.b.</i>
		24.09.2001	-8,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	6,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	26.11.1999	-7,8	-58,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,4	8,1	-18,0
		10.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		26.05.2000	-7,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	7,0	8,2	<i>n.b.</i>
	OP	26.11.1999	-8,7	-63,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,0	7,4	-21,8
		10.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		26.05.2000	-8,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,9	8,0	<i>n.b.</i>
To 505/95	UP	23.11.1999	-8,8	-63,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,2	15,7	-15,0
		26.05.2000	-8,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,9	8,0	<i>n.b.</i>
	MP	23.11.1999	-8,6	-63,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,5	12,2	-11,3
		26.05.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	OP	23.11.1999	-7,7	-58,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	0,2	13,6	-9,7
		26.05.2000	-7,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,4	9,3	<i>n.b.</i>
23.11.2000	-7,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
To 506/95	UP	29.11.1999	-9,2	-65,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,1	14,4	-17,0
		10.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		26.05.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,7	6,1	<i>n.b.</i>
	OP	29.11.1999	-9,0	-65,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	0,6	5,3	-18,1
		10.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		26.05.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-5,5	5,0	<i>n.b.</i>
To 507/95	UP	29.11.1999	-8,9	-64,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,0	4,7	-11,7
		26.05.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,1	10,5	<i>n.b.</i>
		24.11.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		08.12.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-19,9
	OP	29.11.1999	-9,0	-64,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,1	4,4	-9,6
26.05.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,2	4,5	<i>n.b.</i>		
To 508/95	OP	29.11.1999	-7,5	-58,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	0,6	12,5	-18,0
		26.05.2000	-7,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,2	4,2	<i>n.b.</i>
To 509/96	OP	24.11.1999	-5,1	-46,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,0	18,0	-7,0
		26.05.2000	-6,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,7	9,8	<i>n.b.</i>
	MP	24.11.1999	-7,7	-60,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,2	16,4	-15,1
		26.05.2000	-7,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	24.11.1999	-9,2	-66,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,9	13,1	-15,5
		26.05.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,7	9,1	<i>n.b.</i>
To 510/96	OP	24.11.1999	-7,2	-55,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,7	17,7	-20,2
		26.05.2000	-7,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,3	8,7	<i>n.b.</i>
	MP	24.11.1999	-9,8	-69,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,1	12,1	-14,6
		26.05.2000	-9,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,4	6,8	<i>n.b.</i>
	UP	24.11.1999	-9,2	-66,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,0	16,0	-14,8
		26.05.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,9	8,6	<i>n.b.</i>

Messstelle	Niveau	Datum	$\delta^{18}\text{O}-\text{H}_2\text{O}$	$\delta\text{D}-\text{H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N}-\text{NO}_3$	$\delta^{18}\text{O}-\text{NO}_3$	$\delta^{34}\text{S}-\text{SO}_4$	$\delta^{18}\text{O}-\text{SO}_4$	$\delta^{13}\text{C}-\text{DIC}$
To 511/96	OP	24.11.1999	-9,1	-65,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-0,5	10,8	-6,1
		26.05.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,1	5,6	<i>n.b.</i>
		24.11.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	24.11.1999	-8,7	-63,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,4	16,0	-17,7
		26.05.2000	-8,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		21.11.2000	-8,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	24.11.1999	-9,0	-65,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-0,4	13,3	-15,3
		26.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-0,4	6,4	<i>n.b.</i>
	To 512/96	OP	23.11.1999	-8,6	-60,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,0	14,1
26.05.2000			-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
23.11.2000			-8,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
MP		23.11.1999	-9,0	-64,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,6	16,2	-14,4
		26.05.2000	-8,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		21.11.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
UP		23.11.1999	-9,1	-65,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	37,0	19,2	-16,0
		26.05.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	36,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 513/96		OP	23.11.1999	-8,1	-60,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,1	15,4
	26.05.2000		<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	23.11.2000		-8,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	23.11.1999	-8,9	-64,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,5	11,5	-14,9
		26.05.2000	-8,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		21.11.2000	-8,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	23.11.1999	-9,1	-65,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,2	14,6	-15,6
		26.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,0	8,2	<i>n.b.</i>
To 514/96	OP	23.11.1999	-4,3	-40,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,5	16,5	-13,3
		08.12.2000	-4,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	23.11.1999	-9,0	-63,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,3	14,1	-13,5
		08.12.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		24.09.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-0,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	23.11.1999	-9,2	-65,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	9,0	18,6	-13,6
To 515/96	OP	25.11.1999	-5,6	-46,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,6	15,3	-9,6
		26.05.2000	-8,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	-8,4	-61,9	37,6	<i>n.b.</i>	1,8	<i>n.b.</i>	-12,4
		21.11.2000	-4,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	25.11.1999	-8,2	-59,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,5	14,1	-15,6
		26.05.2000	-5,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	-6,4	-51,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,8	10,7	-12,4
		21.11.2000	-7,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		25.11.1999	-9,4	-67,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-5,1	12,7	-14,1
UP	26.05.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-5,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
To 516/96	OP	25.11.1999	-6,6	-51,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,5	16,2	-16,4
		26.05.2000	-8,0	<i>n.b.</i>	22,4	13,7	1,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	-8,2	-60,3	31,8	<i>n.b.</i>	1,6	15,1	-17,3
		21.11.2000	-5,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		19.06.2001	-8,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,9	10,2	<i>n.b.</i>
	MP	25.11.1999	-9,2	-64,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-10,1	<i>n.b.</i>	-13,6
		26.05.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-10,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	-9,3	-65,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,6	3,7	-16,6
		21.11.2000	9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		19.06.2001	0,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-5,9	3,9	<i>n.b.</i>
		24.09.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-10,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	25.11.1999	-9,2	-65,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,1	12,0	-15,6
		26.05.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	-9,2	-66,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,1	<i>n.b.</i>	-16,0
		19.06.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,4	3,3	<i>n.b.</i>
		24.09.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>

Messstelle	Niveau	Datum	$\delta^{18}\text{O}-\text{H}_2\text{O}$	$\delta\text{D}-\text{H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N}-\text{NO}_3$	$\delta^{18}\text{O}-\text{NO}_3$	$\delta^{34}\text{S}-\text{SO}_4$	$\delta^{18}\text{O}-\text{SO}_4$	$\delta^{13}\text{C}-\text{DIC}$
To 517/96	OP	25.11.1999	-8,8	-63,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,3	12,7	-15,2
		27.03.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	10,6	3,4	8,3	<i>n.b.</i>
		26.05.2000	-8,0	<i>n.b.</i>	13,0	13,5	2,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	-7,9	-59,4	11,5	<i>n.b.</i>	1,0	9,6	-16,7
		21.11.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	25.11.1999	-9,2	-65,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-4,9	14,7	-15,0
		27.03.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,9	4,2	<i>n.b.</i>
		26.05.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-4,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	-9,3	-66,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-4,1	8,9	-14,9
		21.11.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	24.09.2001	-9,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-4,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
	UP	25.11.1999	-9,4	-65,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,7	12,0	-14,8
		27.03.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,7	5,5	<i>n.b.</i>
		26.05.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
21.11.2000		-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
To 518/96	OP	25.11.1999	-4,2	-38,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,5	16,2	-12,2
		26.05.2000	-6,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		21.11.2000	-5,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	25.11.1999	-7,2	-55,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,2	14,0	-10,7
		26.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		21.11.2000	-7,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	25.11.1999	-8,2	-58,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,6	15,4	-10,4
		26.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		21.11.2000	-8,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 519/96	OP	26.11.1999	-7,7	-58,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,5	9,5	-18,8
		26.05.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		21.11.2000	-7,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	26.11.1999	-7,7	-57,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,9	8,2	-9,2
		26.05.2000	-7,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		21.11.2000	-7,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	26.11.1999	-9,0	-65,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-0,3	6,9	-16,3
		26.05.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-0,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 520/96	OP	26.11.1999	-9,2	-66,7	11,6	9,4	4,1	6,7	-17,0
		26.05.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	16,3	9,2	2,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		21.11.2000	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	26.11.1999	-9,5	-69,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	6,0	11,8	-15,6
		26.05.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		21.11.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	26.11.1999	-8,9	-65,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,8	9,4	-16,1
		26.05.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 521/00	OP	25.04.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,9	6,2	-15,2
		26.05.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		13.07.2000	-9,4	-66,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-4,1	6,7	-15,6
		13.10.2000	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,6	5,7	-15,6
		23.11.2000	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,0	8,5	-15,9
		08.01.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,0	6,6	-15,0
		22.02.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,6	7,5	<i>n.b.</i>
		09.04.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,5	7,0	<i>n.b.</i>
		22.05.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,8	7,4	<i>n.b.</i>
		19.06.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,8	7,7	<i>n.b.</i>
		UP	25.04.2000	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,8	6,6
	26.05.2000		-9,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	13.07.2000		-9,4	-68,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,2	7,5	-15,5
	13.10.2000		-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,6	5,7	-15,6
	23.11.2000		-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,6	7,2	-15,9
	08.01.2001		-9,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,5	6,1	-15,5
	22.02.2001		-9,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,1	6,5	<i>n.b.</i>
	09.04.2001		-9,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,5	9,1	<i>n.b.</i>
	22.05.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,6	8,1	<i>n.b.</i>	
19.06.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,2	7,6	<i>n.b.</i>		

Anhang VI: Messwerte stabiler Isotope im Grundwasser von Altpegeln, Mockritz

Messstelle	Niveau	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$	$\delta^{13}\text{C-DIC}$
121/93	OP	10.05.2000	-9,6	n.b.	n.b.	n.b.	4,5	n.b.	n.b.
	UP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,2	n.b.
122/93	OP	10.05.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	6,2	n.b.	n.b.
	OP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	2,3	n.b.	n.b.
123/93	MP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,6	n.b.	n.b.
	UP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	1,9	n.b.	n.b.
124/93	OP	10.05.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	4,6	n.b.	n.b.
	UP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,7	n.b.	n.b.
125/93	OP	10.05.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	4,0	n.b.	n.b.
	OP	09.08.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	3,1	11,9	n.b.
126/93	OP	10.05.2000	-8,7	n.b.	n.b.	n.b.	-1,0	n.b.	n.b.
127/93	OP	10.05.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	2,6	n.b.	n.b.
	UP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,9	n.b.	n.b.
128/93	OP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,0	n.b.	n.b.
129/93	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,1	n.b.	n.b.
130/97	OP	10.05.2000	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.	2,8	n.b.	n.b.
132/97	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,8	n.b.	n.b.
	UP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	8,7	n.b.	n.b.
133/97	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,7	n.b.	n.b.
135/98	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,1	n.b.	n.b.
9427	OP	10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-13,7	n.b.	n.b.
9428	OP	10.05.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
		31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,2	n.b.	n.b.
9430	OP	09.08.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	6,1	13,1	n.b.
9437	OP	10.05.2000	-7,9	n.b.	n.b.	n.b.	1,7	n.b.	n.b.
9442	OP	10.05.2000	-7,2	n.b.	n.b.	n.b.	3,7	n.b.	n.b.
9443	OP	10.05.2000	-8,0	n.b.	n.b.	n.b.	1,9	n.b.	n.b.
9450	OP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,3	8,8	n.b.
		20.06.2000	-7,6	-58,0	n.b.	n.b.	2,0	4,7	-13,2
9451a	OP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,5	8,2	n.b.
		20.06.2000	-6,8	-52,9	n.b.	n.b.	8,3	7,4	-15,6
9452	OP	25.04.2000	-7,8	n.b.	n.b.	n.b.	0,6	6,1	-15,7
9453	OP	25.04.2000	-5,3	n.b.	n.b.	n.b.	2,2	9,3	-9,6
9503	OP	14.03.2000	n.b.	n.b.	5,2	13,4	2,9	5,9	n.b.
		25.04.2000	-9,4	n.b.	6,4	10,0	2,4	5,4	-16,4
		20.06.2000	-9,3	-66,0	7,2	8,5	2,8	5,8	-16,8
		19.06.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	8,0	8,2	n.b.
9504	OP	14.03.2000	n.b.	n.b.	6,7	11,0	2,1	6,0	n.b.
		25.04.2000	-9,4	n.b.	8,1	10,7	2,6	6,9	-14,1
Eln 1/95	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	1,5	n.b.	n.b.
	UP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,6	n.b.	n.b.
Eln 1/96	OP	10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	3,6	n.b.	n.b.
		31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,6	n.b.	n.b.
Eln 1/99	OP	09.08.2001	-9,7	n.b.	n.b.	n.b.	4,1	6,2	n.b.
		10.05.2000	-8,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
		09.08.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-4,7	7,5	n.b.
Eln 12/93	OP	14.03.2000	n.b.	n.b.	1,9	6,9	7,1	8,2	n.b.
		10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
		19.06.2001	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	6,3	9,3	n.b.
	UP	10.05.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
		19.06.2001	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	1,7	9,1	n.b.
Eln 13/93	OP	10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	1,4	n.b.	n.b.
Eln 14/93	OP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,7	n.b.	n.b.
	UP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,1	n.b.	n.b.
Eln 21/95	OP	10.05.2000	-8,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	UP	10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Eln 3/93	OP	10.05.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	4,4	n.b.	n.b.
		31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,4	n.b.	n.b.
	UP	10.05.2000	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	3,8	n.b.	n.b.
Eln 3/93 -E	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,8	n.b.	n.b.
Eln 4/93	OP	10.05.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
		09.08.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	10,0	6,3
	MP	10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
		09.08.2001	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	4,7	9,7	n.b.
	UP	09.08.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	3,5	5,4	n.b.
Eln 5/93	OP	09.08.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	2,1	6,2	n.b.
Eln 501/91	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,0	n.b.	n.b.
	UP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,6	n.b.	n.b.

Messstelle	Niveau	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$	$\delta^{13}\text{C-DIC}$
Eln 511/90	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	6,7	n.b.	n.b.
Eln 511/90	OP	09.08.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	6,9	4,7	n.b.
Eln 512/90	OP	10.05.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	UP	10.05.2000	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Eln 513/90	OP	10.05.2000	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	UP	10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Eln 514/90	OP	10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	UP	10.05.2000	-9,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Eln 515/90	OP	10.05.2000	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	MP	10.05.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Eln 7/93	OP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,5	n.b.	n.b.
	UP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,5	n.b.	n.b.
Eln 8/93	UP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,3	n.b.	n.b.
Eln 8/93 -E	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,3	n.b.	n.b.
Nei 1/95	OP	14.03.2000	n.b.	n.b.	3,5	n.b.	4,8	6,0	n.b.
		20.06.2000	-9,6	-65,7	4,5	8,1	4,6	n.b.	-17,8
		19.06.2001	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	4,1	11,2	n.b.
	MP	14.03.2000	n.b.	n.b.	3,5	11,1	5,8	5,0	n.b.
		20.06.2000	-9,5	-65,3	4,9	8,0	5,5	n.b.	-17,9
		19.06.2001	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	5,3	5,9	n.b.
	UP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	1,1	5,9	n.b.
		20.06.2000	-9,5	-64,3	n.b.	n.b.	0,8	n.b.	-16,0
		19.06.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	0,6	5,4	n.b.
Nei 1/96	OP	14.03.2000	n.b.	n.b.	5,0	9,4	6,0	5,7	n.b.
		20.06.2000	-9,2	-62,0	7,6	8,8	5,3	4,7	-7,9
		19.06.2001	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	5,2	8,1	n.b.
OM2 (Drän)	OP	10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	5,9	n.b.	
PB 10/93	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,1	n.b.	
PB 11/93-E	OP	10.05.2000	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	
PB 15/93	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,8	n.b.	
PB 16/93	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,6	n.b.	
PB 17/93	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,1	n.b.	
PB 19/93	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,2	n.b.	
PB 2/96	OP	10.05.2000	-8,7	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	
PB 20/93	OP	10.05.2000	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
		09.08.2001	-9,8	n.b.	n.b.	n.b.	4,4	11,2	n.b.
PB 21/93	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,6	n.b.	n.b.
		09.08.2001	-8,5	n.b.	n.b.	n.b.	6,3	5,4	n.b.
PB 3/93	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,0	n.b.	
PB 5/93-E	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	13,0	n.b.	
PB 7/93	OP	10.05.2000	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	
PB 8/93	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,0	n.b.	
Spiz 1/96	OP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,1	n.b.	
Spiz 1/99	OP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-1,0	n.b.	
Spiz 102/90	OP	14.03.2000	n.b.	n.b.	1,5	6,5	6,3	5,8	n.b.
		16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	6,3	n.b.	n.b.
		20.06.2000	-9,5	-65,3	4,3	6,6	6,0	4,8	-16,7
		19.06.2001	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	5,9	10,3	n.b.
	UP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,0	5,3	n.b.
		20.06.2000	-9,4	-65,1	10,9	15,1	4,6	9,9	-17,0
Spiz 105/90	UP	19.06.2001	-9,6	n.b.	n.b.	n.b.	4,4	6,6	n.b.
		10.05.2000	-9,6	n.b.	n.b.	n.b.	4,7	n.b.	n.b.
		10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,5	n.b.	n.b.
Spiz 106/90	OP	10.05.2000	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	4,4	n.b.	
Spiz 108/90	UP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	2,4	4,8	
Spiz 109/90	UP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	7,0	6,4	
Spiz 112/90	UP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	6,0	5,7	
Spiz 114/91	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,7	n.b.	
Spiz 2/96	OP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,6	n.b.	
	UP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,8	n.b.	
Spiz 2/99	OP	10.05.2000	-8,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	
	UP	10.05.2000	-8,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	
Spiz 3/96	UP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-1,2	n.b.	
Spiz 5/96	OP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,0	n.b.	
	UP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,0	n.b.	
Spiz 5/97	OP	10.05.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	3,7	5,1	
	UP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,4	5,8	
Spiz 5/98	OP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,4	n.b.	
To 1/86	OP	10.05.2000	-8,1	n.b.	n.b.	n.b.	-0,4	n.b.	-8,9
		11.05.2000	-8,2	n.b.	22,8	14,9	n.b.	n.b.	n.b.
	UP	10.05.2000	-7,7	n.b.	n.b.	n.b.	3,4	8,8	-17,8

Messstelle	Niveau	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$	$\delta^{13}\text{C-DIC}$
		11.05.2000	-7,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 1/95	OP	25.04.2000	-8,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,7	7,4	-19,8
To 10/76	OP	25.04.2000	-8,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-16,7
		20.06.2000	-8,7	-62,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-5,4	0,8	-16,8
		19.06.2001	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-6,7	1,5	<i>n.b.</i>
	MP	25.04.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-16,3
		20.06.2000	-9,4	-67,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,4	1,2	-16,0
		19.06.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,9	1,9	<i>n.b.</i>
	UP	25.04.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-14,8
		20.06.2000	-9,5	-67,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-4,2	4,7	-14,5
19.06.2001		-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-6,1	3,4	<i>n.b.</i>	
To 11/76	OP	25.04.2000	-8,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-19,1
		20.06.2000	-8,0	-59,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,8	<i>n.b.</i>	-18,3
		19.06.2001	-8,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,9	6,2	<i>n.b.</i>
	MP	25.04.2000	-8,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-0,6	4,7	-17,0
		20.06.2000	-8,9	-65,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,9	<i>n.b.</i>	-18,0
		19.06.2001	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-4,4	3,7	<i>n.b.</i>
	UP	25.04.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-15,2
		20.06.2000	-9,4	-66,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,6	6,3	-15,5
19.06.2001		-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,2	5,1	<i>n.b.</i>	
To 13/74	OP	10.05.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	10.05.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 13/76	OP	10.05.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	10.05.2000	-8,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 15/74	OP	19.06.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,0	5,2	<i>n.b.</i>
	MP	19.06.2001	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	8,1	7,8	<i>n.b.</i>
	UP	19.06.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	21,6	11,0	<i>n.b.</i>
To 15/76	OP	10.05.2000	-8,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	10.05.2000	-8,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	MP	10.05.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 16/74	OP	19.06.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,9	6,0	<i>n.b.</i>
	UP	19.06.2001	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,6	10,6	<i>n.b.</i>
To 18/76	OP	10.05.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	10.05.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 19/76	OP	16.03.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,2	6,8	<i>n.b.</i>
		20.06.2000	-8,3	-59,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,3	6,7	-13,1
		19.06.2001	-8,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,8	5,4	<i>n.b.</i>
	MP	16.03.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,0	7,2	<i>n.b.</i>
		20.06.2000	-8,5	-58,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,8	<i>n.b.</i>	-9,4
		19.06.2001	-8,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,4	18,7	<i>n.b.</i>
	UP	16.03.2000	6,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		20.06.2000	-8,5	-59,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,9	<i>n.b.</i>	-13,9
19.06.2001		-8,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,3	6,8	<i>n.b.</i>	
To 2/86 E	OP	10.05.2000	-8,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	UP	10.05.2000	-7,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
To 2/95	OP	25.04.2000	-7,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,3	6,8	-15,9
To 20/74	OP	25.04.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		09.08.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,5	9,1	<i>n.b.</i>
	MP	25.04.2000	-9,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		09.08.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	8,6	7,7	<i>n.b.</i>
	UP	25.04.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		09.08.2001	-9,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	25,3	14,8	<i>n.b.</i>
To 20/76	OP	25.04.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,2	5,6	-13,3
		19.06.2001	-9,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	0,4	4,6	<i>n.b.</i>
	MP	25.04.2000	-9,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,8	8,0	-16,3
		19.06.2001	-9,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,2	6,3	<i>n.b.</i>
	UP	25.04.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	6,6	9,1	-16,9
		19.06.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	6,3	4,8	<i>n.b.</i>
To 21/74	UP	09.08.2001	-9,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,9	4,7	<i>n.b.</i>
To 21/76	OP	10.05.2000	-8,4	<i>n.b.</i>	17,1	12,5	-1,6	<i>n.b.</i>	-18,1
		20.06.2000	-9,4	-66,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,6	<i>n.b.</i>	-16,2
		19.06.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,0	5,4	<i>n.b.</i>
	MP	10.05.2000	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	6,3	10,2	-17,9
		20.06.2000	-9,5	-65,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,6	10,0	-15,3
		19.06.2001	-9,4	6,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	5,8	9,0	<i>n.b.</i>
	UP	10.05.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	9,1	12,0	-15,8
		20.06.2000	-9,2	-65,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	7,1	8,2	-16,1
19.06.2001		-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	8,3	-5,1	<i>n.b.</i>	
To 22/76	OP	19.06.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,0	7,6	<i>n.b.</i>
	MP	19.06.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	6,2	7,8	<i>n.b.</i>
	UP	19.06.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	13,7	11,9	<i>n.b.</i>

Messstelle	Niveau	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$	$\delta^{13}\text{C-DIC}$
To 23/74	OP	19.06.2001	-9,6	n.b.	n.b.	n.b.	5,3	5,3	n.b.
To 23/74	UP	19.06.2001	-9,6	n.b.	n.b.	n.b.	5,4	6,0	n.b.
To 24/74	OP	10.05.2000	-8,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 24/74	UP	10.05.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 24/76	OP	19.06.2001	-8,4	n.b.	n.b.	n.b.	7,1	9,7	n.b.
To 24/76	MP	19.06.2001	-8,3	n.b.	n.b.	n.b.	7,5	8,6	n.b.
To 24/76	UP	19.06.2001	-8,5	n.b.	n.b.	n.b.	14,1	9,5	n.b.
To 25/74	OP	19.06.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	4,0	8,9	n.b.
To 29/75	OP	10.05.2000	-8,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 3/76	OP	10.05.2000	-7,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 3/76	MP	10.05.2000	-8,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 3/76	UP	10.05.2000	-8,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 3/86	OP	10.05.2000	-8,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 3/86	UP	10.05.2000	-8,3	n.b.	n.b.	n.b.	-0,6	4,7	n.b.
To 3/95	OP	25.04.2000	-7,8	n.b.	n.b.	n.b.	2,3	6,8	-1,9
To 30/74	OP	10.05.2000	-8,5	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 33/75	OP	10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	3,9	8,6	-15,5
To 34/74	OP	25.04.2000	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	2,2	6,8	-15,1
To 39/74	OP	19.06.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	1,3	10,1	n.b.
To 4A/76	OP	10.05.2000	-8,4	n.b.	n.b.	n.b.	1,6	5,3	n.b.
To 4A/76	UP	10.05.2000	-8,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 5/76	OP	10.05.2000	-8,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 5/76	UP	10.05.2000	-8,8	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 502/90	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	8,7	n.b.	n.b.
To 502/90	MP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,8	n.b.	n.b.
To 503/88	OP	10.05.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 503/88	UP	10.05.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
To 503/90	OP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,6	n.b.	n.b.
To 503/90	UP	31.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,1	n.b.	n.b.
To 506/87	OP	10.05.2000	-7,7	n.b.	n.b.	n.b.	-1,9	n.b.	n.b.
To 507/88	OP	10.05.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	2,9	n.b.	n.b.
To 6/76	OP	25.04.2000	-7,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-16,3
To 6/76	MP	25.04.2000	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-16,2
To 6/76	UP	25.04.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-16,9
To 7/76	OP	25.04.2000	-8,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-12,7
To 7/76	UP	25.04.2000	-8,9	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-16,6
To 8/76	OP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	2,0	6,1	n.b.
To 8/76	OP	20.06.2000	-8,5	-61,2	n.b.	n.b.	2,4	n.b.	-16,6
To 8/76	MP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,0	10,4	n.b.
To 8/76	MP	20.06.2000	-5,8	-46,1	n.b.	n.b.	-9,0	3,2	-17,9
To 8/76	UP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,8	6,3	n.b.
To 8/76	UP	20.06.2000	-7,4	-55,1	n.b.	n.b.	3,1	n.b.	-14,2
To 9A/76	OP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-10,4	0,8	n.b.
To 9A/76	OP	20.06.2000	-9,2	-65,1	n.b.	n.b.	-10,7	1,0	-15,6
To 9A/76	OP	13.10.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-10,3	1,6	-15,8
To 9A/76	OP	24.11.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-9,4	1,3	-17,3
To 9A/76	OP	08.12.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-9,9	n.b.	-16,8
To 9A/76	OP	22.12.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-10,7	n.b.	n.b.
To 9A/76	OP	08.01.2001	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	-9,7	0,0	-16,8
To 9A/76	OP	22.02.2001	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-9,8	1,6	n.b.
To 9A/76	OP	09.04.2001	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	-9,7	2,0	n.b.
To 9A/76	OP	22.05.2001	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-8,8	n.b.	n.b.
To 9A/76	OP	19.06.2001	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-8,7	0,3	n.b.
To 9A/76	OP	09.08.2001	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-7,7	0,8	n.b.
To 9A/76	OP	24.09.2001	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-8,7	n.b.	n.b.
To 9A/76	UP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-6,7	2,2	n.b.
To 9A/76	UP	20.06.2000	-9,3	-66,1	n.b.	n.b.	7,7	2,3	-14,9
To 9A/76	UP	13.10.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-6,9	3,1	-14,8
To 9A/76	UP	24.11.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-7,2	3,2	-18,2
To 9A/76	UP	08.12.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-2,9	n.b.	-15,0
To 9A/76	UP	22.12.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-3,3	n.b.	n.b.
To 9A/76	UP	08.01.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-2,4	5,5	n.b.
To 9A/76	UP	22.02.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-3,2	5,8	n.b.
To 9A/76	UP	09.04.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-2,9	9,4	n.b.
To 9A/76	UP	22.05.2001	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-7,0	n.b.	n.b.
To 9A/76	UP	19.06.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-7,8	2,7	n.b.
To 9A/76	UP	09.08.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-3,8	5,3	n.b.
To 9A/76	UP	24.09.2001	-9,5	n.b.	n.b.	n.b.	-5,0	n.b.	n.b.
ToW 66/70-E	OP	16.03.2000	n.b.	n.b.	4,0	7,6	7,2	7,4	n.b.
ToW 70/69	OP	10.05.2000	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Tsi 1/96	UP	16.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,6	5,7	n.b.

Messstelle	Niveau	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$	$\delta^{13}\text{C-DIC}$
Zia 1/96	OP	25.04.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	5,0	10,4	5,0	5,6	-13,2
Zia 1/96	OP	10.05.2000	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
		20.06.2000	-9,2	-66,0	5,7	8,8	3,9	<i>n.b.</i>	-11,2
		03.10.2000	-9,4	-67,1	5,5	9,8	4,9	5,8	-10,0
		19.06.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	6,5	4,0	<i>n.b.</i>
Zia 13/88 NVBr	OP	10.05.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>

Anhang VII: Messwerte stabiler Isotope von Wässern aus Rammfiltern, Mockritz

Rammfilter	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$	$\delta^{13}\text{C-DIC}$
9477 ZOP	06.10.2000	-8,9	-62,7	14,1	n.b.	-2,2	2,6	-18,1
	13.10.2000	-8,9	n.b.	15,1	n.b.	-4,2	1,9	-17,2
	24.11.2000	-9,2	n.b.	5,3	8,6	-4,0	6,6	-13,4
	08.12.2000	-8,7	n.b.	11,2	10,2	-5,2	n.b.	-11,3
	22.12.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-2,7	n.b.	n.b.
	08.01.2001	-9,1	n.b.	6,4	10,6	0,0	2,8	-11,2
	22.02.2001	-8,9	n.b.	10,6	10,1	-2,8	5,8	n.b.
	09.04.2001	-8,7	n.b.	n.b.	n.b.	-6,7	3,9	n.b.
	22.05.2001	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,7	4,9	n.b.
	19.06.2001	-8,9	n.b.	n.b.	n.b.	1,9	5,5	n.b.
09.08.2001	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.	-0,2	5,5	n.b.	
9507	12.05.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-8,5	n.b.	-17,1
	20.06.2000	-9,4	-65,9	n.b.	n.b.	-8,5	3,3	-17,9
	16.08.2000	-9,3	-66,5	n.b.	n.b.	-8,9	1,5	-17,7
	05.10.2000	-9,3	-67,4	n.b.	n.b.	-8,6	2,2	-16,9
	22.11.2000	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-7,6	1,9	-17,2
	08.01.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-9,7	3,0	-16,0
	22.02.2001	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-7,7	2,6	n.b.
	22.05.2001	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-8,4	n.b.	n.b.
	19.06.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-8,7	1,6	n.b.
	22.11.2000	-8,9	n.b.	n.b.	n.b.	-8,7	4,3	-23,2
9508	08.01.2001	-8,9	n.b.	n.b.	n.b.	-9,4	1,6	-22,6
	22.02.2001	-8,9	n.b.	n.b.	n.b.	-9,6	2,3	n.b.
	19.06.2001	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.	-9,5	0,0	n.b.
9509	12.05.2000	-8,8	n.b.	n.b.	n.b.	-5,0	n.b.	-17,2
	20.06.2000	-8,6	-63,0	n.b.	n.b.	-4,2	4,2	-17,7
	16.08.2000	-8,6	-61,7	n.b.	n.b.	-4,3	3,5	-17,4
	05.10.2000	-8,8	-62,1	n.b.	n.b.	-4,3	3,4	-15,2
	22.11.2000	-8,8	n.b.	n.b.	n.b.	-4,1	2,6	-15,3
	08.01.2001	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.	-5,7	3,9	-14,2
	22.02.2001	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.	-5,2	3,7	n.b.
	09.04.2001	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.	-4,0	9,4	n.b.
9510	12.05.2000	-8,7	n.b.	8,8	8,5	-3,8	n.b.	-14,7
	20.06.2000	-8,5	-61,2	8,1	8,7	-1,4	5,4	-19,4
	16.08.2000	-8,4	-60,4	n.b.	n.b.	-2,0	4,2	-19,7
	05.10.2000	-8,6	-60,9	7,5	7,4	-1,9	4,8	-18,7
	22.11.2000	-8,8	n.b.	7,5	9,9	-4,3	2,9	-19,2
	08.01.2001	-8,9	n.b.	7,3	9,3	-6,3	4,4	-19,1
	22.02.2001	-8,8	n.b.	8,8	10,4	-3,8	4,5	n.b.
	09.04.2001	-8,8	n.b.	12,4	8,4	-3,3	7,5	n.b.
9511 OP	12.05.2000	-8,8	n.b.	n.b.	n.b.	-15,1	n.b.	-19,6
	20.06.2000	-7,8	-57,1	n.b.	n.b.	-7,2	8,8	-19,2
	16.08.2000	-6,8	-54,1	n.b.	n.b.	-4,6	10,4	-20,4
	05.10.2000	-6,7	-51,5	n.b.	n.b.	-5,1	9,1	-19,6
	22.11.2000	-7,3	n.b.	n.b.	n.b.	-6,7	6,2	-20,3
	08.01.2001	-6,9	n.b.	n.b.	n.b.	-2,0	9,3	-21,0
	22.02.2001	-7,1	n.b.	n.b.	n.b.	-1,1	12,1	n.b.
	09.04.2001	-7,1	n.b.	n.b.	n.b.	-1,2	13,7	n.b.
	19.06.2001	-7,7	n.b.	n.b.	n.b.	-6,3	7,7	n.b.
9511 UP	12.05.2000	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	-18,2	n.b.	-14,7
	20.06.2000	-9,2	-65,3	n.b.	n.b.	-18,8	0,5	-13,3
	16.08.2000	-9,0	-63,5	n.b.	n.b.	-18,1	0,8	-11,1
	05.10.2000	-9,2	-65,3	33,0	n.b.	-16,0	-0,1	-11,7
	22.11.2000	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.	-16,9	0,5	-12,1
	08.01.2001	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	-17,4	1,0	-16,3
	22.02.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-16,1	0,9	n.b.
	09.04.2001	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	-15,6	2,2	n.b.
	19.06.2001	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.	-16,8	0,5	n.b.
9512	12.05.2000	-8,3	n.b.	n.b.	n.b.	-10,4	n.b.	-12,3
	20.06.2000	-8,6	-62,4	n.b.	n.b.	-12,2	2,9	-14,0
	16.08.2000	-8,6	-61,5	n.b.	n.b.	-11,9	2,7	-15,5
	05.10.2000	-8,7	-62,0	n.b.	n.b.	-9,7	3,1	-16,5
	22.11.2000	-8,6	n.b.	n.b.	n.b.	-11,3	2,6	-15,3
	08.01.2001	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.	-10,2	2,6	-17,9
	22.02.2001	-9,3	n.b.	n.b.	n.b.	-10,9	3,2	n.b.
	09.04.2001	-8,9	n.b.	n.b.	n.b.	-10,2	4,2	n.b.
9513/1	12.05.2000	-9,1	n.b.	6,4	10,9	-2,4	n.b.	-16,9
	20.06.2000	-9,1	-64,6	6,1	9,0	-0,3	3,7	-18,0

Rammfilter	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$	$\delta^{13}\text{C-DIC}$
	16.08.2000	-9,2	-64,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	0,6	4,0	-15,6
9513/1	06.10.2000	-9,2	-65,4	6,1	7,0	2,1	4,3	-6,2
	13.10.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	5,9	9,0	<i>n.b.</i>	4,9	-5,1
	24.11.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	5,9	10,6	2,3	3,0	-5,6
	08.12.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	4,6	10,2	2,2	<i>n.b.</i>	-7,3
	22.12.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	08.01.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	6,7	8,2	2,2	4,4	-7,9
	22.02.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	12,1	9,4	1,9	6,9	<i>n.b.</i>
	09.04.2001	-8,9	<i>n.b.</i>	8,2	7,8	-1,0	6,5	<i>n.b.</i>
	22.05.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-6,9	6,5	<i>n.b.</i>
	19.06.2001	-8,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,4	2,8	<i>n.b.</i>
09.08.2001	-8,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,4	2,8	<i>n.b.</i>	
9513/2	13.10.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	6,2	8,9	3,0	5,2	-4,2
	24.11.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	4,8	9,4	2,7	4,2	-14,6
	08.12.2000	-9,2	<i>n.b.</i>	6,0	8,0	2,4	<i>n.b.</i>	-5,2
	22.12.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	08.01.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	4,4	6,7	3,3	4,9	-5,8
	22.02.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	6,8	7,5	2,5	7,5	<i>n.b.</i>
	09.04.2001	-9,1	<i>n.b.</i>	10,5	8,9	2,1	6,5	<i>n.b.</i>
	22.05.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-0,3	6,4	<i>n.b.</i>
09.08.2001	-8,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,5	2,2	<i>n.b.</i>	
9513/3	09.04.2001	-9,0	<i>n.b.</i>	11,2	8,2	2,8	10,9	<i>n.b.</i>
	22.05.2001	<i>n.b.</i>	0,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,4	5,2	<i>n.b.</i>
	09.08.2001	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,4	9,0	<i>n.b.</i>
9514/1	06.10.2000	-8,8	-63,8	7,9	15,2	-1,6	3,1	-17,6
	13.10.2000	-8,6	<i>n.b.</i>	14,7	<i>n.b.</i>	-1,4	3,1	-15,5
	24.11.2000	-8,9	<i>n.b.</i>	6,5	10,4	-0,1	6,5	-18,2
	08.12.2000	-9,1	<i>n.b.</i>	5,2	12,0	0,5	<i>n.b.</i>	-15,9
	22.12.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-0,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	08.01.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	4,5	8,3	0,7	3,9	-17,0
	22.02.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	8,4	8,3	0,9	7,4	<i>n.b.</i>
	09.04.2001	-8,8	<i>n.b.</i>	10,3	6,5	-3,3	4,2	<i>n.b.</i>
	22.05.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,6	5,9	<i>n.b.</i>
	19.06.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	0,4	3,6	<i>n.b.</i>
09.08.2001	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,2	6,5	<i>n.b.</i>	
9514/2	06.10.2000	-9,1	-65,3	7,9	9,9	2,6	5,1	-18,1
	13.10.2000	-9,8	<i>n.b.</i>	6,5	11,8	1,9	1,1	-16,2
	08.12.2000	-9,4	<i>n.b.</i>	6,1	11,1	2,0	<i>n.b.</i>	-12,0
	22.12.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	08.01.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	5,9	8,3	2,9	4,4	-17,2
	22.02.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	8,5	9,8	2,7	4,9	<i>n.b.</i>
	09.04.2001	-9,0	<i>n.b.</i>	9,9	9,0	-0,6	7,5	<i>n.b.</i>
	22.05.2001	<i>n.b.</i>	0,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,5	5,3	<i>n.b.</i>
09.08.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	30,0	<i>n.b.</i>	2,7	5,9	<i>n.b.</i>	
9514/3	09.04.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	8,9	6,5	2,0	7,8	<i>n.b.</i>
	22.05.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,2	7,1	<i>n.b.</i>
	09.08.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,7	5,1	<i>n.b.</i>
9516	13.10.2000	-6,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,4	12,3	-19,1
	08.12.2000	-6,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,9	<i>n.b.</i>	-17,8
	22.12.2000	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	08.01.2001	-6,4	6,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,5	12,0	-18,2
	22.02.2001	-7,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,5	8,1	<i>n.b.</i>
	09.04.2001	-8,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,7	6,8	<i>n.b.</i>
	22.05.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,6	6,8	<i>n.b.</i>
To 521/00 OP1	13.10.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	6,8	9,2	4,2	5,8	-15,2
	23.11.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	6,5	8,7	4,6	4,7	-8,3
	08.01.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	6,3	10,0	4,8	5,1	-8,7
	22.02.2001	-9,5	<i>n.b.</i>	8,9	9,1	2,9	10,8	<i>n.b.</i>
	09.04.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	10,2	7,6	4,7	7,6	<i>n.b.</i>
	22.05.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,5	7,5	<i>n.b.</i>
	19.06.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,5	14,3	<i>n.b.</i>
To 521/00 OP2	13.10.2000	-9,3	<i>n.b.</i>	7,1	11,9	2,6	5,8	-15,1
	23.11.2000	-9,4	<i>n.b.</i>	7,0	11,5	3,3	6,2	<i>n.b.</i>
	09.04.2001	-9,5	<i>n.b.</i>	10,3	7,3	2,6	7,3	<i>n.b.</i>
	22.05.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,4	6,6	<i>n.b.</i>
	19.06.2001	-9,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,8	9,7	<i>n.b.</i>

Anhang VIII: Messwerte Feldparameter, Nitrat- und Sulfatgehalte Rammfilter Mockritz (chemische Analysen durch UFZ, ergänzt durch TUD)

Rammfilter	Datum	pH-Werte	LF $\mu\text{S/cm}$	K _S -4,3 mmol/l	K _N -8,2 mmol/l	O ₂ mg/l	NO ₃ mg/l	SO ₄ mg/l	
9477 ZOP	06.10.2000	5,65	1287	0,59	<i>n.b.</i>	3,1	56,3	625	
	13.10.2000	5,52	1137	0,37	0,65	1,0	48,5	569	
	24.11.2000	6,12	1152	0,60	0,51	8,4	202,7	320	
	08.12.2000	5,88	1239	1,14	0,83	2,3	18,2	543	
	22.12.2000	6,16	1067	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	79,7	521	
	08.01.2001	5,88	1229	0,60	0,98	3,4	106,2	436	
	22.02.2001	5,73	1207	0,66	0,72	1,6	75,6	447	
	09.04.2001	5,32	1187	0,28	1,98	0,3	0,3	493	
	22.05.2001	5,82	1012	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	126,8	384	
9507	19.06.2001	6,20	1116	0,60	0,80	5,8	132,7	398	
	09.08.2001	5,93	1135	0,58	0,94	3,2	117,8	409	
	12.05.2000	6,07	1	1,40	1,05	0,2	0,0	392	
	20.06.2000	6,14	1041	1,36	0,78	0,2	0,7	454	
	16.08.2000	6,25	1032	1,30	1,16	0,6	0,0	410	
	05.10.2000	6,20	1055	1,72	1,29	0,5	0,0	460	
	22.11.2000	6,33	1080	2,22	1,35	0,1	0,0	383	
	08.01.2001	6,03	1076	1,49	1,27	0,0	0,0	391	
	22.02.2001	6,12	1064	1,81	0,82	0,0	0,0	419	
9508	22.05.2001	6,29	896	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	0,0	376	
	19.06.2001	6,16	1026	2,42	1,67	0,1	0,0	353	
	22.11.2000	5,47	2220	1,29	9,37	0,1	0,0	1210	
	08.01.2001	5,27	2170	0,82	10,50	0,1	0,4	1178	
	22.02.2001	5,55	2170	1,10	8,98	0,0	0,0	1181	
	19.06.2001	5,44	2200	1,03	10,57	0,1	0,0	1206	
	9509	12.05.2000	4,90	1114	0,19	1,83	7,0	0,2	457
		20.06.2000	4,98	1115	0,24	1,72	0,2	0,0	540
		16.08.2000	4,90	1091	0,18	1,88	0,3	0,0	496
05.10.2000		4,99	1125	0,30	2,28	0,3	0,0	503	
22.11.2000		4,96	1130	0,47	1,38	0,4	0,0	462	
08.01.2001		4,92	1130	0,51	1,72	0,0	0,2	457	
22.02.2001		5,22	1172	0,31	2,23	0,0	0,1	485	
09.04.2001		5,19	1073	0,33	3,29	0,0	4,9	422	
9510		12.05.2000	4,57	1633	0,10	2,30	0,1	132,7	958
	20.06.2000	4,89	1497	0,26	1,59	0,2	160,6	687	
	16.08.2000	4,81	1546	0,26	1,32	0,3	159,7	746	
	05.10.2000	4,96	1523	0,36	1,76	0,4	234,3	623	
	22.11.2000	4,91	1369	0,47	1,88	0,4	107,6	570	
	08.01.2001	4,95	1368	0,74	2,44	0,1	90,7	574	
	22.02.2001	5,42	1387	0,67	1,34	0,1	95,4	576	
	09.04.2001	5,15	1403	0,39	7,68	0,0	113,5	565	
	9511 OP	12.05.2000	5,88	2200	2,50	8,12	0,3	0,0	1154
20.06.2000		6,12	2260	5,12	6,72	0,2	0,0	1244	
16.08.2000		6,04	2330	6,00	6,98	0,2	14,0	1082	
05.10.2000		6,06	2370	5,92	10,00	1,7	1,5	1150	
22.11.2000		6,22	2310	5,78	9,82	0,2	1,8	1085	
08.01.2001		6,26	2240	8,50	10,40	0,2	0,6	935	
22.02.2001		6,29	2150	8,02	9,04	0,7	0,5	759	
09.04.2001		6,29	2190	7,30	12,86	0,3	1,8	848	
19.06.2001		6,22	2290	7,32	9,75	0,5	0,0	950	
9511 UP	12.05.2000	5,81	1385	1,19	2,78	0,3	0,0	607	
	20.06.2000	5,98	1562	1,40	3,78	0,2	0,0	701	
	16.08.2000	5,97	1499	1,28	3,18	0,8	0,0	756	
	05.10.2000	6,13	1509	1,65	3,52	1,9	22,8	638	
	22.11.2000	6,86	1465	1,93	3,10	0,1	1,5	637	
	08.01.2001	6,52	1837	2,17	3,74	0,1	0,6	737	
	22.02.2001	6,66	1579	2,33	2,70	0,2	0,5	747	
	09.04.2001	6,93	1518	3,06	3,06	0,2	1,4	668	
	19.06.2001	6,44	1435	1,98	2,81	0,5	0,0	661	
9512	12.05.2000	6,66	2950	6,89	4,43	8,0	0,0	689	
	20.06.2000	6,56	2730	4,66	4,52	0,2	0,0	784	
	16.08.2000	6,52	2610	4,12	3,56	0,3	0,0	741	
	05.10.2000	6,32	2250	2,98	6,18	0,6	2,1	730	
	22.11.2000	6,38	2550	4,62	5,00	0,0	1,9	647	
	08.01.2001	6,34	2110	3,45	4,80	0,0	0,4	709	
	22.02.2001	6,06	1822	2,15	5,83	0,0	0,3	666	
	09.04.2001	6,12	1884	2,75	7,84	0,0	1,9	651	
	9513/1	12.05.2000	5,80	1469	0,74	0,72	6,2	92,7	742

Rammfilter	Datum	pH-Werte	LF $\mu\text{S/cm}$	K _S -4,3 mmol/l	K _P -8,2 mmol/l	O ₂ mg/l	NO ₃ mg/l	SO ₄ mg/l
9513/1	20.06.2000	5,98	1430	0,86	0,68	5,8	111,8	655
	16.08.2000	6,37	1373	0,68	0,48	7,4	136,2	546
	06.10.2000	6,00	1425	0,53	0,55	7,1	171,3	600
	13.10.2000	5,95	1467	0,27	0,36	7,4	165,9	524
	24.11.2000	5,87	1332	0,58	0,78	6,5	135,4	475
	08.12.2000	6,03	1322	1,25	0,68	10,7	135,7	487
	22.12.2000	6,17	1164	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	131,6	485
	08.01.2001	6,35	1312	0,58	0,60	6,9	128,2	464
	22.02.2001	5,93	1214	0,79	0,41	7,0	116,5	416
	09.04.2001	5,98	1200	0,78	0,79	5,6	77,1	435
	22.05.2001	6,03	1067	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	104,0	441
	19.06.2001	6,09	1221	1,02	1,02	6,2	90,1	453
09.08.2001	6,09	1213	1,18	0,96	5,0	91,7	454	
9513/2	13.10.2000	5,99	1434	0,56	0,31	7,8	167,0	505
	24.11.2000	5,94	1343	0,65	0,71	10,5	163,5	450
	08.12.2000	5,97	1336	0,74	0,80	12,0	144,4	493
	22.12.2000	6,22	1147	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	143,5	465
	08.01.2001	6,74	1359	0,62	0,63	7,8	148,0	462
	22.02.2001	6,01	1216	0,66	0,41	7,9	146,5	395
	09.04.2001	5,97	1210	0,63	0,67	7,2	124,1	398
	22.05.2001	6,06	1053	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	118,8	419
09.08.2001	6,03	1214	0,97	1,08	6,9	70,7	482	
9513/3	09.04.2001	6,27	1243	0,74	0,31	10,2	162,6	377
	22.05.2001	6,23	1027	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	153,0	315
	09.08.2001	6,21	1033	0,81	0,66	7,7	151,9	330
9514/1	06.10.2000	5,83	1194	0,63	<i>n.b.</i>	4,9	67,2	537
	13.10.2000	5,64	1384	0,60	0,32	4,4	95,7	550
	24.11.2000	5,48	1294	0,51	1,01	4,5	97,2	496
	08.12.2000	5,83	1331	0,67	0,79	10,4	121,6	495
	22.12.2000	5,48	1141	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	100,5	510
	08.01.2001	5,65	1319	0,65	1,08	4,4	122,0	479
	22.02.2001	6,01	1347	0,49	0,48	6,0	134,9	462
	09.04.2001	4,95	1236	0,16	1,02	0,7	35,5	502
	22.05.2001	5,89	1077	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	81,1	401
	19.06.2001	5,91	1269	0,68	0,67	6,8	108,8	480
	09.08.2001	5,95	1238	0,67	0,62	6,4	140,0	442
9514/2	06.10.2000	5,99	1073	0,91	<i>n.b.</i>	8,6	74,5	432
	13.10.2000	5,89	1207	0,82	0,32	6,5	116,4	461
	08.12.2000	5,74	1312	0,67	0,71	9,7	121,6	489
	22.12.2000	5,99	804	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	48,9	399
	08.01.2001	6,08	1246	0,58	0,88	7,7	128,7	429
	22.02.2001	5,79	1312	0,55	0,52	7,1	152,4	442
	09.04.2001	5,76	1284	0,61	0,74	4,7	80,0	494
	22.05.2001	5,86	1087	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	124,5	423
	09.08.2001	5,80	1199	0,62	0,78	6,3	123,2	419
9514/3	09.04.2001	5,90	1287	0,65	0,63	9,3	134,4	422
	22.05.2001	6,00	989	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	94,3	387
	09.08.2001	5,91	1146	0,84	0,78	5,5	105,6	415
9516	13.10.2000	6,35	819	2,07	0,42	0,9	0,2	230
	08.12.2000	6,31	752	2,34	0,79	0,1	0,0	191
	22.12.2000	6,89	596	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,1	212
	08.01.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,35	0,94	0,0	0,0	186
	22.02.2001	6,68	762	1,78	0,63	0,1	0,0	197
	09.04.2001	6,38	703	1,09	0,45	0,1	16,6	192
22.05.2001	6,45	601	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	8,9	193	
To 521/00 OP1	13.10.2000	6,93	1096	3,95	0,23	9,4	94,1	230
	23.11.2000	6,82	1114	4,50	0,83	7,4	105,8	202
	08.01.2001	7,05	1104	4,59	0,42	6,5	106,6	210
	22.02.2001	6,93	1134	4,65	0,34	7,3	101,4	222
	09.04.2001	6,96	1110	4,52	0,51	8,5	94,5	221
	22.05.2001	6,99	960	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	92,8	223
	19.06.2001	7,07	1109	4,91	0,70	2,0	98,4	243
To 521/00 OP2	13.10.2000	6,83	786	2,95	0,29	6,8	95,2	217
	23.11.2000	6,75	888	3,76	0,85	4,8	54,7	163
	09.04.2001	7,16	961	3,91	0,33	8,8	59,5	202
	22.05.2001	7,05	835	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	60,2	196
	19.06.2001	7,08	968	4,40	0,55	7,4	70,5	190

Anhang IX: Tritiummesswerte von Grundwasserproben aus Mockritz

Messstelle	OP-Niveau		MP-Niveau		UP-Niveau	
	Datum	³ H (TU)	Datum	³ H (TU)	Datum	³ H (TU)
ToW 66/70 E	16.03.00	9,6				
To 15/74	06.04.92	21,0			06.04.92	1,4
To 16/74			09.04.92	11,0	09.04.92	2,0
To 8/76	16.03.00	10,5	16.03.00	10,9	16.03.00	9,8
To 9A/76			15.03.00	8,2	15.03.00	4,4
					19.04.01	3,8
			24.09.01	10,4	24.09.01	3,0
To 10/76					19.06.01	4,4
To 11/76					19.06.01	6,7
To 19/76	15.03.00	10,6	15.03.00	11,2	15.03.00	11,2
To 20/76	26.09.91	17,0	26.09.91	9,2	26.09.91	1,0
	29.05.97	16,2	29.05.97	12,9	29.05.97	10,7
			19.06.01	12,0	19.06.01	6,6
To 21/76	19.06.01	8,0	19.06.01	7,2	19.06.01	5,3
To 22/76	25.09.91	10,4	25.09.91	2,2	25.09.91	3,5
	29.05.97	11,3	29.05.97	3,1	29.05.97	4,2
To 23/76			07.04.92	21,0	07.04.92	9,0
To 24/76 o	06.04.92	17,0	06.04.92	13,5	06.04.92	6,5
Spiz 102/90	13.03.00	13,7			13.03.00	6,6
Spiz 108/90					13.03.00	7,5
Spiz 109/90					14.03.00	0,1
Spiz 112/90					13.03.00	0,0
Eln 6/93	21.11.95	4,5	21.11.95	0,6	21.11.95	1,1
	26.05.00	2,6	26.05.00	0,3		
Eln 10/93	23.11.95	13,6	23.11.95	7,0	Keine Messstelle	
	26.11.96	13,6	26.11.96	9,6		
	22.11.99	12,2	22.11.99	8,3		
			25.09.01	7,7		
Eln 11/93	21.11.95	14,5	21.11.95	7,1	21.11.95	4,5
	22.11.99	8,6	22.11.99	7,9		
	15.03.00	5,5	15.03.00	7,3	15.03.00	2,7
			19.06.01	5,9	26.05.00	3,1
			24.09.01	6,5	24.09.01	3,8
Eln 12/93			14.03.00	13,8		
			19.06.01	11,8	19.06.01	2,8
Nei 1/95	14.03.00	9,6	14.03.00	9,5	14.03.00	0,8
To 501/95	23.11.95	16,6	23.11.95	15,5	Keine Messstelle	
	22.11.99	12,5	22.11.99	8,6		
To 502/95	20.11.95	15,1	20.11.95	12,0	20.11.95	11,0
					22.07.97	13,2
	22.11.99	9,5	22.11.99	6,4	22.11.99	10,4
	24.03.00	9,7	24.03.00	5,3	24.03.00	10,3
	24.09.01	9,8	24.09.01	6,0	24.09.01	8,3
To 503/95	21.11.95	14,0	21.11.95	8,2	21.11.95	1,2
	24.11.99	5,7	24.11.99	4,3		
	26.05.00	6,0	26.05.00	4,7		
To 504/95	20.11.95	13,3	20.11.95	15,1	20.11.95	14,0
	26.11.99	9,9	26.11.99	10,4	26.11.99	7,7
					25.09.01	8,5
To 505/95	20.11.95	14,4	20.11.95	12,0	20.11.95	17,1
	23.11.99	11,4	23.11.99	8,2	22.07.97	14,1
	23.11.00	11,6			23.11.99	10,9
To 506/95	21.11.95	14,0	21.11.95	14,0	Keine Messstelle	
			29.11.99	10,8		
To 507/95	20.11.95	25,0	20.11.95	26,0	Keine Messstelle	
	29.11.96	22,1	29.11.96	23,4		
	29.11.99	18,5	29.11.99	18,0		
	11.10.00	17,6	11.10.00	17,7		
			24.11.00	17,7		
To 508/95	20.11.95	19,6	Keine Meßstelle		Keine Messstelle	
	29.11.99	12,6				
To 509/95	Nicht untersucht		24.11.99	16,6	26.11.96	13,2
					24.11.99	11,3

Messstelle	OP-Niveau		MP-Niveau		UP-Niveau	
	Datum	³ H (TU)	Datum	³ H (TU)	Datum	³ H (TU)
To 510/96	Nicht untersucht		24.11.99	13,8	28.05.97	13,8
					24.11.99	10,3
To 511/96	26.11.96	17,8	26.11.96	14,2	26.11.96	7,6
	24.11.99	14,7	24.11.99	3,0	24.11.99	6,9
	24.11.00	14,1	26.05.00	4,3	26.05.00	6,6
			21.11.00	3,3		
To 512/96	18.07.96	15,4			Nicht untersucht	
	26.11.96	16,5	26.11.96	7,9		
	23.11.99	13,7	23.11.99	2,5		
	23.11.00	11,0	21.11.00	1,6		
To 513/96	18.07.96	14,1	18.07.96	4,4	18.07.96	0,3
	23.11.99	11,4	23.11.99	7,9		
	23.11.00	10,5	21.11.00	9,7		
To 514/96	18.07.96	13,2	18.07.96	14,4	18.07.96	0,8
	23.11.99	11,1	23.11.99	8,3		
	08.12.00	10,2	08.12.00	8,4		
			25.09.01	9,8		
To 515/96	25.11.96	14,0	25.11.96	9,8	25.11.96	1,2
	25.11.99	10,8	25.11.99	10,3		
			21.11.00	10,1		
To 516/96	25.11.96	14,0	25.11.96	12,1	25.11.96	2,5
	25.11.99	10,3	25.11.99	11,1	25.11.99	5,1
			21.11.00	9,0	26.05.00	5,6
			19.06.01	7,4	19.06.01	5,3
			25.09.01	9,1	25.09.01	4,7
To 517/96	27.11.96	20,6	27.11.96	10,4	27.11.96	2,3
	25.11.99	14,7	25.11.99	4,1	25.11.99	3,7
	27.03.00	10,5	27.03.00	3,6	27.03.00	3,8
	21.11.00	14,2	21.11.00	4,1	21.11.00	4,1
			25.09.01	5,0		
To 518/96	28.05.97	11,7	28.05.97	13,6	28.05.97	11,7
	25.11.99	10,8	25.11.99	11,1	25.11.99	10,9
To 519/96	26.11.99	10,7	26.11.99	10,3	26.11.99	2,0
	21.11.00	10,2	21.11.00	10,2		
To 520/96	26.11.99	13,2	26.11.99	11,8	26.11.99	1,1
	21.11.00	11,3	21.11.00	12,4		
To 521/00 OP1	19.06.01	8,0			Keine Messstelle	
To 521/00	09.04.01	2,1	09.04.01	2,4		
9450	16.03.00	10,8				
9451A	16.03.00	9,7				
9456A	29.11.99	5,4				
9499	27.05.97	14,3	27.05.97	10,6	27.05.97	9,8
	29.11.99	12,5	29.11.99	13,7	29.11.99	6,5
			19.06.01	9,7	19.06.01	6,4
			24.09.01	10,2	24.09.01	7,7
9502	27.05.97	6,1	27.05.97	0,1	Keine Meßstelle	
	29.11.99	7,5				
	19.06.01	6,6	19.06.01	0,4		
9503			14.03.00	8,2		
9504			14.03.00	7,7		
9507	12.05.00	7,5	Keine Meßstelle		Keine Meßstelle	
9508	19.06.01	10,1	Keine Meßstelle		Keine Meßstelle	
9511 OP	12.05.00	12,1				
9513-1	12.05.00	10,0				

Anhang X: Ergänzende Isotopengehalte im Grundwassermessprogramm WASAG-Elsnig

Messtelle	GOK m NN	ROK m NN	Mitte Filter m NN	Datum	³ H	δ ¹⁸ O- H ₂ O
Eln 1/96			13,8	27.11.96	12,6	-9,29
Tsi 1/96OP	122,4	122,20	mehrfach		9,0	-9,49
Eln 3/93OP			4,1	19.11.93	15,3	-9,92
Eln 3/93UP			16,2	19.11.93	6,4	-9,59
Eln 3/96MP	92,2	93,04	mehrfach		10,2	-9,30
Eln 4/93OP			14,3	18.11.96	15,2	-9,74
Eln 4/93MP			39	10.12.96	9,2	-9,26
Eln 4/93UP			61,3	18.11.96	8,0	-9,60
Eln 7/93OP			6,8	26.11.96	12,4	-9,74
Eln 7/93UP			14,9	26.11.96	17,0	-9,61
Eln 8/93OP	106,4	107,37	11,9	17.11.97	0,8	-9,17
Eln 8/93MP		107,33	74,5	17.11.97	1,2	-9,66
Eln 15/93OP	94,6	95,50	2,6	26.11.96	18,2	-9,61
Eln 15/93UP		95,70	35	26.11.96	0,2	-9,42
Eln 15/93UP				28.11.97	0,0	-9,12
Eln 21/95OP			3,6	27.11.96	11,9	-9,43
Eln 21/95UP			24,6	27.11.96	10,5	-9,45
Eln 513/90OP			7,9	23.10.96	12,6	-9,32
Eln 513/90UP			27,9	23.10.96	27,6	-9,70
Eln 514/90OP		104,15	15,9	04.10.91	26,0	n.b.
				19.11.96	14,7	-9,73
Eln 514/90UP		104,12	30,8	04.10.91	21,0	n.b.
				19.11.96	16,5	-9,80
Eln 515/90OP	97,8	98,32	5,9	26.11.96	18,3	-9,71
Pumpversuch				21.11.97	23,0	-9,45
Eln 515/90MP		98,22	17	26.11.96	25,4	-9,69
Pumpversuch				27.11.97	22,4	-9,37
Eln 515/90UP		98,24	26	26.11.96	26,8	-9,71
				18.11.97	24,5	-9,51
To 1/76OP			11	25.11.96	17,6	-9,56
To 2/76UP			48,2	07.04.92	14,0	n.b.
				25.11.96	21,7	-9,64
To 21/74UP	93,1	92,91	44,3	19.11.97	18,5	-9,28
To 24/74OP	91,7	92,61	5,3	18.11.97	12,7	-9,00
To 24/74UP		92,61	mehrfach	18.11.97	12,0	-9,33
To 25/74			8,5	18.11.96	19,4	-9,77
Spiz 102/90OP			6,7	25.11.96	18,6	-9,83
				13.03.00	13,7	
Spiz 102/90UP		116,19	39,7	01.10.91	1,6	n.b.
				25.11.96	6,5	-9,71
				13.03.00	6,6	
Eln3/95OP			4,5	27.11.96	18,2	-9,59
Eln3/95UP			17	27.11.96	12,2	-9,47
121/93OP			17,3	27.11.96	22,4	-10,05
121/93UP			30,5	27.11.96	19,8	-9,74
125/93			11	19.11.96	15,4	-9,69
127-2/93OP			13,5	25.11.96	5,9	-9,83
127-1/93UP			33,5	25.11.96	0,4	-9,65
129/93	97,8	98,71	10,3 bis 25,3	25.11.96	12,6	-9,23
				24.11.97	12,2	-9,15
130/97 9m	98,4	98,79	5 bis 29	17.11.97	10,3	-9,51
130/97 28m				17.11.97	10,4	-9,18
132/97UP	94,0	94,68	11 bis 22,5	24.11.97	13,0	-9,06
133/97 10m	96,3	96,78	8,8 bis 21	24.11.97	21,0	-9,53
133/97 19m				24.11.97	21,2	-9,58
70/69OP		123,84	21,0	04.10.91	12,0	n.b.
70/69UP		123,69	42,0	04.10.91	0,1	n.b.

Anhang XI: FCKW und SF₆-Messwerte von Grundwässern, Mockritz und Torgau-Ost

Messstelle	Datum	F 12 pmol/l	F 11 pmol/l	F 113 pmol/l	SF6 fmol/l
<i>Mockritz</i>					
Weinske an 516	21.11.00	3,60	7,10	0,70	3,3
To 501/95 OP	22.11.99	0,43	0,78	0,02	
To 501/95 MP	22.11.99	5,20	0,00	0,09	
To 502/95 OP	22.11.99	11,00	0,13	0,06	
To 502/95 OP	24.03.00	9,75	0,11	0,06	
To 502/95 MP	22.11.99	3,70	0,08	0,09	
To 502/95 MP	24.03.00	1,20	0,07	0,02	
To 502/95 UP	22.11.99	1,40	0,19	0,21	
To 502/95 UP	24.03.00	0,90	0,10	0,03	
To 505/95 OP	23.11.99	1,60	0,10	0,04	
To 505/95 OP	23.11.00	1,20	0,05	0,02	9,0
To 505/95 MP	23.11.99	2,70	0,14	0,10	
To 505/95 UP	23.11.99	0,21	0,10	0,07	
To 507/95 OP	29.11.99	0,83	0,02	0,02	
To 507/95 MP	29.11.99	0,55	0,02	0,02	
To 507/95 MP	24.11.00	0,47	0,02	0,01	14,0
To 511/96 OP	24.11.00	0,61	0,11	0,02	11,0
To 512/96 OP	23.11.00	0,24	0,02	0,01	6,7
To 513/96 OP	23.11.00	3,90	0,01	0,01	6,7
To 515/96 MP	21.11.00	2,80	0,28	0,20	4,3
To 516/96 MP	25.11.99	0,47	0,22	0,18	
To 516/96 MP	21.11.00	0,68	0,03	0,04	9,0
To 516/96 UP	25.11.99	0,26	0,52	0,75	
To 517/96 OP	27.03.00	2,50	2,80	0,27	
To 517/96 MP	27.03.00	0,04	0,02	0,00	
To 517/96 UP	27.03.00	0,04	0,02	0,00	
Eln 10/93 OP	22.11.99	9,10	0,46	0,17	
Eln 10/93 MP	22.11.99	4,00	0,09	0,01	
Eln 11/93 OP	22.11.99	0,27	0,16	0,04	
Eln 11/93 MP	22.11.99	0,10	0,04	0,09	
9499 OP	29.11.99	2,40	5,40	0,55	
9499 MP	29.11.99	2,20	5,40	0,29	
9499 UP	29.11.99	0,03	0,13	0,00	
9502 OP	29.11.99	1,40	2,60	0,18	
To 521/00 OP	09.04.01	0,14	0,13	-0,01	
To 521/00 UP	09.04.01	0,03	0,05	-0,01	
9507	19.06.01	1,40	0,03	0,02	4,1
9508	19.06.01	0,79	0,02	0,01	41,0
<i>Torgau-Ost</i>					
ToO 508/94 OP	20.11.00	1,60	2,20	0,21	5,2
ToO 514/94 OP	20.11.00	0,64	1,70	0,14	1,4
ToO 514/94 MP	20.11.00	0,30	0,70	0,06	1,2
ToO 514/94 UP	20.11.00	0,09	0,06	0,03	0,9
ToO 517/94 MP	20.11.00	2,50	0,10	0,03	2,0
ToO 506/91 MP (I6/3)	20.11.00	5,40	0,16	5,00	2,5
Rezentwert 1		3,1	7,0	0,7	ca. 2
Nachweisgrenze		0,05	0,05	0,05	

Anhang XII: Messwerte stabiler Isotope, temporäre Grundwassermessstellen Mockritz, Tiefenangaben beziehen sich auf Grundwasseroberfläche

Sondierung	Tiefe (m)	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$
TM-1	0	04.10.2000	-9,0	-65,5	7,6	9,5	4,7	5,7
TM-2	0	09.11.2000	-8,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	1,6	8,6
TM-3	0	14.03.2001	-8,8	<i>n.b.</i>	12,6	<i>n.b.</i>	-9,6	2,5
TM-4	0	14.03.2001	-9,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,8	2,7
TM-5	0	14.03.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,2	7,8
TM-6	0	14.03.2001	-6,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	0,2	13,8
TM-7	0	14.03.2001	-9,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-13,5	5,9
TM-8	0	14.03.2001	-8,8	<i>n.b.</i>	10,6	9,9	-1,4	9,4
TM-9	0	14.03.2001	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,2	2,4
TM-10	0	14.03.2001	-9,5	<i>n.b.</i>	11,4	9,0	0,6	8,1
TM-11	0	14.03.2001	-9,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-4,5	2,8
TM-12	0	14.03.2001	-8,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	3,4	11,8
TM-13	0	14.03.2001	-8,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-6,2	3,7
TM-14	0	14.03.2001	-7,7	<i>n.b.</i>	18,5	12,6	3,6	7,5
TM-15	0	14.03.2001	-9,2	<i>n.b.</i>	13,1	21,3	-7,4	3,5
TM-16	0	06.10.2000	-8,7	-62,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-4,4	6,3
	0	08.11.2000	-8,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-1,6	6,9
TM-18	0	06.10.2000	-8,9	-62,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,3	4,0
TM-19	0	08.11.2000	-8,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	4,3	5,3
TS1-3,5m	0	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,5	8,5
TS1-4,0m	0,5	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,5	9,9
TS1-4,5m	1	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,7	9,9
TS1-5,0m	1,5	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,5	11,3
TS1-5,5m	2	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,8	11,1
TS1-6,0m	2,5	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,3	11,7
TS1-6,5m	3	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,5	13,2
TS1-7,0m	3,5	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,3	14,0
TS1-7,4m	3,9	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	2,5	14,1
TS2-4,5m	0	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,8	3,0
TS2-5,0m	0,5	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-3,0	3,9
TS2-5,5m	1	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,7	3,8
TS2-6,0m	1,5	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,6	3,7
TS2-6,5m	2	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,5	4,4
TS2-7,0m	2,5	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,5	5,6
TS2-8,0	3,5	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,5	5,9
TS2-9,2m	4,7	02.08.2001	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-2,1	9,7

Anhang XIII: Messwerte Feldparameter, Nitrat- und Sulfatgehalte, temporäre Grundwassermessstellen Mockritz (chemische Analysen durch UFZ, ergänzt durch TUD)

ORT	DAT	pH-Wert	LF µS/cm	O ₂ mg/l	NO ₃ mg/l	SO ₄ mg/l
TM-1	04.10.2000	7,19	1906	4,2	253,8	453
TM-2	09.11.2000	<i>n.b.</i>	1035	<i>n.b.</i>	0,6	368
TM-3	14.03.2001	4,70	1826	<i>n.b.</i>	15,2	952
TM-4	14.03.2001	5,91	1526	<i>n.b.</i>	0,0	729
TM-5	14.03.2001	6,45	1680	<i>n.b.</i>	0,0	594
TM-6	14.03.2001	6,40	2130	<i>n.b.</i>	0,3	808
TM-7	14.03.2001	5,91	1256	<i>n.b.</i>	0,0	570
TM-8	14.03.2001	5,70	1406	<i>n.b.</i>	160,2	560
TM-9	14.03.2001	6,31	1061	<i>n.b.</i>	0,0	409
TM-10	14.03.2001	6,67	988	<i>n.b.</i>	20,9	262
TM-11	14.03.2001	6,91	994	<i>n.b.</i>	0,0	285
TM-12	14.03.2001	5,78	699	<i>n.b.</i>	0,0	228
TM-13	14.03.2001	5,93	1360	<i>n.b.</i>	0,0	784
TM-14	14.03.2001	5,29	882	<i>n.b.</i>	18,7	329
TM-15	14.03.2001	5,93	1360	<i>n.b.</i>	13,2	630
TM-16	06.10.2000	<i>n.b.</i>	2210	<i>n.b.</i>	5,2	907
	08.11.2000	<i>n.b.</i>	1530	<i>n.b.</i>	5,1	670
TM-18	06.10.2000	<i>n.b.</i>	1350	<i>n.b.</i>	0,0	517
TM-19	08.11.2000	<i>n.b.</i>	1155	<i>n.b.</i>	200,6	326
TS1-3,5m	02.08.2001	6,83	637	3,1	30,9	205
TS1-4,0m	02.08.2001	6,96	639	5,8	31,7	193
TS1-4,5m	02.08.2001	7,10	641	6,0	45,2	184
TS1-5,0m	02.08.2001	7,03	645	5,3	45,3	182
TS1-5,5m	02.08.2001	6,87	652	6,9	41,6	179
TS1-6,0m	02.08.2001	6,90	671	7,0	36,0	181
TS1-6,5m	02.08.2001	6,72	684	7,5	31,4	181
TS1-7,0m	02.08.2001	6,95	689	5,0	29,7	182
TS1-7,4m	02.08.2001	7,10	696	6,0	40,3	181
TS2-4,5m	02.08.2001	5,94	921	0,5	10,1	643
TS2-5,0m	02.08.2001	5,98	950	1,5	14,8	539
TS2-5,5m	02.08.2001	5,82	962	2,2	0,0	540
TS2-6,0m	02.08.2001	5,65	982	1,5	0,0	505
TS2-6,5m	02.08.2001	5,47	1037	1,5	0,0	482
TS2-7,0m	02.08.2001	5,07	1111	1,0	0,0	425
TS2-8,0	02.08.2001	4,45	1129	1,5	0,0	438
TS2-9,2m	02.08.2001	4,55	1318	0,6	0,0	426

Anhang XIV: Messwerte stabiler Isotope, Oberflächenwasser Mockritz

Messpunkt	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$
9511-Senke	05.10.2000	-2,8	-28,5	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
AEIbe507	29.11.1999	-4,1	-37,2	n.b.	n.b.	n.b.	17,9
OW(15)	17.04.2000	-6,0	-48,2	n.b.	n.b.	-7,9	n.b.
OW(18)	17.04.2000	-8,6	-60,1	n.b.	n.b.	4,5	n.b.
	19.06.2000	-8,8	-61,7	n.b.	n.b.	5,1	5,7
OW(20)	22.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,6
	17.04.2000	-8,5	-59,5	n.b.	n.b.	2,7	6,3
	19.06.2000	-4,7	-42,9	24,5	n.b.	4,8	6,2
OW(21)	22.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	6,7
	17.04.2000	-7,8	-56,6	n.b.	n.b.	2,0	6,9
	19.06.2000	-6,8	-51,1	n.b.	n.b.	2,3	6,8
OW(3)	22.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	6,0	5,3
	17.04.2000	-8,1	-57,3	n.b.	n.b.	5,8	5,3
OW(4)	22.03.2000	n.b.	n.b.	6,3	n.b.	5,7	4,8
	17.04.2000	-8,3	-55,5	n.b.	n.b.	5,5	n.b.
OW(5)	22.03.2000	n.b.	n.b.	6,2	n.b.	5,2	4,6
	17.04.2000	-8,2	-56,4	n.b.	n.b.	6,0	n.b.
OW(6)	22.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5,2	6,3
	17.04.2000	-8,4	-58,0	n.b.	n.b.	5,5	n.b.
OW(7)	22.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	2,7	6,1
	17.04.2000	-7,0	-47,7	n.b.	n.b.	-0,3	6,9
OW(8)	22.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	4,7	5,6
	17.04.2000	-8,6	-58,8	n.b.	n.b.	5,8	n.b.
OWGMB3	10.05.2000	-8,5	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
OWGMB4	10.05.2000	-8,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
OWSB2	10.05.2000	-8,9	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
OWSB3	10.05.2000	-8,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Teich509	24.11.1999	-6,3	-52,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Wein1093	02.02.2000	-8,4	n.b.	5,5	8,4	2,2	16,1
	17.02.2000	n.b.	n.b.	6,4	8,4	2,5	7,0
	01.03.2000	-8,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	20.03.2000	n.b.	n.b.	4,9	10,4	2,8	6,8
	17.04.2000	-8,3	n.b.	7,2	10,6	2,4	5,6
	04.05.2000	-8,5	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.05.2000	-8,4	n.b.	12,0	n.b.	1,3	n.b.
	19.06.2000	-8,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	6,7
	12.07.2000	-8,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	01.08.2000	-7,4	n.b.	n.b.	n.b.	3,6	7,9
	16.08.2000	-6,9	-53,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	08.09.2000	-8,0	-56,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	06.10.2000	-4,5	-42,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	Wein503	24.11.1999	-8,0	-58,7	3,8	16,3	2,2
02.02.2000		-8,3	n.b.	5,5	8,2	2,4	17,6
17.02.2000		n.b.	n.b.	6,7	8,2	2,3	6,5
01.03.2000		-8,7	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
14.03.2000		n.b.	n.b.	5,7	7,3	n.b.	n.b.
20.03.2000		n.b.	n.b.	5,6	9,9	2,8	6,2
17.04.2000		-8,1	n.b.	7,1	11,0	2,0	6,0
04.05.2000		-8,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
17.05.2000		-8,2	n.b.	12,3	n.b.	2,1	n.b.
19.06.2000		-8,1	n.b.	10,9	n.b.	n.b.	5,7
12.07.2000		-8,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
01.08.2000		-7,6	n.b.	23,3	n.b.	2,2	9,5
16.08.2000		-5,5	-49,8	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
08.09.2000		-7,8	-54,4	n.b.	n.b.	2,0	7,4
06.10.2000		-4,4	-38,9	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
08.11.2000		-6,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
23.11.2000		-8,6	n.b.	7,9	13,8	3,2	3,9
11.12.2000		-7,7	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
08.01.2001	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	
Wein514	23.11.1999	-7,1	-52,8	5,8	19,0	4,0	16,9
	02.02.2000	-8,2	n.b.	5,2	8,9	2,4	16,2
	17.02.2000	-8,4	n.b.	7,0	8,9	2,3	6,9
	20.03.2000	n.b.	n.b.	4,9	9,3	2,8	7,9
	17.04.2000	-8,3	n.b.	n.b.	n.b.	2,4	6,1
	04.05.2000	-8,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.05.2000	-8,2	n.b.	11,8	12,5	1,1	n.b.
	19.06.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	6,6
01.08.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3,6	7,5	

Messpunkt	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$
Wein515	25.11.1999	-7,9	-58,1	5,1	13,5	2,2	16,1
	02.02.2000	-8,5	n.b.	5,0	8,8	2,4	13,9
	17.02.2000	-8,3	n.b.	6,7	8,8	2,5	6,7
	01.03.2000	-8,8	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	20.03.2000	n.b.	n.b.	5,3	9,0	2,7	6,1
	17.04.2000	-8,2	n.b.	n.b.	n.b.	2,5	6,0
	04.05.2000	-8,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.05.2000	-8,6	n.b.	9,8	12,0	1,3	n.b.
	19.06.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	7,3
01.08.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	2,2	4,9	
Wein516	25.11.1999	-7,8	-58,5	3,1	19,6	2,2	12,9
	02.02.2000	-8,4	n.b.	5,1	7,2	2,4	15,5
	17.02.2000	-8,4	n.b.	6,8	7,2	2,6	7,8
	01.03.2000	-8,7	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	20.03.2000	n.b.	n.b.	5,1	9,2	2,7	5,8
	17.04.2000	-8,2	n.b.	n.b.	n.b.	2,3	5,8
	04.05.2000	-8,5	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.05.2000	-8,5	n.b.	9,6	9,8	n.b.	1,4
	05.06.2000	217,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
01.08.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	2,5	7,0	
Wein517	25.11.1999	-7,9	-58,5	3,3	13,1	2,2	15,7
	02.02.2000	-8,4	n.b.	5,6	9,1	2,3	13,6
	17.02.2000	-8,3	n.b.	6,4	9,1	2,3	7,0
	20.03.2000	n.b.	n.b.	4,9	8,1	2,8	6,7
	17.04.2000	-8,4	n.b.	7,3	12,0	2,5	5,8
	17.05.2000	-8,5	n.b.	9,9	12,3	2,1	n.b.
	19.06.2000	-8,9	n.b.	8,4	17,1	n.b.	8,2
	12.07.2000	-8,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	01.08.2000	-8,0	n.b.	11,1	n.b.	2,5	6,4
	16.08.2000	-6,6	-52,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	08.09.2000	-7,7	-56,5	n.b.	n.b.	2,0	6,9
	06.10.2000	-5,2	-43,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	08.11.2000	-6,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	23.11.2000	-7,6	n.b.	6,3	10,5	3,2	7,9
	08.12.2000	-8,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
08.01.2001	-8,8	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	
ZF1093	17.04.2000	-7,6	-54,0	n.b.	n.b.	6,6	1,8

**Anhang XV: Messwerte Feldparameter und Hauptionen Oberflächenwasser Mockritz
(chemische Analysen durch UFZ, ergänzt durch TUD)**

Messpunkt	Datum	pH-Wert	LF µS/cm	Ca mg/l	Mg mg/l	K mg/l	Na mg/l	Cl mg/l	NO ₃ mg/l	SO ₄ mg/l
9511-Senke	05.10.2000	n.b.	n.b.	200	44,3	15,3	46,9	145,1	5,1	388
AElbe507	29.11.1999	n.b.	n.b.	120	25,4	5,7	23,4	50,3	0,8	184
OW(18)	19.06.2000	6,98	724	95	12,0	8,0	26,4	34,6	31,4	178
OW(20)	19.06.2000	8,22	504	64	13,0	5,5	0,0	34,6	n.b.	99
OW(21)	19.06.2000	8,23	692	85	14,7	11,5	24,9	65,7	0,0	232
OW(3)	22.03.2000	n.b.	n.b.	117	11,8	17,0	12,4	29,5	67,6	87
OW(4)	22.03.2000	n.b.	n.b.	165	17,3	14,9	23,6	60,4	264,0	152
OW(5)	22.03.2000	n.b.	n.b.	194	25,6	11,6	25,3	66,1	287,0	191
OW(6)	22.03.2000	n.b.	n.b.	192	25,4	11,4	25,7	66,0	269,0	190
OW(7)	22.03.2000	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	113
OW(7)	22.03.2000	n.b.	n.b.	91	15,4	18,2	25,6	44,5	164,0	n.b.
OW(8)	22.03.2000	n.b.	n.b.	121	12,0	13,8	18,0	39,6	70,0	130
Teich509	24.11.1999	n.b.	n.b.	124	26,7	5,6	26,1	50,7	0,1	206
Wein1093	02.02.2000	7,07	692	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.02.2000	7,18	748	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	01.03.2000	7,20	712	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	20.03.2000	n.b.	n.b.	93	13,8	11,6	18,3	n.b.	n.b.	n.b.
	20.03.2000	n.b.	n.b.	93	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	45,1	n.b.
	20.03.2000	7,49	652	n.b.	13,8	11,6	18,3	34,2	n.b.	153
	05.04.2000	n.b.	n.b.	86	13,5	11,7	19,4	27,5	25,6	77
	17.04.2000	7,20	660	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.05.2000	n.b.	n.b.	99	14,7	10,9	21,2	61,7	11,1	245
	05.06.2000	n.b.	n.b.	171	38,8	16,3	37,2	80,2	15,7	389
	19.06.2000	7,20	767	95	15,3	11,2	27,9	71,0	15,2	247
	12.07.2000	6,49	700	113	19,9	7,0	34,2	59,2	8,1	240
	01.08.2000	n.b.	n.b.	95	20,9	12,9	38,2	57,6	0,2	234
	16.08.2000	6,99	770	103	17,9	14,7	38,9	64,8	0,0	214
	08.09.2000	6,60	628	87	11,2	13,2	25,8	57,7	6,4	172
	06.10.2000	6,91	724	100	14,8	13,5	25,3	60,1	5,1	213
	08.11.2000	7,61	836	102	15,2	13,2	26,5	48,9	12,9	222
Wein503	24.11.1999	7,60	760	128	15,0	16,5	30,5	63,3	17,0	200
	02.02.2000	7,84	691	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.02.2000	7,15	718	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	01.03.2000	7,25	709	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	14.03.2000	n.b.	n.b.	81	10,4	12,1	16,5	30,7	49,4	126
	20.03.2000	7,45	n.b.	n.b.	n.b.	11,2	n.b.	32,3	n.b.	n.b.
	20.03.2000	n.b.	n.b.	89	13,7	11,2	16,5	n.b.	46,6	n.b.
	20.03.2000	n.b.	665	89	13,7	n.b.	16,5	n.b.	n.b.	146
	05.04.2000	n.b.	n.b.	85	13,7	12,0	19,3	29,2	28,8	100
	17.04.2000	7,21	658	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.05.2000	n.b.	n.b.	95	14,1	12,3	22,4	57,0	10,4	224
	05.06.2000	n.b.	n.b.	118	32,1	14,2	27,1	55,8	10,6	230
	19.06.2000	7,15	772	89	13,8	11,8	24,6	67,5	10,1	238
	12.07.2000	6,50	753	101	13,9	1,6	22,9	56,6	8,3	239
	01.08.2000	n.b.	n.b.	99	15,0	12,0	22,0	66,5	0,3	233
	16.08.2000	7,10	1326	68	43,3	30,7	66,2	100,1	0,4	240
	08.09.2000	6,43	517	67	9,1	11,0	19,8	43,3	2,2	141
	06.10.2000	6,96	741	100	14,1	13,1	25,3	60,3	4,2	213
	08.11.2000	7,57	825	103	16,5	15,3	28,3	52,2	15,6	216
	23.11.2000	7,10	750	93	14,6	12,9	25,8	51,7	13,2	185
	11.12.2000	6,74	770	90	15,0	12,7	27,5	56,4	22,9	185
	08.01.2001	5,98	802	92	13,3	13,2	28,5	54,4	29,9	186
Wein514	23.11.1999	n.b.	n.b.	141	15,2	22,3	24,9	58,3	13,3	185
	02.02.2000	7,56	684	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.02.2000	7,17	716	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	01.03.2000	7,23	708	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	20.03.2000	n.b.	n.b.	94	13,6	10,7	15,8	n.b.	n.b.	n.b.
	20.03.2000	7,54	n.b.	94	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	147
	20.03.2000	n.b.	652	n.b.	13,6	10,7	15,8	31,1	47,3	n.b.
	05.04.2000	n.b.	n.b.	86	13,2	11,4	19,0	31,9	30,8	131
	17.05.2000	n.b.	n.b.	93	13,5	11,1	20,8	57,0	10,6	231
	05.06.2000	n.b.	n.b.	127	34,6	13,1	28,1	61,0	11,9	271
	19.06.2000	7,30	755	95	15,0	11,3	27,9	65,7	13,2	242
	12.07.2000	6,61	694	107	19,2	8,1	34,2	45,2	7,4	224
	01.08.2000	n.b.	n.b.	98	20,8	8,1	34,6	49,2	0,1	217
	16.08.2000	7,48	819	60	40,3	21,8	36,8	65,5	0,0	220
	08.09.2000	6,72	514	65	8,9	10,4	21,0	46,3	5,1	146

Messpunkt	Datum	pH-Wert	LF µS/cm	Ca mg/l	Mg mg/l	K mg/l	Na mg/l	Cl mg/l	NO ₃ mg/l	SO ₄ mg/l
	06.10.2000	6,97	742	100	14,8	13,9	25,9	60,3	3,2	216
	08.11.2000	7,63	823	104	19,5	15,3	28,2	49,9	14,5	219
Wein515	25.11.1999	7,37	845	146	15,5	14,6	29,7	61,6	18,5	204
	02.02.2000	7,35	703	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.02.2000	7,18	714	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	01.03.2000	7,22	701	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	20.03.2000	7,56	n.b.	94	13,6	10,6	15,9	31,7	n.b.	150
	20.03.2000	n.b.	649	94	13,6	10,6	15,9	n.b.	45,1	n.b.
	05.04.2000	n.b.	n.b.	85	13,6	11,8	19,5	31,2	28,7	117
	17.04.2000	7,25	661	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.05.2000	n.b.	n.b.	98	14,6	11,9	23,9	63,5	12,7	238
	05.06.2000	n.b.	n.b.	151	33,1	13,2	25,3	52,0	10,1	244
	19.06.2000	7,15	753	92	15,2	11,2	26,8	59,9	10,4	258
	12.07.2000	6,63	708	113	20,1	9,3	37,1	49,0	11,4	232
	01.08.2000	n.b.	n.b.	113	19,4	13,4	38,7	56,1	8,3	237
	16.08.2000	7,06	771	89	15,2	14,1	32,2	62,7	0,0	230
	08.11.2000	7,60	812	102	15,4	13,1	26,1	47,4	13,3	219
Wein516	25.11.1999	7,58	840	124	14,9	14,7	28,1	62,3	15,3	208
	02.02.2000	7,51	709	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.02.2000	7,17	713	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	01.03.2000	7,24	704	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	20.03.2000	7,60	n.b.	88	14,0	10,7	18,2	34,8	n.b.	155
	20.03.2000	n.b.	687	88	14,0	10,7	18,2	n.b.	45,0	n.b.
	17.04.2000	7,26	680	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.05.2000	n.b.	n.b.	97	14,3	11,7	22,0	60,6	16,1	238
	05.06.2000	n.b.	n.b.	146	32,9	12,4	23,0	45,9	9,0	n.b.
	19.06.2000	7,37	751	97	15,6	11,0	28,9	55,6	7,7	229
	12.07.2000	6,66	728	114	19,6	13,7	40,2	56,3	15,4	238
	01.08.2000	n.b.	n.b.	112	19,3	11,3	35,7	55,5	12,3	230
	16.08.2000	7,13	749	99	16,1	11,7	35,4	60,8	2,3	218
	08.09.2000	6,85	627	75	11,4	11,4	25,2	56,8	10,5	161
	06.10.2000	7,00	723	99	14,2	12,7	23,9	56,4	7,6	209
	08.11.2000	7,38	858	108	15,9	45,2	28,6	80,3	12,0	218
	23.11.2000	7,08	737	92	13,8	13,6	26,0	49,1	13,2	185
Wein517	25.11.1999	7,30	836	130	14,8	14,5	28,1	63,8	15,4	208
	02.02.2000	7,43	713	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.02.2000	7,12	713	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	01.03.2000	7,22	707	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	20.03.2000	7,45	n.b.	86	13,7	10,8	16,0	32,5	n.b.	152
	20.03.2000	n.b.	663	86	13,7	10,8	16,0	n.b.	45,3	n.b.
	17.04.2000	7,23	694	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	17.05.2000	n.b.	n.b.	98	14,2	10,6	21,7	66,5	17,4	248
	05.06.2000	n.b.	n.b.	131	34,4	14,7	29,1	60,5	11,5	285
	19.06.2000	7,67	749	94	15,0	10,5	28,0	55,5	7,4	228
	12.07.2000	6,72	707	112	19,9	11,0	33,9	51,0	13,1	241
	01.08.2000	n.b.	n.b.	117	19,6	12,1	38,6	59,5	13,9	234
	16.08.2000	7,22	740	97	16,9	13,1	34,6	58,9	2,8	212
	08.09.2000	7,13	620	78	11,4	10,7	23,6	55,2	6,8	166
	06.10.2000	7,04	724	99	14,2	12,3	24,2	56,2	3,8	210
	08.11.2000	7,46	830	104	15,5	13,6	27,8	51,4	12,2	221
	23.11.2000	7,01	760	95	14,7	14,5	26,9	54,1	14,0	186
	08.12.2000	6,80	808	90	13,8	14,0	30,9	62,7	20,4	195
	08.01.2001	7,32	782	102	14,5	11,6	24,9	49,4	28,2	193

Anhang XVI: Sulfatgehalte und $\delta^{34}\text{S}$ -Werte Lysimeterproben Falkenberg

Lysimeter-Nr	PN-Datum	SO ₄ mg/l	$\delta^{34}\text{S}$ -SO ₄	Lysimeter-Nr	PN-Datum	SO ₄ mg/l	$\delta^{34}\text{S}$ -SO ₄
20	Mrz. 00	43	5,7	78	Mrz. 00	103	8,1
37	Mrz. 00	43	6,1	79	Mrz. 00	319	8,8
	Feb. 01	219	6,5	80	Mrz. 00	249	8,8
	Mrz. 01	240	6,8	81	Mrz. 00	248	8,8
	Apr. 01	254	6,4	82	Mrz. 00	31	8,6
	Dez. 01	940	6,3	83	Mrz. 00	23	8,2
	Jan. 02	623	6,2	84	Mrz. 00	18	8,4
	Feb. 02	579	6,3	85	Mrz. 00	75	7,2
	Mrz. 02	377	6,2	86	Mrz. 00	66	7,6
40	Apr. 02	379	6,1	87	Mrz. 00	73	7,7
	Mrz. 00	63	6,1	88	Mrz. 00	31	6,0
	Feb. 01	206	8,1	89	Mrz. 00	40	6,7
	Mrz. 01	214	8,1	90	Mrz. 00	53	7,2
	Apr. 01	231	8,4	91	Mrz. 00	222	7,0
	Mai. 01	175	8,2	92	Mrz. 00	296	7,0
	Jun. 01	774	2,9	93	Mrz. 00	474	7,4
	Dez. 01	668	8,4	95	Jan. 00	40	7,0
Jan. 02	415	8,0	Mrz. 00		53	7,3	
Feb. 02	428	9,1	Sep. 00		91	7,5	
Mrz. 02	384	8,8	Dez. 00		80	8,2	
45	Mrz. 00	58	6,4		Jan. 01	71	8,4
	Feb. 01	133	5,9		Feb. 01	54	7,9
	Mrz. 01	294	6,3		Mrz. 01	80	8,8
	Apr. 01	128	5,6		Apr. 01	92	8,9
	Mai. 01	290	6,9	Mai. 01	82	9,4	
	Jun. 01	1171	2,0	Jun. 01	593	2,6	
	Nov. 01	734	6,2	Sep. 01	131	9,3	
	Dez. 01	717	6,2	Okt. 01	133	9,9	
	Jan. 02	445	6,8	Nov. 01	130	10,0	
	Feb. 02	402	6,6	Dez. 01	145	6,1	
	Mrz. 02	309	6,2	Jan. 02	155	9,7	
	Apr. 02	228	6,1	Feb. 02	189	10,4	
48	Mrz. 00	84	3,6	Mrz. 02	163	10,0	
	Feb. 01	221	8,4	Apr. 02	148	10,0	
	Mrz. 01	271	8,4	97	Jan. 00	91	7,5
	Apr. 01	238	8,3		Mrz. 00	85	7,3
Mai. 01	242	8,5	Dez. 00		68	7,8	
53	Mrz. 00	52	6,4		Jan. 01	66	8,1
	Feb. 01	95	7,0	Feb. 01	77	8,3	
	Mrz. 01	114	6,8	Mrz. 01	101	9,0	
	Apr. 01	109	6,8	Apr. 01	85	8,5	
	Mai. 01	117	6,7	Mai. 01	263	6,4	
	Jan. 02	208	6,9	Mai. 01	86	9,1	
	Feb. 02	183	7,2	Sep. 01	106	8,9	
	Mrz. 02	115	6,9	Okt. 01	124	9,8	
54	Apr. 02	101	6,6	Nov. 01	139	9,9	
	Jan. 00	112	6,5	Dez. 01	145	10,6	
	Feb. 01	87	7,1	Jan. 02	133	10,4	
	Mrz. 01	114	6,6	Feb. 02	101	10,0	
	Apr. 01	107	6,9	Mrz. 02	112	10,0	
	Mai. 01	93	6,8	Apr. 02	129	9,9	
	Jan. 02	212	6,5	100	Mrz. 00	38	4,8
	Feb. 02	182	7,1		Feb. 01	121	6,6
Mrz. 02	143	6,8	Mrz. 01		182	7,2	
Apr. 02	122	7,0	Apr. 01		137	7,0	
70	Mrz. 00	73	7,1	Mai. 01	140	7,2	
71	Mrz. 00	42	8,2	Jun. 01	130	7,3	
	Jan. 01	60	8,3	Dez. 01	502	8,3	
	Feb. 01	47	8,1	Jan. 02	260	7,5	
	Mrz. 01	49	8,3	Feb. 02	198	7,9	
	Apr. 01	45	8,1	Mrz. 02	135	8,8	
	Mai. 01	47	8,3	Apr. 02	104	8,3	
	Sep. 01	51	8,0	101	Mrz. 00	62	5,3
	Okt. 01	50	8,8		Feb. 01	216	7,0
	Nov. 01	47	8,1		Mrz. 01	127	7,3
	Dez. 01	45	8,1		Apr. 01	141	7,1
	Jan. 02	51	7,9		Mai. 01	141	7,3
	Feb. 02	42	8,6		Jun. 01	395	3,4
Mrz. 02	46	8,1	Dez. 01		359	7,6	

Lysimeter-Nr	PN-Datum	SO ₄ mg/l	δ ³⁴ S-SO ₄	Lysimeter-Nr	PN-Datum	SO ₄ mg/l	δ ³⁴ S-SO ₄
71	Apr. 02	42	7,6	101	Jan. 02	260	8,6
72	Mrz. 00	43	7,8		Feb. 02	245	8,8
73	Mrz. 00	98	7,9		Mrz. 02	184	8,6
74	Mrz. 00	75	8,5		Apr. 02	153	8,8
75	Mrz. 00	79	8,2	104	Mrz. 00	39	4,0
76	Mrz. 00	116	8,1	105	Mrz. 00	54	4,1
77	Mrz. 00	106	8,4	107	Mrz. 00	35	4,8

**Anhang XVII: Messwerte stabiler Isotope, Boden- und Sedimentproben Mockritz
(Tiefenangaben beziehen sich auf die Geländeoberkante)**

Sondierung	Tiefe m	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$	$\delta^{34}\text{S-FeS}_2$	$\delta^{34}\text{S-FeS}$	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$
S-1	0,5	3,7	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,5	5,0	5,5	n.b.	n.b.	-8,3	-64,7
	2,5	5,0	n.b.	n.b.	n.b.	-8,5	-65,8
	3,5	-6,8	5,3	n.b.	n.b.	-8,3	-63,1
	4,5	-13,8	3,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
S-2	5,5	-13,0	4,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	0,5	3,6	n.b.	n.b.	n.b.	-6,0	-51,4
S-4	0,9	5,0	5,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	0,2	1,2	4,8	n.b.	n.b.	-6,8	-56,0
S-4	0,3	-1,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	0,8	-2,3	3,7	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,5	-9,1	-0,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	2,5	-23,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
S-5	1,2	2,6	n.b.	n.b.	n.b.	-9,2	-66,9
	2,4	-2,9	4,6	n.b.	n.b.	-8,5	-63,1
	2,9	4,2	6,7	n.b.	n.b.	-8,2	-61,7
S-6	0,2	3,7	5,6	-6,5	n.b.	-8,6	-64,0
	0,8	2,8	8,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,4	2,8	4,4	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,8	4,0	6,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	2,7	2,0	6,0	-13,5	n.b.	n.b.	n.b.
	3,3	-1,8	4,2	-15,9	n.b.	n.b.	n.b.
	3,7	-8,3	3,3	-12,1	n.b.	n.b.	n.b.
	4,7	-5,7	3,2	-11,4	n.b.	n.b.	n.b.
	5,5	-7,6	3,2	-24,0	n.b.	n.b.	n.b.
S-6B	1,2	3,2	3,7	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,5	1,9	4,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,9	0,8	4,8	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	2,8	-0,8	3,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	3,4	0,6	6,2	-8,4	-3,7	n.b.	n.b.
	3,7	-4,4	3,4	-9,1	n.b.	n.b.	n.b.
	3,9	-5,8	4,3	-6,3	n.b.	n.b.	n.b.
	4,8	-3,0	5,5	-14,3	n.b.	n.b.	n.b.
S-7	0,4	3,1	3,8	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	0,9	4,5	4,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,4	5,6	7,9	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,9	4,2	6,6	-17,3	n.b.	n.b.	n.b.
	2,5	0,6	4,9	-14,6	n.b.	n.b.	n.b.
	3,4	-4,4	3,9	-15,0	n.b.	n.b.	n.b.
	3,9	-5,9	2,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
S-8	0,2	3,7	n.b.	n.b.	n.b.	-6,1	-47,2
	0,6	1,2	4,6	n.b.	n.b.	-7,3	-58,4
	1,5	3,4	3,3	n.b.	n.b.	-7,8	-61,3
	2,5	4,0	8,0	n.b.	n.b.	-8,3	-61,1
	3,5	-6,7	7,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
S-9	0,9	2,5	4,8	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,4	3,3	1,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,9	3,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	2,7	2,5	5,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	3,7	1,2	4,2	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	4,7	-5,8	2,9	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
S-10	6,3	-11,0	2,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	0,8	2,2	3,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,7	2,6	9,8	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	2,8	-2,2	6,7	-12,4	n.b.	n.b.	n.b.
	3,3	6,7	2,4	-7,8	-3,1	n.b.	n.b.
	3,8	7,3	4,6	-5,2	-3,2	n.b.	n.b.
	4,2	0,3	1,7	-5,8	-0,9	n.b.	n.b.
S-11	4,7	-6,4	1,8	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,5	-4,6	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
S-12	2,5	-7,3	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,8	-8,1	n.b.	-5,5	n.b.	n.b.	n.b.
S-12	2,5	-9,0	n.b.	-15,5	n.b.	n.b.	n.b.
	3,5	-9,4	n.b.	-12,2	n.b.	n.b.	n.b.
	4,5	-19,9	n.b.	-38,4	n.b.	n.b.	n.b.
S-13	0,5	3,0	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	1,5	3,1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
	2,5	-3,2	n.b.	-21,4	n.b.	n.b.	n.b.

Sondierung	Tiefe m	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$	$\delta^{34}\text{S-FeS}_2$	$\delta^{34}\text{S-FeS}$	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$
	3,5	-16,3	<i>n.b.</i>	-27,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	4,5	-14,4	<i>n.b.</i>	-38,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-14	0,9	-3,7	<i>n.b.</i>	-29,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	1,5	-2,6	<i>n.b.</i>	-32,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,3	-11,4	<i>n.b.</i>	-30,7	-40,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	3,3	-6,2	<i>n.b.</i>	-40,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	4,3	-5,7	<i>n.b.</i>	-33,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	4,8	-24,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-15	1,5	-4,9	<i>n.b.</i>	-20,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,5	-30,1	<i>n.b.</i>	-36,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-16	1,5	3,5	4,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,5	4,7	2,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	3,5	4,9	6,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	4,5	0,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	5,5	-1,1	4,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-17	0,5	-0,1	3,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	1,5	-1,0	9,4	-16,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,3	0,6	6,3	-8,0	-4,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,8	0,0	6,1	-9,9	-2,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	3,3	5,9	4,9	-5,6	-1,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	3,8	1,5	6,1	-5,2	-1,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	4,5	-0,1	6,7	-7,4	-1,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	5,5	-5,9	4,5	-17,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	6,5	-16,5	2,4	-31,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	7,5	-8,2	5,2	-31,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-18	1,5	-33,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,5	-4,5	<i>n.b.</i>	-13,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-19	1,5	-5,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,5	-3,0	<i>n.b.</i>	-25,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	3,5	-7,1	<i>n.b.</i>	-24,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	4,5	-17,9	<i>n.b.</i>	-18,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-20	1,5	-23,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,5	-16,1	<i>n.b.</i>	-17,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-22	5,5	-21,9	<i>n.b.</i>	-26,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	6,5	-14,3	<i>n.b.</i>	-34,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-9503	0,3	6,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	0,9	4,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	1,8	4,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	3,1	4,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	3,9	4,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	4,6	5,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	5,5	2,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	6,5	3,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	8,2	4,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	9,0	-18,4	<i>n.b.</i>	-19,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	10,5	-25,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	11,7	-27,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	12,7	4,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	13,6	-9,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	14,6	0,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	15,5	-2,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	15,9	-12,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	17,2	-17,6	<i>n.b.</i>	-37,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	19,0	-32,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	19,7	-34,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
20,5	-37,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
21,5	1,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
23,5	-20,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
S-9504	0,5	5,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	1,5	5,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,3	5,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,8	4,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	3,1	-20,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	3,7	-5,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	4,5	2,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	5,5	3,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	6,5	3,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	7,5	-41,7	<i>n.b.</i>	-47,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	8,5	-32,4	<i>n.b.</i>	-30,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	9,5	-27,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	10,5	-23,1	<i>n.b.</i>	-23,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
11,5	-24,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	

Sondierung	Tiefe m	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{18}\text{O-SO}_4$	$\delta^{34}\text{S-FeS}_2$	$\delta^{34}\text{S-FeS}$	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$
	12,5	-15,6	<i>n.b.</i>	-26,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	13,5	-19,8	<i>n.b.</i>	-27,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-9504	14,5	1,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	15,5	-21,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	16,5	-10,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	17,5	-25,0	<i>n.b.</i>	-24,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	18,5	-19,1	<i>n.b.</i>	-25,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	19,5	-19,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	20,5	-7,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	21,5	-7,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	23,5	-7,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	24,5	-0,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	25,5	-0,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	26,5	-8,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	27,5	2,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	28,5	-6,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	30,5	-4,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	33,5	-3,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-12,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
37,5	17,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-22,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
39,0	13,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-27,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-9507	0,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,2	<i>n.b.</i>
	0,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,7	<i>n.b.</i>
	2,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,1	<i>n.b.</i>
	3,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,7	<i>n.b.</i>
	4,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,8	<i>n.b.</i>
S-9509	5,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,9	<i>n.b.</i>
	0,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,3	<i>n.b.</i>
	0,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,6	<i>n.b.</i>
	1,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,7	<i>n.b.</i>
S-9510	2,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,9	<i>n.b.</i>
	0,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-7,9	<i>n.b.</i>
	0,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,3	<i>n.b.</i>
	2,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,8	<i>n.b.</i>
S-9512	3,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,4	<i>n.b.</i>
	0,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,7	<i>n.b.</i>
	0,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-10,2	<i>n.b.</i>
	1,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-10,1	<i>n.b.</i>
	2,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,4	<i>n.b.</i>
S-9514	3,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,6	<i>n.b.</i>
	4,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,6	<i>n.b.</i>
	1,0	-0,2	3,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	1,9	2,7	6,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,6	3,0	6,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
S-HyZ	3,3	2,9	7,7	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	3,8	3,1	10,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	0,4	3,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	1,3	4,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	1,9	4,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,4	4,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
	2,9	4,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
3,4	-13,8	<i>n.b.</i>	-23,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	
4,4	-11,1	<i>n.b.</i>	-28,8	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	

**Anhang XVIII: Messwerte stabiler Isotope und von Tritium in Grund- und Oberflächenwässern
Bramstedt**

Messstelle	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	^3H	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{13}\text{C-DIC}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$
AB 2	07.04.2000	-7,8	-52,6	n.b.	-7,2	n.b.	n.b.	n.b.
AB 3	17.04.2000	-7,9	-52,1	n.b.	-4,0	n.b.	n.b.	n.b.
AB 7	14.04.2000	-7,5	-51,2	n.b.	4,0	n.b.	n.b.	n.b.
Drepte	12.04.2000	-7,5	-48,4	n.b.	-2,3	n.b.	n.b.	n.b.
G1	10.04.2000	-7,7	-51,3	n.b.	2,4	n.b.	n.b.	n.b.
G2	11.04.2000	-7,8	-52,3	20,3	-13,5	-19,6	n.b.	n.b.
G4	11.04.2000	-7,6	-51,3	9,8	0,0	-18,3	5,3	n.b.
G5	11.04.2000	-7,6	-51,2	17,7	-7,0	-10,5	n.b.	n.b.
Gackau	12.04.2000	-7,3	-49,0	6,2	-2,2	n.b.	n.b.	n.b.
HB 10	20.04.2000	-7,8	-52,5	n.b.	-10,5	n.b.	n.b.	n.b.
HB 13	19.04.2000	-7,7	-51,8	3,3	-10,2	-15,4	n.b.	n.b.
	18.04.2001	-7,7	n.b.	n.b.	-9,8	n.b.	n.b.	n.b.
HB 2	19.04.2000	-7,8	-51,4	n.b.	-1,8	n.b.	n.b.	n.b.
HB 3	20.04.2000	-7,8	-52,3	n.b.	-3,0	n.b.	n.b.	n.b.
HB 4	20.04.2000	-7,7	-50,8	n.b.	-4,4	n.b.	n.b.	n.b.
HB 5	19.04.2000	-8,1	-53,0	n.b.	-9,6	n.b.	n.b.	n.b.
HB 6	26.04.2000	-7,6	-50,8	4,9	-5,2	-13,3	n.b.	n.b.
HB 7	19.04.2000	-7,7	-50,4	n.b.	-7,2	n.b.	n.b.	n.b.
HB 9	26.04.2000	-7,9	-53,1	6,3	-9,0	-12,6	n.b.	n.b.
Hy 103	12.04.2000	-7,6	-50,9	0,0	-8,1	n.b.	n.b.	n.b.
Hy 99	12.04.2000	-7,8	-51,9	1,1	-3,8	n.b.	n.b.	n.b.
PB 10	25.04.2000	-8,0	-52,7	n.b.	-5,4	n.b.	n.b.	n.b.
PB 11	10.04.2000	-7,7	-53,0	n.b.	-6,5	n.b.	n.b.	n.b.
PB 13	14.04.2000	-7,4	-52,5	n.b.	1,8	n.b.	n.b.	n.b.
PB 15	10.04.2000	-7,7	-50,3	n.b.	-9,0	n.b.	n.b.	n.b.
PB 18	27.04.2000	-7,9	-53,4	n.b.	1,8	n.b.	n.b.	n.b.
PB 19	27.04.2000	-7,8	-52,8	n.b.	0,5	n.b.	n.b.	n.b.
PB 22	17.04.2000	-7,6	-51,7	n.b.	-9,2	n.b.	n.b.	n.b.
PB 23	20.04.2000	-7,9	-52,8	0,2	-15,0	-15,1	n.b.	n.b.
PB 26a	11.04.2000	-6,8	-45,4	10,0	5,1	-20,8	3,4	n.b.
PB 34	11.04.2000	-7,7	-51,3	n.b.	4,0	n.b.	2,9	n.b.
PB 4	13.04.2000	-8,1	-55,3	n.b.	-3,9	n.b.	n.b.	n.b.
PB 40	17.04.2000	-7,6	-49,9	9,7	2,2	-24,9	n.b.	n.b.
PB 41	10.04.2000	-7,6	-52,5	n.b.	-1,4	n.b.	n.b.	n.b.
PB 42	13.04.2000	-7,8	-51,7	n.b.	4,2	n.b.	3,8	n.b.
	18.04.2001	-7,8	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	6,2	3,6
PB 43	13.04.2000	-7,9	-53,5	n.b.	-7,3	n.b.	n.b.	n.b.
PB 44	13.04.2000	-7,2	-46,3	n.b.	2,0	n.b.	n.b.	n.b.
PB 45	13.04.2000	-7,4	-48,7	n.b.	-10,9	n.b.	n.b.	n.b.
PB 47	14.04.2000	-8,1	-56,4	n.b.	-13,1	n.b.	n.b.	n.b.
PB 49	14.04.2000	-7,6	-53,3	n.b.	47,1	n.b.	n.b.	n.b.
PB 51	19.04.2000	-7,7	-51,0	n.b.	-7,7	n.b.	n.b.	n.b.
PB 53	11.04.2000	-7,5	-48,1	n.b.	4,4	n.b.	2,8	n.b.
PB 54	12.04.2000	-7,6	-50,7	8,7	1,9	n.b.	2,1	n.b.
PB 55	07.04.2000	-7,8	-52,3	n.b.	0,4	n.b.	n.b.	n.b.
PB 56	11.04.2000	-7,6	-51,5	9,3	3,8	-20,6	4,7	n.b.
	18.04.2001	-7,5	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	7,6	2,9
PB 57	19.04.2000	-7,8	-50,7	n.b.	-4,3	n.b.	n.b.	n.b.
PB 58	11.04.2000	-7,2	-48,4	8,9	3,5	-23,0	7,2	n.b.
	18.04.2001	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-22,0	n.b.	n.b.
PB 59	11.04.2000	-7,2	-50,3	n.b.	-2,4	n.b.	n.b.	n.b.
PB 5a	12.04.2000	-7,5	-49,1	n.b.	1,7	n.b.	n.b.	n.b.
PB 60	17.04.2000	-7,7	-50,1	8,8	-8,4	-17,6	n.b.	n.b.
PB 61	17.04.2000	-7,1	-49,9	10,2	3,5	-23,0	n.b.	n.b.
PB 62	06.04.2000	-7,8	-51,7	n.b.	-9,4	n.b.	n.b.	n.b.
PB 63	06.04.2000	-7,4	-49,9	n.b.	3,3	n.b.	-0,9	n.b.
PB 65	06.04.2000	-8,1	-52,5	n.b.	-2,1	n.b.	n.b.	n.b.
PB 66	06.04.2000	-8,0	-55,0	n.b.	0,4	n.b.	n.b.	n.b.
PB 67	07.04.2000	-7,8	-52,2	n.b.	-0,5	n.b.	n.b.	n.b.
PB 68	07.04.2000	-7,9	-51,9	n.b.	-9,7	-21,9	12,0	n.b.
PB 69	05.04.2000	-7,2	-48,7	n.b.	15,0	n.b.	n.b.	n.b.
PB 70	05.04.2000	-7,6	-51,2	n.b.	-2,2	n.b.	n.b.	n.b.
PB 71	05.04.2000	-8,0	-52,7	n.b.	-4,4	n.b.	n.b.	n.b.
PB 72	04.04.2000	-7,6	-51,7	0,2	-4,5	n.b.	n.b.	n.b.
PB 73	04.04.2000	-7,7	-52,6	10,2	-7,0	n.b.	13,9	n.b.
PB 74	04.04.2000	-7,9	-52,4	2,5	-11,4	n.b.	n.b.	n.b.
PB 75	04.04.2000	-7,7	-52,2	15,7	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.

Messstelle	Datum	$\delta^{18}\text{O-H}_2\text{O}$	$\delta\text{D-H}_2\text{O}$	^3H	$\delta^{34}\text{S-SO}_4$	$\delta^{13}\text{C-DIC}$	$\delta^{15}\text{N-NO}_3$	$\delta^{18}\text{O-NO}_3$
PB 76	06.04.2000	-7,5	-49,5	<i>n.b.</i>	-3,5	<i>n.b.</i>	4,5	<i>n.b.</i>
PB 78	12.04.2000	-7,5	-49,9	2,5	-7,2	-18,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
PB 79	04.04.2000	-7,8	-51,6	44,2	2,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
PB 80	18.04.2000	-7,7	-50,0	21,0	-10,8	-18,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
PB 81	20.04.2000	-7,6	-51,9	18,2	3,8	-23,2	5,8	<i>n.b.</i>
PB 82	18.04.2000	-7,6	-51,0	0,2	-10,8	-18,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
PB 83	12.04.2000	-7,9	-49,4	<i>n.b.</i>	0,5	<i>n.b.</i>	4,6	<i>n.b.</i>
PB 84	07.04.2000	-8,0	-52,3	<i>n.b.</i>	-6,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
PB 85	05.04.2000	-7,9	-51,4	16,5	-4,5	<i>n.b.</i>	2,9	<i>n.b.</i>
PB 86	26.04.2000	-7,7	-49,1	<i>n.b.</i>	4,4	<i>n.b.</i>	4,3	<i>n.b.</i>
PB 87	11.04.2000	-7,7	-51,7	8,5	3,9	<i>n.b.</i>	5,7	<i>n.b.</i>
	18.04.2001	-7,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	7,3	6,4
PB 89-F1	18.04.2001	-8,0	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-9,3	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
PB 89-F2	18.04.2001	-7,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-8,2	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
PB 90-F1	18.04.2001	-7,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-10,4	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
PB 90-F2	18.04.2001	-7,6	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	-7,5	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
Schm. Grube	25.04.2000	-4,7	-35,2	<i>n.b.</i>	3,1	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>
Schöne Tränke	25.04.2000	-7,4	-48,2	9,9	3,9	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>	<i>n.b.</i>