Industrielle Beeinflussung des tiefen Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz, Sachsen-Anhalt

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades:

doctor rerum naturalium

(Dr. rer. nat.)

vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
(mathematisch-naturwissenschaftlicher Bereich)
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

von

Diplom-Geologe

Kay Rehberg

geb. am: 18.11.1970 in: Halle (Saale)

Gutachter:

1. Prof. Dr. W. Gläßer, UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH
2. Prof. Dr. P. Wycisk, Martin-Luther-Universität Halle/Wittenberg
3. Prof. Dr. M. Sauter, Friedrich-Schiller-Universität Jena

Halle (Saale), den 31.01.2003

INHALT

1 Einleitung ... 1
1.1 Die Region Zeitz ... 1
1.2 Problemstellung ... 2
1.2.1 Phenole und Schwelwasser-Tiefenversenkung ... 4
1.2.2 Sulfat und Grundwasserabsenkung ... 5
2 Zielstellungen ... 5
2.1 Auswirkungen der Schwelwasser-Tiefenversenkung ... 5
2.2 Auswirkungen der Grundwasserabsenkung ... 6
3 Geologie und Hydrogeologie der Region Zeitz ... 7
3.1 Geologischer Rahmen ... 7
3.2 Zechstein ... 10
3.2.1 Werra-Folge Z1 ... 10
3.2.2 Staßfurt-Folge Z2 ... 10
3.2.3 Leine-Folge Z3 ... 10
3.2.4 Obere Letten ... 11
3.2.5 Bröckelschiefer-Folge ... 11
3.3 Unterer Buntsandstein ... 11
3.4 Permotriassische Tektonik und Lagerungsverhältnisse ... 11
3.5 Tertiär und Quartär ... 12
3.5.1 Paläozän – Unteres Eozän ... 12
3.5.2 Mittleres Eozän (Bornaer Folge A, GWL 6) ... 12
3.5.3 Oberes Eozän (Bornaer Folge B, GWL 5) ... 12
3.5.4 Oligozän (Bornaer Folge C, Böhlener Schichten) ... 13
3.5.5 Quartär ... 13
3.6 Hydrogeologie ... 14
3.6.1 Grundwasserleiter Plattendolomit/Riff (GWL II) ... 14
3.6.2 Grundwasserleiter Lockergestein ... 15
4 Material und Methoden ... 21
4.1 Bohrungen und Grundwassermessstellen ... 21
4.1.1 Neubohrungen Profen, Deuben/Trebnitz ... 21
4.1.2 Bohrungen, Brunnen und Grundwassermessstellen fremder Rechtsträger ... 21
4.2 Geophysikalische Bohrlochmessungen ... 21
4.3 Probenahme ... 23
4.3.1 Grundwasser ... 23
4.3.2 Lockersedimente ... 23
4.3.3 Sedimentgesteine aus Bohrungen ... 23
4.4 Grundwasseranalytik ... 23
4.4.1 Haupt- und Spurenelemente ... 23
4.4.2 Phenolanalytik ... 23
4.5 Isotopenuntersuchungen ... 25
4.5.1 Schwefel-34 ... 26
4.5.2 Sauerstoff-18 ($\delta\ ^{18}O\text{-}SO_4$) ... 27
4.5.3 Kohlenstoff-13 ($\delta^{13}C$-DIC) ... 27
5 Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole ... 29
5.1 Kenntnisstand ... 29
5.1.1 Bisherige Arbeiten ... 29
5.1.2 Phenole im Grundwasser ... 29
5.2 Historie der Tiefenversenkung von Schwelereiabwässern ... 31
5.2.1 Standort Deuben/Trebnitz ... 32

5.2.2 Standort Profen ... 34
5.3 Charakteristik schwelwassertypischer Phenole ... 34
5.3.1 Vorkommen, Eigenschaften, Toxizität ... 34
5.3.2 Richt- und Grenzwerte ... 36
5.4 Der geologische Untergrund der Versenkungsstandorte ... 37
5.4.1 Standort Profen ... 37
5.4.2 Standort Deuben/Trebnitz ... 46
5.5 Konzentration und Verteilung der Phenole in den Gesteinen des Zechsteins ... 53
5.5.1 Phenole im Profener Zechstein-Riff ... 53
5.5.2 Phenole im Plattendolomit von Deuben/Trebnitz ... 60
5.6 Schwelwassertypische Kontaminationen des Grundwassers ... 66
5.6.1 Phenole im Grundwasser des Zechstein-Riffs Profen ... 66
5.6.2 Phenole im Grundwasser des Plattendolomits von Deuben/Trebnitz ... 68
5.7 Natural Attenuation von Phenolen ... 71
5.7.1 Hydrochemische Bedingungen im Aquifer ... 71
5.7.2 Reaktionswege des mikrobiellen Abbaus von Phenolen ... 73
5.7.3 Phenolabbau durch sulfatreduzierende Bakterien ... 75
5.7.4 Phenolabbau durch methanogene Bakterien ... 76
5.8 Sorption von Phenolen ... 77
5.8.1 Sorption an natürlicher organischer Substanz ... 77
5.8.2 Sorption an polaren Mineraloberflächen ... 81
5.8.3 Sorption an Tonmineralen ... 82
5.9 Schlussfolgerungen ... 83
6 Grundwasserabsenkung vs. Sulfat und Phenole im Grundwasser ... 87
6.1 Bisherige Kenntnisse ... 87
6.1.1 Phenole im Grundwasser tertiärer Grundwasserleiter ... 87
6.1.2 Sulfat im Grundwasser tertiärer Grundwasserleiter ... 87
6.1.3 Möglichkeiten von Isotopenuntersuchungen am Sulfat ... 89
6.2 Grundwasserrelevante Sulfatquellen ... 90
6.2.1 Sulfat atmosphärischer Niederschläge ... 90
6.2.2 Sulfat im Boden und der ungesättigten Zone ... 91
6.2.3 Schwefel im Zechstein ... 92
6.2.4 Schwefel in den Sedimenten der tertiären Aquifere ... 92
6.3 Geochemische Prozesse im Aquifer ... 93
6.3.1 Bildung sedimentärer Sulfide ... 93
6.3.2 Isotopengeochemie der Sulfatreduktion und Pyritbildung ... 96
6.3.3 Sulfatbildung durch Pyritoxidation ... 98
6.3.4 Isotopengeochemie der Pyritoxidation ... 100
6.4 Isotopengeochemie des Schwefels ... 101
6.4.1 Isotopengehalte des Zechstein-Anhydrits ... 101
6.4.2 Isotopengehalte des Schwefels in den Aquifersedimenten ... 102
6.4.3 Pyritbildung in den Aquifersedimenten ... 103
6.5 Sulfat im Grundwasser – Hydrochemische Indikatoren ... 104
6.5.1 Physikochemische Parameter ... 104
6.5.2 Sulfat, Eisen und andere gelöste Stoffe ... 105
6.6 Sulfat im Grundwasser – Isotopenhydrologische Indikatoren ... 115
6.6.1 Isotopie des Sulfats im GWL 5 ... 115
6.6.2 Isotopie des Sulfats im GWL 6 ... 120
6.7 Phenole im Grundwasser des GWL 6 und Oberflächenwasser ... 123
6.8 Schlussfolgerungen ... 124
7 Zusammenfassung ... 126

8 Literatur 129

Anlagen

ABBILDUNGEN

Abb. 1-1: Übersicht des Untersuchungsgebietes mit Lage der Braunkohlentagebaue, Wasserwerke sowie Schluckbrunnen der Schwelwasserversenkung der carbochemischen Industrie. 2

Abb. 1-2: Konzeptionelles Modell des Untersuchungsgebietes. Linke Seite Bergbau (Tagebau) mit Sümpfungsbrunnen, rechte Seite Wasserwirtschaft mit Förderbrunnen und dazwischen carbochemische Industrie mit Schluckbrunnen im Zechstein-Aquifer und Schadstoffplume. Horizontale Pfeile markieren die Fließrichtung des Grundwassers, vertikale Pfeile den Aufstieg von gespanntem Grundwasser. O_2 symbolisiert das Eindringen von Luftsauerstoff bei Entwässerung des Aquifers. 3

Abb. 1-3: Risikosituation als Ziel – Prozess – Folge – Darstellung (von oben nach unten). Durch die räumliche Überlagerung von Tiefenversenkung und Grundwasserförderung (Pfeil) resultiert das Risiko eines hydraulischen Aufstiegs kontaminierter Grundwässer aus dem Zechstein-Aquifer (GWL II) in den tertiären Basisaquifer (GWL 6). 4

Abb. 3-1: Stratigraphisches Normalprofil der Region Zeitz mit Kennzeichnung der wichtigsten Grundwasserleiter. Das Profener Zechstein-Riff wurde in der Bohrung UFZ 101 mit einer Mächtigkeit von 110 m erbohrt. GWL = Grundwasserleiter 9

Abb. 5-1: Zeitliche Veränderung des Phenol-Eintrages in das Grundwasser durch die Versenkung von Schwelereiabwässern an den Standorten Profen und Deuben/Trebnitz. Phenolmengen wurden aus den Angaben von Huth (1972) in kg/d umgerechnet. 32

Abb. 5-2: Vereinfachtes Schema zu tendenziellen Veränderungen in der Löslichkeit und Toxizität der Alkylphenole in Abhängigkeit von der Anzahl an C-Atomen und der Struktur. 36

Abb. 5-3: Hydrogeologisches Profil des Standortes Profen von den Schluckbrunnen nach NW in Richtung Tgb. Profen. Blaue Flächen = Rifffazies des Zechsteins (GWL II), gelbe Flächen = tertiäre Aquifere (GWL 61, GWL 62, GWL 63), graue Flächen = Grundwasserstauer (Verwitterungsmaterial, tertiäre Tone, Braunkohle-Flöz). Lage des Profils siehe Karte 5-2. Bohrprofile nach DIN 4023. 42

Abb. 5-4: Hydrogeologisches Profil des Standortes Profen von den Schluckbrunnen nach NNE parallel zum Tgb. Profen. Blaue Flächen = Rifffazies des Zechsteins (GWL II), gelbe Flächen = tertiäre Aquifere (GWL 61, GWL 62, GWL 63), graue Flächen = Grundwasserstauer (Verwitterungsmaterial, tertiäre Tone, Braunkohle-Flöz). Lage des Profils siehe Karte 5-2. Bohrprofile nach DIN 4023. 43

Abb. 5-5: Entwicklung des Wasserstandes in der UFZ 101 über einen Zeitraum von 322 Tagen. Unterbrechung der Messung durch Wartungsarbeiten bzw. Austausch des Datenloggers. 44

Abb. 5-6: Veränderung des Wasserstandes in der UFZ 201 nach Auffüllversuch. Anfangswasserstand 97.60 mNN. Das Minimum 94.73 mNN wurde nach 57 Tagen erreicht. 45

Abb. 5-7: Entwicklung des Wasserstandes in der UFZ 301 über einen Zeitraum von 114 Tagen. Vergleichswerte des Luftdruckes gemessen in der Station Leipzig/Schkeuditz (Quelle: http://www.wetter-online.de) zeigen die Anhängigkeit kurzfristiger Schwankungen des Wasserstandes von Änderungen des Luftdruckes. 46

Abb. 5-8: Anstieg des Wasserstandes in der UFZ 401 über einen Zeitraum von 128 Tagen. 49

Abb. 5-9: Hydrogeologisches Profil des Standortes Deuben/Trebnitz von den Schluckbrunnen Trebnitz nach NE in Richtung Deuben. Blaue Flächen = Zechstein-Plattendolomit (GWL II), gelbe Flächen = tertiäre Aquifere (GWL 61, GWL 52), graue Flächen = Grundwasserstauer (verwitterter Unterer Buntsandstein, tertiäre Tone, Braunkohle-Flöz). Lage des Profils siehe Karte 5-3. Bohrprofile nach DIN 4023. 50

Abb. 5-10: Anstieg des Wasserstandes in der UFZ 601 über einen Zeitraum von 114 Tagen. 51

Abb. 5-11: Konzentrationsverteilung des Gesamtphenols im Riffkalkstein/-dolomit der UFZ 101. Zunahme der Konzentration in hydraulisch nicht aktiven Zonen des Riff-Dolomits. Logs der bohrlochgeophysikalischen Messungen (von links): Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Caliber, Gamma-Ray, Gamma-Gamma, Neutron-Neutron, Fokussiertes Elektrolog. 54

Abb. 5-12: Durchschnittliche molare Anteile der Phenolhomologe am Gesamtphenol im Zechstein der Bohrung UFZ 101. 55

Abb. 5-13: Abnahme des Molaren Verhältnisses Phenol/Gesamtphenol in hydraulisch aktiven Zuflussbereichen im verkarsteten oberen Teil des Riffs der UFZ 101. Diagramme von links: Molare Verhältnisse der Phenolhomologe, Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Gamma-Ray-Log. 56

Abb. 5-14: Konzentrationsverteilung des Gesamtphenols im Riffkalkstein/-dolomit der UFZ 301. Zunahme der Konzentration in hydraulisch nicht aktiven Zonen des unverkarsteten Riff-Dolomits sowie an der Grenzfläche zum liegenden Ton (T1). Logs der bohrlochgeophysikalischen Messungen (von links): Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Caliber, Gamma-Ray, Gamma-Gamma, Neutron-Neutron, Fokussiertes Elektrolog. 57
Abb. 5-15: Durchschnittliche prozentuale Anteile der Phenolhomologe am Gesamtphenol im Zechstein der Bohrung UFZ 301..... 58
Abb. 5-16: Zunahme des Molaren Verhältnisses Phenol/Gesamtphenol an den Grenzflächen zu hydraulisch aktiven Bereichen innerhalb des Plattendolomits der UFZ 301. Diagramme von links: Molare Verhältnisse der Phenolhomologe, Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Trennflächenanzahl aus ABTV-Messungen, Gamma-Ray-Log. 59
Abb. 5-17: Abnehmende Konzentration an Gesamtphenol im Gestein entlang des Grundwasserfließpfades von UFZ 401 (Nähe Schluckbrunnen Trebnitz 3/42) über UFZ 501 (Schluckbrunnen Deuben 5/44, 6/44) zu UFZ 601 (Grundwasserabstrom). 60
Abb. 5-18: Anreicherung des Gesamtphenols in den tonigen Schichten im Hangenden (T4=Obere Letten) und Liegenden (T3=Grauer Salzton) des Plattendolomits der UFZ 401. GR-Log als Maß für Tonanteil im Gestein. 61
Abb. 5-19: Veränderung der Molaren Verhältnisse zwischen Phenol, Kresolen, DMP, TMP, EP und Gesamtphenol an lithologischen Grenzflächen zwischen Plattendolomit (Ca3) und Grauem Salzton (T3) sowie Oberen Letten (T4). 61
Abb. 5-20: Konzentrationsverteilung des Gesamtphenols im Plattendolomit der UFZ 501. Zunahme der Konzentration in den stauenden Schichten des Grauen Salztones (T3). X-Achse ist logarithmisch skaliert. Die Logs der bohrlochgeophysikalischen Messungen (von links): Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Caliber, Gamma-Ray, Gamma-Gamma, Neutron-Neutron, Fokussiertes Elektrolog. 62
Abb. 5-21: Zunahme des Molaren Verhältnisses Phenol/Gesamtphenol im Hauptzuflussbereich des Plattendolomits der UFZ 501. Geringere Unterschiede der Molaren Verhältnisse in Zonen geringer Wasserwegsamkeit. Diagramme von links: Molare Verhältnisse der Phenolhomologe, Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Gamma-Ray-Log. 63
Abb. 5-22: Anreicherung an Gesamtphenol in den hydraulisch nicht aktiven Bereichen im Hangenden (t = tertiäres Einsturzgebirge) und Liegenden (T3 = Grauer Salzton) des Plattendolomits der UFZ 601. Die Logs der bohrlochgeophysikalischen Messungen (von links): Zuflussbereiche im Bohrloch aus Flowmeter (Flow) /Fluidlogging (Fluid), Caliber, Gamma-Ray, Gamma-Gamma, Neutron-Neutron, Fokussiertes Elektrolog sind Ausdruck von Veränderungen der Gesteinseigenschaften Dichte, Porosität, Klüftigkeit, Wasserführung, Tongehalt. 64
Abb. 5-23: Abnahme des Molaren Verhältnisses Phenol/Gesamtphenol in hydraulisch aktiven Bereichen des Plattendolomits der UFZ 601 durch zunehmenden Lösungsaustrag im Grundwasserabstrom. Diagramme von links: Molare Verhältnisse der Phenolhomologe, Zuflussbereiche im Bohrloch aus Flowmeter (Flow) und Fluidlogging (Fluid), Trennflächenanzahl aus ABTV-Messungen, Gamma-Ray-Log. 65
Abb. 5-24: Molare Anteile (in %) der Phenolhomologe am Gesamtphenol im Plattendolomit. Abnahme des Phenol-Anteils unter gleichzeitiger Zunahme des Anteils der Alkylphenole im Grundwasserabstrom (Pfeil). 65
Abb. 5-25: Konzentrationsanstieg schwelwassertypischer C0-C3-Alkylphenole im Grundwasser entlang des Grundwasserfließpfades Profen (Pfeile). Schadstoffeintrag erfolgte in der Nähe der UFZ 101. Angabe der Gesamtphenol-Konzentrationen für jede Probe. Erläuterungen im Text. 66
Abb. 5-26: Zunahme des Phenol/Gesamtphenol-Verhältnisses, Abnahme der Alkylphenol-Verhältnisse im Grundwasserabstrom vom Schadstoffeintrag (UFZ 101) zur UFZ 301. Als Vergleich sind die Molaren Verhältnisse der Gesteinsproben als Mittelwerte des jeweiligen Filterbereichs der GWM dargestellt. Rechtes Bild, molare Anteile in % am Gesamtphenol im Grundwasser als Pie-Chart. Pfeile markieren die Veränderung in Richtung des Grundwasserabstroms. 67
Abb. 5-27: Anstieg der C1-C3-Alkylphenol-Konzentrationen und Verringerung der Phenolkonzentrationen im Grundwasser entlang des Fließpfades Trebnitz – Deuben (Pfeil). Probe Trebnitz 4/43 ist Standwasser aus einem Schluckbrunnen. Probe UFZ 501 ist durch Spülwasser beeinflusst. Angabe der Gesamtphenol-Konzentrationen für jede Probe. Erläuterungen im Text. 68
Abb. 5-28: Abnahme des Phenol/Gesamtphenol-Verhältnisses, Zunahme der Alkylphenol-Verhältnisse im Grundwasserabstrom (Pfeile) vom Schadstoffeintrag (Trebnitz 3/42, UFZ 401) zur GWM UFZ 601. Als Vergleich sind die Molaren Verhältnisse der Gesteinsproben als Mittelwerte des jeweiligen Filterbereichs der GWM dargestellt. Oberes Bild, molare Anteile in % am Gesamtphenol im Grundwasser als Pie-Chart. Wasserproben der UFZ 501 waren durch Spülwasser beeinflusst und daher nicht auswertbar. 70

Abb. 5-29: Vergleich ausgewählter hydrochemischer Parameter zwischen unbelastetem Grundwasser des GWL II und Phenol-belastetem Grundwasser aus den GWM UFZ 101, 301, 401, 501, 601. Nitrat-Konzentrationen > 0.1 mg/l im Phenol-belasteten Grundwasser sind vermutlich auf geringe Spuren von Spülwasser aus dem Bohrprozess zurückzuführen. Weitere Erläuterungen im Text. 72
Abb. 5-30: Vorbereitung der Ringspaltung beim anaeroben Abbau von Phenol und p-Kresol (nach Harwood et al. 1999; Londry et al. 1999). 73
Abb. 5-31: Sorptionsisothermen für die Sorption von Phenol, o-Kresol, 2,4-DMP, 2,5-DMP und 2,4,6-TMP an Kalkstein bei pH 8 und 11 °C (Daten aus Licha 2002). 78
Abb. 5-32: Doppelt logarithmische Darstellung der Sorptionsisothermen. Der Anstieg der Geraden entspricht nF, der Schnittpunkt mit der y-Achse KF (Daten aus Licha 2002). 79
Abb. 5-33: Verteilung der Spezies nach Säure-Base-Reaktion von Phenol (linkes Diagramm) und 2,4-Dimethylphenol (rechtes Diagramm) in Abhängigkeit vom pH-Wert. Schraffierter Balken ist der gemessene pH-Bereich im Grundwasser. 81
Abb. 5-34: Modell zur Sorption von Phenolat-Anionen an hydratisierten Gitter-Kationen des Calcits. Bei pH_{Wasser} < pH (zpc) ist die Mineraloberfläche positiv geladen. 82
Abb. 6-1: Zeitliche Veränderung in der Zusammensetzung des gehobenen Grundwassers aus dem GWL 5–6 der Wasserwerke Hagenest, Heukendorf und Bruderzeche. Linker Teil, Veränderung der Gesamthärte (GH), Nichtcarbonathärte (NKH) und Sulfat. Rechter Teil, Veränderungen im Sulfat- und Chloridgehalt in Abhängigkeit von der durchschnittlichen Fördermenge pro Jahr. Daten aus Gräber (1999). 88
Abb. 6-2: Der globale Schwefelkreislauf. Pfeile: Stoff-Flux in 106 t/a. Klammern: Pools in 106 t. DMS = Dimethylsulfid. Sulfatreduktion und Schwefeloxidation sind eng mit dem Umsatz von Eisenmineralien z.B. Pyrit verbunden (verändert nach Fritsche 1998). 90
Abb. 6-3: Vereinfachter Reaktionspfad der dissimilatorischen Sulfatreduktion mit Kennzeichnung der Teilreaktionen (Widdel & Hansen 1992). Adenosintriphosphat (ATP), Adenosin-5-Phosphosulfat (APS). out = außerhalb der Zelle, in = innerhalb der Zelle. 94
Abb. 6-4: Schematische Darstellung der Prozesse zur Bildung sedimentärer Pyrite. SRB = sulfate reducing bacteria, SOB = sulfide oxidizing bacteria (verändert nach Berner 1984). 96
Abb. 6-5: Vergleich der δ^{34}S-Isotopengehalte sedimentärer Disulfide des GWL 5, des GWL 6 und der Braunkohle des Flözes 1. 102
Abb. 6-6: δ^{34}S-Isotopengehalte der Disulfide aus den Aquifersedimenten des GWL 5 und GWL 6 im Vergleich zu berechneten Isotopengehalten aus der Rayleigh-Fraktionierung mit kinetischen Fraktionierungsfaktor von –47 ‰ (links) und von –22 ‰ (rechts). Ausgangssulfat ist gelöstes Zechstein-Sulfat. 102
Abb. 6-7: δ^{34}S- und δ^{18}O-Gehalte löslicher Sulfate aus den Sedimenten des GWL 5 und GWL 6 im Vergleich zu typischen Bereichen für Zechstein-Sulfat und Sulfaten aus der Pyritoxidation. 103
Abb. 6-8: Stabilitätsdiagramme für das System S-O-H (S = 10^{-3} mol/l) und Fe-O-H (Fe = 10^{-4} mol/l) für 25 °C, 1 bar (nach Brookins 1988). Die E_H/pH-Werte der Grundwässer im Untersuchungsgebiet sind gekennzeichnet. 104
Abb. 6-9: Vergleich der physikochemischen Parameter pH, Lf, E_H und T für Grundwässer des GWL 5, GWL 6 und GWL II im Box-Whisker-Diagramm. 105
Abb. 6-10: Darstellung der Hauptionenverhältnisse (meq%/l) in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes im Piper-Diagramm. Abweichungen von den Hauptionen Ca^{2+}, $S0_4^{2+}$, HCO_3^- durch leichte Zunahme der Na^+- und Cl^--Konzentrationen in den Grundwasserleitern GWL 5 und GWL II. 106
Abb. 6-11: Variationen in der Konzentration ausgewählter Ionen im Grundwasser der Grundwasserleiter GWL 5, GWL 6 und GWL II als Box-Whisker-Diagramm. Analysen mit Ionenbilanz-Fehler |IB| > 5 wurden nicht berücksichtigt. 107
Abb. 6-12: Hydrochemische Trends für SO_4^{2-}/HCO_3^- , $SO_4^{2-}/Fe_{ges.}$ (links) sowie SO_4^{2-}/pH (rechts) im Grundwasser des GWL 5. Pfeile kennzeichnen die typische Entwicklung als Folge zunehmender Beeinflussung des Grundwassers durch Sulfidoxidation. Erläuterungen im Text. Ergänzende Analysen aus Wucher et al. (1994); Kittler & Gräber (1995); Eccarius (2000). 108
Abb. 6-13: Beziehung zwischen Ca^{2+} und SO_4^{2-} (links) und die Ca^{2+}-Konzentrationen in Abhängigkeit vom pH-Wert des Grundwassers (rechts). Ergänzende Analysen aus Wucher et al. (1994); Kittler & Gräber (1995); Eccarius (2000). 109
Abb. 6-14: Hydrochemische Trends für SO_4^{2-}/HCO_3^-, $SO_4^{2-}/Fe_{ges.}$ (links) sowie SO_4^{2-}/pH (rechts) im Grundwasser des GWL 6. Gestrichelte Pfeile kennzeichnen theoretische hydrochemische Trends der Sulfidoxidation. Ausgefüllter Pfeil markiert die gleichzeitige Zunahme der SO_4^{2-}- und HCO_3^--Konzentrationen, typisch für die Zumischung von Zechstein-Grundwasser des GWL II. Erläuterungen im Text. Ergänzende Analysen aus Wucher et al. (1994); Kittler & Gräber (1995); Eccarius (2000). 111
Abb. 6-15: Beziehung zwischen Ca^{2+} und SO_4^{2-} (links) und die Ca^{2+}-Konzentrationen in Abhängigkeit vom pH-Wert des Grundwassers (rechts). Ergänzende Analysen aus Wucher et al. (1994); Kittler & Gräber (1995); Eccarius (2000). 111

Abb. 6-16: Verhalten von Sulfat in Abhängigkeit von Calcium (links) und Hydrogencarbonat (rechts) im Grundwasser des GWL II. 114
Abb. 6-17: Häufigkeitsverteilung der $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Werte des Grundwasser-Sulfats und sedimentärer Pyrite in den Grundwasserleitern GWL 5 und GWL 6. 116
Abb. 6-18: Abhängigkeit des $\delta^{18}O_{SO4}$ vom $\delta^{18}O_{H2O}$ im GWL 5 und GWL 6 bei der Bildung von Sulfat durch Sulfidoxidation. Linien repräsentieren unterschiedliche Anteile an $^{18}O_{H2O}$ beim Einbau in das Sulfation. Grundlage Isotopenbilanz mit ε_{O2} = -11.4 ‰, ε_{H2O} = +4.1 ‰ (nach Taylor & Wheeler 1994). 117
Abb. 6-19: $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Werte des Grundwasser-Sulfats und des löslichen Sulfats aus dem Aquifersediment des GWL 5. Isotopische Veränderungen durch Sulfatreduktion (Reduktion A und B) sowie Mixing. Ausgangssulfat stammt aus ^{34}S-variablen Schwefelquelle, vermutlich sedimentärer Pyrit. Zahlenwerte an den Datenpunkten geben die $\delta^{13}C_{DIC}$-Gehalte in ‰ PDB an. 118
Abb. 6-20: $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Werte des Grundwasser-Sulfats und des löslichen Sulfats aus dem Aquifersediment des GWL 6. Isotopische Veränderungen durch Sulfatreduktion und Mischung mit Zechstein-Sulfat (Z1-Feld). Ausgangssulfat für die Sulfatreduktion stammt aus ^{34}S-variablen Schwefelquellen, vermutlich sedimentärer Pyrit. Zahlenwerte an den Datenpunkten geben die $\delta^{13}C_{DIC}$ Gehalte in ‰ PDB an..... 121

TABELLEN

Tab. 2-1: Untersuchungsziele zur Betrachtung der Auswirkungen der Tiefenversenkung von Schwelwässern auf das Grundwasser mit Bezug zur gewählten Untersuchungsmethode. Beschreibung der Methoden s. Kap. 4. 6
Tab. 3-1: Gliederung der Grundwasserstockwerke und Grundwasserleiter (GWL) im Untersuchungsgebiet. Lockergesteinsgrundwasserleiter werden durch arabische, Festgesteinsgrundwasserleiter durch römische Zahlen bezeichnet. 14
Tab. 3-2: Hydraulische Parameter für den Plattendolomit des GWL II (nach Präger 2002; mündl. Mitt. Reichardt 2001; Hanzlik et al. 1993; Bohnwagner & Schenke 1992; Hecht 1991). 15
Tab. 3-3: Hydraulische Parameter für den GWL 61 (nach Eccarius 2000; Wucher et al. 1994). 18
Tab. 3-4: Hydraulische Parameter für den GWL 5 (nach Eccarius 2000; Wucher et al. 1994). 18
Tab. 4-1: Übersicht über angewendete geophysikalische Messverfahren im offenen Bohrloch zur relativen Erfassung von Gesteinseigenschaften. 22
Tab. 4-2: Nachweisgrenzen der EPA-Phenole nach Method 604 (U.S.EPA 1999). 24
Tab. 4-3: Nachweisgrenzen der SPME-GC-MS-Analysenmethode im Wasser und Feststoff im Vergleich zu den Empfindlichkeitsfaktoren des Phenolindex für Phenol und Alkylphenole (nach Licha et al. 2001a)..... 25
Tab. 4-4: Kurzübersicht der ausgewählten Isotopenmethoden und der entsprechenden Untersuchungsziele..... 26
Tab. 5-1: Eigenschaften und Zusammensetzung von unbehandelten Schwelwässern. k.A. = keine Angaben. 31
Tab. 5-2: Ökotoxizität von Phenol und Alkylphenolen getestet an verschiedenen aquatischen Mikroorganismen (Kahru et al. 2000). 35
Tab. 5-3: Flüchtigkeit und Wasser-Löslichkeit von Phenol und 2,4-Dimethylphenol im Vergleich zum Benzen. Daten aus U.S.EPA (1996a,b). 35
Tab. 5-4: Richt- und Grenzwerte für Phenol in µg/l (nach Rippen 1995; von der Trenck et al. 1999). 37
Tab. 5-5: Mikrobieller Abbau bzw. Persistenz (kein Abbau) schwelwassertypischer Phenole im Grundwasser unter verschiedenen Redoxverhältnissen. (? = bisher nicht untersucht). 75
Tab. 5-6: Abgeleitete Sorptionsparameter aus den batch-Versuchen von Licha (2002) und Wu et al. (2001) im Vergleich zur Löslichkeit in Wasser. 80
Tab. 5-7: Berechnete Kd-Werte unter Annahme eines Anteils an organischem Kohlenstoff von 2 %. k.A. = keine Angaben in der Literatur. 81
Tab. 6-1: Variationen der $\delta^{34}S$-Isotopengehalte verschiedener Emissionsquellen im Vergleich zum Niederschlag. 91
Tab. 6-2: $\delta^{34}S/\delta^{18}O$-Gehalte sulfathaltiger Düngemittel der ehemaligen DDR (nach Mallén 2000[(1)]; Knief 1998[(2)]). Bestimmung des $\delta^{18}O$ am Sulfat im Boden unter entsprechender Düngung (Knief 1998). 92
Tab. 6-3: Isotopengehalte des Zechstein-Anhydrits aus Krölpa (Mittelwerte aus 6 Proben) im Vergleich zu globalen Referenzwerten für marines Zechstein-Sulfat. 101
Tab. 6-4: Konzentration schwelwassertypischer Phenole im Grundwasser des GWL 6 sowie im Oberflächenwasser der Weißen Elster. Angaben in µg/l. nn = nicht nachweisbar, nb = nicht bestimmt. . 123

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. W. Gläßer von der Sektion Hydrogeologie des UFZ Leipzig-Halle für die Idee zur Arbeit, die Unterstützung und fachliche Betreuung sowie Herrn Prof. Dr. P. Wycisk vom Fachgebiet Umweltgeologie des Instituts für Geologische Wissenschaften der Martin-Luther-Universität Halle für die Betreuung und die wertvollen Diskussionen, die maßgeblich zum Entstehen der Arbeit beigetragen haben.

Außerdem danke ich Herrn Dr. S. Geyer von der Sektion Hydrogeologie des UFZ für die Betreuung, ständige Diskussionsbereitschaft und fachliche Hilfe.

Für die Hilfe von Herrn Dipl. Ing. R. Krieg von der Sektion Hydrogeologie des UFZ bei den vielen Probenahmen und Geländearbeiten möchte ich mich herzlich bedanken.

Ich danke ebenfalls Herrn Dipl. Chem. T. Licha von der Universität Jena für die GC-MS-Messungen, die fachlichen Ratschläge und die zur Verfügung gestellten Daten.

Den Mitarbeitern der AG Isotopenhydrologie des UFZ Herrn Dr. R. Trettin, Herrn Dr. Strauch, Herrn Dipl. Chem. P. Kowski sowie allen Laborantinnen danke ich für die Isotopenmessungen und ihre Unterstützung im Labor sowie bei der Interpretation der Daten.

Ebenso danke ich den Mitarbeitern der Sektion Analytik des UFZ, insbesondere Herrn Dipl. Chem. J. Steffen, für die ICP-, AAS- und IC-Messungen der Wasserproben.

Für die gute Zusammenarbeit und Unterstützung für Probenahmen und Bohrungen im Tagebau danke ich den Herren K. Mann und C. Bergmann der Mibrag mbH, Theißen.

Den Mitarbeitern der GFE Consult GmbH, Frau R. Präger und Herrn A. Pohle, gilt mein Dank für die Unterstützung bei der Bewältigung der vielen technischen Probleme bei der Betreuung der Bohrungen.

Besonders herzlich danke ich Anja Lootze, die mich mit viel Verständnis und Hilfe in allen Phasen der Arbeit aufopferungsvoll unterstützt hat.

Dank auch allen ungenannten Helfern, die zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben.

ABKÜRZUNGEN

ABTV	Akustischer Bohrlochteleviewer (geophysikalisches Bohrlochmessverfahren)
AMD	Acid Mine Drainage
APS	Adenosin-5-Phosphosulfat
ATP	Adenosintriphosphat
AVS	Acid Volatile Sulfur (säureflüchtiger Schwefel)
CAL	Kaliber-Log (geophysikalisches Bohrlochmessverfahren)
CDT	Standard für die Bestimmung von $\delta^{34}S$ (Cañon Diablo Troilite)
C_{org}	organischer Kohlenstoff
Cs	Konzentration im Feststoff
Cw	Konzentration im Wasser
δ	δ-Wert der Isotopenverhältnisse
DMP	Dimethylphenol
DIC	Dissolved Inorganic Carbon (gelöster anorganischer Kohlenstoff)
DOC	Dissolved Organic Carbon (gelöster organischer Kohlenstoff)
ε	isotopischer Anreicherungsfaktor
E_H	Redoxspannung bezogen auf Standardwasserstoffelektrode
EP	Ethylphenol
FEL	Fokussiertes Elektrolog (geophysikalisches Bohrlochmessverfahren)
GC-MS	Gaschromatographie mit massenspektrometrischem Detektor
GG	Gamma-Gamma-Log (geophysikalisches Bohrlochmessverfahren)
GR	Gamma-Ray-Log (geophysikalisches Bohrlochmessverfahren)
GWL	Grundwasserleiter
GWM	Grundwassermessstelle
kf	Durchlässigkeitsbeiwert
Kd	Verteilungskoeffizient (Wasser – Feststoff)
K_F	Freundlich-Koeffizient
Koc	Verteilungskoeffizient bezogen auf organischen Kohlenstoff
Kow	Octanol – Wasser – Verteilungskoeffizient
Lf	elektrische Leitfähigkeit
g/kg TS	g/kg Trockensubstanz
mNN	Höhenangabe in Meter über Normal Null (Pegel Kronstadt)
n_F	Freundlich-Exponent
NN	Neutron-Neutron-Log (geophysikalisches Bohrlochmessverfahren)
PDB	Standard für die Bestimmung von ^{13}C für alle Kohlenstoffverbindungen z.B. DIC, DOC, CO_2, CH_2O (Rostrum von *Belemnitella americana* der Kreide der Pee Dee Formation in South Carolina)
SDAG	Sowjetisch-Deutsche Aktiengesellschaft (Wismut)
SMOW	Standard für die Bestimmung von $\delta^{18}O$ und $\delta^{2}H$ in Wasser (Standard Mean Ocean Water)
SOM	Sedimentary Organic Matter
SPME	Solid Phase Micro Extraction (GC-MS Methode)
TVO	Deutsche Trinkwasserverordnung
Tgb.	Tagebau
TMP	Trimethylphenol
UG	Untersuchungsgebiet
WW	Wasserwerk

Kurzfassung
Im Zuge der über 100-jährigen Nutzung durch Bergbau, carbochemische Industrie und Wasserwirtschaft kam es in der Region Zeitz zu einer nachhaltigen Beeinträchtigung des tiefen Grundwassers. Bergbau und Wasserwirtschaft induzierten durch die hydraulische Überbeanspruchung des Aquifersystems geochemische und hydraulische Prozesse, während Schwelereien ca. 5 Mio. m^3 hoch kontaminierte Abwässer in den klüftigen Zechstein-Aquifer (GWL II) versenkten.
Durch Forschungsbohrungen an den ehem. Schwelereistandorten Profen und Deuben/Trebnitz gelang es erstmals, schwelwassertypische Kontaminationen des Grundwassers und des Aquifergesteins im GWL II durch Phenol und C1-C3-Alkylphenole (Kresole, Dimethylphenole, Ethylphenole, Trimethylphenole) als direkte Folge der Schwelwasser-Tiefenversenkung nachzuweisen. In fünf von sechs abgeteuften Bohrungen wurden 17 schwelwassertypische Verbindungen von erheblicher ökotoxikologischer Relevanz bestimmt. Die Konzentration an Gesamtphenol (Σ Phenol + Alkylphenole) erreichte Maximalwerte von bis zu 128500 µg/kg im Gestein sowie bis zu 312000 µg/l im Grundwasser.
Bedingt durch die unterschiedlichen geologischen Verhältnisse (Bryozoenriff/Plattendolomit) waren zwischen den beiden Standorten Unterschiede in der Grundwasserströmung, dem Stofftransport und in der Schadstoffverteilung feststellbar. Phenole werden im Grundwasser in gelöster Form als neutrales Molekül transportiert. Durch Unterschiede in der Wasserlöslichkeit der Einzelverbindungen kommt es zu einer chromatographischen Auftrennung des komplexen Schadstoffplumes.
Phenol war die mobilste Verbindung mit dem geringsten Sorptionsvermögen. Über die berechneten Molaren Verhältnisse zwischen den Isomeren-Gruppen und dem Gesamtphenol konnten Gesetzmäßigkeiten für die An- und Abreicherung bestimmter Verbindungen im Gestein abgeleitet werden. In geophysikalisch nachgewiesenen hydraulisch aktiven Gesteinsbereichen war eine deutliche Verringerung des Phenol/Gesamtphenol-Verhältnisses auf Werte < 0.5 zu beobachten. Im Gegensatz dazu war das Phenol/Gesamtphenol-Verhältnis in dichten Gesteinsbereichen mit geringer hydraulischer Aktivität meist 0.5 – 0.8. Gleichzeitig war die Gesamtphenol-Konzentration in den hydraulisch aktiven Bereichen meist geringer als in hydraulisch inaktiven. Durch Matrixdiffusion erfolgte ein Transport des Phenols in gering durchlässige Gesteinsbereiche (dead-end-Poren/-Klüfte) sowie eine Sorption in tonigen Schichten.
Das hydraulische Druckpotenzial des GWL II war im Vergleich zum Jahr 1944 um 31 – 35 m geringer. Durch den beobachteten kontinuierlichen Anstieg des Druckpotenzials ist ein hydraulischer Aufstieg in den tertiären Basisaquifer (GWL 6) des Hangenden nicht auszuschließen. Im Grundwasser des GWL 6 wurden Phenole jedoch nur im Spurenbereich bis 53 µg/l (Gesamtphenol) bestimmt, was einen Aufstieg kontaminierter Grundwässer aus dem GWL II derzeit nicht bestätigt. Steigende Sulfat-Konzentrationen im Grundwasser des GWL 6, als deren Ursache der Aufstieg von sulfatreichem Grundwasser aus dem GWL II bzw. die Sulfidoxidation im teilentwässerten GWL 6 vermutet wurden, waren Anlass für weitere Untersuchungen. Über $\delta^{34}S/\delta^{18}O$-Isotopenbestimmungen am Grundwasser-Sulfat und an den relevanten Sulfatquellen konnte ein lokaler Aufstieg von sulfatreichem (unkontaminierten) Grundwasser aus dem GWL II in den GWL 6 nachgewiesen werden. Reaktions-typische $\delta^{18}O_{SO4}$ < + 5 ‰ SMOW machten außerdem Einflüsse der Sulfidoxidation deutlich.
Künftige hydraulische Veränderungen, z.B. durch fortschreitenden Tagebau, könnten nicht nur zu einer Ausdehnung des Schadstoffplumes im GWL II führen, sondern bei Erreichen bevorzugter Aufstiegszonen zu einer Kontamination des wasserwirtschaftlich wichtigen GWL 6.

1 Einleitung

Tiefe Grundwässer stellen durch ihre gute Geschütztheit gegenüber wassergefährdenden Stoffen eine wichtige Ressource für die Wasserversorgung dar. Durch fortschreitende Urbanisierung und Industrialisierung werden natürliche Ressourcen immer stärker anthropogen beeinflusst. Entwicklungen dieser Art vollziehen sich in Raum und Zeit, wodurch eine Betrachtung historischer Veränderungen im Untersuchungsraum unbedingt notwendig ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wird untersucht, wie das Grundwasser der Region Zeitz durch die über 100-jährige industrielle Nutzung des Bergbaus, der carbochemischen Industrie und der Wasserwirtschaft nachhaltig beeinflusst wurde. Der direkte Stoffeintrag in das Grundwasser über die Tiefenversenkung von phenolischen Schwelereiabwässern spielt dabei ebenso eine wichtige Rolle wie anthropogen ausgelöste geochemische und hydraulische Prozesse.

Verunreinigungen des Grundwassers durch phenolische Verbindungen sind aufgrund der vielfältigen industriellen Anwendung und Verbreitung in Gaswerken, Schwelereien, Teerverarbeitungswerken und Holzbehandlungsanlagen weltweit ein großes Problem. Die bisher u.a. von Teutsch et al. (1997), King et al. (1999a,b), Broholm & Arvin (2000) und Broholm et al. (2000) angenommene leichte Abbaubarkeit von Phenolen im Grundwasser wurde jüngst durch Lerner et al. (2000), Williams et al. (2001) und Thornton et al. (2001) stark relativiert. Eine einfache Übertragung der Ergebnisse aus Laborexperimenten auf natürliche Aquifere scheint vor allem bei Grundwasserschadensfällen mit komplexen "Schadstoffcocktails", z.B. an Gaswerks-/Schwelereistandorten, problematisch.

Vergleichsweise wenig Aufmerksamkeit wird hydraulischen und geochemischen Prozessen entgegengebracht, die durch menschliche Aktivität ausgelöst, die Wasserqualität und -quantität erheblich beeinträchtigen können. Die hydraulische Überbeanspruchung eines Grundwasseraquifers kann zu gravierenden Veränderungen im Wasserhaushalt und in der Wasserchemie führen. Gleichzeitig können empfindliche Störungen des hydraulischen Systems eine Mobilisierung von Schadstoffen bewirken.

1.1 Die Region Zeitz

Die Region Zeitz befindet sich im Dreiländereck Sachsen-Anhalt, Thüringen, Sachsen und ist gekennzeichnet durch die enge räumliche und zeitliche Verflechtung von Braunkohlenbergbau, Carbochemie und Wasserwerken (Abb. 1-1). Die Stadt Zeitz mit dem ehemaligen Hydrierwerk bildete das industrielle Zentrum des sog. Zeitz-Weißenfelser-Braunkohlenreviers.

Mit dem Beginn des Braunkohlenbergbaus Ende des 19. Jahrhunderts entwickelte sich die Region rasch zu einem Zentrum des Bergbaus und der Carbochemie in Mitteldeutschland. Auf Basis der bitumenreichen Braunkohle entstanden Schwelereien, Teerverarbeitungswerke und das Hydrierwerk Zeitz. Inmitten dieser Industrielandschaft wurden zahlreiche Wasserwerke gebaut, um der bereits im 19. Jahrhundert einsetzenden Verschlechterung der Wasserversorgung durch versiegende Hausbrunnen entgegenzuwirken (Barthel 1962). In den 20er Jahren wurde der untertägige Kammerpfeilerbruchbau durch den Abbau im Tagebaubetrieb abgelöst. Es entstanden die ersten Tagebaurestlöcher, z.B. Restloch Vollert, die später u.a. zur Lagerung von Industrieabfällen genutzt wurden.
Durch Kriegsschäden kam es bereits in den 40er Jahren zu ersten unkontrollierten Schadstoffaustritten. Die Schwelereien Profen und Deuben entsorgten von 1940 bis ca. 1975

hochtoxische phenolische Abwässer durch Tiefenversenkung. Bereits Mitte der 40er Jahre erkannte man die möglichen Gefahren für einzelne Wasserfassungen (Picard 1944).

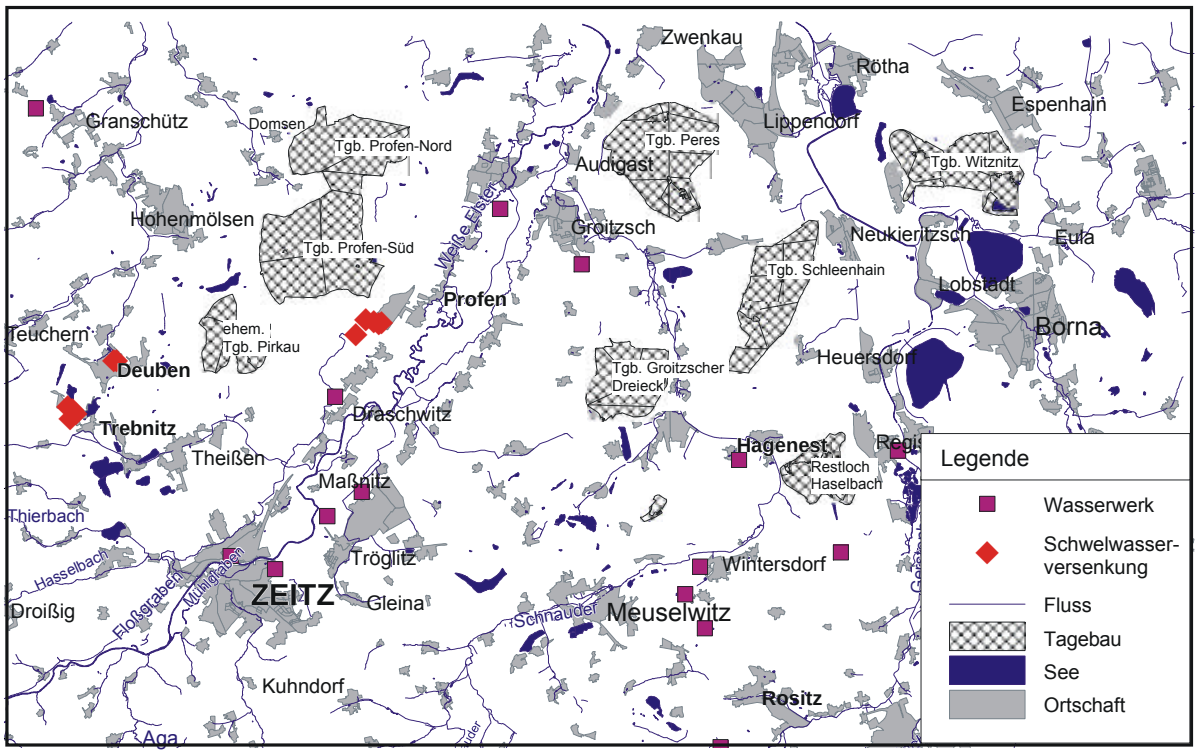


Abb. 1-1: Übersicht des Untersuchungsgebietes mit Lage der Braunkohlentagebaue, Wasserwerke sowie Schluckbrunnen der Schwelwasserversenkung der carbochemischen Industrie.

Gleichzeitig fördern Wasserwerke und Sümpfungsbrunnen der Braunkohlentagebaue aus diesem Aquifersystem und erzeugen damit großräumige Absenktrichter, die sich teilweise überlagern. Gegenwärtig sind die Großtagebaue Profen, Schleenhain und Peres Zentrum des Abbaus (Mibrag 2002).

Seit den 80er Jahren wurde in den umliegenden Wasserwerken eine zunehmende Verschlechterung der Wasserqualität durch steigende Sulfat-Konzentrationen festgestellt. Als Folge davon wurde bis in die späten 90er Jahre die Mehrzahl der Wasserwerke geschlossen.

Über einen Zeitraum von mehr als einhundert Jahren unterlag das Grundwasser in der Region Zeitz einer Vielzahl anthropogener Einflüsse, die zu deutlichen Verschlechterungen der Grundwasserqualität führten. Damit verbunden waren z.T. erhebliche Einschränkungen für die wasserwirtschaftliche Nutzung.

1.2 Problemstellung

Seit über einhundert Jahren erfolgte in der Region Zeitz eine intensive Nutzung durch carbochemische Industrie, Bergbau und Wasserwirtschaft. Dies führte zu charakteristischen direkten und indirekten Stoffeinträgen in das Grundwasser.

Durch die carbochemische Industrie erfolgte im vorliegenden Fall ein **direkter** Stoffeintrag in das Grundwasser, indem Industrieabwässer durch Tiefenversenkung gezielt in den geologischen Untergrund verbracht wurden.

Als Folge der bergbaulichen und wasserwirtschaftlichen Nutzungen hingegen sind **indirekte** Stoffeinträge in das Grundwasser anzunehmen, die aus der hydraulischen Beanspruchung der tertiären Aquifere resultieren. Durch die nutzungsspezifische Absenkung des Grundwassers kann es zur Entwässerung und Belüftung des Aquifers kommen. Darüber hinaus verändern sich die hydraulischen Druckverhältnisse nahezu im gesamten System.

Die enge räumliche Überlagerung der Nutzungsarten und deren Folgeerscheinungen werden im konzeptionellen Modell (Abb. 1-2) veranschaulicht.

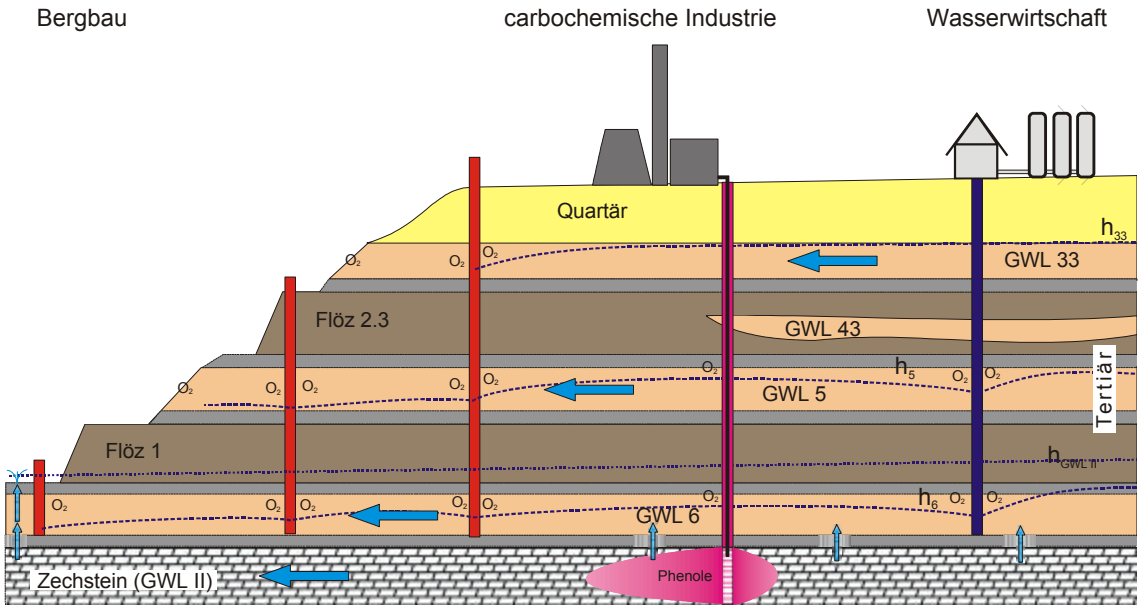


Abb. 1-2: Konzeptionelles Modell des Untersuchungsgebietes. Linke Seite Bergbau (Tagebau) mit Sümpfungsbrunnen, rechte Seite Wasserwirtschaft mit Förderbrunnen und dazwischen carbochemische Industrie mit Schluckbrunnen im Zechstein-Aquifer und Schadstoffplume. Horizontale Pfeile markieren die Fließrichtung des Grundwassers, vertikale Pfeile den Aufstieg von gespanntem Grundwasser. O_2 symbolisiert das Eindringen von Luftsauerstoff bei Entwässerung des Aquifers.

Das konzeptionelle Modell verdeutlicht, dass Bergbau und Wasserwirtschaft Grundwasser aus denselben Grundwasserleitern fördern. Als Folge davon wird der Grundwasserdruckspiegel sowohl im tertiären Basisaquifer (GWL 6) als auch im Liegendaquifer des Zechsteins (GWL II) stark abgesenkt (Abb. 1-2). Räumlich parallel dazu, jedoch zeitlich versetzt, hat die Tiefenversenkung von Industrieabwässern den GWL II erheblich stofflich belastet. Für die nächsten Jahre werden durch fortschreitenden Tagebaubetrieb, Flutung von Schächten der ehemaligen SDAG Wismut (z.B. Löbichau) sowie verringerte wasserwirtschaftliche Nutzung ansteigende Druckspiegel erwartet.
Durch die räumliche Überlagerung von Grundwasserförderung und Tiefenversenkung bildeten sich Zusammenhänge aus, die zu einer potenziellen Risikosituation für das Grundwasser geführt haben (Abb. 1-3).

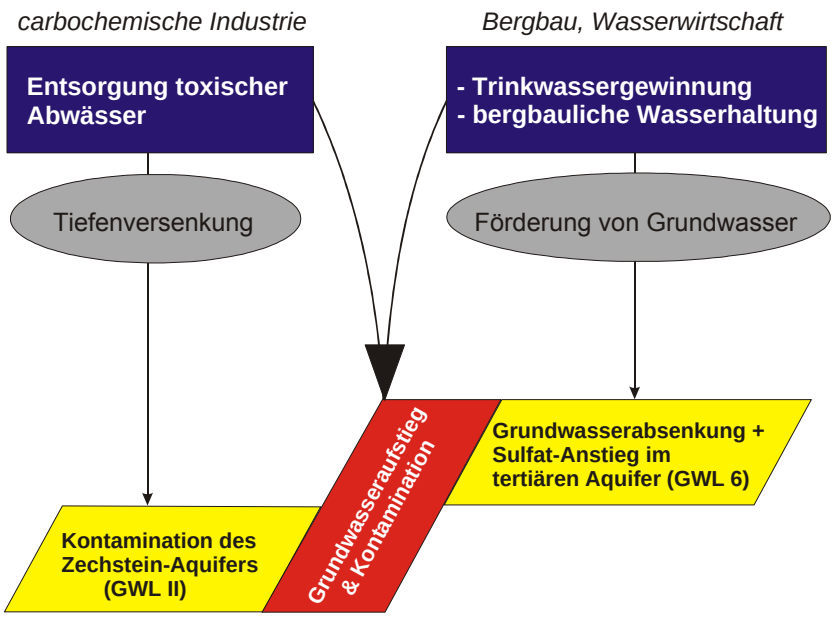


Abb. 1-3: Risikosituation als Ziel – Prozess – Folge – Darstellung (von oben nach unten). Durch die räumliche Überlagerung von Tiefenversenkung und Grundwasserförderung (Pfeil) resultiert das Risiko eines hydraulischen Aufstiegs kontaminierter Grundwässer aus dem Zechstein-Aquifer (GWL II) in den tertiären Basisaquifer (GWL 6).

1.2.1 Phenole und Schwelwasser-Tiefenversenkung

Durch Tiefenversenkung (deep well injection), einer Entsorgungsmethode für überwiegend industrielle Abwässer, werden noch heute toxische Abwässer direkt in den Untergrund mit dem Ziel verbracht, sie langfristig von der Biosphäre zu isolieren. So wurden z.B. in den USA 1996 11 % des jährlichen Aufkommens an flüssigen Abfällen über Versenkungsbrunnen entsorgt (Brasier & Kobelski 1996). In der Bundesrepublik werden noch heute "Mutterlaugen" aus der Kaliproduktion in den Untergrund verpresst. Im Thüringer Becken wurden schwach radioaktive flüssige Abfälle in ehemaligen Erdölbohrungen versenkt (mündl. Mitt. Gläßer 2002). Die 'Vorteile' der Tiefenwasserversenkung gegenüber der chemisch-biologischen Abwasserbehandlung liegen in den bis zu 80 % niedrigeren Kosten, wodurch dieses Verfahren in früherer Zeit sehr verbreitet war (Lehr 1986). Die Unsicherheit hinsichtlich lateraler oder vertikaler Migration der Abwässer mit dem Risiko einer Kontamination des Grundwassers hat in den letzten Jahren zu einer deutlichen Reduzierung der Anlagen und zu schärferen behördlichen Zulassungsbestimmungen geführt (Smith 1996).

An zwei Standorten der carbochemischen Industrie, den Schwelereien Profen und Deuben, wurden Abwässer in bis zu 200 m tiefe Schluckbrunnen geleitet. Die o.g. Braunkohlen-Schwelereien haben zwischen 1939 und 1975 ca. 5 Mio. m^3 phenolische Abwässer in den Untergrund "entsorgt". Durch die Tiefenversenkung gelangten riesige Mengen an Phenol, Alkylphenolen, Fettsäuren, Ammonium und anderen Verbindungen in den Untergrund. Aufgrund ansteigender Druckspiegel im Zechstein-Aquifer besteht in Zukunft die Möglichkeit eines hydraulischen Aufstiegs kontaminierter Wässer in darüber liegende nutzbare tertiäre Aquifere.

1.2.2 Sulfat und Grundwasserabsenkung

In der Region Zeitz wird das Grundwasser der tertiären Aquifere (GWL 5, GWL 6) durch Förderbrunnen der Wasserwerke und Sümpfungsbrunnen der Tagebauwasserhaltung stark abgesenkt. Als Folge davon kann Luft in den entwässerten Porenraum des Aquifers diffusiv eindringen, wodurch sich oxidierende Redoxverhältnisse einstellen können. Oxidationsprozesse, z.B. an reduzierten Eisenmineralen (Pyrit, Markasit), führen zur Freisetzung von Stoffen wie z.B. Fe, SO_4 , die vom (wieder-) ansteigenden Grundwasser gelöst werden.
Infolge der Grundwasserabsenkung werden die tertiären Aquifere hydraulisch entlastet. Es entstehen weiträumige Absenktrichter. An Störungszonen oder in Bereichen mit fehlendem Grundwasserstauer kann sulfatreiches Grundwasser aus dem gespannten Zechstein-Aquifer (GWL II) aufsteigen (Rehberg 1997). Durch die geogen bedingte hohe Ca-SO_4-Mineralisation des Grundwassers im Zechstein-Aquifer würde dies ebenfalls zu einem Anstieg des Sulfats im Grundwasser des tertiären Aquifers führen. Wäre dies der Fall, so könnte auch eine lokale Kontamination durch die versenkten phenolischen Schwelwässer nicht ausgeschlossen werden.

2 Zielstellungen

Ziel dieser Arbeit ist es, die aus der räumlichen Überlagerung von Schwelwasser-Tiefenversenkung in den Zechstein-Aquiferen und Grundwasserabsenkung in den tertiären Aquiferen entstandene Risikosituation für das Grundwasser durch zwei methodisch verschiedene Lösungsansätze zu untersuchen. Dies beinhaltet eine detaillierte Untersuchung der nachfolgend beschriebenen Teilprobleme mit dem Ziel einer umfassenden Beurteilung des Kontaminationsrisikos für den wasserwirtschaftlich genutzten tertiären Basisaquifer (GWL 6) durch aufsteigendes phenolbelastetes Grundwasser aus dem Zechstein (GWL II).

2.1 Auswirkungen der Schwelwasser-Tiefenversenkung

Ausgangspunkt soll eine erstmalige Untersuchung der Schadstoffquellen an den ehemaligen Versenkungsbrunnen der Schwelereien Profen und Deuben sein. Durch jeweils drei Forschungsbohrungen, die als Grundwassermessstellen ausgebaut werden sollen, wird jeder Standort erkundet. Primär geht es um den Nachweis von schwelwassertypischen Phenolen im Grundwasser und Aquifergestein sowie um die Beschreibung von Transportprozessen, was im Einzelnen in Tab. 2-1 genannt und methodisch untersetzt ist.

Tab. 2-1: Untersuchungsziele zur Betrachtung der Auswirkungen der Tiefenversenkung von Schwelwässern auf das Grundwasser mit Bezug zur gewählten Untersuchungsmethode. Beschreibung der Methoden s. Kap. 4.

Ziel	Untersuchungsmethodik
Mächtigkeit, Lithologie	Erkundungsbohrungen mit Entnahme von Bohrkernen
Porosität, Klüftigkeit	Porositätsbestimmungen an Bohrkernen, Bohrlochgeophysik (NN, FEL, GG, CAL, ABTV)
Bestimmung von Zuflussbereichen im Kluftaquifer	Flowmetermessungen, Sal-Temp-Log, Fluidlogging
Grundwasserfließrichtung	Stichtagsmessungen des Wasserstandes
zeitliche Veränderung des Grundwasserstandes	kontinuierliche Langzeitmessungen des Wasserstandes mit Datenlogger
Konzentration schwelwassertypischer Phenole im Gestein	Entnahme von Proben aus Bohrkernen, Probenaufbereitung (Mikrowellenaufschluss) und GC-MS-Analytik auf Einzelverbindungen
Konzentration schwelwassertypischer Phenole im Grundwasser	Ausbau der Bohrungen als Grundwassermessstellen, Entnahme von Grundwasserproben und GC-MS-Analytik auf Einzelverbindungen
Transport schwelwassertypischer Phenole im Grundwasser	Vergleich der Speziesverteilung schwelwassertypischer Phenole zwischen Grundwasser und Gestein sowie zwischen Schadstoffquelle und Grundwasserabstrom
Sorption schwelwassertypischer Phenole	Auswertung von batch-Versuchen
Natural Attenuation Potenzial schwelwassertypischer Phenole im Grundwasser	Entnahme von Grundwasserproben und Bestimmung abbausensitiver Parameter (pH, E_H, O_2, DIC, SO_4, H_2S, NO_3), Konzentrationsvergleich zwischen Quelle und Abstrom, Auswertung von Literaturstudien zum Abbau

2.2 Auswirkungen der Grundwasserabsenkung

Durch gezielte Untersuchungen des Grundwassers im tertiären Basisaquifer (GWL 6) ist zunächst zu klären, ob bereits eine Kontamination durch schwelwassertypische Phenole eingetreten ist. In einem zweiten Schritt soll untersucht werden, ob die regional ansteigenden Sulfat-Gehalte im Grundwasser der tertiären Aquifere (GWL 6, GWL 5) möglicherweise mit einem hydraulischen Aufstieg von (Phenol-unbelastetem) Grundwasser aus dem Zechstein-Aquifer in Zusammenhang stehen oder die Oxidation sedimentärer Sulfide in den Aquifersedimenten die Ursache ist. Dieser indirekte Nachweis für den Aufstieg von Zechsteinwässern ist ein wichtiges Kriterium für die Beurteilung des regionalen Kontaminationsrisikos.

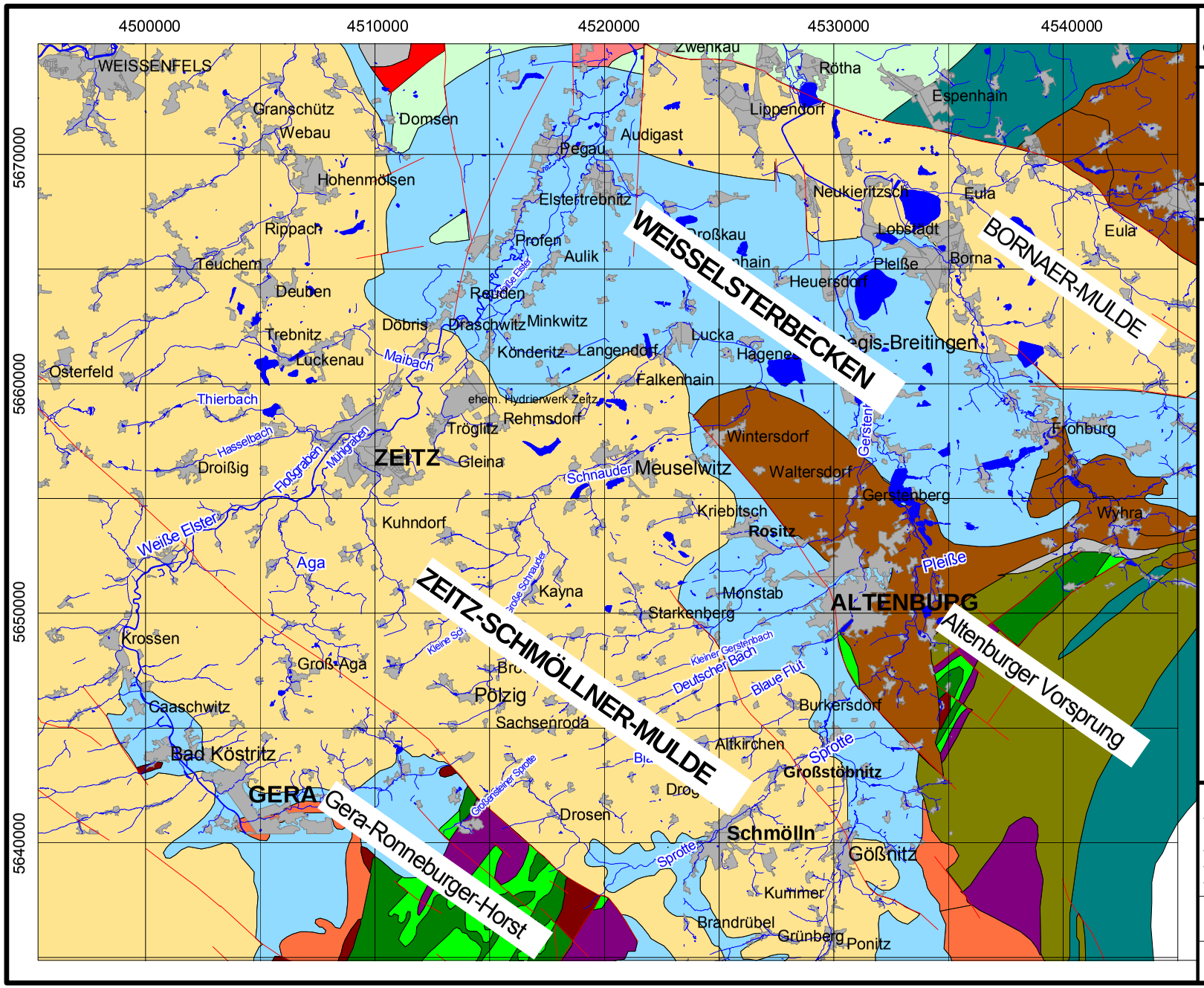
Konventionelle geochemische, hydrochemische und hydraulische Untersuchungsmethoden sind jedoch kaum ausreichend, um zwischen hydraulischen (Grundwasseraufstieg) und rein geochemischen Prozessen (Sulfidoxidation) der Sulfatbildung zu differenzieren. Deshalb sollen **Isotopenuntersuchungen** am gelösten Sulfat des Grundwassers, die mit Isotopengehalten der Schwefelquellen in den Aquifersedimenten verglichen werden, Aufschluss über die Herkunft des Sulfats geben.

3 Geologie und Hydrogeologie der Region Zeitz

Wie bereits in Kap. 1 angesprochen, resultiert die untersuchte Problemstellung aus dem komplexen Zusammenspiel von geologischem Untergrund, hydrogeologischen Wechselwirkungen zweier Aquifersysteme (Lockergestein im Hangenden, Festgestein im Liegenden) sowie unterschiedlichen anthropogenen Einflüssen.
Die Kenntnis der regionalen geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse ist Grundvoraussetzung für das Verständnis lokaler Phänomene. Daher wird in diesem Kapitel eine geologisch-hydrogeologische Zusammenfassung des derzeitigen Kenntnisstandes gegeben.

3.1 Geologischer Rahmen

Das Untersuchungsgebiet befindet sich südlich der Röthaer Störung auf der Nordwestsächsischen Tiefscholle und wird regionalgeologisch dem Weißelsterbecken zugeordnet (Karte 3-1). Das Weißelsterbecken, ein epirogen-subrosiv entstandenes Tertiärbecken im Weißelster-Pleiße-Gebiet (Meyer 1950), ist durch mächtige Sedimentkomplexe aus Sand/Kies-Ton-Braunkohle (Abb. 3-1) gekennzeichnet. Hydrogeologisch von Bedeutung sind die Lockersedimente des Tertiärs sowie die Festgesteine des Zechsteins. In den Randbereichen im S (Zeitz-Schmöllner-Mulde) und im NE (Bornaer Mulde) bilden mächtige Ablagerungen des Unteren Buntsandsteins den Hauptgrundwasserleiter.
Das Normalprofil (Abb. 3-1) gibt eine Übersicht zur Lithologie, Mächtigkeit und stratigraphischen Bezeichnung der Schichtenfolge vom Zechstein bis zum Quartär und verweist gleichzeitig auf die Nummerierung der Grundwasserleiter.



Industrielle Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 3-1:
Regionalgeologische Einheiten des Untersuchungsraums in der abgedeckten geologischen Karte

Legende

- Fluss
- geol. Störung
- See
- Ortschaft

Geologie

- Unterer Buntsandstein
- Zechstein
- Oberes Rotliegend
- Unteres Rotliegend
- Permokarbon, Granite
- Oberkarbon
- Unterkarbon
- Devon
- Silur
- Ordovizium, Gräfenthaler Gr.
- Ordovizium, Phycoden Gr.
- Ordovizium, Frauenbach gr.
- Kambrium
- Proterozoikum

N W E S

Maßstab

0 5 10

Kilometer

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Thüringen, Sachsen (2000)
- Geol. Übersichtskarte Sachsen (1998)
- Pretschold et al. (1980, 1987)
- Radtke (2001)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem:
Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

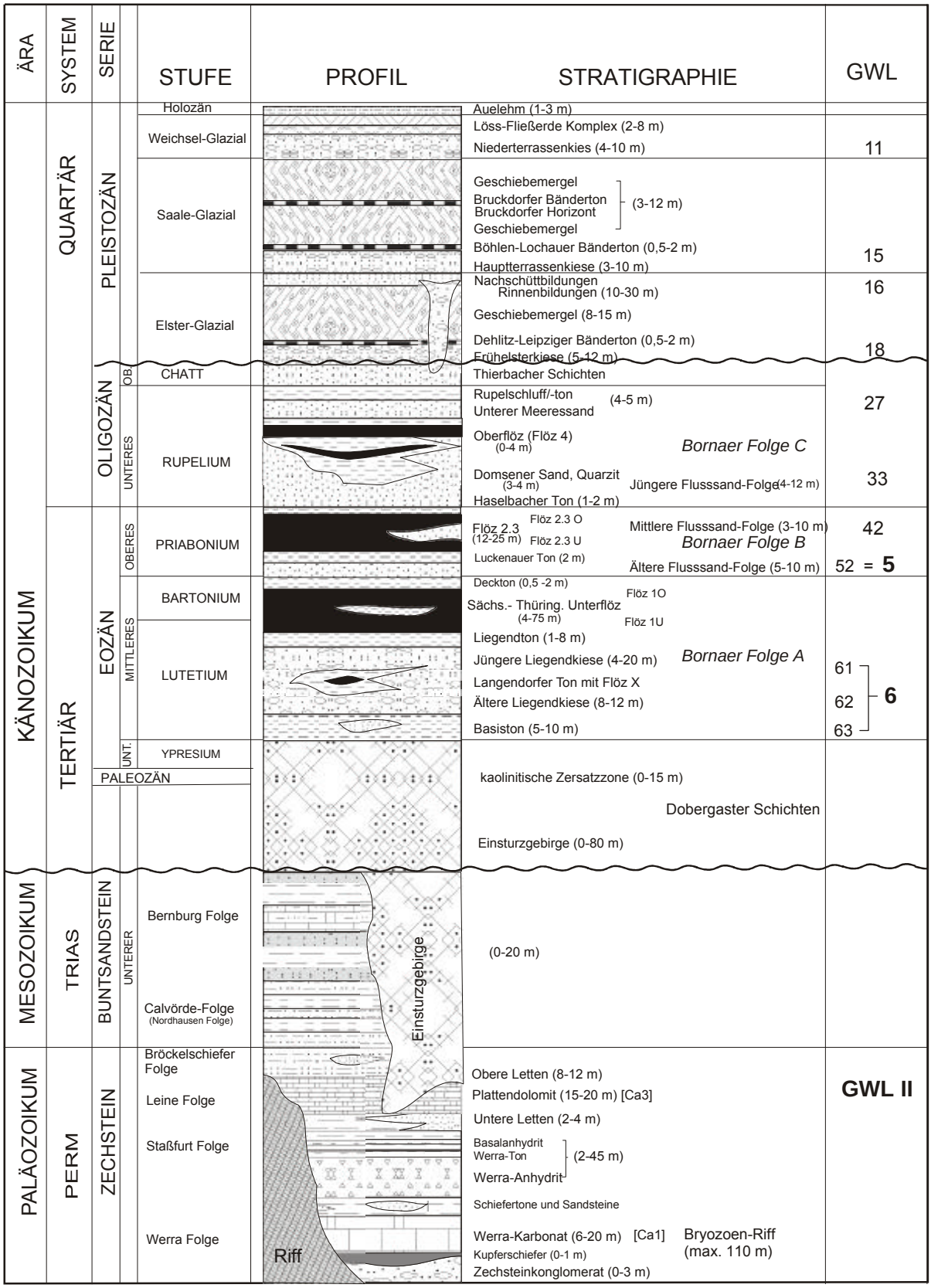


Abb. 3-1: Stratigraphisches Normalprofil der Region Zeitz mit Kennzeichnung der wichtigsten Grundwasserleiter. Das Profener Zechstein-Riff wurde in der Bohrung UFZ 101 mit einer Mächtigkeit von 110 m erbohrt. GWL = Grundwasserleiter

3.2 Zechstein

Das Untersuchungsgebiet befand sich paläogeographisch im Übergangsbereich zwischen der vollmarin/salinaren Fazies im NW (Saale-Gebiet) und einer küstennahen Randfazies im E (Elster-Gebiet). Die Transgression des Zechsteinmeeres erfolgte über eine stark reliefierte Oberfläche, die durch Rotliegend-Tektonik, Erosion, Sedimentation und Vulkanismus geprägt war. Dadurch kam es vor allem im Werra-Zyklus zu einer ausgeprägten Differenzierung der allgemein uferfernen Beckenrandentwicklung in eine lagunäre Fazies und eine Rifffazies (z.B. Profener Riff). Auffällig ist das fast völlständige Fehlen von Werra-Steinsalz. Im Randbereich des Zechsteinmeeres kam es statt dessen zur Ausfällung von mächtigen Anhydriten.

3.2.1 Werra-Folge Z1

Die Basis des Zechsteins bildet das Zechsteinkonglomerat (0 – 30 m), welches durch den lokal entwickelten Kupferschiefer (0 – 0.5 m) überlagert wird. Das darauffolgende Werra-Karbonat erreicht schließlich Mächtigkeiten von 6 – 20 m und besteht im liegenden Teil aus Dolomiten in Wechsellagerung mit Mergeln und Schiefertonen. Die einzelnen Schichtglieder weisen Mächtigkeiten im cm- bis dm-Bereich auf. Im Hangenden sind die Dolomite überwiegend feinkristallin, z.T. porös und mit eingelagerten dolomitischen Feinsandsteinen (Tonndorf 1965, 1994). Als fazielle Sonderentwicklung treten bis zu 110 m mächtige Bryozoen-Riffe wie z.B. das Profener Riff auf. Diese dolomitisierten, stark porösen bis zelligen Riffkalke sitzen z.T. direkt dem Grundgebirge auf, besitzen jedoch als sog. Patch Reefs nur geringe Größe. Auf das Werra-Karbonat folgt der Mittlere Werra-Ton, eine Wechselfolge von rotbraunen Schiefertonen mit Anhydritlagen, welche bereits eng an den folgenden Werra-Anhydrit anknüpft. Werra-Anhydrite erreichen lokal Mächtigkeiten bis zu 45 m, sind aber z.T. durch Lösungsprozesse im Tertiär auf Hochschollen stark reduziert bzw. vollständig abgelaugt. Graue Schiefertone und Sandsteine des Oberen Werra-Tons (1.5 – 2.0 m) unterteilen die Anhydrite in einen oberen und einen unteren Komplex (Müller 1983; Reichardt & Schulze 1990).

3.2.2 Staßfurt-Folge Z2

Sedimente der Stassfurt-Folge wurden von Mühlmann (1981) als rotbraune z.T. graue Schiefertone mit eingelagerten Dolomit- und Anhydritlagen beschrieben. Insgesamt sind kaum vollständige Profile erhalten, was eine genaue Einstufung der Carbonatfolge über dem Werra-Anhydrit erschwert.

3.2.3 Leine-Folge Z3

An der Basis der Leine-Folge befindet sich der Graue Salzton, der von grauen z.T. sandigen Tonen mit einzelnen Dolomitlagen gebildet wird. Diesem lagert direkt der primär 15 – 20 m mächtige Plattendolomit auf. Den Abschluss der Leine-Folge bilden die Oberen Letten, die zum Hangenden in die kaum zu trennenden Aller-Tone übergehen.

Plattendolomit (GWL II)

Der Plattendolomit erreicht eine Mächtigkeit von 3 – 15 m und überlagert rote Sandsteine sowie Schiefertone. Nach NW in Richtung Merseburg nimmt die Mächtigkeit des Plattendolomits auf 40 m zu, während sie nach SE auf 6 – 15 m abnimmt (Huth 1972). Im N erreicht der Plattendolomit Mächtigkeiten von 15 – 25 m, nimmt jedoch nach S bis nach Gera stetig ab. Für das Einfallen wurden von Plöttner (1977) Werte um 10° E ermittelt. Der Plattendolomit setzt sich aus cm bis dm starken dünnplattigen bis dünnbankigen, z.T.

flaserigen Dolomiten zusammen, getrennt durch feine dunkelgraue Schiefertonlagen. Letztere sind für die plattige Absonderung verantwortlich. Ulrich (1964) und Gläßer (1995) konnten zwischen einer lichtgrauen, bitumenarmen, küstenfernen und einer dunklen, kohlenstoffreichen, küstennahen Fazies mit Anreicherungen von Galenit und Sphalerit unterscheiden. Charakteristisch ist die stets hohe Klüftigkeit des Gesteins. Als Folge von Lösungserscheinungen im Gestein durch zirkulierende Grundwässer kommt es zu Verkarstungserscheinungen und Kavernenbildung. Der graue bis braungraue feinkristalline Dolomit geht zum Hangenden in die feinkörnigen klastischen Oberen Letten über, was auf eine Regression im Übergang zu der kontinentalen Fazies des Unteren Buntsandsteins hindeutet.

3.2.4 Obere Letten

Der Plattendolomit wird durch die klastischen Oberen Letten, einer Wechsellagerung aus 8 – 12 m mächtigen graugrünen und roten, stark glimmerführenden Schluffsteinen und rötlichen sowie grauen Sandsteinen (Mühlmann 1981), überlagert. Die Fazies entspricht einer allgemeinen Regression am Übergang zur Trias. Aufgrund der sehr ähnlichen Ausbildung der überlagernden Schluffsteine der Bröckelschieferfolge ist eine genaue stratigraphische Einordnung oft sehr schwierig.

3.2.5 Bröckelschiefer-Folge

Die Bröckelschiefer-Folge befindet sich im Übergangsbereich Zechstein-Buntsandstein, wird aber stratigraphisch dem Zechstein zugeordnet. Die rotbraunen und grünlichgrauen Ton- und Schluffsteine erreichen Mächtigkeiten von 10 – 20 m und sind faziell eng mit den Oberen Letten verbunden.
Eine genaue stratigraphische Einordnung der Sedimente an der Grenze Perm/Trias ist problematisch. Die in einem Steinbruch bei Caaschwitz aufgeschlossene Perm/Trias-Grenze wurde von Szurlies (1998) ausführlich beschrieben.

3.3 Unterer Buntsandstein

Der feinklastische Untere Buntsandstein, eine Wechselfolge aus Sand-, Schluff- und Tonsteinen, erreicht im S des Untersuchungsgebietes, z.B. bei Trebnitz, maximale Mächtigkeiten von 30 – 40 m. Der Übergang vom Zechstein zum Unteren Buntsandstein ist von Erosionsdiskordanzen begleitet und wird durch einen konglomeratischen Horizont mit Quarzgeröllen markiert. In Richtung N (nördlich von Zeitz, Karte 3-1) streicht er rasch aus.

3.4 Permotriassische Tektonik und Lagerungsverhältnisse

Die Lagerungsverhältnisse der permotriassischen Ablagerungen wurden entscheidend durch die Reaktivierung variszisch angelegter Störungssysteme in der Kreide bestimmt. Die vorherrschenden Richtungen waren NW-SE, NE-SW und N-S. Als Folge der kretazischen Bruchtektonik trat eine verstärkte Brekziierung und Klüftung der Gesteine des Zechsteins und Unteren Buntsandsteins ein. Durch die Vergitterung der Störungen entstand ein kompliziertes Störungsmuster in Form eines Schollenmosaiks aus einzelnen gehobenen bzw. abgesenkten Schollen. Auf den Tiefschollen konnte sich ein mehr oder weniger vollständiges Zechstein-Profil erhalten, hingegen es auf den Hochschollen zu verstärkter Verkarstung und Anhydritablaugung (Subrosion) kam. Durch die tektonische Beanspruchung wurden E-W und N-S streichende Kluftsysteme angelegt. Diese stellen als Bereiche höherer Permeabilität potenzielle Wegsamkeiten für Grundwässer dar. Störungen gelten als Vorzeichnungen für die später dort bevorzugt einsetzende Subrosion. Kreuzungspunkte von Störungen sind dabei

Zentren größerer Wegsamkeiten und intensiver Karst- und Kavernenbildung im carbonatischen/anhydritischen Zechstein (Doll 1982). Infolge intensiver Subrosion sind die Zechsteinmächtigkeiten im Untersuchungsgebiet stark reduziert und kleinräumig entwickelt. Die Reliefunterschiede der heutigen Zechstein-Oberfläche erreichen Werte bis zu 150 m (Rehberg 1997).

3.5 Tertiär und Quartär

Im gesamten Arbeitsgebiet werden Zechstein und Unterer Buntsandstein durch Lockersedimente des Tertiärs überlagert. Nur im äußersten Süden streichen die tertiären Ablagerungen auf der Thüringischen Triashochfläche aus. Insgesamt erreicht die Lockergesteinsbedeckung Mächtigkeiten von durchschnittlich 60 m, kann aber in lokalen Subrosionsstrukturen bis auf 200 m ansteigen.

3.5.1 Paläozän – Unteres Eozän

Das Paläozän und tiefere Eozän ist durch intensive Verwitterung und Abtragung der morphologisch stark gegliederten prätertiären Landoberfläche geprägt. Reliktisch erhalten ist die kaolinitische Verwitterungskruste der permotriassischen Gesteine, die sog. Zersatzzone. Mit Beginn der tertiären Sedimentation erfolgte eine Aufarbeitung des Verwitterungshorizontes in den Dobergaster Schichten. Durch die im Paläozän einsetzende Subrosion des Werra-Anhydrits brach das Gebirge über den sich ausweitenden Karsthohlräumen ein und vermischte sich mit den Tonen der Zersatzzone. Dieses Einsturzgebirge ist ein heterogenes Gemisch aus der kaolinitischen Zersatzzone sowie brekziierten Sedimentgesteinen des Zechsteins und Unteren Buntsandsteins. Bei dem in Bohrungen schwer zu bestimmenden Einsturzgebirge handelt es sich um dunkelgraue bis braune, tonige Schluffe z.T. Sande mit gröberen Komponenten aus Sandstein, Kalkstein, Dolomit und Quarz. Die Mächtigkeit des Einsturzgebirges reicht von 0 – 80 m.

3.5.2 Mittleres Eozän (Bornaer Folge A, GWL 6)

Während sich zyklisch verändernder Sedimentationsbedingungen lagerten sich in einem Schuttfächer fluviatil-limnische Sedimente der Bornaer Folge A ab (Mai & Walther 2000). Der Basiston wird durch lateral weit aushaltende Liegendkiese überlagert. Diese auch als Flusssande bezeichneten Ablagerungen bilden im Liegenden des Flözes 1 den Grundwasserleiterkomplex GWL 6 (Michel 1960; Eissmann 1970; Doll 1982).
Im Hangenden gehen die Sande und Kiese in Tone und Schluffe über, die als Langendorfer Ton den max. 4 m mächtigen Liegendton des Sächsisch-Thüringischen Unterflözes (Flöz 1) bilden. Das Braunkohlenflöz erreicht Mächtigkeiten bis max. 75 m und wird derzeit im Tgb. Profen und im Tgb. Schleenhain abgebaut. Durch die Subrosion bildeten sich im Mittleren Eozän sog. Subrosionskessel aus, in denen es zu lokalen Mächtigkeitszunahmen kam (Mühlmann 1981). In flächenhafter Verbreitung besitzt das Flöz 1 jedoch nur Mächtigkeiten um 4 m. Den Abschluss der Sedimentation im Mittleren Eozän bildet der Deckton im Hangenden des Sächsisch-Thüringischen Unterflözes.

3.5.3 Oberes Eozän (Bornaer Folge B, GWL 5)

Im ausgehenden Mittleren Eozän bildete sich ein von Böhmen bis in den nördlichen Leipziger Raum reichendes Gewässernetz aus Ur-Elster, Zwickauer Fluss etc. und schüttete einen Schwemmfächer nach NW in das sich weiträumig senkende Weißelsterbecken (Meyer 1952; Lauer et al. 1990). Phasen fluviatiler Sedimentation wechselten mit limnischen Kohlebildungsphasen und führten zur zyklischen Abfolge der Bornaer Folge B.

Die Basis des Oberen Eozäns bilden die Älteren Zeitzer Flusssande, die im Untersuchungsgebiet aus grauen bis graubraunen Fein- bis Mittelkiesen sowie Grobsanden bestehen. Sie bilden den GWL 5. Im Hangenden folgt der weit verbreitete Luckenauer Ton. Mit einer durchschnittlichen Mächtigkeit von 2 m ist er abgesehen von lokalen Fehlstellen durch Abbau bzw. Erosion ein Grundwasserstauer. Im Hangenden lagert das Bornaer und Thüringer Hauptflöz (Flöz 2.3) mit normaler Flözmächtigkeit von 12 m und in Kesselstrukturen mit 15 – 25 m (Mühlmann 1981). Durch einen fluviatilen Einschub der Mittleren Zeitzer Flusssande (GWL 42) ist das Thüringer Hauptflöz nördlich der über Domsen - Grunau - Profen verlaufenden "Rusendorfer Gabel" aufgespalten. Den Abschluss der Sedimentation bildet im Hangenden des Flözes 2.3 der Haselbacher Ton.

3.5.4 Oligozän (Bornaer Folge C, Böhlener Schichten)

Durch Transgression im Unteren Oligozän veränderten sich die Sedimentationsbedingungen und es kam zur Ablagerung der marin-brackischen Domsener Sande. Die marin-brackische Fazies wird östlich der Weißen Elster durch fluviatile Fein- bis Grobsande (Jüngere Zeitzer Flusssande) vertreten (Mühlmann 1981).
Die überwiegend aus Feinsanden bestehenden Domsener Sande führen an der Basis braune, kohlige Schluffe in Wechsellagerung mit braunen bis hellgrauen, glimmerführenden Feinsanden. Die durchschnittliche Mächtigkeit beträgt 3 – 4 m. Im Hangenden folgt das Böhlener Oberflöz (Flöz 4), das nur reliktisch in lokalen Absenkungsbereichen erhalten ist. Die Schichtenfolge des Unteren Oligozäns wird als Bornaer Folge C zusammengefasst. Im Unteren Oligozän kam es zu einer zweiten Transgression. Damit entstand die dreigeteilte marine Rupelfolge (Böhlener Schichten), die dem Flöz 4 transgressiv auflagert. Sie besteht aus Unterem Meeressand – Rupelton – Oberen Meeressand und ist ebenfalls nur in abgesenkten Bereichen wie dem Floßgrabenloch erhalten geblieben (Mühlmann 1981). Den Abschluss der oligozänen Sedimentation bilden die fluviatilen Thierbacher Schichten.

3.5.5 Quartär

Die quartären Ablagerungen setzen sich aus pleistozänen bis holozänen Flussschottern zusammen. Darüber hinaus treten glazigene Sedimente als Grund- und Endmoränen (Elster 1,2; Saale 1,2) sowie Lössablagerungen des Saale 3- und Weichselglazials auf den Hochflächen auf. Eine ausführliche Beschreibung gibt Eissmann (1994a,b). Wichtige Grundwasserleiter sind Kiese und Sande der frühelsterglazialen Hochterrasse (GWL 18), der frühsaaleglazialen Hauptterrasse (GWL 15) und der frühweichselglazialen Niederterrasse (GWL 11). Glaziale und periglaziale Prozesse, vor allem die Erosion durch periglaziale oder subglaziäre Rinnensysteme, erodierten im Pleistozän die liegenden tertiären Schichten.

3.6 Hydrogeologie

Die Grundwasserleiter des Weißelsterbeckens können durch hydraulische Trennung in vier Grundwasserstockwerke unterteilt werden (Tab. 3-1).

Tab. 3-1: Gliederung der Grundwasserstockwerke und Grundwasserleiter (GWL) im Untersuchungsgebiet. Lockergesteinsgrundwasserleiter werden durch arabische, Festgesteinsgrundwasserleiter durch römische Zahlen bezeichnet.

1. Grundwasserstockwerk (quartäre Grundwasserleiter)	GWL 18, GWL 16, GWL 15, GWL 14, GWL 11, GWL 10
2. Grundwasserstockwerk (obere tertiäre Grundwasserleiter)	GWL 5, GWL 42, GWL 33, GWL 31
3. Grundwasserstockwerk (untere tertiäre Grundwasserleiter)	GWL 6 (GWL 63-GWL 62-GWL 61)
4. Grundwasserstockwerk (Festgesteins-Grundwasserleiter)	Plattendolomit/Riff (GWL II), Unterer Buntsandstein (GWL I),

Die untersuchte Problematik bezieht sich ausschließlich auf die tieferen Grundwasserleiter GWL II, GWL 6 und GWL 5. Die hangenden Aquifere sind aufgrund der weiträumigen Zerstörung durch Tief- und Tagebau sowie Sümpfungsmaßnahmen hydrogeologisch nicht von Bedeutung.
Zunächst soll eine allgemeine Beschreibung der untersuchten Aquifere gegeben werden. Ergebnisse aus den abgeteuften Forschungsbohrungen an den Schwelereistandorten Profen und Deuben werden in Kap. 5 erläutert.

3.6.1 Grundwasserleiter Plattendolomit/Riff (GWL II)

Die Wasserführung innerhalb des Plattendolomits ist an Klüfte sowie Karsthohlräume gebunden. Der Plattendolomit verhält sich deshalb als Kluft-/Karstgrundwasserleiter. Charakteristisch ist die hohe Transmissivität, durch die dieser Horizont für die Tiefenversenkung von Abwässern besonders gut geeignet war. Die überaus hohe Wasseraufnahme des Gebirges wurde u.a. durch Auffüllversuche beim Bohren des Schluckbrunnens Deuben 5/44 belegt. Dokumentiert wurde für dieses Bohrloch eine Wasseraufnahme von 1.3 – 1.4 m^3/min über einen Zeitraum von 55 h.

Einen Sonderfall stellt das sich lateral mit dem Plattendolomit verzahnende etwa 110 m mächtige Profener Riff dar, das aufgrund der hohen Transmissivität ebenfalls für die Versenkung von Abwässern genutzt wurde. Die maximale Schluckfähigkeit wurde von Picard (1944) für die Bohrung Profen 5/44 mit 2.5 m^3/min über 96 h angegeben. Der sehr poröse bis kavernöse Kalkstein und Dolomit hat eine wesentlich höhere Porosität von bis zu 27 % und dadurch ein erhöhtes Speichervolumen. Trennflächen spielen für die Wasserführung eine geringere Rolle als im Plattendolomit.
Aufgrund der bruchtektonischen Beanspruchung an NW-SE, NE-SW und N-S streichenden Störungen sowie durch die Subrosion gestörte Lagerung ist der Plattendolomit oft nur in isolierten Schollen erhalten. Die hydraulischen Parameter werden entscheidend von der Klüftigkeit des Gesteins beeinflusst.
Als Folge der unterschiedlichen tektonischen Auflockerung und des hydraulischen Verbundes mit hangenden Grundwasserleitern werden beträchtliche Abweichungen in den hydraulischen Parametern (Tab. 3-2) beobachtet. Als Hangendstauer wirken die Oberen Letten bzw. der Bröckelschiefer, während der Graue Salzton den Grundwasserleiter zum Liegenden hydraulisch abdichtet.

Eine flächenhafte Grundwasserneubildung wird für den Plattendolomit aufgrund der hohen Mächtigkeit der überlagernden Schichten des Buntsandsteins bzw. Tertiärs als gering eingeschätzt (Pretschold et al. 1980; Kussmann 1993). Bei entsprechenden Druckverhältnissen kann die Grundwasserspeisung über die Hangendgrundwasserleiter oder über Vorfluter z.B. Weiße Elster, Sprotte erfolgen. Dies ist jedoch nur in der Zeitz-Schmöllner-Mulde möglich (Karte 3-1), da dort der Plattendolomit oberflächennah ansteht. Für diesen Bereich ermittelte Pretschold et al. (1980) eine Grundwasserneubildung für den Unteren bis Mittleren Buntsandstein von 2.4 – 3.7 l/s km^2. In Ausstrichbereichen der Täler, z.B. Weiße Elster nördlich Bad Köstritz, Sprotte in Schmölln, speisen exfiltrierende Vorfluter den GWL II. Insbesondere an Störungszonen, wie z.B. der Crimmitschauer Störung, sind Infiltrationen sehr wahrscheinlich, jedoch bisher nicht quantifiziert.

Tab. 3-2: Hydraulische Parameter für den Plattendolomit des GWL II (nach Präger 2002; mündl. Mitt. Reichardt 2001; Hanzlik et al. 1993; Bohnwagner & Schenke 1992; Hecht 1991).

Parameter	**Minimum**	**Maximum**
kf-Wert	10^{-6} m/s	10^{-3} m/s
Porosität [(1)]	0.5 %	6.0 %
Transmissivität	2.30×10^{-5} m^2/s	2.94×10^{-3} m^2/s
Leistungs-Absenkungs-Quotient Lq	0.007 l/s m	2.9 l/s m

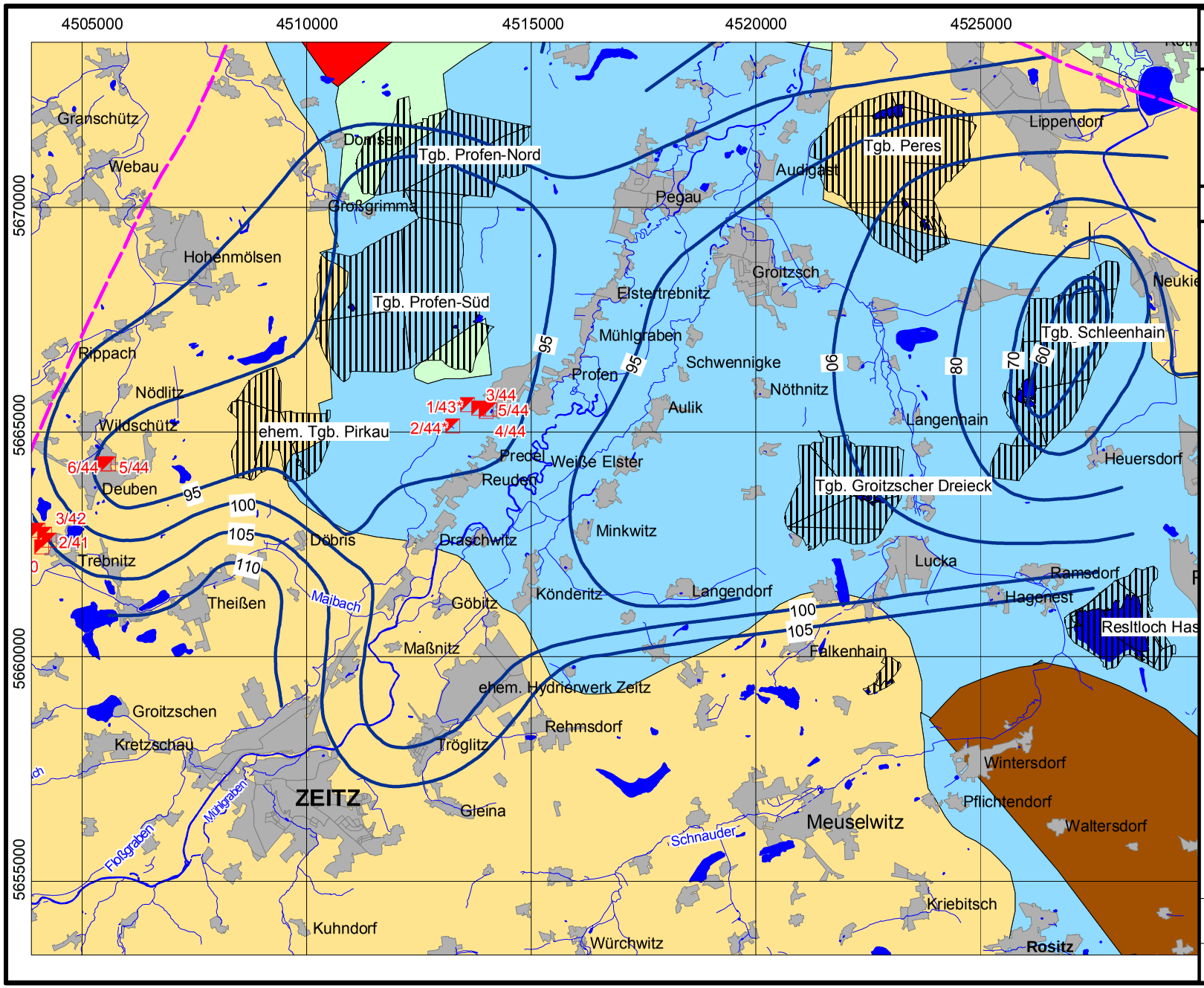
[(1)] nach DIN 52102 an Bohrkernproben

Grundwasserdynamik

Die generelle Strömung des Grundwassers im GWL II des Untersuchungsgebietes ist ausgehend von den Neubildungs-/Infiltrationsbereichen im S nach N gerichtet. Durch die hydraulische Entlastung der Tagebaue Profen und Schleenhain haben sich deutliche Absenkbereiche herausgebildet, die zu einer Veränderung der Grundwasserfließrichtung geführt haben (Karte 3-2). Die Druckverhältnisse im GWL II sind überwiegend gespannt. Durch Sümpfungsmaßnahmen der Tagebaue ist von einer hydraulischen Entlastung von etwa 30 – 35 m auszugehen. Die im Raum Maßnitz befindliche Depression im Grundwasserdruckspiegel ist nicht auf das 1998 stillgelegte Wasserwerk zurückzuführen. Als Ursache werden hydraulische Verbindungen zu den hangenden Grundwasserleitern vermutet. Detaillierte Ausführungen zur lokalen Grundwasserdynamik im GWL II an den untersuchten Standorten werden in Kap. 5 gemacht.

3.6.2 Grundwasserleiter Lockergestein

Im Weißelsterbecken haben sich in den mächtigen Abfolgen aus tertiären und quartären Lockersedimenten drei Grundwasserstockwerke ausgebildet (Tab. 3-1). Durch den seit über einhundert Jahren umgehenden Bergbau wurde das 1. Grundwasserstockwerk und z.T. die hangenden Schichten des 2. Grundwasserstockwerkes stark gestört. Dennoch sind diese Aquifere hinsichtlich der Grundwasserneubildung und Regenerierung des hydraulischen Systems bedeutsam. Das 3. Grundwasserstockwerk , im Liegenden des Flözes 1, ist aufgrund seiner Tiefenlage kaum durch den Bergbau zerstört worden.
Vor diesem Hintergrund wird deutlich, dass der GWL 6 und der GWL 5 die wichtigsten Aquifere für die wasserwirtschaftliche Nutzung mit überregionaler Bedeutung sind. In nachfolgender Beschreibung wurde auf eine Charakterisierung der übrigen Aquifere verzichtet.



Industrielle Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 3-2: Regionale Grundwasserdynamik im Zechstein-Aquifer (GWL II)

Legende

- Schluckbrunnen
- hydraulische Störung
- Grundwasserisohypse GWL II mNN (nach MIBRAG 2001)
- Fluss
- Tagebau
- See
- Ortschaft

Geologie

- Unterer Buntsandstein
- Zechstein
- Oberes Rotliegend
- Unteres Rotliegend
- Permokarbon, Granite
- Proterozoikum (?)

Maßstab

N W E S

0 2,5 5

Kilometer

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Sachsen (2000)
- Geol. Übersichtskarte Sachsen (1998)
- MIBRAG (2001)
- Rehberg (1997)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem: Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

Grundwasserleiterkomplex GWL 6

Der Basisgrundwasserleiter unter dem Flöz 1 bildet einen Komplex aus zwei, lokal drei, Grundwasserleitern. Die größte flächenhafte Verbreitung besitzt der GWL 61. In Wasserwerksbrunnen bzw. Sümpfungsbrunnen wurden jedoch meist die GWL 61 und GWL 62 zusammen verfiltert. Aus diesem Grund werden die beiden Grundwasserleiter in dieser Arbeit undifferenziert als **GWL 6** bezeichnet.

GWL 63

Der GWL 63 ist nur in isolierten Linsen des Beckenzentrums verbreitet. Er verzahnt sich lateral und vertikal mit den Dobergaster Schichten. In den bearbeiteten Schichtenverzeichnissen wurden 5 – 10 m mächtige Mittel- bis Grobsande mit kiesigen Einlagerungen angetroffen. Auf Hochlagen des prätertiären Reliefs ist der GWL 63 nicht entwickelt. Hydraulische Verbindungen zu den hangenden Grundwasserleitern sind nicht bekannt. Hydrogeologisch ist der GWL 63 von untergeordneter Bedeutung.

GWL 62

Der GWL 62 ist im Vergleich zum GWL 63 wesentlich weiter verbreitet und besitzt daher im Untersuchungsgebiet größere hydrogeologische Bedeutung. Infolge der Subrosion zeigt der GWL 62 ebenfalls eine lückenhafte Verbreitung mit wechselnden Mächtigkeiten und unterschiedlicher Teufenlage. Getrennt werden beide durch den Langendorfer Ton, der Mächtigkeiten von 2 – 15 m besitzt. Durch intratertiäre Erosion kommt es zu Verbreitungslücken dieses Stauers im Bereich der Elsteraue aber auch im Beckeninneren. Hydraulische Verbindungen bilden sich zwischen dem GWL 62 und GWL 61 vor allem in den Erosionsbereichen oder durch Schichtausfälle in den Flanken der Subrosionskessel aus. Der Aquifer ist ein Mittel- bis Grobsand mit feinkiesigen Anteilen und einer durchschnittlichen Mächtigkeit von 8 – 12 m, lokal bis zu 30 m. Die Tiefenlage variiert von 50 m NN in Subrosionssenken (z.B. Maßnitzer Kessel) bis 100 m NN in den Hochlagen. In einigen Bereichen lagern die Aquifersedimente direkt dem prätertiären Untergrund auf.
An der Basis des GWL 62 bilden der tertiäre Basiston und die Zersatzzone wichtige Stauer. Beide Horizonte sind jedoch nicht lückenlos verbreitet, woraus hydraulische Verbindungen zum GWL II resultieren (Rehberg 1997).
Der kf-Wert liegt im Bereich von 1.25×10^{-4} m/s bis 2.35×10^{-4} m/s (Koch 1988). Die Druckverhältnisse im GWL 62 sind bei entsprechender Trennung durch Liegend- bzw. Hangendstauer gespannt. Entspannte Druckverhältnisse stellen sich in Ausstrichbereichen der Stauer bzw. im Umfeld der Tagebaue Profen und Schleenhain ein.

GWL 61

Im Bereich des Untersuchungsgebietes ist der GWL 61 flächenhaft am weitesten verbreitet. Seine Mächtigkeit reicht von 4 – 20 m. In Senkungsgebieten wurden max. 40 m erbohrt. Bei einer mittel- bis grobsandigen Ausbildung sind schwankende Kiesanteile (Fein- und Mittelkies) zu verzeichnen.
Der Liegendstauer des GWL 61, der Langendorfer Ton, ist in Mächtigkeiten von 5 – 15 m relativ weit verbreitet. Im Hangenden des GWL 61 lagert das Flöz 1 mit entsprechendem Liegendton. Dadurch ist eine hydraulische Barriere zum hangenden GWL 5 gegeben, die jedoch ebenfalls nicht durchgängig ausgebildet ist. In tertiären Rinnen, wie der Pflichtendorfer-/Löschütz-Rinne, kommt es zu weitreichenden hydraulischen Verbindungen zwischen dem GWL 6 – GWL 5 – GWL 4, da dort die Flöze 1 und 2 nicht abgelagert bzw. erodiert wurden.
Die Schwankungen der hydraulischen Parameter (Tab. 3-3) sind Ausdruck lithologischer Wechsel in der Struktur des Aquifers.

Tab. 3-3: Hydraulische Parameter für den GWL 61 (nach Eccarius 2000; Wucher et al. 1994).

Parameter	**Minimum**	**Maximum**
kf-Wert	0.6×10^{-4} m/s	1.2×10^{-3} m/s
effektive Porosität (n_e)	16.5 %	24 %
Speicherkoeffizient	1.5×10^{-4}	2.8×10^{-3}

GWL 5

Der Grundwasserleiter im Hangenden des Flözes 1 ist ebenfalls eine fluviatile Folge aus Mittel-/Feinkiesen bis Grobsanden, dessen Verbreitungsgrenze über der des GWL 61 liegt. Die Mächtigkeit reicht von 5 – 12 m, seltener bis 20 m. Große Mächtigkeiten treten in den syngenetischen Subrosionskesseln z.B. im Maßnitzer Kessel auf. Es können zwei Abfolgen, die fein- bis mittelkiesig beginnen und mit Mittel- bis Grobsanden abschließen, ausgehalten werden. Die hydraulischen Parameter wurden in Tab. 3-4 zusammengestellt.

Tab. 3-4: Hydraulische Parameter für den GWL 5 (nach Eccarius 2000; Wucher et al. 1994).

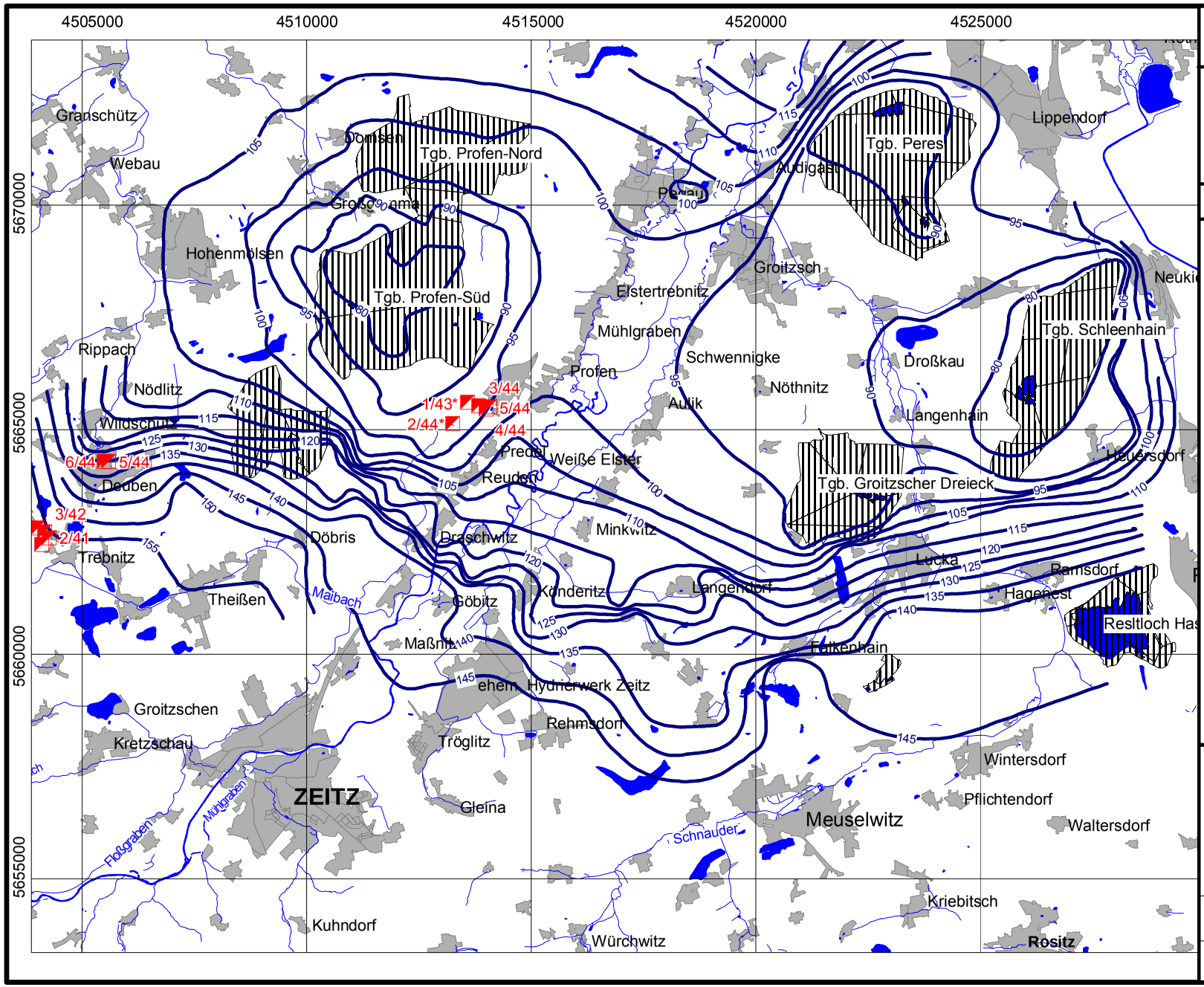
Parameter	**Minimum**	**Maximum**
kf-Wert	4.9×10^{-5} m/s	3×10^{-3} m/s
effektive Porosität (n_e)	22.7 %	-
Speicherkoeffizient	7.5×10^{-5}	-

Daraus lassen sich relativ starke Variationen in den kf-Werten ableiten, die Ausdruck der z.T. deutlichen Veränderungen in der Korngröße des Sedimentes sind.
Über pleistozäne Erosionsrinnen z.B. der Döbriser Rinne kommt es zu hydraulischen Verbindungen mit den hangenden und liegenden Grundwasserleitern. Im Hangenden bildet der Luckenauer Ton (1 – 3 m) bzw. das überlagernde Flöz 2.3 einen Stauer. Bei unterbrochener Flözbildung und nicht ausgebildetem Luckenauer Ton sind hydraulische Verbindungen zu den quartären Grundwasserleitern möglich. Im Vorfeld der Tagebaue Profen und Schleenhain wird der GWL 5 durch die Randriegelbrunnen entwässert, so dass er auf Hochlagen der Aquiferbasis trocken sein kann.
Bei Trennung des GWL 5 von den Hangendgrundwasserleitern bauen sich gespannte Druckverhältnisse auf, die sich an den Verbreitungsgrenzen der Stauer über hydraulische Verbindungen ausgleichen (Koch 1988).

Grundwasserdynamik

Durch den Betrieb der Wasserfassungen, z.B. WW Hagenest, WW Maßnitz und der Sümpfungsbrunnen der Tagebaue Profen, Schleenhain und Groitzscher Dreieck, kam es zur Entspannung der Druckpotenziale in den tertiären Aquiferen GWL 6 und GWL 5. In der Grundwasseroberfläche bilden sich z.T. weiträumige Absenktrichter aus (Karte 3-3).

Durch Vorfeldentwässerung und Sümpfungsmaßnahmen innerhalb der Tagebaue Profen, Schleenhain und Groitzscher Dreieck veränderte sich die Grundwasserfließrichtung in Richtung der Entlastungsbereiche. Die generelle Fließrichtung ist in beiden Aquiferen sehr ähnlich, im Raum Profen von SW nach NE und im Raum Schleenhain von SE nach NW (Karte 3-3). In Richtung der Entlastungsbereiche waren zunehmend steilere hydraulische Gradienten zu beobachten.



Industrielle Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 3-3:
Regionale Grundwasserdynamik im Tertiär-Aquifer (GWL 61)

Legende

- Schluckbrunnen
- Grundwasserisohypsen GWL 61 mNN (nach MIBRAG 2001)
- Fluss
- Tagebau
- See
- Ortschaft

Maßstab

N W E S

0 2,5 5

Kilometer

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Sachsen (2000)
- MIBRAG (2001)
- Rehberg (1997)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem:
Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

4 Material und Methoden

4.1 Bohrungen und Grundwassermessstellen

4.1.1 Neubohrungen Profen, Deuben/Trebnitz

An den ehemaligen Schwelereistandorten wurden im Zeitraum 02/2001 bis 09/2001 je drei Bohrungen in den Versenkungshorizont abgeteuft. Das tertiäre Deckgebirge wurde im Linksspülbohrverfahren durchteuft, anschließend verrohrt und zementiert. Der Zielhorizont, der Zechstein-Plattendolomit bzw. das Profener Riff, wurde im Seilkernbohrverfahren durchteuft und Bohrkerne (Kerndurchmesser 100 mm) entnommen. Nach der Bohrlochmessung wurden die Bohrungen als Grundwassermessstellen ausgebaut. Die Filterbereiche wurden je nach geologischen Verhältnissen z.T. als Stufenfilter ausgeführt. Als Ausbaumaterial wurde im Grundwasserbereich Edelstahl (Wickeldrahtfilter, Vollrohr) und im Deckgebirge Stahl bzw. PVC verwendet. Die Bohrprofile und Ausbaupläne sind in Anlage 2 dokumentiert.

4.1.2 Bohrungen, Brunnen und Grundwassermessstellen fremder Rechtsträger

Neben Grundwassermessstellen des UFZ wurden zusätzlich eine Vielzahl von Bohrungen, Brunnen und Grundwassermessstellen mit freundlicher Genehmigung der folgenden Firmen, Behörden und Institutionen ausgewertet und für eigene Probenahmen genutzt:

- MIBRAG mbH Theißen
- Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie, Freiberg
- Staatliches Amt für Umweltschutz Halle (Saale)
- Zeitzer Standortgesellschaft mbH
- LMBV mbH Bitterfeld
- MIDEWA GmbH, Zeitz

4.2 Geophysikalische Bohrlochmessungen

Zur Beschreibung lithologischer und hydraulischer Veränderungen innerhalb des Aquifers vor allem hinsichtlich Tongehalt, Porosität, Klüftigkeit, Dichte sowie zur Identifikation von Grundwasserzuflussbereichen im Gebirge wurden umfangreiche geophysikalische Bohrlochmessungen (Tab. 4-1) durchgeführt. Damit war es möglich, innerhalb des Aquifers zwischen lithologisch und hydraulisch verschiedenen Bereichen zu unterscheiden, was für die Beschreibung der Schadstofftransportprozesse im Kluftaquifer von großer Bedeutung war.

Die geophysikalischen Messungen wurden von der Firma HGN Hydrogeologie GmbH, Torgau, ausgeführt. Potenzielle Zuflussbereiche wurden über Sal-Temp-Logs und CAL-Logs im offenen Bohrloch und Zuflussbereiche im ausgebauten Filterbereich über Flowmetermessungen durch Richter (2002) bestimmt.

Tab. 4-1: Übersicht über angewendete geophysikalische Messverfahren im offenen Bohrloch zur relativen Erfassung von Gesteinseigenschaften.

Messverfahren	**physikalisches Prinzip**	**Einheit**	**Ziel der Messung**
3-Arm-Kaliber (CAL)	Bohrlochgeometrie	mm	Feststellung von Kavernen, Bohrloch-wandausbrüchen und intensiv geklüfteten Bereichen
Gamma-Ray-Log (GR)	Messung der natürlichen Radioaktivität (^{238}U, ^{232}Th, ^{40}K)	api [(1)]	lithologische Profilgliederung, Bestimmung des Tongehalts
Gamma-Gamma-Dichte (GG)	Gamma-Quelle: Cs, Co Adsorption der Gamma-Strahlung durch das Gebirge	cps	Dichte, Porosität des Gesteins
Neutron-Neutron (NN)	Neutronen-Quelle: α-Emitter ^{252}Cf; Messung der Strahlung aus Brems- und Einfangprozessen der Neutronen mit dem Gebirge	WW [(2)]	lithologische Profilgliederung, Porosität des Gesteins, Wasseranteil im Gebirge
Akustischer Bohrloch Televiewer (ABTV)	Abtasten der Bohrlochwand mit Ultraschallsignal (800 kHz), Messung Amplitude und Laufzeit des reflektierten Signals	[-]	räumliche Erfassung der Klüfte und Kluftsysteme
Fokussiertes-Elektrolog (FEL)	Messung des scheinbaren spezifischen elektrischen Widerstandes im Gestein	Ohm m	Lithologie, Aussagen zur Porosität und Sättigung
Fluidlogging	Messung der Verteilung einer NaCl-Tracerlösung im Bohrloch	l/min	natürliches hydraulisches Regime
Sal-Temp-Log	Messung der Leitfähigkeit und Temperatur des Bohrlochfluids (Grundwasser)	mS/cm °C	Detektion hydraulisch aktiver Horizonte durch Änderung in der Leitfähigkeit/Temperatur im offenen Bohrloch
Flowmeter	hydraulische Anregung des Bohrlochs mittels Pumpe bzw. Auffüllung, Messung des vertikalen Strömungsprofils mit Impeller-Flowmeter	m/min l/s	qualitative und quantitative Erfassung von Zufluss- und Verlusthorizonten im Filterbereich

[(1)] Standardmaß des American Petroleum Institute
[(2)] Wasser-Wert, wassergesättigten Ton hat den Wasser-Wert 1

Für detailliertere Ausführungen zu den angewendeten geophysikalischen Messverfahren wird auf Fricke & Schön (1999) verwiesen.

4.3 Probenahme

Im Rahmen dieser Arbeit wurden entsprechend der Zielstellung Grundwasserproben, Sedimentproben sowie Sedimentgesteinsproben entnommen und untersucht.

4.3.1 Grundwasser

Die Probenahme des Grundwassers erfolgte nach den Vorschriften des DVWK Merkblatts 245 (DVWK 1997). Bei der Probenahme wurden die physikochemischen Parameter pH, elektrische Leitfähigkeit (Lf), Redoxpotenzial (E_H) und der Sauerstoffgehalt in einer Durchflusszelle gemessen. Angaben zu Messgeräten befinden sich in Anlage 3.

4.3.2 Lockersedimente

Die Proben der Lockergesteinsgrundwasserleiter dienten zur Untersuchung der Schwefel- und Sauerstoffisotopen der Sulfide und löslichen Sulfate. Dazu wurden mit freundlicher Unterstützung durch die MIBRAG mbH im Tgb. Profen und Tgb. Schleenhain die Aquifere GWL 5 und GWL 6 beprobt.
Die Proben wurden an frischen Anschnitten entnommen und sofort mit Schutzgas (Argon) begast. Transport und Lagerung bis zur Aufbereitung erfolgten in Argon-begasten PE-Beuteln in gasdichten HDPE-Fässern.

4.3.3 Sedimentgesteine aus Bohrungen

Zur Bestimmung der Phenolgehalte in den Gesteinen des Versenkungshorizontes wurden aus den dafür abgeteuften Kernbohrungen in Profen und Deuben/Trebnitz Proben des Zechstein-Plattendolomits bzw. Zechstein-Riffs entnommen. Die Bohrkerne wurden dazu auf der Baustelle direkt aus dem Kernrohr in eine mit Schutzgas (Argon) kontinuierlich gespülte Box überführt. Teile des Kerns wurden mit sterilen Zangen entnommen, in sterile Aluminiumfolie gewickelt und sofort in flüssigem Stickstoff schockgefroren. Der Transport erfolgte in mit flüssigem Stickstoff gefüllten Styroporboxen bis ins Labor. Bis zur Aufbereitung und Messung wurden die Proben bei –25 °C in Argonatmosphäre gelagert.

4.4 Grundwasseranalytik

4.4.1 Haupt- und Spurenelemente

Ziel der Haupt- und Spurenelementbestimmungen waren u.a.:

- hydrochemische Charakterisierung
- Ableitung hydrochemischer Trends
- Bewertung des Natural Attenuation Potenzials

Die verwendeten Analysenmethoden der untersuchten Haupt- und Spurenelemente sowie ihre Nachweisgrenzen wurden in Anlage 3 zusammengefasst.

4.4.2 Phenolanalytik

Schwelwassertypische Phenole wurden durch Herrn Dipl.-Chem. Tobias Licha (Friedrich-Schiller-Universität Jena) an Grundwasser- und Gesteinsproben nach der Methodik von Licha (2001a,b) analysiert. Das Ziel bestand in der Konzentrationsbestimmung einzelner Phenolhomologe als Grundlage für die Beschreibung von Transport- und Sorptionsprozessen sowie der Bewertung des Natural Attenuation Potenzials.

Derzeit existieren zwei international standardisierte Verfahren zur Phenolanalytik: die Analytik von Einzelphenolen über Gaschromatographie mit massenspektrometrischer Detektion, Method 604 (U.S.EPA 1999) und der photometrische Nachweis als Phenolindex-Summenparameter (DIN 38409/H16).
Bei den meisten Altlastenuntersuchungen beschränkt man sich auf die Phenole der EPA-Liste (Tab. 4-2) bzw. auf den Phenolindex. Für die Untersuchung von Schwelereistandorten ist diese Liste jedoch unzureichend, da außer 2,4-DMP keine weiteren Alkylphenole erfasst werden.

Tab. 4-2: Nachweisgrenzen der EPA-Phenole nach Method 604 (U.S.EPA 1999).

Parameter	Nachweisgrenze (µg/L)
2-Chlorophenol	0.31
2-Nitrophenol	0.45
Phenol [(1)]	0.14
2,4-Dimethylphenol [(1)]	0.32
2,4-Dichlorophenol	0.39
2,4,6-Trichlorophenol	0.64
4-Chloro-3-methylphenol	0.36
2,4-Dinitrophenol	13.0
2-Methyl-4,6-dinitrophenol	16.0
Pentachlorophenol	7.4
4-Nitrophenol	2.8

[(1)] Verbindung typisch für Schwelereien und Gaswerkstandorte.

Von Licha et al. (2001a) wurde festgestellt, dass der Phenolindex, eine photometrische Messung eines Farbstoffs, der bei der Reaktion von Phenolen mit 4-Aminoantipyrin entsteht, nicht auf para-substituierte Phenole, Hydroxy- und Dihydroxyphenole oder mit geringerer Empfindlichkeit auf meta- und ortho-substituierte Dimethyphenole reagiert (Tab. 4-3). Ein weiteres Problem ist die Reaktion anderer Verbindungen wie Huminstoffe, Aniline oder heterozyklischer Verbindungen mit 4-Aminoantipyrin, was zu Verfälschungen des Messwerts führen kann (Licha et al. 2001a). In dieser Arbeit wurden deshalb Phenol und schwelwassertypische Alkylphenole mittels Headspace-SPME-GC-MS bestimmt. Die von Licha et al. (2001a,b) entwickelte Analysenmethode zur Bestimmung underivatisierter Alkylphenole im Wasser und Feststoff erfolgte mit der solid-phase micro extraction technique (SPME; Möder et al. 1997; Pörschmann et al. 1998) unter Verwendung einer semipolaren chiralen Säule vom Typ Permethyl-α-Cyclodextrin zur selektiven Anreicherung und wasserfreien Überführung in das GC-MS. Die Nachweisgrenzen lagen je nach Verbindung und Matrix im Bereich von 0.1 – 12 µg/l (Tab. 4-3).
Die Analytik der Gesteins- und Grundwasserproben auf Phenol und Alkylphenole wurde durch Herrn Dipl. Chem. Tobias Licha (Friedrich-Schiller-Universität Jena) an der Sektion Hydrogeologie des UFZ durchgeführt.

Tab. 4-3: Nachweisgrenzen der SPME-GC-MS-Analysenmethode im Wasser und Feststoff im Vergleich zu den Empfindlichkeitsfaktoren des Phenolindex für Phenol und Alkylphenole (nach Licha et al. 2001a).

Stoff	**Empfindlichkeitsfaktor Phenolindex**	**Nachweisgrenze Wasser (µg/l) Headspace-SPME-GC-MS**	**Nachweisgrenze Feststoff (µg/kg) Headspace-SPME-GC-MS**
Phenol	1.00	2.95	11.80
o-Kresol	0.76	0.21	0.84
m-Kresol	0.65		
p-Kresol	0.00		
2,3 DMP	0.41	0.14	0.56
2,4 DMP	0.00		
2,5 DMP	0.53		
2,6 DMP	0.54		
3,4 DMP	0.00		
3,5 DMP	0.10		
2,4,6 TMP	0.00	0.08	0.32
2,3,5 TMP	0.11		
3,4,5 TMP	0.00		
2,3,6 TMP	0.35		

Probenaufbereitung Gesteinsproben

Die Zerkleinerung erfolgte in einer mit Trockeneis gekühlten Achatkugelmühle. Jeweils 25 g Probe wurden dann mit 40 ml 0.05 M NaOH versetzt, in der Mikrowelle bei 125 °C für 55 min extrahiert und anschließend analysiert. Diese Methode erreicht nach Licha et al. (2001b) für Kalksteine und Tone wesentlich höhere Ausbeuten (Wiederfindungsrate 70 – 100 %) als bisherige Arbeitsweisen.
Die Aufbereitung der Proben wurde durch Herrn Dipl. Chem. Tobias Licha an der Friedrich-Schiller-Universität Jena durchgeführt.

Probenaufbereitung Grundwasserproben

Als Probengefäß wurden 100 ml Hungate-Röhrchen verwendet, in denen analog zur DIN 38409/H16 Kupfersulfat zur Konservierung der Probe vorgelegt war. Die Proben wurden dunkel und gekühlt bis ins Labor transportiert und dort sofort analysiert.

4.5 Isotopenuntersuchungen

Isotopenuntersuchungen lassen nicht nur Rückschlüsse auf die Herkunft im Grundwasser gelöster Inhaltstoffe z.B. Sulfat zu, sondern weisen auch bestimmte isotopenselektive geochemische Prozesse, wie beispielsweise mikrobiellen Schadstoffabbau (Spence et al. 2001), nach.

Die Isotopenbestimmungen im Rahmen dieser Arbeit (Tab. 4-4) wurden in der Arbeitsgruppe Isotopenhydrologie des Umweltforschungszentrums Leipzig-Halle GmbH durchgeführt.

Tab. 4-4: Kurzübersicht der ausgewählten Isotopenmethoden und der entsprechenden Untersuchungsziele.

Grundwasser-Sulfat	**Sediment/Sedimentgestein**	**Untersuchungsziel**
$\delta\,^{34}S\text{-}SO_4$	$\delta\,^{34}S$ löslicher Sulfate des Aquifersediments	• isotopische Charakterisierung der Sulfat-Quellen • Bestimmung der Herkunft des Sulfats im Grundwasser • Nachweis von Grundwasseraufstieg anhand charakteristischer Isotopensignatur
$\delta\,^{18}O\text{-}SO_4$	$\delta\,^{34}S$ sedimentärer Pyrite	
	$\delta\,^{34}S$ / $\delta\,^{18}O$ Zechstein-Anhydrit	

4.5.1 Schwefel-34

Schwefel kommt in unterschiedlichen Konzentrationen und Bindungsformen in der Atmosphäre, Lithosphäre, Hydrosphäre und Biosphäre vor. Er besteht aus vier stabilen Isotopen mit folgenden Häufigkeiten (Hoefs 1997):

^{32}S = 95,02 %; ^{33}S = 0,75 %; ^{34}S = 4,21 %; ^{36}S = 0,02 %

Das Verhältnis von $^{32}S/^{34}S$ zeigt Variationen durch eine Vielzahl an anorganischen und organischen Prozessen in der Natur und ist deshalb von besonderem Interesse in den Geowissenschaften. Es wird ausgedrückt als $\delta^{34}S$, definiert durch Gl. 4-1.

$$\delta\,^{34}S(‰) = \left[\frac{\frac{^{34}S}{^{32}S_{Probe}}}{\frac{^{34}S}{^{32}S_{Standard}}} - 1 \right] \times 1000 \qquad \text{Gl. 4-1}$$

Die Angabe des $\delta^{34}S$-Gehalts erfolgt vereinbarungsgemäß als Isotopenverhältnis $^{32}S/^{34}S$ relativ zum internationalen Stand CDT (Cañon-Diablo-Troilite).
Geochemische Prozesse wie z.B. Sulfatreduktion sind mit z.T. erheblichen Isotopenfraktionierungen verbunden, die als isotopisches Signal in den daraus gebildeten Mineralen wie z.B. Pyrit gespeichert werden. Durch Oxidations- und/oder Lösungsprozesse werden diese Sulfate in das Grundwasser eingetragen. Durch Bestimmung ihrer Isotopengehalte lassen sich Rückschlüsse auf ihre Herkunft ziehen.

Grundwasser (d ^{34}S –SO_4)

Die mit Chloroform (~ 1 ml/l) und Zinkacetat versetzte Wasserprobe wurde zunächst mit 0.45 µm Membranfilter filtriert, durch Zugabe von HCl auf einen pH von 3.5 – 4.0 eingestellt und anschließend auf ca. 80 °C erwärmt. Durch Zugabe von 0.5 M $BaCl_2$-Lösung wurde das Sulfat quantitativ als $BaSO_4$ gefällt. Der 24 h gealterte Niederschlag wurde mit einem aschefreien Blaubandfilter filtriert und mit $H_2O_{dest.}$ neutral gewaschen. Das getrocknete Filter wurde im Muffelofen bei 800 °C verascht. Das $BaSO_4$ wurde im Reaktionsrohr mit Cu/CuO bei 1020 °C unter Anwesenheit von V_2O_5 thermokatalytisch zum SO_2-Messgas umgesetzt. Die Messung erfolgte online im Massenspektrometer (Finnigan MAT, Typ delta-S) mit Elementaranalysator und Conflow II-Einlass (open split). Der Analysenfehler beträgt bei Doppelbestimmung ±0.3 ‰.

Sedimentärer Pyrit (d ^{34}S-Pyrit)

Zur Bestimmung des ^{34}S-Gehalts in sedimentären Sulfiden wurde die von Zhabina & Volkov (1978) beschriebene Chromreduktionsmethode verwendet. Durch die Arbeiten von Tuttle et al. (1986) und Canfield et al. (1986) konnte gezeigt werden, dass diese Methode weder organischen Schwefel noch Sulfatschwefel reduziert. Wird aus der Probe vorher der monosulfidische und elementare Schwefel vollständig entfernt, ist dieser Aufschluss spezifisch für Pyrit. Eisenmonosulfide, meist bestehend aus den Mineralen Machinawit (FeS_{1-x}), Greigit (Fe_3S_4), Pyrrhotit ($Fe_{1-x}S$) sowie amorphen Monosulfiden (FeS_{ppt}), werden mit 6 N HCl versetzt und als H_2S ausgetrieben. Diese säurelöslichen Monosulfide werden auch als AVS (acid volatile sulfide) bezeichnet.
Da die untersuchten Sedimente kein AVS bzw. elementaren Schwefel enthielten, konnte auf deren Entfernung verzichtet werden.
Zum Aufschluss der Eisendisulfide, meist Pyrit (FeS_2, kubisch) und Markasit (FeS_2, orthorhombisch), wurde 30 – 50 g getrocknetes Sediment in einer Destillationsanlage unter Stickstoffatmosphäre mit salzsaurer $CrCl_2$-Lösung zu H_2S reduziert. Das entstehende H_2S wurde im Stickstoffstrom in eine Vorlage aus Zinkacetat-Lösung geleitet und als ZnS gefällt. Anschließend wurde der Niederschlag durch Zugabe von 0.1 M $AgNO_3$-Lösung zu AgS umgefällt.

4.5.2 Sauerstoff-18 (δ ^{18}O-SO_4)

Der ^{18}O-Gehalt des im Grundwasser gelösten Sulfats ist abhängig von der Sulfat-Quelle und dem Reaktionsweg. Bei der Lösung von Sulfaten wie z.B. Anhydrit kommt es zu keinen messbaren Veränderungen im δ^{18}O des gelösten Sulfats (Clark & Fritz 1997). Wird jedoch das Sulfat durch die Oxidation von sedimentären Sulfiden gebildet, so entsteht Sulfat mit deutlich geringeren δ^{18}O-Werten. Diese isotopischen Unterschiede bilden die Grundlage für die Differenzierung zwischen Sulfidoxidation im GWL 6 und Grundwasseraufstieg aus dem Zechstein (GWL II).

Präparation, Messung

Ausgangssubstanz ist das $BaSO_4$ aus der Präparation für die ^{34}S-Bestimmung. Durch Pyrolyse im Graphitofen bei 1450 °C wurde das $BaSO_4$ zu CO-Messgas umgesetzt. Die Messung erfolgte im Finnigan Delta plus XL (thermo quest) mit Pyrolyseeinrichtung und Conflow II-Einlass (open split). Der Fehler lag bei Doppelbestimmung bei ±0.8 ‰. Die Werte, angegeben in (‰), beziehen sich auf den internationalen Standard SMOW.

4.5.3 Kohlenstoff-13 (δ^{13}C-DIC)

Aufgrund großer isotopischer Unterschiede in den Kohlenstoffquellen ist δ^{13}C ein guter Tracer für die Carbonatentwicklung im Grundwasser.
Geochemische Reaktionen wie z.B. Carbonatlösung oder Mineralisation organischen Kohlenstoffs führen zu Veränderungen im DIC-Pool des Grundwassers, die sich durch charakteristische Verschiebungen des δ^{13}C nachweisen lassen. Isotopenfraktionierungen, z.B. durch Calcitausfällung, führen ebenfalls zu isotopischen Veränderungen, die ausführlich durch Clark & Fritz (1997) beschrieben werden.

Präparation, Messung

Die Wasserprobe wurde im Gelände mit frisch angesetzter $Ba(OH)_2$-Lösung gefällt und luftdicht verschlossen. Im Labor wurde der Niederschlag ($BaCO_3$ + $BaSO_4$) filtriert und mit $H_2O_{dest.}$ gewaschen. Nach Trocknung wurde durch Zugabe konzentrierter Phosphorsäure das $BaCO_3$ als CO_2-Messgas ausgetrieben und massenspektrometrisch (Finnigan Mat, Typ Delta S) gemessen. Die Angabe der $\delta^{13}C$-Werte erfolgte in (‰) bezogen auf den internationalen Standard PDB.

5 Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole

5.1 Kenntnisstand

5.1.1 Bisherige Arbeiten

In der Region Zeitz wurde durch die in den 1930er bis 1970er Jahren weit verbreitete kohlechemische Industrie (z.B. Schwelereien, Gaswerke, Kohledestillationsanlagen) Boden und Grundwasser u.a. durch Phenole, PAK und BTEX verunreinigt.
Nicht zuletzt durch das hohe Aufkommen an toxischen Abwässern haben Schwelereien großen Anteil an den heutigen Altlasten. Neben der Einleitung in Tagebaurestlöcher, z.B. Vollert (Eccarius 2000), wurden an zwei Schwelerei-Standorten von 1944 bis 1975 ca. 5 Mio. m^3 hoch kontaminierte Abwässer in bis zu 200 m tiefe Schluckbrunnen in den Zechstein (Plattendolomit/Riff) versenkt bzw. verpresst.

Durch die Untersuchungen von Picard (1944), Weber (1955) und Huth (1972) wurde erstmals auf die Gefährdung für das Grundwasser durch den Aufstieg der versenkten Schwelwässer in die hangenden Lockergesteinsgrundwasserleiter aufmerksam gemacht. In nachfolgenden Untersuchungen u.a. durch Plöttner (1977), Hug (1991, 1992, 1993), Viehweg & Bohnwagner (1994) wurde das Kontaminationsrisiko immer wieder kontrovers diskutiert. In der Arbeit von Rehberg (1997) wurden erstmals Grundwasserproben aus dem Abstrom mittels SPME-GC-MS (Möder et al. 1997) nach Einzelsubstanzen getrennt analysiert. Die Gehalte lagen in der Summe jedoch bei max. 80 µg/l. Dies schien zunächst die Vermutung zu bestätigen, dass Phenole inzwischen abgebaut bzw. im Grundwasserstrom transportiert und verdünnt worden sind. Jedoch wurde in neueren Arbeiten u.a. von Lerner et al. (2000), Thornton et al. (2001) an einem Standort der Kohleteerdestillation in England bei sehr ähnlichem Schadstoffspektrum im Grundwasser nur äußerst geringe Phenol-Abbauraten beobachtet.
In allen bisherigen Untersuchungen blieben zudem das nähere Umfeld der Schluckbrunnen bzw. die Schluckbrunnen selbst völlig unberücksichtigt. Auch für eine gezielte Erkundung des Grundwasserabstroms sah man in der Vergangenheit keine Veranlassung.
Durch fortschreitenden Tagebau und Überkippung von Liegendwasserdurchbrüchen im Tgb. Profen ist in Zukunft mit ansteigenden Druckpotenzialen zu rechnen. Isotopenuntersuchungen von Rehberg (1997) bestätigten den lokalen Aufstieg von Grundwässern aus dem Zechstein-Aquifer z.B. im Tgb. Profen.

5.1.2 Phenole im Grundwasser

Hauptschadstoffe in industriellen Abwässern aus der Pyrolyse von Braunkohlen und Ölschiefern sind Phenole. Dazu gehören u.a. das Phenol (C_6H_5OH) aber auch kurzkettige Alkylphenole z.B. Kresole, Ethylphenole sowie Di- und Trimethylphenole, deren Gehalte mit zunehmender Prozesstemperatur abnehmen (Porath 1999). Halogenierte Phenole bzw. Nitrophenole sind nicht typisch. Grundwasserkontaminationen durch Phenole sind weltweit durch zahlreiche Industrieanlagen wie z.B. Gaswerke, Braunkohle-/Ölschiefer-Schwelereien, Holzbehandlungsanlagen und Deponien ein stets aktuelles Problem (Rosenfeld & Plumb 1991; Kiilerich & Arvin 1996; Johansen et al. 1997).

Die Stoffgruppe der Phenole gehört aufgrund ihrer hohen Wasserlöslichkeit zu den im Grundwasser gelösten organischen Schadstoffen. Sie werden ausschließlich im gelösten Zustand transportiert. Mit durchschnittlichen Transportweiten ("Reaktionsräumen") im Grundwasser von 300 – 600 m galten Phenole bisher als relativ leicht abbaubar (Ehrlich et al. 1982; Teutsch et al. 1997).

Ihr Abbau vollzieht sich im Zusammenhang mit sog. Natural Attenuation Prozessen (u.a. Nyer & Duffin 1997; Azadpour-Keeley et al. 1999). Natural Attenuation ist als Kombination aus Verdünnung, biotischen und abiotischen Abbaureaktionen zu verstehen, die zu einer Verringerung der Schadstoffkonzentrationen entlang des Fließpfades von der Schadstoffquelle zum Beobachtungsbrunnen führen (Lerner et al. 2000). Für viele organische Schadstoffe ist die Biodegradation durch im Aquifer natürlich vorkommende Mikroorganismen (Bakterien, Pilze) der Schlüsselprozess des Abbaus. Beim Abbau verschiedener Phenole in aeroben Aquiferen konnten Klecka et al. (1990) eine Halbwertszeit von einigen Tagen beobachten. Unter anaeroben Redoxverhältnissen (Nitrat-reduzierend, Eisen-reduzierend, Sulfat-reduzierend, methanogen) konnten Bossert & Young (1986), Wang et al. (1988), Suflita et al. (1989), Lovley & Lonergan (1990) und Godsy et al. (1992a,b) den Abbau einzelner Phenole nachweisen. Die beobachteten Halbwertszeiten lagen im Bereich von Wochen. Das Degradationspotenzial wird von der Molekülgröße sowie der Anzahl und Stellung der substituierenden Alkylgruppen bestimmt (Lerner et al. 2000).
Trotz des nachgewiesenen Abbaus von Phenol und einfach methylierten Phenolen ist für eine Vielzahl an höher methylierten Di- und Trimethylphenolen bisher kein Abbau unter anaeroben Bedingungen untersucht worden. Durch Lerner et al. (2000) wurden jüngst Zweifel am vollständigen Abbau von Phenol, Kresolen und Dimethylphenolen unter natürlichen Bedingungen geäußert.

In vielen Felduntersuchungen wurde zudem mit dem Summenparameter Phenolindex (DIN 38409/H16) gearbeitet, der auf die toxischeren Alkylphenole mit einer Empfindlichkeit von 0 – 76 % gegenüber Phenol reagiert (Licha et al. 2001a). Für die Überwachung von Deponien und industriellen Abwässern existiert ein standardisiertes Verfahren zur Einzelbestimmung von Phenolen, die Liste der EPA-Phenole (EPA Method 604; U.S.EPA 1999). Diese Liste umfasst vorwiegend Nitrophenole und halogenierte Phenole, Phenol und 2,4-DMP. Andere Alkylphenole werden nicht erfasst.
Durch Johansen et al. (1997) wurden im Grundwasser eines Gaswerkes in Dänemark Dimethylphenole mit einem Anteil von 85 % am Gesamtphenol als Hauptschadstoffgruppe innerhalb der Phenole identifiziert und auf die Bedeutung der Alkylphenole im Grundwasser aufmerksam gemacht.
Durch die lückenhafte analytische Bestimmung phenolischer Einzelverbindungen und ungeeignete Parameterlisten für spezielle Schadensfälle (z.B. Schwelereien, Gaswerke) wurde in der Vergangenheit die leichte Abbaubarkeit der Phenole stark verallgemeinert. Auch in Laborversuchen wurde häufig nur der Abbau von Phenol (C_6H_5OH) bzw. einfacher Alkylphenole z.B. Kresole (C_7H_8OH) untersucht.

Gesicherte Aussagen zur Kontamination des Grundwassers an Schwelereistandorten sind jedoch nur mit einer geeigneten Analytik möglich, die alle relevanten Einzelsubstanzen erfasst.

5.2 Historie der Tiefenversenkung von Schwelereiabwässern

Die Schwelereien Profen und Deuben der A. Riebeck'sche Montanwerke AG begannen bereits im Jahr 1936 im Zeitz-Weißenfelser Braunkohlenrevier mit der Gewinnung von Teer, Leichtöl und Schwelkoks durch die Verschwelung von Braunkohle bzw. Braunkohlenbriketts. Nach 1949 wurden die Schwelereien durch das VEB Braunkohlenwerk "Erich Weinert" übernommen und bis in die 1970er Jahre betrieben. Inzwischen sind die Produktionsanlagen vollkommen rückgebaut.

In der technologischen Entwicklung der Braunkohlenschwelerei wurde von ca. 1870 bis 1935 das Rolle-Verfahren und ab 1935 vorwiegend das Lurgi-Verfahren angewendet (Lissner & Thau 1953). In der Schwelerei Deuben wurden nach Struzina (1997) Braunkohlenbriketts im Lurgi-Verfahren verschwelt. Die Schwelerei Profen verwendete ebenfalls einen Lurgi-Ofen jedoch wurden Rohbraunkohle bzw. Nasspresslinge genutzt. Ältere Anlagen im Zeitz-Weißenfelser-Revier, z.B. die Schwelerei Groitzschen (Kiesl 1997), verschwelten Rohbraunkohle im Rolle-Verfahren.

In dem ausführlich durch von Alberti (1983) beschriebenen Lurgi-Verfahren wurden Braunkohlenbriketts im Spülgasschwelofen nach Vortrocknung bis auf 600 °C erhitzt. Durch die Umspülung mit heißem Schwelergas wurden Teer, Öle, Benzin und Schwelgas ausgetrieben. Als Rückstand blieb Schwelkoks übrig. Über einen nachgeschalteten elektrischen Abscheider (EGR) wurde Teer und in der Kondensationsanlage Öle und Benzine aus dem Gas abgetrennt. Das Schwelwasser entstand durch das Einspritzen von Wasser im Vorkühler zum Abkühlen des Schwelgases bzw. im Querkühler durch Kondensation der wässrigen Gasbestandteile aus dem Schwelgas. Neben verschiedenen Phenolen enthielt das Schwelwasser größere Mengen an C2-C7-Fettsäuren, Ammoniak, Methylalkohol, Essigsäure, Stickstoff-Heterozyklen und Schwefelwasserstoff (von Alberti 1983; Huth 1972; Leibnitz et al. 1957).

Tab. 5-1: Eigenschaften und Zusammensetzung von unbehandelten Schwelwässern. k.A. = keine Angaben.

	von Alberti (1983)	**Huth (1972)**	**Mangold et al. (1973) Schwelwasser Böhlen, Espenhain**
Farbe	zunächst klar, nach Oxidation der Phenole braun-braunrot	k.A.	k.A.
Geruch	stechend, nach früher verwendeten Krankenhaus-Desinfektionsmitteln	k.A.	k.A.
Besonderheiten	mitgerissene Teerbestandteile	k.A.	Schaumbildung
pH	k.A.	k.A.	8.0 – 8.5
Phenole	7 – 15 g/l	11 – 12 g/l	8.0 – 8.6 g/l
Ammoniak	4 – 6 g/l	k.A.	6.4 – 7.6 g/l
Schwefelwasserstoff	0.4 – 1.0 g/l	0.9 g/l	0.8 – 2.1 g/l
Fettsäuren	0.5 – 7.5 g/l	k.A.	8.8 – 13.0 g/l
BSB5	k.A.	k.A.	20 – 30 g/l
$KMnO_4$-Verbrauch	k.A.	k.A.	100 – 120 g/l

Die Schwelereien Profen und Deuben begannen etwa 1944 bzw. 1939/40 mit Genehmigung des Preußischen Bergamtes Zeitz bzw. Oberbergamtes Halle mit der Versenkung von phenolhaltigen Abwässern in den Untergrund. Dazu wurden bis 1944 in Profen fünf und in Deuben/Trebnitz sechs Schluckbrunnen in den Zechstein-Plattendolomit bzw. Riffkalk gebohrt (Karte 5-1). Die Enddurchmesser der Bohrlöcher reichten im Zielhorizont (Zechstein)

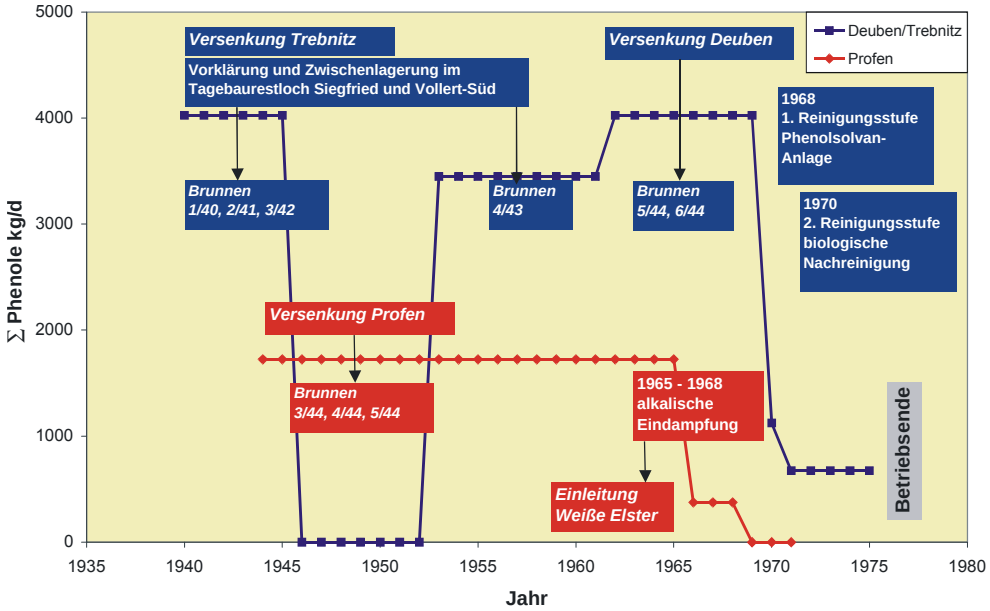


Abb. 5-1: Zeitliche Veränderung des Phenol-Eintrages in das Grundwasser durch die Versenkung von Schwelereiabwässern an den Standorten Profen und Deuben/Trebnitz. Phenolmengen wurden aus den Angaben von Huth (1972) in kg/d umgerechnet.

von 165 – 216 mm. Die Bereiche oberhalb des Zechsteins wurden mit Stahlrohr ausgebaut, während die Filterstrecken offen (ohne Filterausbau) blieben. Ein typisches Ausbauschema ist in Anlage 1 dargestellt. Zwischen den beiden Standorten bestehen deutliche Unterschiede hinsichtlich der Betriebszeit und dem Volumen an versenkten Abwässern (Abb. 5-1). Insgesamt wurden über einen Zeitraum von ca. dreißig Jahren ~ 5.2 Mio. m^3 Abwässer versenkt, was einer Masse von ~ 50000 t Phenol (gesamt) entspricht.

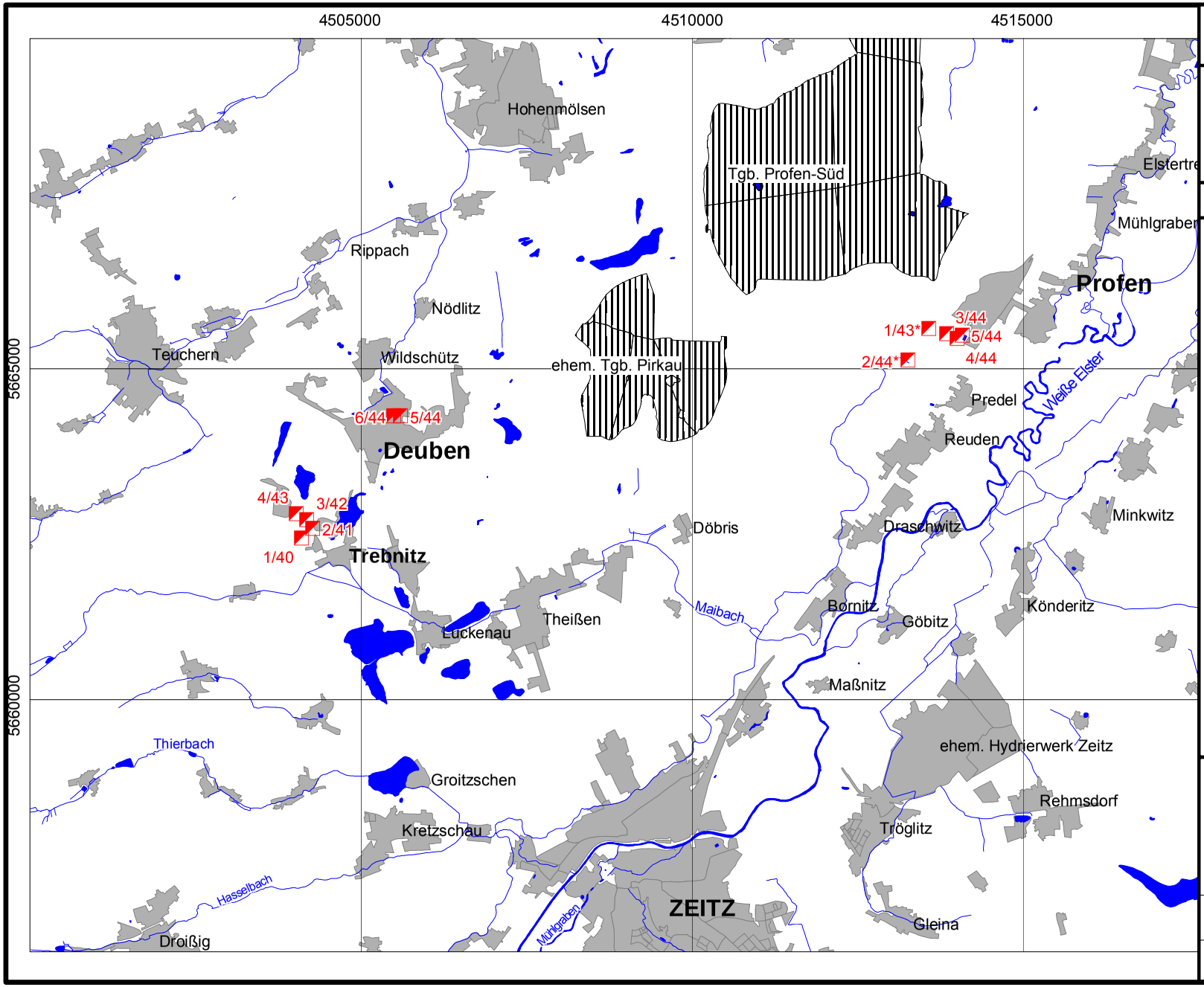
5.2.1 Standort Deuben/Trebnitz

Die täglich anfallenden Mengen erreichten in Deuben eine Größenordnung von bis zu 450 m^3. Bis 1961 wurden die Schwelwässer zur Zwischenlagerung und Vorklärung in das Tagebaurestloch Siegfried bzw. Vollert-Süd (Eccarius 2000) geleitet und über die vier Brunnen in Trebnitz versenkt.

Im Laufe der Zeit verringerte sich die Schluckfähigkeit der Brunnen, was zur Aufgabe einiger Brunnen führte. Bereits 1955 waren die Brunnen 1/40, 2/41 und 3/42 am Standort Trebnitz nicht mehr schluckfähig. Im Jahr 1959 war auch die Schluckfähigkeit des Brunnens 4/44 stark eingeschränkt, so dass die Schwelwässer mit einem Druck von 4 at verpresst wurden. Ab 1961 bis zur Stilllegung 1975 wurden die Abwässer in Deuben direkt über die Brunnen 5/44 und 6/44 versenkt.

Die Phenol-Konzentrationen in den Abwässern haben sich durch die Inbetriebnahme verschiedener Reinigungsstufen z.B. Phenolsolvananlage von anfänglich 10 – 12 g/l auf 1 – 2 g/l reduziert. Im Jahr 1945 konnte zwar eine Phenolsolvananlage (von Alberti 1983) zur Rückgewinnung der Phenole als Rohstoff fertiggestellt werden, jedoch wurde diese Anlage im Zuge der Reparationsleistungen an die Sowjetunion demontiert.

Erst im Jahre 1968 wurde nach Huth (1972) und Plöttner (1977) in Deuben eine neue Phenolsolvananlage in Betrieb genommen, die 1970 um eine nachgeschaltete biologische Reinigungsstufe erweitert wurde.



Industrielle Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 5-1:
Lage der Schluckbrunnen Profen und Deuben/Trebnitz

Legende

- Schluckbrunnen
- Fluss
- Tagebau
- See
- Ortschaft

2/44* 1/43* Brunnen aufgrund geringer Transmissivität nicht als Schluckbrunnen genutzt

Maßstab

N W E S

0 2 4
Kilometer

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Sachsen (2000)
- Rehberg (1997)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem: Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

5.2.2 Standort Profen

In der Schwelerei Profen wurden seit 1942/43 drei Lurgi-Spülgasschwelöfen zur Verschwelung von zunächst ca. 300 t/d Rohbraunkohle betrieben. Ab 1947 wurden 200 t/d vorgetrocknete Nasspresslinge der Brikettfabrik Profen verschwelt. Das gewonnene Öl und der Schwelteer wurden in Tanks zur Mineralölfabrik Köpsen befördert und dort aufgearbeitet (Picard 1944). Die Schwelerei Profen begann Ende 1944 mit der Versenkung von Schwelwässern zunächst über die Brunnen 3/44 und 4/44 (Karte 5-1). Später wurde auf den Brunnen 5/44 umgestellt. Die Brunnen 1/43 und 2/44 wurden wegen geringer Schluckfähigkeit nicht zur Versenkung genutzt. Von dem anfallenden Schwelwasser wurde ein geringer Teil als Einspritzkondensat für die Gasvorkühler genutzt, der Hauptteil wurde zur Abkühlung und Ölabscheidung durch zwei Betonbehälter mit je 40 m^3 Volumen geleitet, bevor es über eine Pumpe (Pumpenleistung 5 m^3/h) in die Schluckbrunnen gepumpt wurde (Picard 1944). Die täglich anfallende Menge an Abwässern betrug ca. 100 – 120 m^3 /d (Picard 1944) und erreichte max. 150 m^3/d (Huth 1972).
Von 1965 bis 1968 wurden die Abwässer in einer alkalischen Eindampfungsanlage gereinigt und anschließend in die Weiße Elster abgeleitet (Huth 1972). Ab 1969 bis zur Stilllegung der Anlage im Januar 1971 wurden die anfallenden Abwässer mit Kesselwagen nach Deuben transportiert, dort gereinigt und in die Brunnen Deuben 5/44 und Deuben 6/44 versenkt.

5.3 Charakteristik schwelwassertypischer Phenole

5.3.1 Vorkommen, Eigenschaften, Toxizität

Unter Phenolen werden aromatische organische Verbindungen zusammengefasst, bei denen mindestens ein Wasserstoffatom am Benzolring durch eine Hydroxylgruppe substituiert ist. Sind weitere Wasserstoffatome gegen Substituenten von niedrigerer Priorität als die Hydroxylgruppe ausgetauscht, z.B. Methylgruppen (CH_3), entstehen Homologe der Phenole. Phenole sind schwache organische Säuren, die bei pH 7 überwiegend undissoziiert (neutral) vorliegen.
Phenole sind hydrophile semipolare Verbindungen. Aufgrund ihrer weiten Verbreitung in der Industrie u.a. bei der Herstellung von Weichmachern, Insektiziden, Herbiziden, Arzneimitteln, Desinfektionsmitteln etc. gehören Phenole zu den häufig anzutreffenden Schadstoffen. In der Natur entstehen Phenole durch mikrobielle Umsetzung und Neusynthese von tierischem und pflanzlichen Material (z.B. Holz, Laub), jedoch in geringeren Konzentrationen.
Das strukturelle Polymer Lignin besteht zu etwa 30 % aus Pflanzenmaterial und ist das zweit wichtigste Polymer in der Natur nach der Zellulose (Adler 1977). Aromatische Verbindungen übernehmen im Pflanzengewebe aufgrund ihrer Toxizität gegenüber Mikroorganismen bzw. durch Polymerisationsreaktionen Schutzfunktionen. Aromatische Verbindungen wie Phenol und seine Derivate sind Bestandteil vieler natürlicher Rohstoffe wie z.B. Braunkohle (van Heemst et al. 1999) und Erdöl (Taylor et al. 1997; Rolfes 1999). Phenol wurde als sog. Kreosot zur Holzkonservierung verwendet. In den USA gehört Phenol mit ~ 2.1 Mio. t zu den 40 am meisten industriell produzierten Chemikalien (ChemExpo 1999). Es wird u.a. zur Herstellung von Polycarbonat-Harzen, Explosivstoffen, Farben, Holzschutzmitteln, Textilien, Medikamenten und Desinfektionsmitteln verwendet.

Gaswerke, Teerwerke und Schwelereien in Mitteldeutschland nutzten aus politischen Gründen Braunkohle als Rohstoff. Dabei wurden große Mengen an Phenolen freigesetzt. Aufgrund ihrer guten Wasserlöslichkeit zählen Phenole zu den Grundwasser gefährdenden

Schadstoffen. Alkylphenole, Homologe bei denen ein oder mehrere Wasserstoffatome durch Methylgruppen (CH_3) substituiert sind, entstehen bei der Verschwelung (Pyrolyse) der Kohle.

Die Wasserlöslichkeit und damit die Mobilität der Alkylphenole nimmt von den C0- zu den C3-Phenolen ab (Abb. 5-2). Aufgrund ihrer sehr guten Löslichkeit in Wasser (Tab. 5-3, Anlage 4), geringen Retardation und hohen Ökotoxizität werden Alkylphenole in die Wassergefährdungsklasse 3 (stark wassergefährdende Stoffe) eingeordnet (Montgomery 1996; Streit 1994). Toxikologische Untersuchungen von Kahru et al. (2000) zeigen die unterschiedliche Ökotoxizität der Phenolhomologe (Tab. 5-2).

Tab. 5-2: Ökotoxizität von Phenol und Alkylphenolen getestet an verschiedenen aquatischen Mikroorganismen (Kahru et al. 2000).

Verbindung	**$L(E)C_{50}$ [1] [mg/l]**	**Toxizität**
Phenol	1 – 10	toxisch
p-Kresol	≤ 1	sehr toxisch
2,4-DMP	1 – 10	toxisch
2,3-DMP	1 – 10	toxisch
3,4-DMP	≤ 1	sehr toxisch

[1] Lowest 50 % Lethal (Effective) Concentration

Die Flüchtigkeit der Phenole kann über die Henry-Konstante H, den Verteilungskoeffizient eines Stoffs zwischen der Gasphase und der Wasserphase, beschrieben werden. Obwohl Phenole an ihrem charakteristischen Geruch erkennbar sind, ist ihre Flüchtigkeit im Vergleich zu anderen Schadstoffen z.B. Benzen (Tab. 5-3) gering.

Tab. 5-3: Flüchtigkeit und Wasser-Löslichkeit von Phenol und 2,4-Dimethylphenol im Vergleich zum Benzen. Daten aus U.S.EPA (1996a,b).

Verbindung	**Henry-Konstante (atm m^3/mol)**	**Löslichkeit (g/l)**
Phenol	3.97×10^{-7}	82.80
2,4-Dimethylphenol	2.00×10^{-6}	7.87
Benzen	*5.55×10^{-3}*	*1.75*

Eine ausführliche Darstellung der physikochemischen Eigenschaften erfolgt durch Verschueren (1996).

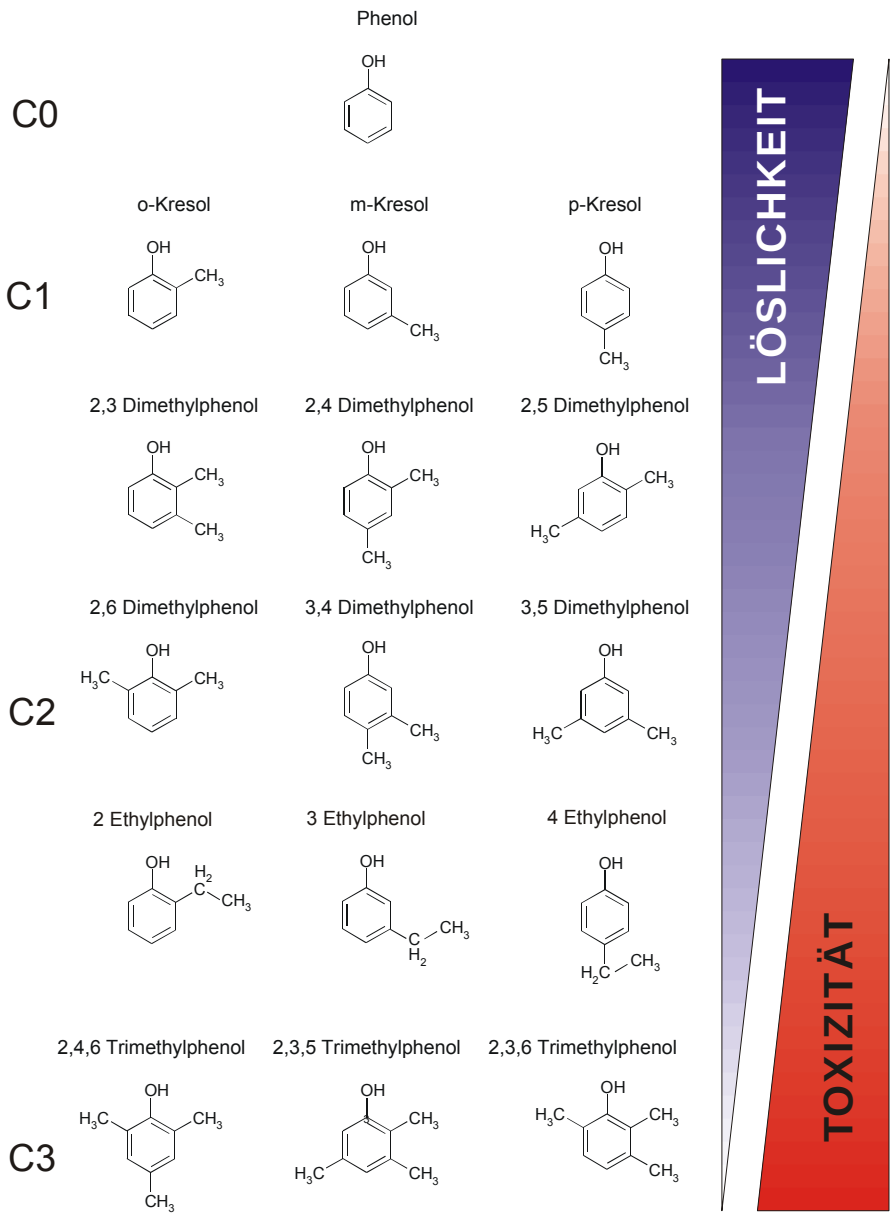


Abb. 5-2: Vereinfachtes Schema zu tendenziellen Veränderungen in der Löslichkeit und Toxizität der Alkylphenole in Abhängigkeit von der Anzahl an C-Atomen und der Struktur.

5.3.2 Richt- und Grenzwerte

Von einigen Bundesländern wurden in der Vergangenheit unterschiedliche Richt- und Grenzwerte für die Schadstoffgruppe Phenole aufgestellt (Tab. 5-4). Zur Beurteilung von Grundwasserverunreinigungen wurden durch die "Arbeitsgruppe Grundwasser und Wasserversorgung der Länderarbeitsgemeinschaft Wasser" (LAWA-AGG) im 'Arbeitskreis Prüfwerte' human- und ökotoxikologisch begründete Geringfügigkeitsschwellen u.a. für Phenole abgeleitet. Die Geringfügigkeitsschwelle konkretisiert dabei für die einzelnen Stoffe oder Stoffgruppen den Schadensbegriff des Wasserhaushaltsgesetzes und orientiert sich dabei an den Trinkwassergrenzwerten der Deutschen Trinkwasserverordnung TVO (von der Trenck et al. 1999).

Obwohl die für Trinkwasser geltende TVO einen Grenzwert für Phenole von 0.5 µg/l vorschreibt, wurde bei der Festlegung der Geringfügigkeitsschwelle (von der Trenck et al. 1999) die Nachweisgrenze des Phenolindex nach DIN 38409/H16 von 10 µg/l berücksichtigt.

Verbindliche Grenzwerte für C1-C3-Alkylphenole existieren bisher weder in Deutschland noch international.

Tab. 5-4: Richt- und Grenzwerte für Phenol in µg/l (nach Rippen 1995; von der Trenck et al. 1999).

Eingreifwert/ Prüfwert (mg/l)	**A**	**B**	**C**	**Sanierungsziel**
Baden-Württemberg Liste (1993)	Hintergrundwert	Prüfwert	Toleranzwert	**10**
	10	**30**	**100**	
Holland Liste (1991)	Referenzwert	nähere Untersuchung	Sanierungs-untersuchung	-
	0.2	**15**	**50**	
BBodschV Prüfwert Wirkungspfad Boden-Grundwasser	**20** (1)			
Geringfügigkeitsschwelle LAWA-AGG (von der Trenck et al. 1999)	**20** (2)			

(1) ISO/ DIS 8165 – 2: 01.97 Determination of selected monohydric Phenols by derivatasation and Gas Chromatography

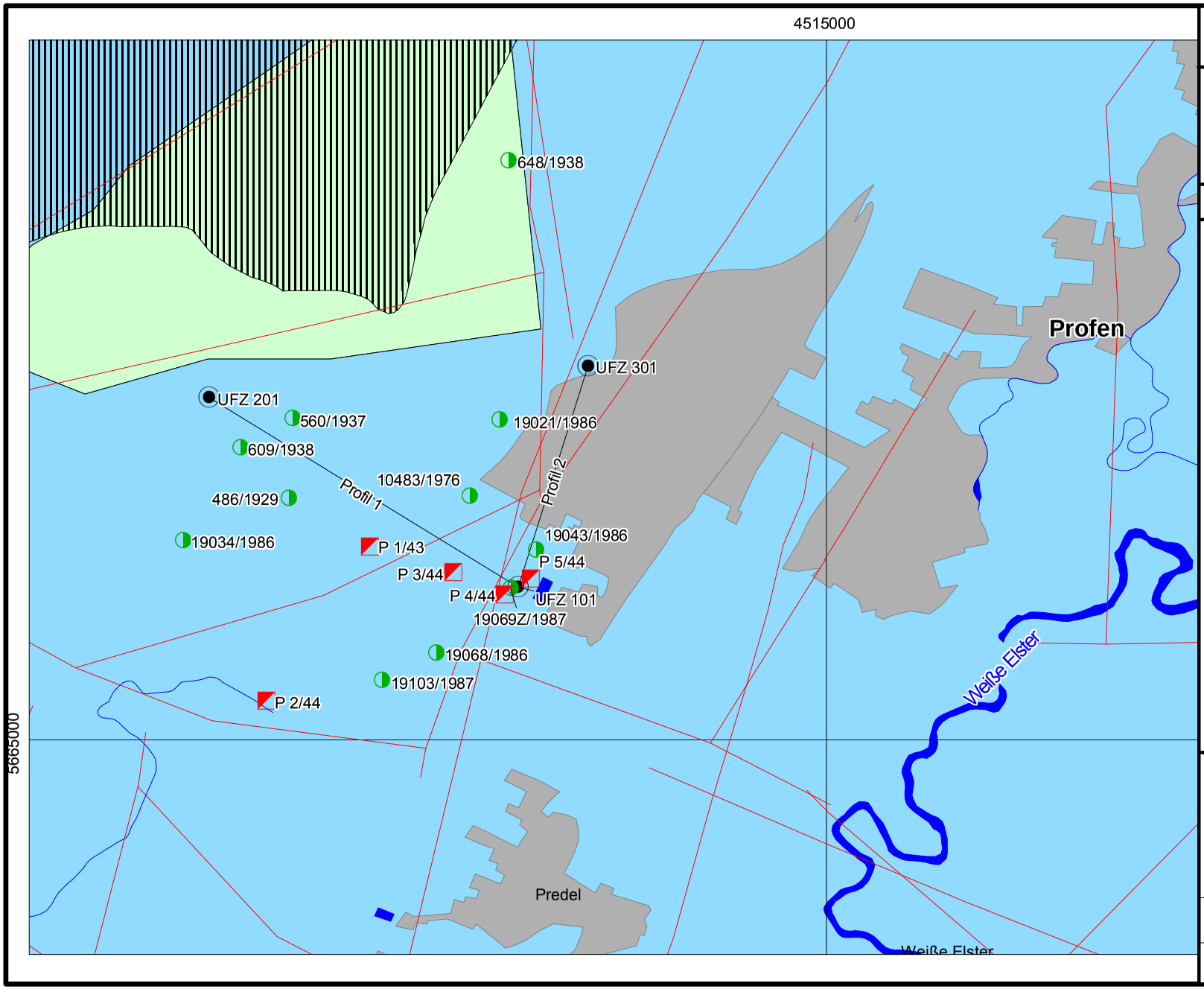
(2) Phenolindex nach Wasserdampfdestillation 20 µg/l und Unterschreitung der sensorischen Wahrnehmungsschwelle

5.4 Der geologische Untergrund der Versenkungsstandorte

Detailkenntnisse zum strukturellen und lithologischen Aufbau des Zechstein-Aquifers sind Grundvoraussetzung für das Verständnis des Schadstofftransports im Grundwasser. Dazu wurden an den Standorten Profen und Deuben/Trebnitz je drei Bohrungen in den Versenkungshorizont Zechstein-Plattendolomit bzw. in die Rifffazies des Zechsteins abgeteuft und als GWM ausgebaut. Die Bohransatzpunkte wurden so gewählt, dass sowohl das direkte Umfeld der Schluckbrunnen als auch der Grundwasserabstrom erfasst werden konnten.
In den nachfolgenden Darstellungen beziehen sich Teufenangaben immer auf mNN, um Höhenunterschiede einzelner Horizonte und ihre Lage zum Grundwasserdruckspiegel besser zu verdeutlichen sowie die Vergleichbarkeit zwischen den Bohrungen zu gewährleisten.

5.4.1 Standort Profen

Das geologische Ziel der Bohrungen UFZ 101, UFZ 201, UFZ 301 am Standort Profen bestand im Durchteufen des Versenkungshorizontes, der als Bryozoenriff bzw. Plattendolomit ausgebildet war. Das Liegende wurde durch einen dichten graugrünen, teils rötlich marmorierten, geschieferten Schluffstein gebildet. Das als Schiefer angesprochene Gestein ist dem Grundgebirge zuzuordnen und hat vermutlich ordovizisches Alter (mündl. Mitt. Gläßer 2001).



Industrielle Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 5-2:
Standort Profen- Lage der UFZ-GWM, Erkundungsbohrungen und Schluckbrunnen

Legende

- Schluckbrunnen
- Erkundungsbohrungen
- UFZ-GWM (Zechstein)
- geolog. Störung
- Fluss
- Tagebau
- See
- Ortschaft

Geologie

- Unterer Buntsandstein
- Zechstein
- Proterozoikum

Maßstab

N W E S

0 375 750

Meter

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Sachsen (2000)
- Geol. Übersichtskarte Sachsen (1998)
- Rehberg (1997)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem:
Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

Klüfte im Gestein waren vollständig mit Hämatit oder Calcit gefüllt. Die Oberkante des Grundgebirges wurde in folgenden Höhenlagen erbohrt:
UFZ 101 –51.04 mNN, UFZ 201 –60.11 mNN, UFZ 301 –47.9 mNN.
Die Oberfläche des Grundgebirges hat ein westliches Einfallen, wird jedoch wie aus Abb. 5-3 ersichtlich durch einzelne Störungen versetzt. Das überaus dichte Gestein hatte eine sehr geringe Porosität von ~ 4 % und wirkt aufgrund kaum vorhandener offener Klüfte als Grundwasserstauer.

Über dem Grundgebirge lagert ein poröses Bryozoen-Riff, das durch die Schluckbrunnen 3/44, 4/44 und 5/44 als Schluckhorizont genutzt wurde. Die Bohrung UFZ 101 wurde folglich in unmittelbarer Nähe der Schluckbrunnen abgeteuft (Karte 5-2). Der erstmalig durchteufte Riffkörper hatte eine maximale Mächtigkeit von 110 m. Der Übergang zum 1.5 – 5 m mächtigen Grundgebirge war unterschiedlich ausgebildet. Während in der Bohrung UFZ 101 im Übergangsbereich ein Wechsel von Dolomit- und Kalksteinbrocken mit Schieferbruchstücken auftrat, wurde in der Bohrung UFZ 301 ein dunkelgrauer Tonstein mit dünnen Lagen aus Fasergips und Pyrit erbohrt. Die Gesteine des Zechsteins lagen in Rifffazies vor.

In der Bohrung **UFZ 101** lag die Zechsteinoberfläche (Rifftop) bei 64 mNN und war durch Lösungsprozesse stark verkarstet und kavernös. Auch im Inneren des Riffs wurden größere Kavernen angetroffen. Während im Hangenden verkarstete Kalksteine auftraten, war zum Liegenden eine zunehmende Dolomitisierung zu beobachten. Die insgesamt hohe Porosität im Kalkstein verringerte sich zum liegenden Dolomit von 24.5 % (45.5 mNN) auf 19.3 % (–4.3 mNN). Darüber hinaus war eine abnehmende Klüftigkeit festzustellen. Diese lithologischen Veränderungen im Bohrkern konnten durch geophysikalische Bohrlochmessungen (Abb. 5-11) bestätigt werden. Im Gamma-Ray-Log (GR-Log) waren durch höhere γ-Aktivitäten erhöhte Tonanteile im verkarsteten Teil des Profils erkennbar. Durch das Gamma-Gamma-Log (GG-Log) konnten gefügebedingte Dichteunterschiede sowohl im Kalkstein als auch im Dolomit ausgehalten werden, wobei klüftige/poröse Gesteine durch höhere Strahlungsintensität infolge geringerer Absorption erkennbar waren (Abb. 5-11).
Der Anteil an biogenem Skelettmaterial im Gestein (Muscheln, Bryozoen, Korallen) war überwiegend hoch. In den Gesteinsporen und auf Klüften fanden sich teilweise schwarzgraue Beläge mit deutlichem Phenolgeruch. Darüber hinaus waren in Poren und Klüften Kristallisationen von Calcit (im Hangenden) und Dolomit (im Liegenden) sowie Pyritminerale erkennbar. Im Gestein waren organoleptisch Phenol-Kontaminationen nachweisbar. Zum Liegenden war eine Abnahme in der Geruchsintensität festzustellen. Proben konnten aufgrund technischer Probleme nur bis –5 mNN entnommen werden.

Ausgehend vom Schadstoffeintrag an den Schluckbrunnen wurde die Bohrung **UFZ 201** ca. 1125 m im NW der UFZ 101 (Karte 5-2) abgeteuft. Die Oberfläche des Riffs fällt steil nach NW bis auf ca. –50 mNN ein (Abb. 5-3, Profen 1/43, UFZ 201). In der UFZ 201 wurde Zechstein bei –49.1 mNN angetroffen und lag damit 113.1 m tiefer als in UFZ 101. Die Tatsache, dass in beiden Bohrungen das Grundgebirge in unterschiedlicher Teufe erbohrt wurde und die Riffoberfläche bereits in der Bohrung Profen 1/43 auf dem Niveau –50 mNN lag, bestätigt eine tektonische Störung, die sowohl im Grundgebirge als auch im Zechstein zu einem vertikalen Versatz führte (Abb. 5-3).

Der Zechstein war als sehr harter, dichter Dolomit in einer Mächtigkeit von nur 11 m ausgebildet. Das Gestein hatte mit 0.2 – 6.3 % eine deutlich geringere Porosität als in der Bohrung UFZ 101. Im auffallend trockenen Bohrkern waren nur sehr wenige offene Klüfte mit großen Kluftabständen erkennbar. Im Gestein waren einzelne bis 5 mm dünne teilweise

calcitische Tonlagen anzutreffen. Beim Bohrprozess waren ungewöhnlich niedrige bis keine Spülungsverluste zu verzeichnen. Dies deutet bereits auf die geringe Wasserwegsamkeit des Gebirges im Umfeld dieser Bohrung hin. Der biogene Skelettanteil im Gestein war im Vergleich zur Bohrung UFZ 101 stark verringert. Im Gestein wurden keine organoleptischen Anzeichen für Kontamination durch Schwelwässer festgestellt, weshalb auf eine analytische Untersuchung verzichtet wurde.

Die Bohrung **UFZ 301** wurde 720 m im NNE von UFZ 101 abgeteuft. Die Zechsteinoberfläche wurde bei 13.5 mNN erbohrt und lag damit 50.5 m tiefer als in UFZ 101. Insgesamt war jedoch ein vergleichsweise flaches Einfallen der Riffoberfläche von SSW nach NNE zu beobachten. Die Abfolge aus Kalkstein im hangenden (Mächtigkeit 16.4 m) und Dolomit im liegenden Teil des Profils (Mächtigkeit 22 m) wird durch einen 20.5 m mächtigen Komplex aus Ton und schwach verfestigten kalkigen Ton-/Schluffsteinen und Feinsandsteinen unterbrochen, die vermutlich in einer Phase der Riffdestruktion abgelagert wurden. Im GR-Log (Abb. 5-14) waren die tonigen Schichten des Ton-Kalkstein-Komplexes sowie im Hangenden und Liegenden durch erhöhte γ-Aktivitäten klar abgrenzbar. Im GG-Log, der nur im Dolomit gemessen wurde, waren kaum Dichteunterschiede festzustellen.
Im Profil (Abb. 5-4) war weiterhin erkennbar, dass die Basis des Zechsteins in etwa gleichem Höhenniveau von –51 mNN (UFZ 101) bzw. –48 mNN lag und somit kein massiver vertikaler Versatz durch tektonische Störungen existierte.

Der erbohrte zellig-poröse Kalkstein/Dolomit erreichte eine Mächtigkeit von 17 m. Es wurde ein deutlich höherer biogener Skelettanteil (Riffbildner) beobachtet als in den Gesteinen der UFZ 201. Der graue Dolomit war insgesamt wenig geklüftet. Zwischengeschaltete bis 15 mm dünne tonige Lagen waren selten. Kernmärsche mit geringem Kerngewinn z.B. bei –38.9 mNN waren erste Anzeichen für intensiv geklüftete Horizonte. Der Dolomit geht an der Basis in dichte dolomitische Tonsteine über.
Das Gestein zeigte organoleptische Anzeichen einer Kontamination durch Phenole, die jedoch vorwiegend auf Bereiche mit höherer Porosität und/oder Klüftigkeit bzw. auf Grenzflächen beschränkt waren. Auch hier waren schwarze Kluftbeläge auffällig.

Im Hangenden des in der **UFZ 101** erbohrten Riffs lagerte ein 10 m mächtiger Ton (tertiärer Basiston), der an der Basis mit Kalkgeröllen, im Top mit Quarzkiesen durchsetzt war. Der Übergang des in hangenden Bereichen stark verkarsteten Riffs in die mit Riffschutt und Ton vermischten Sedimente war kontinuierlich. Dieser Ton bildete einen Grundwasserstauer zu den Fein- bis Mittelkiesen des tertiären GWL 62 im Hangenden. Der 6 m mächtige GWL 62 wird durch den 9 m mächtigen Langendorfer Ton vom darüber liegenden GWL 61 getrennt. Durch den Basiston des Flözes 1 wird der GWL 61 zum Hangenden begrenzt. Insgesamt wurden tertiäre Sedimente in einer Mächtigkeit von 56.5 m erbohrt. Nach NW war eine deutliche Mächtigkeitszunahme der tertiären Sedimente zu beobachten (Abb. 5-3). In den Flankenbereichen des Riffs ist jedoch mit einer deutlichen Abnahme bzw. dem Schichtausfall der Grundwasserstauer Basiston und Langendorfer Ton zu rechnen.

Den biogenen Zechstein-Dolomiten in der **UFZ 201** lagerte direkt ein 2.5 m mächtiges tertiäres Braunkohlenflöz auf, das von 10 m Feinkies (GWL 62) überlagert wurde. Es folgte ein sehr mächtiger Tonkomplex (79 m) mit eingeschaltetem Flöz, welcher sich mit einem ähnlichen Schichtkomplex der Bohrung Profen 1/43 korrelieren ließ. Da Kalk- bzw. Dolomitbruchstücke fehlten, wurden die Sedimente der Bornaer Folge A und nicht dem Einsturzgebirge zugeordnet. Den Abschluss bildete ein 18.5 m mächtiges Sedimentpaket aus Fein- bis Mittelkiesen (GWL 61) sowie ein 2.5 m mächtiger Schluff. Darüber lagerte ausschließlich Kippenmaterial.

Über dem Zechstein der **UFZ 301** lagerte eine etwa 12 m mächtige, heterogen zusammengesetzte Abfolge, bestehend aus einer tonigen Matrix mit eingelagerten Geröllen und Bruchstücken aus Kalkstein, Dolomit, Quarzkiesen sowie Ton-/Schluffsteinen. Diese Sedimente markieren den stark verkarsteten und teilweise mit Riffschutt angefüllten Bereich an der Riffflanke. Im Hangenden folgen, durch schluffig-tonige Einschaltungen getrennt, mächtige Kiesfolgen, welche die Grundwasserleiter GWL 63 (19 m), GWL 62 (25 m) und GWL 61 (8 m) bilden. Der GWL 63 ist jedoch nur in Bereichen mit hohen Akkumulationsraten verbreitet. Die Mächtigkeit der tertiären Sedimente erreichte insgesamt 108 m und ist damit fast doppelt so hoch wie in der Bohrung UFZ 101.

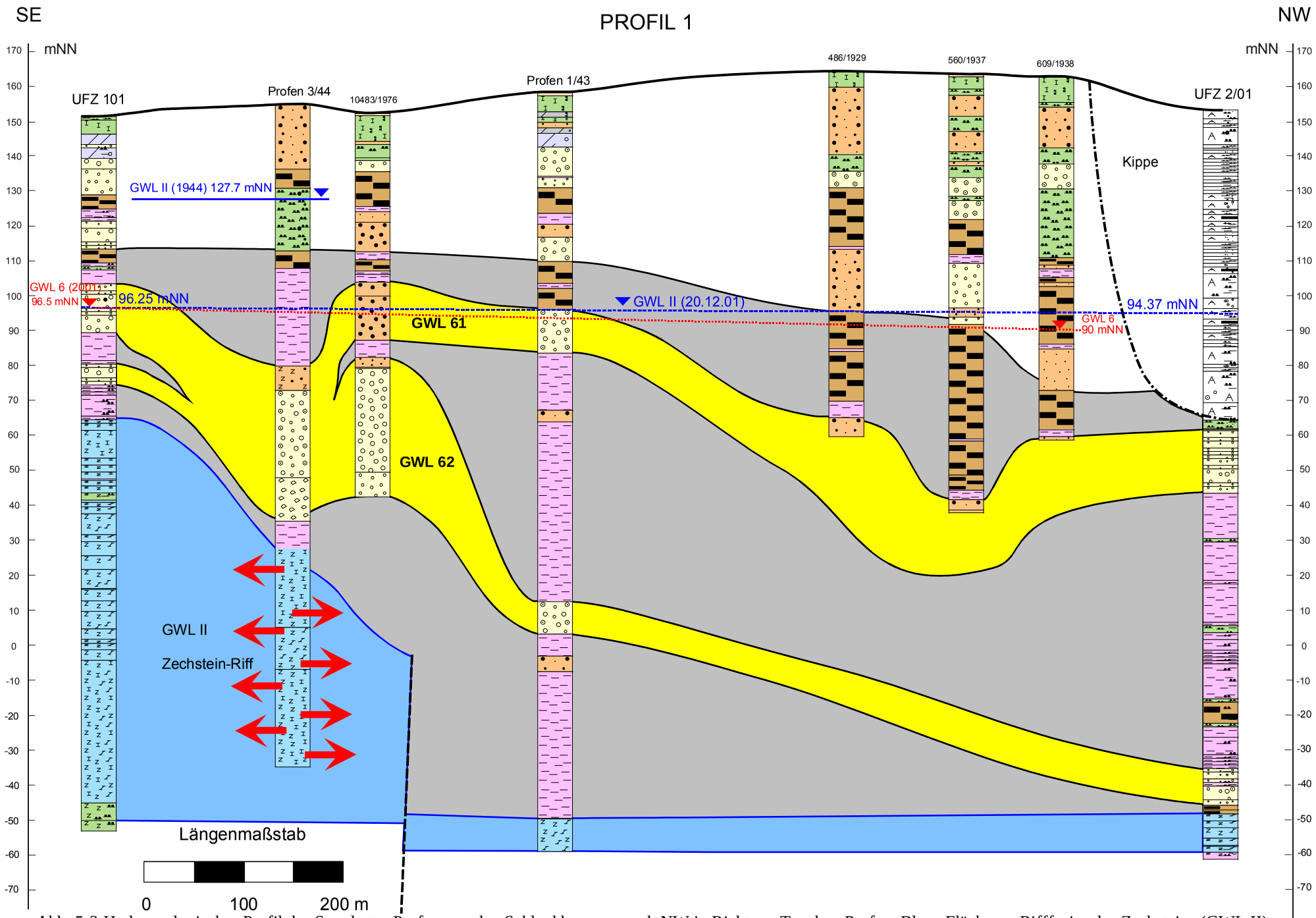


Abb. 5-3:Hydrogeologisches Profil des Standortes Profen von den Schluckbrunnen nach NW in Richtung Tagebau Profen. Blaue Flächen = Rifffazies des Zechsteins (GWL II), gelbe Flächen = tertiäre Aquifere (GWL 61, GWL 62, GWL 63), graue Flächen = Grundwasserstauer (Verwitterungsmaterial, tertiäre Tone, Braunkohle-Flöz).
Lage des Profils siehe Karte 5-2. Bohrprofile nach DIN 4023.

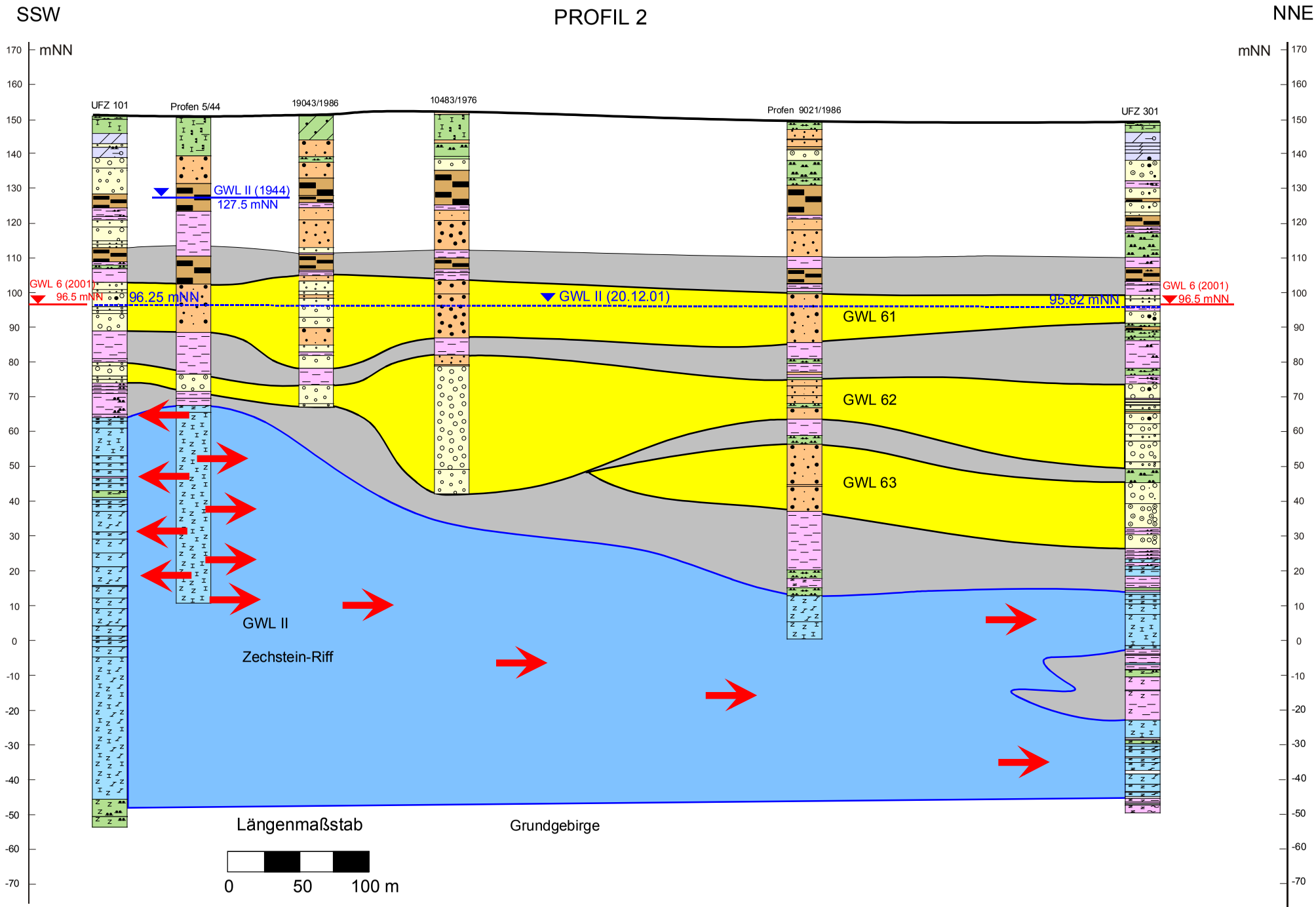


Abb. 5-4: Hydrogeologisches Profil des Standortes Profen von den Schluckbrunnen nach NW in Richtung Tagebau Profen. Blaue Flächen = Rifffazies des Zechsteins (GWL II), gelbe Flächen = tertiäre Aquifere (GWL 61, GWL 62, GWL 63), graue Flächen = Grundwasserstauer (Verwitterungsmaterial, tertiäre Tone, Braunkohle-Flöz).
Lage des Profils siehe Karte 5-2. Bohrprofile nach DIN 4023.

Grundwasserdynamik im Zechstein-Riff Profen

Durch den Betrieb der umliegenden Tagebaue und Wasserwerke kam es in den letzten fünfzig Jahren zum Absinken des Druckwasserspiegels im Zechstein (GWL II) von 127.5 mNN im Jahr 1944 (Picard 1944) auf ca. 96 mNN im Jahr 2002. Daraus ergibt sich eine Druckdifferenz von ca. 31.5 m.
In den neuen GWM wurden erstmals kontinuierliche Messungen des Wasserstandes mittels Datenlogger durchgeführt. Zur Vergleichbarkeit der Wasserstände zwischen den einzelnen GWM wird sich nachfolgend auf eine Stichtagsmessung vom 20.12.2001 bezogen. Dadurch ist gewährleistet, dass der Einfluss luftdruckbedingter Schwankungen des Wasserstandes minimiert wird.

Für die **UFZ 101** wurde zur Stichtagsmessung ein Wasserstand von 96.25 mNN gemessen. Das Druckpotenzial des gespannten Aquifers lag somit im Höhenniveau der tertiären Lockersedimente des GWL 6. Für den entspannten tertiären Basisaquifer GWL 6 ist derzeit von ähnlichen Wasserständen zwischen 95.0 – 96.50 mNN auszugehen (Abb. 5-3). Die Druckdifferenzen zum GWL II sind am Standort Profen als äußerst gering einzuschätzen.
Trotz luftdruckbedingter Schwankungen des Wasserstandes von bis zu 40 cm konnte im Messzeitraum ein kontinuierlicher Anstieg des Wasserstandes im GWL II beobachtet werden (Abb. 5-5).

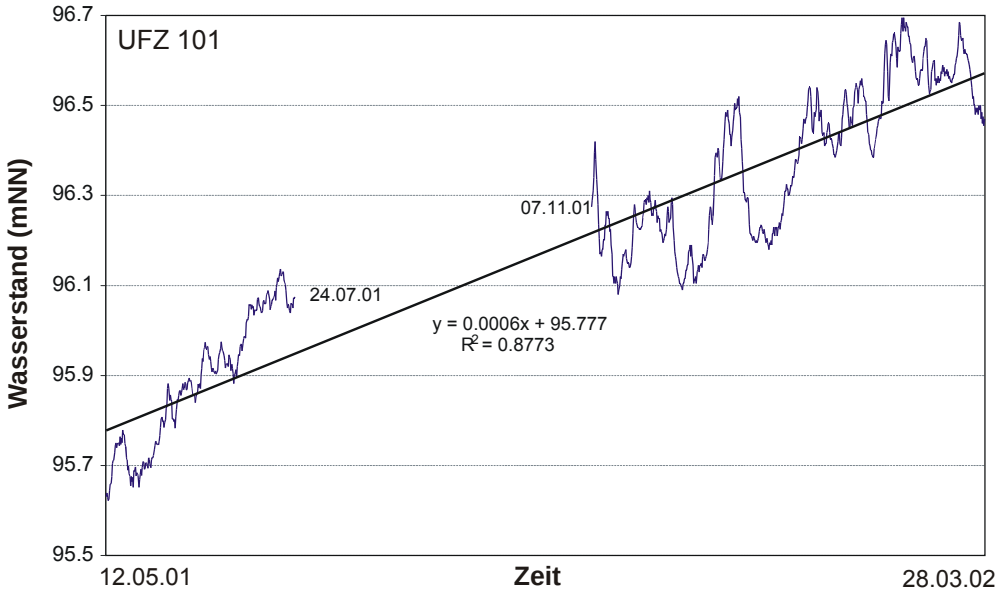


Abb. 5-5: Entwicklung des Wasserstandes in der UFZ 101 über einen Zeitraum von 322 Tagen. Unterbrechung der Messung durch Wartungsarbeiten bzw. Austausch des Datenloggers.

Im Bohrloch **UFZ 201** konnte im Bereich des Zechsteins kein Zustrom von Grundwasser festgestellt werden. Die wenigen offenen Klüfte im Gestein führten kein Grundwasser und verfügen demnach über keine hydraulische Verbindung zu wasserführenden Teilen des Riffs im SE. Für den Schluckbrunnen Profen 1/43, der ebenfalls nordwestlich der Störung liegt (Abb. 5-3), beschreibt Picard (1944) Auffüllversuche mit 7.2 m^3/h über die Dauer von 7 Tagen, was jedoch im Vergleich zu den Auffüllversuchen an dem benachbarten Brunnen Profen 3/44 mit 72 m^3/h vergleichsweise gering erscheint. Dennoch muss die Klüftigkeit in diesem Bereich des Profils deutlich höher sein als an der Bohrung UFZ 201, was auf die Nähe zur tektonischen Störung schließen lässt. Durch die nach NW abnehmende Klüftigkeit des Gesteins ist ein Grundwasserfluss kaum noch möglich.

Auf einen Filterausbau für die UFZ 201 wurde verzichtet und der Bereich des Zechsteins offen belassen. Durch einen Auffüllversuch (Abb. 5-6) konnte gezeigt werden, dass das Gebirge Wasser mit einer Rate von ~ 5 mm/d (Bohrlochdurchmesser 146 mm, wirksame Länge 13.5 m) bis zum Erreichen eines Gleichgewichtszustandes aufnimmt. Der nach Al-Dahir & Morgenstern (1969) berechnete K_f-Wert lag bei 4×10^{-10} m/s. Nach 56 Tagen wurde der niedrigste Wasserstand (Gleichgewicht) erreicht. Bis zum Ende der Messung war ein erneuter Anstieg auf 95.20 mNN zu verzeichnen, der vermutlich durch Schwankungen des Luftdruckes verursacht wurde.

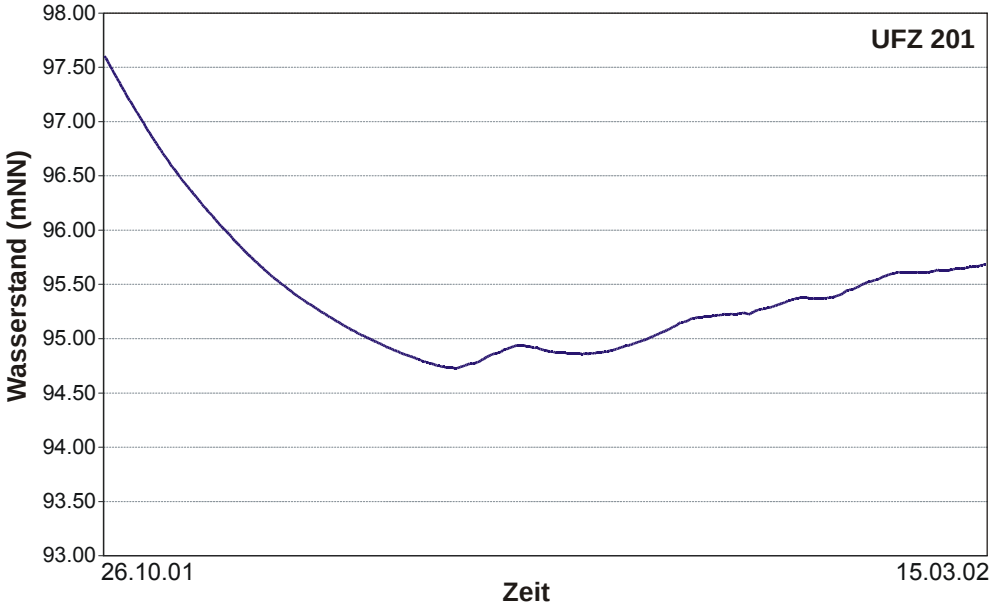


Abb. 5-6: Veränderung des Wasserstandes in der UFZ 201 nach Auffüllversuch. Anfangswasserstand 97.60 mNN. Das Minimum 94.73 mNN wurde nach 57 Tagen erreicht.

Die Stichtagsmessung ergab für die **UFZ 301** einen Wasserstand von 95.82 mNN. Das Druckpotenzial war im Vergleich zur UFZ 101 um 0.43 m niedriger. Daraus ergab sich ein geringes Grundwassergefälle von SSW (UFZ 101) nach NNE (UFZ 301) von ca. 0.6 ‰. Der Wasserstand des GWL 6 entsprach den o.g. Werten am Ansatzpunkt UFZ 101.
Im Beobachtungszeitraum konnten ebenfalls luftdruckbedingte Schwankungen im Wasserstand von bis zu 40 cm festgestellt werden (Abb. 5-7).

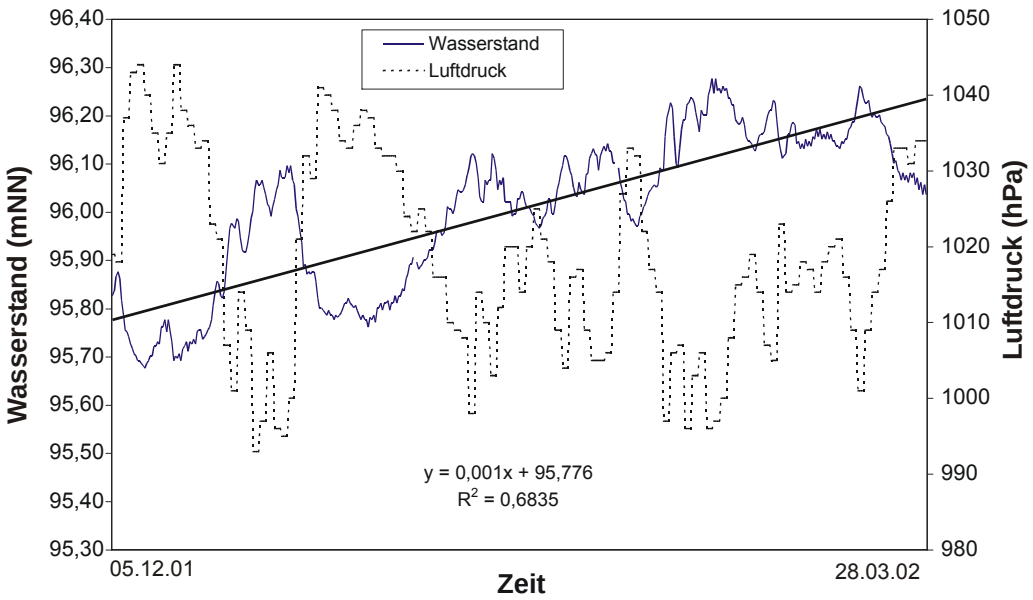


Abb. 5-7: Entwicklung des Wasserstandes in der UFZ 301 über einen Zeitraum von 114 Tagen. Vergleichswerte des Luftdruckes gemessen in der Station Leipzig/Schkeuditz (Quelle: http://www.wetter-online.de) zeigen die Abhängigkeit kurzfristiger Schwankungen des Wasserstandes von Änderungen des Luftdruckes.

5.4.2 Standort Deuben/Trebnitz

Das geologische Ziel der Bohrungen UFZ 401, UFZ 501, UFZ 601 am Standort Deuben/Trebnitz bestand im Durchteufen des Versenkungshorizontes, welcher hier nicht als biogener Riffkalk/-dolomit, sondern in geschichteter Fazies als sog. Plattendolomit ausgebildet war. Das Liegende wurde durch einen grauen Ton mit Bruchstücken von Dolomit, Ton- und Schluffsteinen, dem sog. Grauen Salzton gebildet, der in keiner Bohrung durchteuft wurde. Die erbohrten Mächtigkeiten reichten von 2 m (UFZ 601) bis 7 m (UFZ 401).

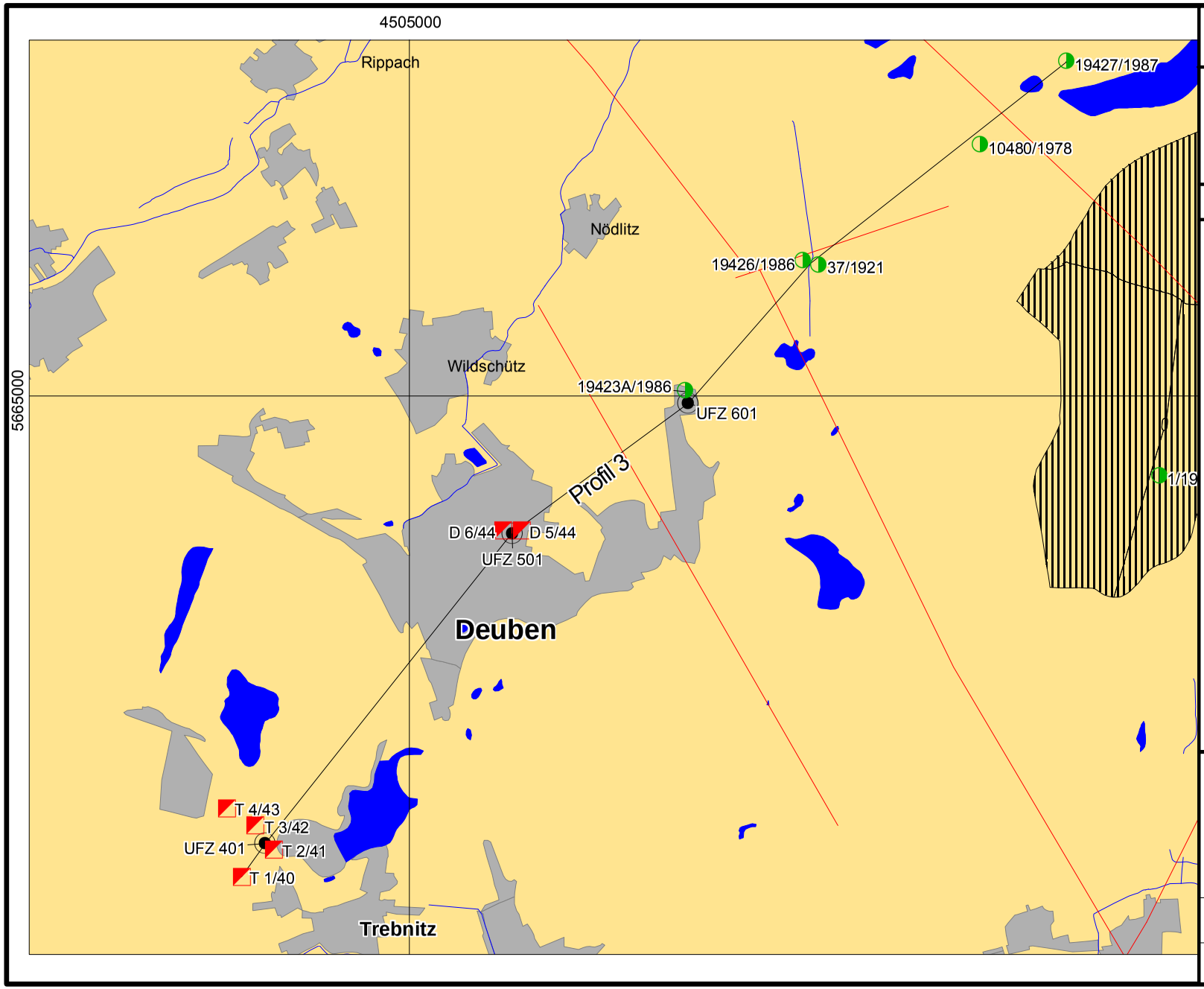
Die Bohrung **UFZ 401** wurde im Abstand von ca. 15 m zum ehemaligen Schluckbrunnen Trebnitz 3/42 abgeteuft. Die Oberkante des Grauen Salztones lag bei 76.7 mNN. In Richtung UFZ 501 (NE) konnte ein Einfallen auf 56.67 mNN festgestellt werden. Der plattig ausgebildete, vorwiegend dichte Plattendolomit wurde in einer Mächtigkeit von 19 m erbohrt. Hohe Spülungsverluste beim Bohren, Kernverluste und die geringe Standfestigkeit des Bohrlochs wurden auf die hohe Klüftigkeit des Gebirges zurückgeführt. Sowohl im Plattendolomit als auch in den oberen Schichten des Grauen Salztones fanden sich deutliche Hinweise auf Phenolkontaminationen. Überlagert wurde der Plattendolomit durch tonig-schluffige z.T. sandige Schichten der Oberen Letten und des Unteren Buntsandsteins. Auch in diesen Schichten wurden Phenolkontaminationen festgestellt. Der Übergang vom Plattendolomit zu den mehr tonigen Schichten im Hangenden und Liegenden konnte anhand der höheren γ-Aktivität im GR-Log (Abb. 5-18) genau erfasst werden. Auf weitere Messverfahren musste wegen der geringen Standfestigkeit des Bohrlochs verzichtet werden.

Der Plattendolomit in der 2110 m entfernten Bohrung **UFZ 501** hatte eine Mächtigkeit von 24 m und zeigte wie auch der Graue Salzton im Liegenden deutliche Anzeichen von Phenolkontaminationen. Der Plattendolomit wurde als grauer/dunkelgrauer, plattiger bis bankiger feinkristalliner Dolomit erbohrt. Durch engständige offene Klüfte zerfiel das Gestein beim Bohren in kleine Bruchstücke. Einzelne Klüfte hatten dunkelgraue bis schwarze Beläge. Das Gestein konnte anhand des GR- und GG-Logs (Abb. 5-20) als lithologisch relativ

homogen bezeichnet werden. Deutlich ausgebildet waren im GR-Log die Übergänge zu den tonigen Schichten im Hangenden und Liegenden, jedoch war hier nur der Graue Salzton kontaminiert. Im Hangenden lagerten 10 m mächtige tonig-schluffige Sedimente der Oberen Letten und des verwitterten Unteren Buntsandsteins. Die Oberfläche des Buntsandsteins fällt analog zur Zechstein-Oberfläche von 117.7 mNN (UFZ 401) auf 93.2 mNN (UFZ 501) ein. Die Mächtigkeit des Unteren Buntsandsteins nahm von SW nach NE ab.

In Richtung der 1160 m entfernten Bohrung **UFZ 601** war in der Höhenlage der Oberkante des Grauen Salztones im Vergleich zur UFZ 501 eine Differenz von 59 m (Abb. 5-9). Dieser Versatz wurde durch eine tektonische Störung in Verbindung mit Subrosionsprozessen verursacht. Obwohl die im weiteren Verlauf des Profils (Abb. 5-9) liegenden Bohrungen 37/1921 und 19427/1987 den Grauen Salzton nicht erreicht haben, sprechen die bei 96 mNN erbohrten Sandsteine des Unteren Buntsandsteins ebenfalls für einen Vertikalversatz zur südwestlich gelegenen Bohrung UFZ 601. Damit ist eine zweite Störung zwischen der UFZ 601 und der 37/1921 sehr wahrscheinlich.
Im Plattendolomit (Mächtigkeit 9 m) und den obersten Partien des Grauen Salztones waren Phenolkontaminationen wahrnehmbar. Auch hier hatten der GR- und GG-Log (Abb. 5-22) ein ausgeglichenen Verlauf, was auf geringe Unterschiede in Lithologie und Gefüge hindeutet. Der Übergang zum Grauen Salzton war deutlich im GR-Log zu erkennen. In der Plattendolomit-Oberfläche trat zur UFZ 501 eine Höhendifferenz von 77.5 m auf. Das im Hangenden lagernde Einsturzgebirge zeichnete sich jedoch nur durch eine geringere Gesteinsdichte im GG-Log ab. Zwischen den Bohrungen UFZ 501 und UFZ 601 hat sich eine steil einfallende, lokale Senkungsstruktur (Subrosionskessel) entwickelt, die mit bis zu 80 m mächtigen Versturzmassen (UFZ 601), bestehend aus tertiären Tonen, Sanden, Quarzkiesen sowie Ton- und Sandsteinen, oolithischen Kalksteinen des Unteren Buntsandsteins aber auch vereinzelten Dolomitbruchstücken des Zechsteins angefüllt wurde. Im weiteren Verlauf des Profils in Abb. 5-9 ist erkennbar, dass in der 1010 m entfernten Erkundungsbohrung 37/1921 unverstürzter Buntsandstein bei 96 mNN erbohrt wurde. Dies spricht für eine lokale Senkungsstruktur mit sehr steilen Flanken.

In allen drei Bohrungen lagerte über den bindigen Schichten des Unteren Buntsandsteins bzw. des Einsturzgebirges eine tertiäre Schichtenfolge, die in ihrer Mächtigkeit von SW (UFZ 401, 55 m) nach NE (UFZ 601, 71 m) zunächst zunahm. Weiter in Richtung NE ging die Mächtigkeit außerhalb der Senkungsstruktur (Bohrung 37/1921) wieder auf ca. 58 m zurück. Die Basis bildeten die kiesigen z.T. sandigen Sedimente des GWL 6, deren Mächtigkeit von SW (UFZ 401, 4 m) nach NE (UFZ 601, 13 m) zunahm. Zum Hangenden wurde diese Folge durch den Liegendton des Sächsisch-Thüringischen Unterflözes (Flöz 1) begrenzt. Das Flöz 1 wurde jedoch nur in der Bohrung UFZ 601 und in der Altbohrung 19427/1987 erbohrt. Bei fehlendem Flöz erreicht der Ton als fazielle Vertretung Mächtigkeiten von 12 – 14 m.
Über dem Ton bzw. Flöz 1 wurden die feinkiesigen Sedimente mit unterschiedlichen Sandanteilen des GWL 5 in Mächtigkeiten von 9 – 22 m erbohrt. In der Bohrung 37/1921 zeigte sich, dass bei Ausfall des Flözes 1 und der Tone an der Basis und im Top des Flözes die Grundwasserleiter GWL 52 und GWL 61 hydraulisch verbunden sind.
Der Luckenauer Ton (5 – 9 m), der zu der Braunkohlensedimentation des Flözes 23 überleitet, bildet den Hangendstauer des GWL 52. Das Flöz 23 wurde jedoch nur in der Bohrung UFZ 401 und der Altbohrung 37/1921 erbohrt. Da für den Raum Deuben von Döring & Priemke (1991) Braunkohlentiefbau beschrieben wurde, ist vermutlich das primär abgelagerte Flöz 23 untertägig abgebaut worden. Darauf deutete auch der beim Abteufen der UFZ 501 bei 30 m einsetzende erhebliche Spülungsverlust und das fehlende Drehmoment hin. Da die hangenden Schichten für die Aufgabenstellung nicht von Bedeutung waren, wurde auf eine Beschreibung der Lagerungsverhältnisse verzichtet.



Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 5-3:
Standort Deuben/Trebnitz- Lage der UFZ-GWM, Erkundungsbohrungen und der Schluckbrunnen

Legende

- Schluckbrunnen
- Erkundungsbohrungen
- UFZ-GWM (Zechstein)
- geolog. Störung
- Fluss
- Tagebau
- See
- Ortschaft

Geologie

- Unterer Buntsandstein

Maßstab

N W E S

0 500 1.000
Meter

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Sachsen (2000)
- Geol. Übersichtskarte Sachsen (1998)
- Rehberg (1997)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem:
Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

Grundwasserdynamik im Plattendolomit

Auch im Raum Deuben/Trebnitz kam es in den letzten fünfzig Jahren zum Absinken des Druckspiegels im Zechstein (GWL II). Die festgestellte Druckdifferenz zwischen 1940 (Trebnitz 1/40, 131.1 mNN) und heute (UFZ 401, 96.4 mNN) lag bei ca. 34.7 m.
In den GWM wurden ebenfalls kontinuierliche Messungen des Wasserstandes mittels Datenlogger durchgeführt.
Die zur Auswertung herangezogene Stichtagsmessung erfolgte am 01.10.2001.

In der **UFZ 401** konnte zur Stichtagsmessung ein Wasserstand von 96.38 mNN bestimmt werden. Damit lag der Grundwasserspiegel nur etwa 70 cm über der Oberkante des Plattendolomits und kann folglich als leicht gespannt bezeichnet werden. Wie aus Abb. 5-9 hervorgeht, lag die Druckdifferenz zum GWL 6 bei fast 60 m.
Die kontinuierliche Messung der Wasserstände zeigte, dass der Wasserstand in der UFZ 401 über einen Zeitraum von 128 Tagen anstieg (Abb. 5-8). Der höchste Wasserstand wurde am 22.03.02 mit 98.29 mNN gemessen und lag damit fast um 2 m über dem Wert der Stichtagsmessung. Im Neubildungsgebiet Zeitz-Schmöllner-Mulde wurden im Jahr 2000 Wasserstände zwischen 173 mNN (Caaschwitz) und 208 mNN (Schmölln) beobachtet.

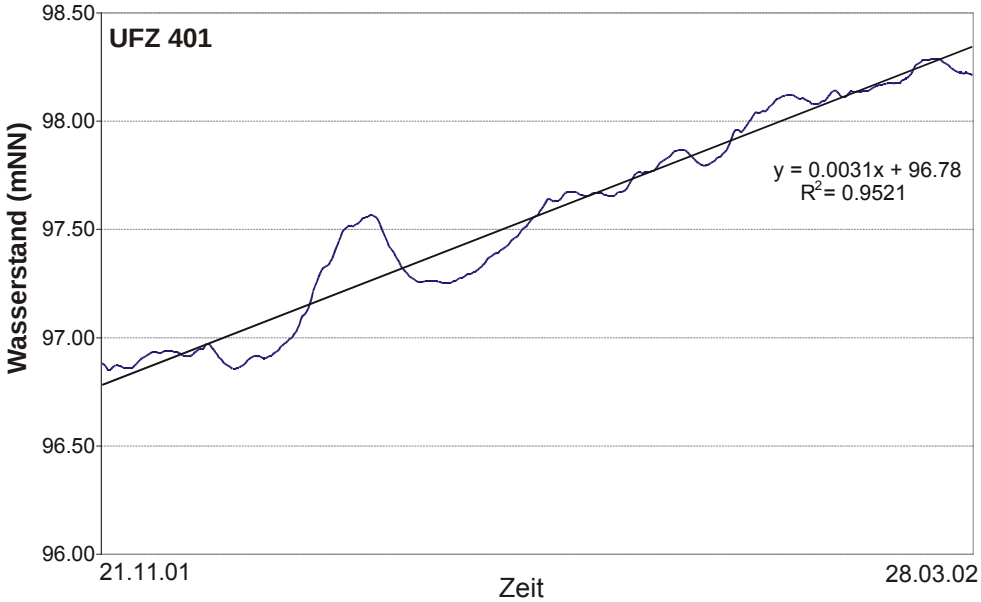


Abb. 5-8: Anstieg des Wasserstandes in der UFZ 401 über einen Zeitraum von 128 Tagen.

Aus dem gegenwärtigen Trend zeichnet sich ab, dass sich im GWL II wieder gespannte Druckverhältnisse aufbauen.
Die **UFZ 501** wurde im vermuteten Grundwasserabstrom der UFZ 401 positioniert. Der Wasserstand zur Stichtagsmessung lag bei 96.31 mNN. Damit war zwar nur eine geringe Differenz von 7 cm zur UFZ 401 festzustellen, jedoch haben sich in der UFZ 501, wie aus Abb. 5-9 deutlich wird, bereits gespannte Druckverhältnisse aufgebaut. Der Grundwasserspiegel lag um mehr als 13 m über der Oberkante des Plattendolomits. Für den GWL 6 war in diesem Bereich nach MIBRAG (2001) ein Wasserstand von ca. 130 mNN anzunehmen.
Eine Aufzeichnung der Wasserstände war für die UFZ 501 aufgrund von Problemen beim Ausbau der Messstelle nicht möglich.

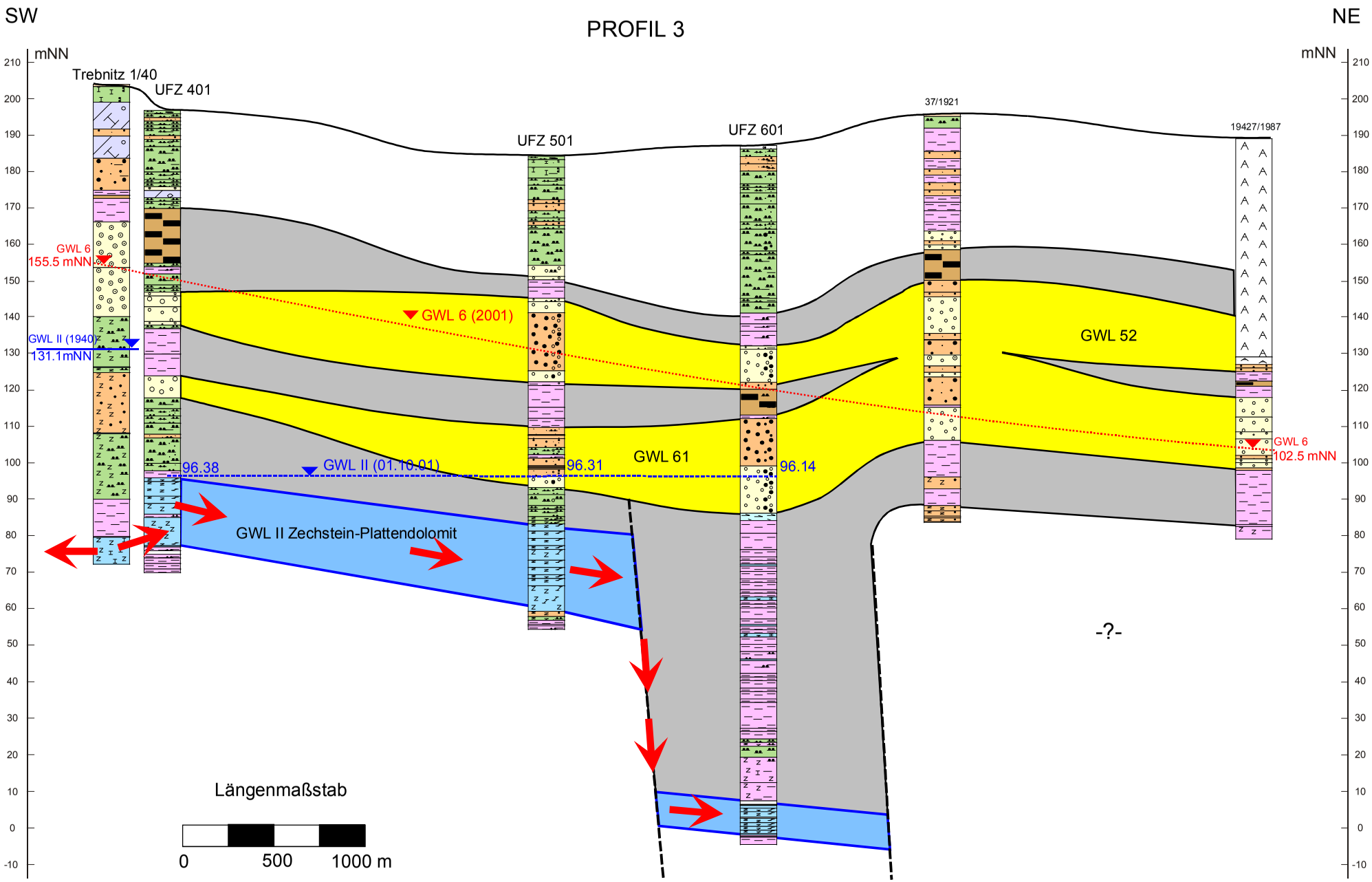


Abb. 5-9: Hydrogeologisches Profil des Standortes Deuben/Trebnitz von den Schluckbrunnen Trebnitz nach NE in Richtung Deuben. Blaue Flächen = Zechstein-Plattendolomit (GWL II), gelbe Flächen = tertiäre Aquifere (GWL 61, GWL 52), graue Flächen = Grundwasserstauer (verwitterter Unterer Buntsandstein, tertiäre Tone, Braunkohle-Flöz). Rote Pfeile markieren den Transportpfad der versenkten Schwelwasser im Aquifer. Lage des Profils siehe Karte 5-3. Bohrprofile nach DIN 4023.

In der **UFZ 601** wurde zur Stichtagsmessung mit 96.14 mNN ein im Vergleich zur UFZ 501 um 17 cm niedrigerer Wasserstand gemessen. Die Wasserstände waren auch hier eindeutig steigend. Der Anstieg der Ausgleichsgeraden (Abb. 5-10) entspricht dem für die UFZ 401 ermittelten Wert. Dieses gleichartige hydraulische Verhalten bedeutet, dass es hydraulische Verbindungen über die geologischen Störungen geben muss. Das etwas niedrigere Druckpotenzial bringt ferner zum Ausdruck, dass der Grundwasserfluss, wie anfangs vermutet, von SW nach NE gerichtet ist. Die Senkungsstruktur verfügt über hydraulisch leitfähige Flankenbereiche, die den tiefliegenden Plattendolomit speisen und somit zum Aufbau eines erheblichen Druckpotenzials von mehr als 90 m führen.
Der mit 98.33 mNN höchste Wasserstand vom 19.03.02 lag um mehr als 2 m über dem Wert der Stichtagsmessung und bestätigt damit die Ergebnisse der Messungen an der UFZ 401.

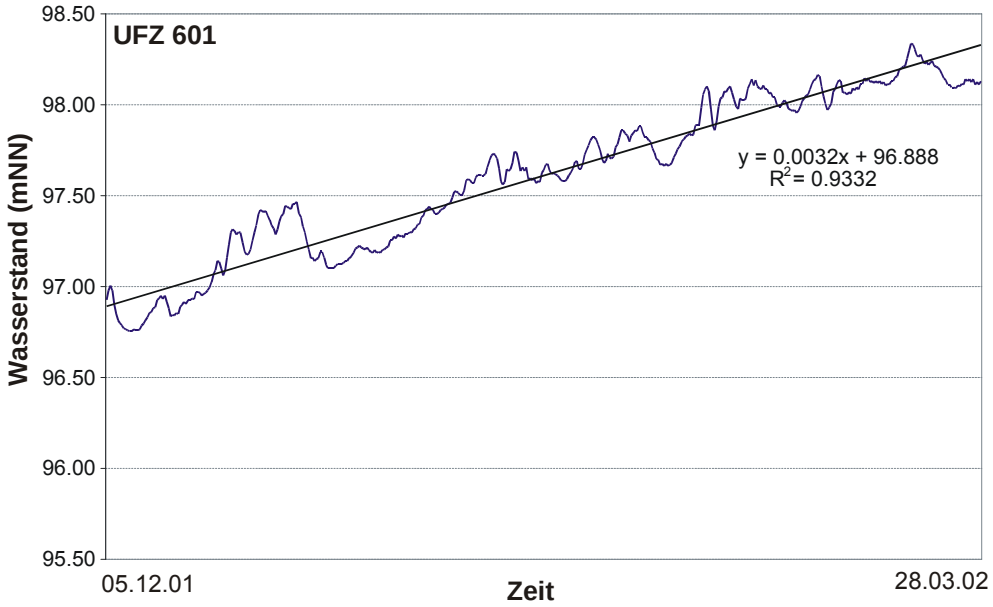
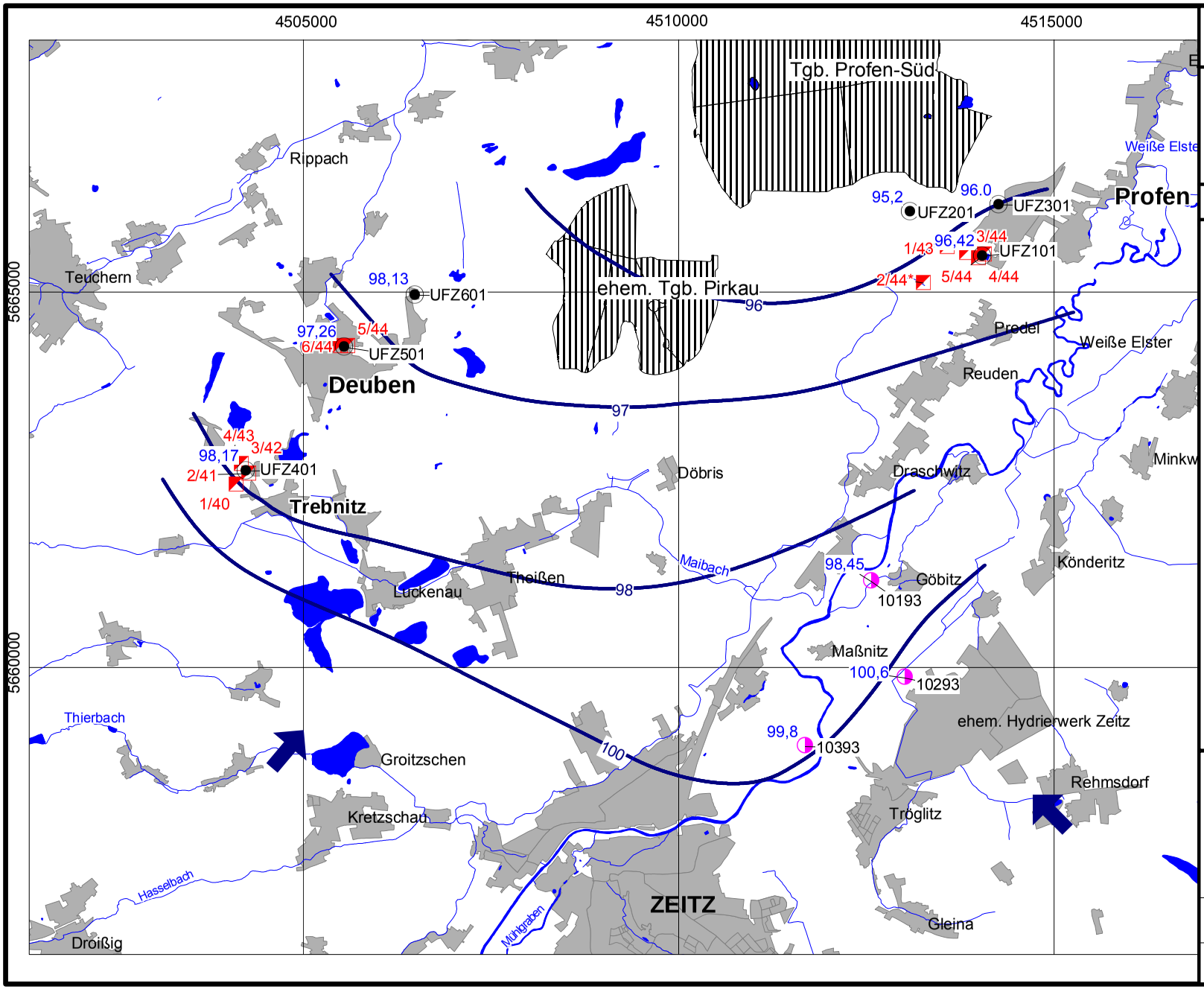


Abb. 5-10: Anstieg des Wasserstandes in der UFZ 601 über einen Zeitraum von 114 Tagen.

In Übereinstimmung mit älteren Untersuchungen von Picard (1944), Wagenbreth (1958), Michel (1960) und Huth (1972) wird aufgrund der identischen Grundwasserdynamik (Fließrichtung, Druckhöhen, zeitliche Veränderungen) im Plattendolomit von Deuben/Trebnitz und im Zechstein-Riff von Profen von ausgeprägten hydraulischen Verbindungen zwischen den beiden Faziesbereichen ausgegangen.

Ein generalisierter Grundwasserisohypsenplan (Karte 5-4) auf Basis einer Stichtagsmessung vom 15.03.2002 an den sechs UFZ-GWM und drei zusätzlichen GWM des Staatlichen Amtes für Umweltschutz Halle (StAU) soll die sich derzeitig darstellende Grundwasserdynamik verdeutlichen.
Der Grundwasseranstrom aus den Neubildungsbereichen der Zeitz-Schmöllner-Mulde (Sprottetal, Weißelstertal) ist zunächst nach NW gerichtet. In Richtung des Entlastungsbereichs Tagebau Profen ändert sich die Fließrichtung nach N-NE. Ein Entlastungsbereich im Raum Maßnitz, wie er von MIBRAG (2001) angenommen wurde, stellte sich nicht dar. Vielmehr entsprach die Fließrichtung den Vorstellungen von Huth (1972), wobei die gemessenen Druckhöhen im Vergleich zum Jahr 1972 etwa 20 – 25 m geringer waren. Für den Raum Profen wurde jedoch eine erstaunliche Übereinstimmung mit heutigen Druckhöhen festgestellt. So wurde von Huth (1972) für den Brunnen Profen 4/44 ein Wasserstand von 96.4 mNN angegeben. Auch hier waren in der Grundwasserfließrichtung im Vergleich zu Huth (1972) kaum gravierende Veränderungen zu erkennen, was auf die schon damals hydraulisch entlastende Wirkung des Tgb. Profen schließen lässt.



Industrielle Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 5-4: Grundwasserdynamik im Zechstein-Aquifer (GWL II)

Basis Stichtagsmessung 15.03.2002

Legende

- UFZ GWM
- GWM StAU Halle
- Schluckbrunnen
- Grundwasserisohypse (mNN) 03/2002, vermutet
- Fluss
- Tagebau
- See
- Ortschaft

Maßstab

N W E S

0 1,5 3

Kilometer

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Sachsen (2000)
- Geol. Übersichtskarte Sachsen (1998)
- Rehberg (1997)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem: Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

5.5 Konzentration und Verteilung der Phenole in den Gesteinen des Zechsteins

5.5.1 Phenole im Profener Zechstein-Riff

Die Gesteinsproben aus dem Zechstein der Bohrungen UFZ 101 und 301 zeigten hohe Belastungen durch Phenole und C1-C3-Alkylphenole, die auf die Versenkung von Schwelwässern zurückzuführen waren. Die Gesteinsproben der Bohrung UFZ 201 waren absolut unbelastet und werden in den nachfolgenden Ausführungen nicht näher beschrieben.

Die Entwicklung der Schadstoffkonzentrationen zwischen der UFZ 101 und der UFZ 301 beschreibt den Grundwasserfließpfad von der Schadstoffquelle (Schluckbrunnen 4/44, 5/44) im Grundwasserabstrom.

Die Bohrung **UFZ 101**, zwischen den beiden Schluckbrunnen 4/44 und 5/44 gelegen, entspricht der heutigen Kontaminationssituation im Schluckhorizont am ehemaligen Versenkungsstandort. In der porösen/kavernösen Rifffazies des Zechsteins wurden Konzentrationen an Gesamtphenol bis max. 10170 µg/kg bestimmt. Im vertikalen Profil waren ausgehend von den obersten, stark verkarsteten Schichten (60 mNN, ~ 2000 µg/kg) signifikante Konzentrationszunahmen mit der Tiefe festzustellen (Abb. 5-11). Im biogenen Kalkstein wurden Porositäten von 24.5 % bestimmt. Ab etwa 41 mNN setzte der Übergang von Kalkstein in Dolomit ein. Wie die bohrlochgeophysikalischen Messungen (Abb. 5-11) zeigten, war dieser lithologische Wechsel mit Veränderungen in der Wasserführung des Gebirges (Flowmeter), abnehmenden Tongehalten (GR-Log), höherer Dichte des Gebirges (GG-Log) und geringeren Porositäten und Wassergehalten (Neutron-Neutron-Log (NN), Fokussiertes Elektrolog (FEL)) verbunden. Gleichzeitig war das Gebirge weniger geklüftet, was sich u.a. durch weniger Ausbrüche der Bohrlochwand (vgl. Caliber-Log (CAL) Abb. 5-11) ausdrückte.
In den Gesamtphenol-Konzentrationen war eine deutliche Abnahme in den dichteren dolomitischen Gesteinsbereichen zu verzeichnen.
Bis 25 mNN waren die Konzentrationen im Bereich 1400 – 7800 µg/kg stark schwankend, obwohl das Gestein als relativ homogener Dolomit mit Porositäten von 20 – 27 % ausgebildet war. Danach nahmen die Konzentrationen stetig zu, bis zum Maximum von 10170 µg/kg bei 18 mNN. Obwohl dieser wenig geklüftete Gesteinsbereich geringer wasserwegsam ist als die hangenden Teile des Profils, kann es hier in dead-end Poren bzw. einzelnen Klüften zu einem Trapping gekommen sein, das hohe Schadstoffkonzentrationen über lange Zeit speichern konnte.

Mit zunehmender Teufe war eine kontinuierliche Abnahme der Gesamtphenol-Konzentrationen bis auf Werte von 0 – 180 µg/kg zu beobachten. Parallel dazu konnte bohrlochgeophysikalisch (Abb. 5-11) eine intensivere Klüftung des Gebirges (CAL-Log), geringere Dichte (GG-Log) sowie verstärkte Wasserführung (NN-Log, FEL-Log) nachgewiesen werden. Grundwasserzuflüsse in das Bohrloch wurden direkt über Flowmetermessungen im Bereich 10.5 – 5.8 mNN bestimmt.

Ab dieser Teufe standen aufgrund technischer Probleme keine weiteren Kernproben zur Verfügung. Die bis zum Erreichen der Endteufe geförderten Cuttings waren jedoch organoleptisch unauffällig.

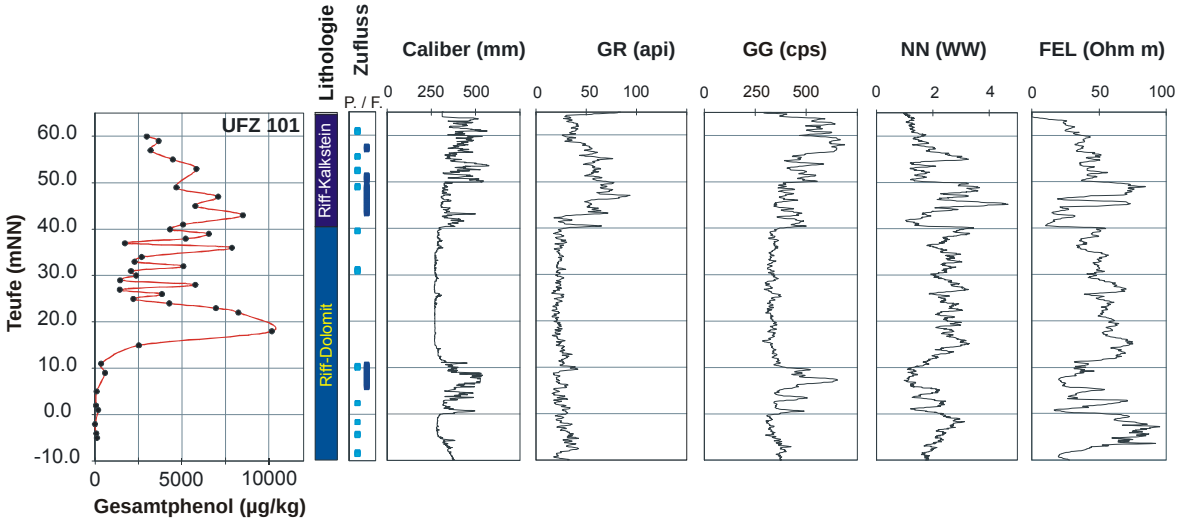


Abb. 5-11: Konzentrationsverteilung des Gesamtphenols im Riffkalkstein/-dolomit der UFZ 101. Zunahme der Konzentration in hydraulisch nicht aktiven Zonen des Riff-Dolomits. Logs der bohrlochgeophysikalischen Messungen (von links): Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Caliber, Gamma-Ray, Gamma-Gamma, Neutron-Neutron, Fokussiertes Elektrolog.

Da die hier betrachteten phenolischen Einzelverbindungen sich in ihren physikochemischen Eigenschaften unterscheiden, wurden über Vergleiche der Isomeren-Gruppen im Gestein zwischen der Eintragstelle und dem Grundwasserabstrom Rückschlüsse auf Transportmechanismen gezogen.
Dazu wurden aus den Konzentrationen der Einzelsubstanzen im Gestein die jeweiligen Stoffmengen berechnet und zur entsprechenden Isomeren-Gruppe zusammengefasst. Die Stoffmengen der Isomeren-Gruppen wurden dann mit der Stoffmenge an Gesamtphenol nach Gl. 5-1 in Beziehung gesetzt. Die daraus berechneten **Molaren Verhältnisse** (MV) bringen den molaren Anteil der jeweiligen Isomeren-Gruppe am Gesamtphenol im Gestein zum Ausdruck.

$$MV = \frac{M_{Isomeren-Gruppe}}{M_{Gesamtphenol}} \qquad \text{Gl. 5-1}$$

MV	Molares Verhältnis [-]
$M_{Isomeren\text{-}Gruppe}$	Stoffmenge der Isomeren-Gruppe (Phenol, Kresole, DMP, EP, TMP) [mol]
$M_{Gesamtphenol}$	Summe der Stoffmengen aller Einzelverbindungen [mol]

In der durchschnittlichen Verteilung als Mittelwert aller Proben (Abb. 5-12) waren die Kresole mit 41 % die dominierende Gruppe in der UFZ 101. Phenol, DMP und EP hatten eine nahezu ähnliche prozentuale Verteilung, während TMP am geringsten vertreten waren.

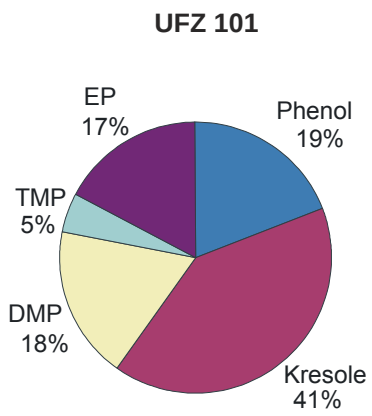


Abb. 5-12: Durchschnittliche molare Anteile der Phenolhomologe am Gesamtphenol im Zechstein der Bohrung UFZ 101.

Die vertikale Verteilung der Molaren Verhältnisse ergab ein weitaus differenzierteres Bild (Abb. 5-13). Kresole bildeten den dominierenden Anteil am Gesamtphenol in den hangenden Bereichen des Profils, die als ausgeprägte Grundwasser-Zuflussbereiche erfasst wurden. Der höhere Tonanteil im oberen, teilweise verkarsteten Abschnitt des Profils scheint außerdem eine bevorzugte Sorption der weniger hydrophilen Verbindungen zu unterstützen. In den mittleren Abschnitten, die kaum aktive Grundwasserzuflüsse hatten, war Phenol mit Anteilen von 50 – 55 % am Gesamtphenol dominierend. Kresole hatten Anteile von ca. 30 %. Einzelne Zuflussbereiche im Liegenden des Profils (< 10 mNN) waren durch Kresole und DMP kontaminiert, Phenol jedoch war nicht nachweisbar.

Die Molaren Verhältnisse im wenig wasserwegsamen, sehr dichten Bereich von 24 – 20 mNN entsprachen in etwa der molaren Zusammensetzung des Original-Schwelwassers mit 53 % Phenol, 30 % Kresolen, 7 % DMP, 9 % EP und 1 % TMP.

DMP hatten bei geringen Gesamtphenol-Konzentrationen hohe molare Anteile, während bei hohen Gesamtphenol-Konzentrationen die DMP-Anteile deutlich geringer waren. Die höchsten DMP-Anteile wurden in den hangenden und liegenden Bereichen des Profils mit 20 – 30 % am Gesamtphenol gemessen. In den Horizonten von 40 – 32 mNN sowie von 24 – 15 mNN wurden die geringsten Anteile um 10 % beobachtet.

Für die EP konnte aufgrund ähnlicher physikochemischer Eigenschaften eine den DMP ähnliche Verteilung festgestellt werden. Meist waren ihre Anteile im Vergleich zu den DMP etwas niedriger. In Proben mit hohen Gesamtphenol-Konzentrationen, z.B. 45 – 33 mNN und 23 – 15 mNN, wurden höhere Anteile an EP als DMP bestimmt.

Die molaren Anteile der TMP waren überwiegend < 10 %. In Zuflussbereichen schien eine leichte Erhöhung des TMP-Anteils vorzuliegen.

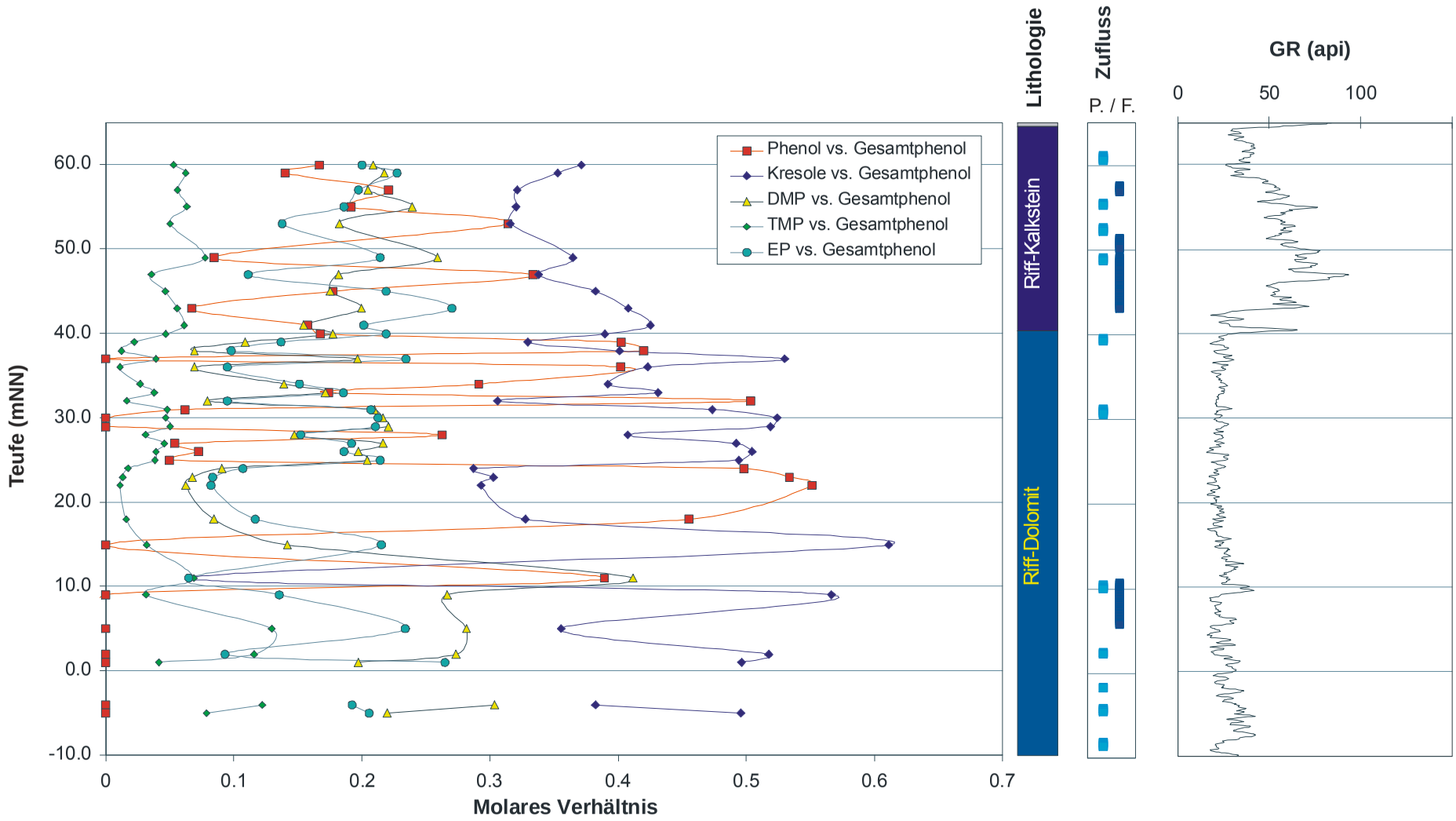


Abb.5-13: Abnahme des Molaren Verhältnisses Phenol/Gesamtphenol in hydraulisch aktiven Zuflussbereichen im verkarsteten oberen Teil des Riffs der UFZ 101. Diagramme von links: Molare Verhältnisse der Phenolhomologe, Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Gamma-Ray-Log.

In der Bohrung **UFZ 301** konnte zwischen zwei kontaminierten Bereichen klar differenziert werden. Diese zeichneten sich durch Unterschiede in den Gesamtphenol-Konzentrationen um teilweise das Sechsfache aus (Abb. 5-14).
Der obere, stark verkarstete Teil des Zechsteinprofils, ein poröser/kavernöser Kalkstein mit tonig-sandigem Material in Hohlräumen, wurde in einer Teufe zwischen +5 und –4 mNN erbohrt. Die Gehalte an Gesamtphenol lagen zwischen 1000 und 4100 µg/kg. In den liegenden Schichten (< –5 mNN) war eine Zunahme des Tongehalts und ein kontinuierlicher Konzentrationsrückgang zu erkennen (Abb. 5-14). Die darunter liegenden tonigen Schichten von –5 bis –29 mNN waren unbelastet.

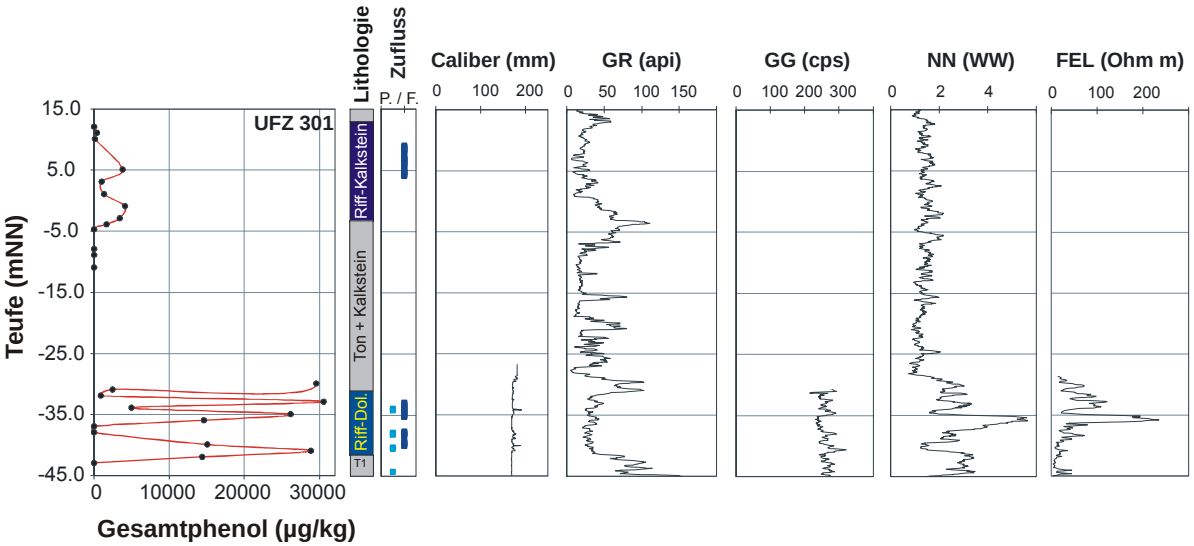


Abb. 5-14: Konzentrationsverteilung des Gesamtphenols im Riffkalkstein/-dolomit der UFZ 301. Zunahme der Konzentration in hydraulisch nicht aktiven Zonen des unverkarsteten Riff-Dolomits sowie an der Grenzfläche zum liegenden Ton (T1). Logs der bohrlochgeophysikalischen Messungen (von links): Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Caliber, Gamma-Ray, Gamma-Gamma, Neutron-Neutron, Fokussiertes Elektrolog.

Ein poröser Schluffstein mit Dolomit-Einschlüssen bildete bei –30 mNN die Grenze zum unteren, nicht verkarsteten Teil der Zechstein-Abfolge. In diesem Horizont wurden sehr hohe Gesamtphenol-Gehalte bis zu 29500 µg/kg festgestellt. Wie im GR-Log (Abb. 5-14) zu erkennen war, zeichnet diesen Horizont ein erhöhter Tongehalt aus. In dem darunter lagernden dichten, wenig geklüfteten Dolomit (Porosität 10.6 %) waren sprunghaft abnehmende Konzentrationen auf Werte zwischen 2500 – 1000 µg/kg zu beobachten. Im nachfolgenden Horizont, einem porösen und klüftigen Dolomit, wurde ein erneuter Konzentrationsanstieg auf 30500 µg/kg festgestellt. Dies korreliert nach Abb. 5-14 mit nachgewiesenen Zuflussbereichen, abnehmendem Tongehalt (GR-Log) und erhöhter Wassersättigung (NN-Log, FEL-Log) des Gebirges.
Dieser sprunghafte Wechsel von sehr hohen > 10000 µg/kg zu sehr niedrigen Konzentrationen < 1000 µg/kg setzt sich auch im weiteren Profilverlauf fort und ist, wie die bohrlochgeophysikalischen Messungen in Abb. 5-14 belegen, mit Veränderungen der Gesteinseigenschaften verbunden. Intensiv geklüftete, wasserwegsame Bereiche wechseln mit kompakten, wenig geklüfteten Schichten, die kein Grundwasser leiten, wie z.B. der Bereich von –37 bis –38 mNN, der absolut unbelastet und durch hohe Gesteinswiderstände (FEL-Log), geringe Wassersättigung (NN-Log) sowie keine nachweisbaren Grundwasserzuflüsse gekennzeichnet war. Das Gestein trat hier als geschichteter Dolomit mit einer Porosität von nur 7.5 % auf.

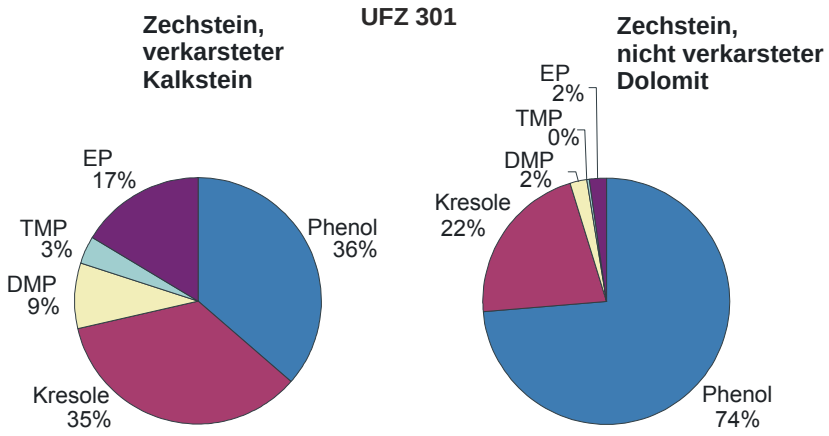


Abb. 5-15: Durchschnittliche prozentuale Anteile der Phenolhomologe am Gesamtphenol im Zechstein der Bohrung UFZ 301.

Ab –43 mNN bis zur Basis wurde das Gestein sehr dicht, mit nur wenigen Klüften und einer Porosität von 8.5 %. Die Konzentrationen an Gesamtphenol lagen unter der Nachweisgrenze.
Die zwei kontaminierten Bereiche des Zechstein-Profils der Bohrung UFZ 301 konnten auch anhand unterschiedlicher molarer Anteile am Gesamtphenol im Gestein differenziert werden (Abb. 5-15). Während im oberen, durch Verkarstungsprozesse entfestigten, Teil des Profils Phenol und Kresole mit je 35 % etwa gleiche Anteile am Gesamtphenol hatten, war der unverkarstete Zechstein-Dolomit im unteren Teil zu 74 % durch Phenol und 22 % durch Kresole belastet. In der vertikalen Verteilung der Molaren Verhältnisse (Abb. 5-16) wurde deutlich, dass in den schwach belasteten obersten Teilen des verkarsteten Kalksteins (12 – 10 mNN) die geringer wasserlöslichen EP und TMP dominierten, während Phenol unterhalb der Nachweisgrenze lag.
Da in diesem Abschnitt des Profils Grundwasserzuflüsse geophysikalisch nachgewiesen wurden (Abb. 5-16), ist von einer verstärkten Lösung der leichtlöslichen Verbindungen aus dem Gestein auszugehen. Unterhalb des Zuflussbereiches waren ansteigende Gesamtphenol-Konzentrationen > 1000 µg/kg auffällig. Über wasserwegsame Klüfte migrierten die im Grundwasser gelösten Phenole in dead-end-Poren und -Klüfte.
In diesen Zonen dominierten dann die leichtlöslichen Spezies wie Phenol (Anteil 40 – 60 %) und Kresole (Anteil 30 – 50 %). Die Anteile der DMP, EP und TMP am Gesamtphenol lagen meist unter 10 % und nahmen nur an den Grenzflächen zum unbelasteten Gestein zu.

Im deutlich stärker kontaminierten unverkarsteten Zechstein-Dolomit (–30 bis –43 mNN) bildeten Phenol (Anteil > 60 %) und Kresole (Anteil 20 – 30 %) die Hauptanteile am Gesamtphenol. DMP, EP und TMP spielten nahezu keine Rolle. Auch hier stieg der molare Anteil des Phenols an den Grenzflächen zu den Zuflussbereichen deutlich an, während in den Zuflussbereichen eine Abnahme zu Gunsten des Kresolanteils zu verzeichnen war.

Der Schadstoffeintrag erfolgte aus stärker wasserwegsamen, klüftigen Horizonten in weniger hydraulisch leitfähige Schichten. Als Folge davon wurde das besonders mobile Phenol in die tonigen Schichten im Hangenden und Liegenden der Zuflussbereiche transportiert und erreichte dort Anteile von nahezu 100 % am Gesamtphenol. In der Nähe zu wasserwegsamen Bereichen war eine lösungsbedingte Abnahme des Phenolanteils auf etwa 60 % zu verzeichnen (Abb. 5-16).

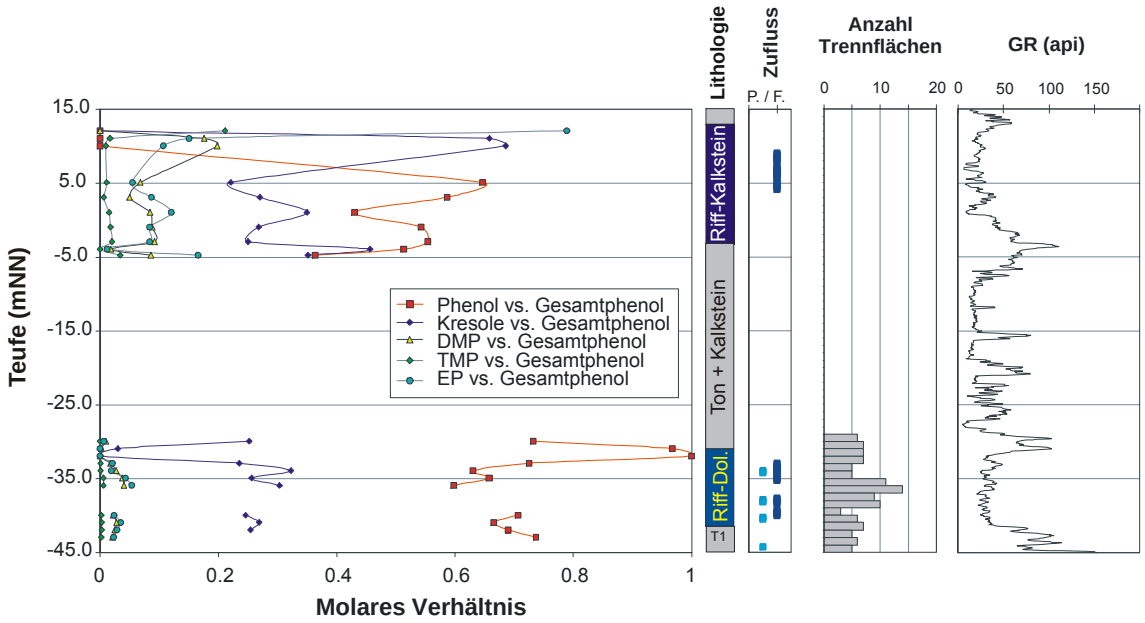


Abb. 5-16: Zunahme des Molaren Verhältnisses Phenol/Gesamtphenol an den Grenzflächen zu hydraulisch aktiven Bereichen innerhalb des Plattendolomits der UFZ 301. Diagramme von links: Molare Verhältnisse der Phenolhomologe, Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Trennflächenanzahl aus ABTV-Messungen, Gamma-Ray-Log.

5.5.2 Phenole im Plattendolomit von Deuben/Trebnitz

Die Gesteinsproben aus dem Plattendolomit der Bohrungen UFZ 401, UFZ 501 und UFZ 601 unterschieden sich von den biogenen Riffgesteinen aus dem Raum Profen vor allem durch ihre deutlich geringere Gesteinsporosität und höhere Klüftigkeit. Dennoch wurden im Gestein sehr hohe Belastungen durch Phenole und Alkylphenole von max. 128500 µg/kg festgestellt, die eindeutig auf die Versenkung von Schwelwässern zurückzuführen waren.

Die höchsten Konzentrationen wurden an den Bohrungen in unmittelbarer Nähe der ehemaligen Versenkungsbrunnen Trebnitz 3/42 (UFZ 401) und Deuben 5/44, 6/44 (UFZ 501) gemessen. Doch auch in der 1150 m im Grundwasserabstrom abgeteuften Bohrung UFZ 601 waren Gehalte an Gesamtphenol von bis zu 28000 µg/kg festzustellen. Im Grundwasserfließpfad von UFZ 401 zu UFZ 601 war insgesamt eine deutliche Konzentrationsabnahme zu erkennen (Abb. 5-17).

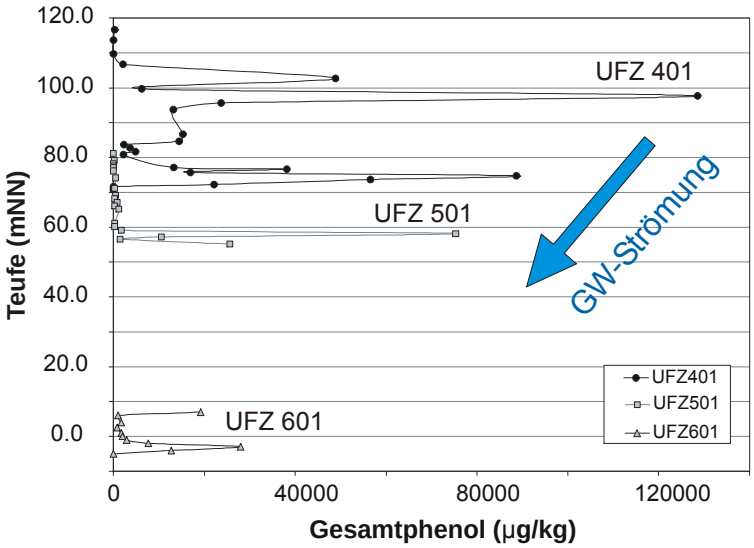


Abb. 5-17: Abnehmende Konzentration an Gesamtphenol im Gestein entlang des Grundwasserfließpfades von UFZ 401 (Nähe Schluckbrunnen Trebnitz 3/42) über UFZ 501 (Schluckbrunnen Deuben 5/44, 6/44) zu UFZ 601 (Grundwasserabstrom).

In der **UFZ 401** waren Phenole in geringen Konzentrationen von 311 µg/kg bereits in den verwitterten Schichten des Unteren Buntsandsteins ab 117 mNN nachweisbar (Abb. 5-18). Im weiteren Verlauf des Profils war eine deutliche Zunahme auf ~ 49000 µg/kg Gesamtphenol bei 103 mNN festzustellen. In den tonig-schluffigen Sedimenten der Oberen Letten (98 mNN) wurde die maximale Konzentration von 128500 µg/kg gemessen. Da diese Schicht unmittelbar über dem Plattendolomit lagerte, konnten hoch kontaminierte Schwelwässer über Klüfte in geringleitende Horizonte eindringen. Undichtheiten im Ringraum des Schluckbrunnens und das Verpressen des Schwelwassers mit Druck waren vermutlich die Ursache für die weitreichende Kontamination bis in die Schichten des Unteren Buntsandsteins.

Im Plattendolomit ab 96 mNN war ein rapider Rückgang der Konzentrationen auf Werte < 25000 µg/kg zu verzeichnen. Der unterlagernde Graue Salzton (ab 77 mNN) zeigte wiederum einen sprunghaften Anstieg der Gesamtphenol-Konzentrationen bis auf 88500 µg/kg.
Dieser Konzentrationsanstieg korreliert mit dem Anstieg der γ-Aktivität im GR-Log (Abb. 5-18) als Maß für höhere Tonanteile. Unterhalb von 72 mNN war das Gestein bereits wieder unbelastet.
Das durchschnittlich höchste Molare Verhältnis wurde für Phenol bestimmt (Abb. 5-19). Damit bildete Phenol mit etwa 50 – 60 % den Hauptanteil am Gesamtphenol. Kresole waren mit ~ 20 % die zweit wichtigste Gruppe, während DMP und EP mit 5 – 10 % etwa gleiche Anteile am Gesamtphenol ausmachten. TMP spielten keine Rolle.

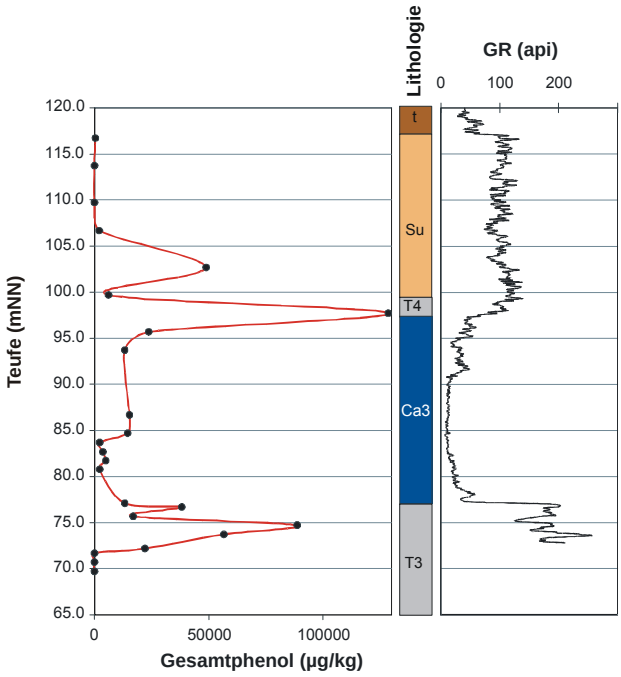


Abb. 5-18: Anreicherung des Gesamtphenols in den tonigen Schichten im Hangenden (T4=Obere Letten) und Liegenden (T3=Grauer Salzton) des Plattendolomits der UFZ 401. GR-Log als Maß für Tonanteil im Gestein.

An lithologischen Grenzen, z.B. Plattendolomit/Grauer Salzton (76.7 mNN), traten Verschiebungen der Molaren Verhältnisse auf. Dort verringerte sich zumeist der molare Anteil des Phenols zu Gunsten der Alkylphenole. Im wasserwegsamen Plattendolomit war der Phenolanteil geringer als in den wenig wasserwegsamen tonig-schluffigen Schichten im Hangenden und Liegenden.

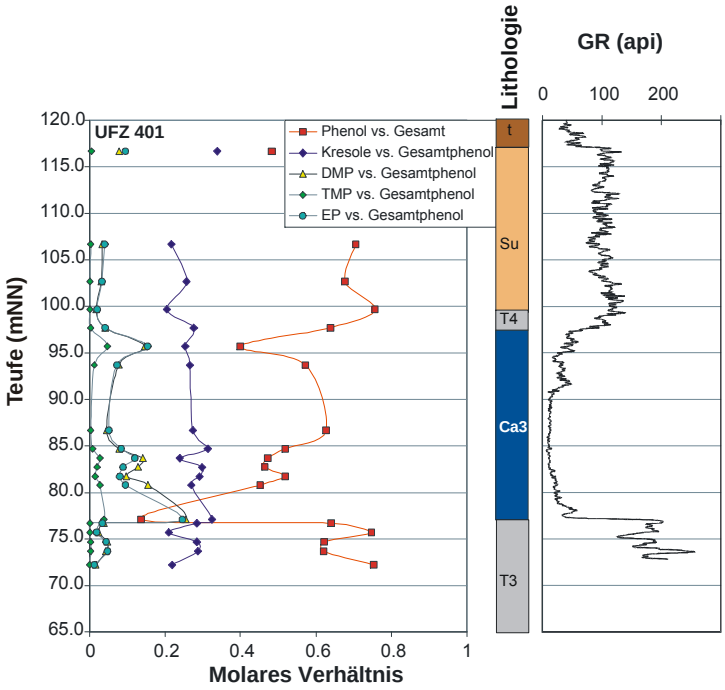


Abb. 5-19: Veränderung der Molaren Verhältnisse zwischen Phenol, Kresolen, DMP, TMP, EP und Gesamtphenol an lithologischen Grenzflächen zwischen Plattendolomit (Ca3) und Grauem Salzton (T3) sowie Oberen Letten (T4).

Die Bohrung **UZF 501** wurde zwischen den zuletzt betriebenen Schluckbrunnen Deuben 5/44 und 6/44 abgeteuft und befindet sich gleichzeitig im Grundwasserabstrom zur UFZ 401 und den Schluckbrunnen Trebnitz. Die den Plattendolomit überlagernden Ton-/Schluffsteine der Oberen Letten und des Buntsandsteins waren organoleptisch unauffällig und wurden nicht untersucht. Am Verlauf der geophysikalischen Bohrlochmesskurven im Plattendolomit (NN-Log, GG-Log, FEL-Log, Flowmeter; Abb. 5-20) waren kleinräumige Änderungen in den Gesteinseigenschaften zu erkennen, die u.a. auf die unterschiedliche Klüftigkeit und Wasserführung des Gebirges zurückzuführen waren. Die Gesamtphenol-Konzentrationen lagen überwiegend unter 1100 µg/kg. In den Horizonten mit nachgewiesenem Grundwasserzufluss, z.B. 70 – 74 mNN, waren die Konzentrationen geringer als in den hydraulisch nicht aktiven Bereichen. An der lithologischen Grenze zum Grauen Salzton (60 mNN) war ein deutlicher Konzentrationssprung zu erkennen. Die Gesamtphenol-Konzentration erreichte in einer als nicht wasserwegsam ausgewiesenen Zone 75000 µg/kg. In der darunter befindlichen potenziell wasserwegsamen Zone nahm die Konzentration wieder deutlich ab, um zum Liegenden wieder etwas anzusteigen.

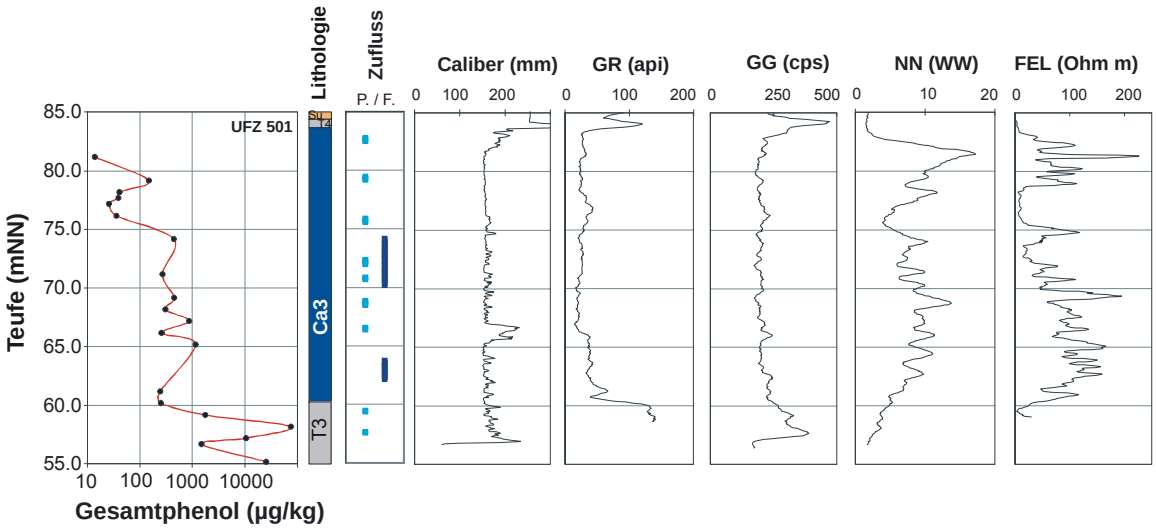


Abb. 5-20: Konzentrationsverteilung des Gesamtphenols im Plattendolomit der UFZ 501. Zunahme der Konzentration in den stauenden Schichten des Grauen Salztones (T3). X-Achse ist logarithmisch skaliert. Die Logs der bohrlochgeophysikalischen Messungen (von links): Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Caliber, Gamma-Ray, Gamma-Gamma, Neutron-Neutron, Fokussiertes Elektrolog.

Anhand der Molaren Verhältnisse konnte für die wasserwegsamen Bereiche des Plattendolomits, z.B. 70 – 74 mNN, eine deutliche Dominanz des Phenolanteils mit ~ 80 % am Gesamtphenol gegenüber den Alkylphenolen erkannt werden (Abb. 5-21). In hydraulisch nicht aktiven Bereichen des Plattendolomits, z.B. 75 – 80 mNN, lagen die Molaren Verhältnisse weitaus dichter zusammen. Kresole und DMP bildeten hier oft den Hauptanteil am Gesamtphenol. In den tonigen Schichten des Grauen Salztones wurden starke Variationen in den Molaren Verhältnissen festgestellt. In den als potenziell wasserwegsam charakterisierten Bereichen bestimmten Kresole und DMP die Molaren Verhältnisse, während in den hydraulisch nicht aktiven Zonen Phenol mit ~ 80 % molarem Anteil am Gesamtphenol vorherrschte. Diese Tendenz stimmt mit der Konzentrationsentwicklung im Grauen Salzton überein.

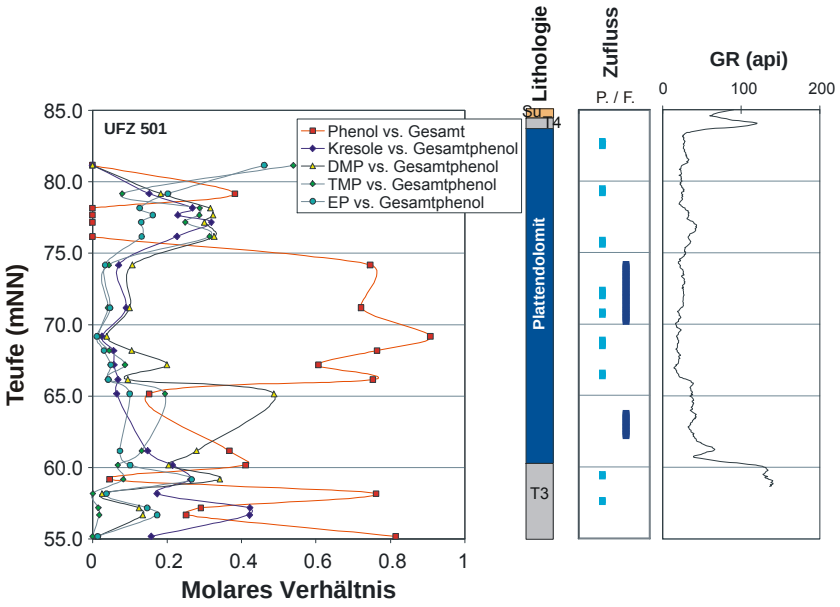


Abb. 5-21: Zunahme des Molaren Verhältnisses Phenol/Gesamtphenol im Hauptzuflussbereich des Plattendolomits der UFZ 501. Geringere Unterschiede der Molaren Verhältnisse in Zonen geringer Wasserwegsamkeit. Diagramme von links: Molare Verhältnisse der Phenolhomologe, Zuflussbereiche im Bohrloch (potenzielle = P. ; durch Flowmetermessungen nachgewiesene = F.), Gamma-Ray-Log.

Die Bohrung **UFZ 601** befindet sich ca. 1100 m im nordöstlichen Grundwasserabstrom von der UFZ 501. Das Gestein wies im Vergleich zu den Bohrungen im Grundwasseranstrom die geringsten Konzentrationen an Gesamtphenol auf. Die vertikale Konzentrationsentwicklung zeigte eine Anreicherung von Gesamtphenol in den gering durchlässigen tonigen Schichten im Hangenden (Maximalwert 19000 µg/kg) und Liegenden (Maximalwert 28000 µg/kg) des Plattendolomits. Die Konzentration korreliert mit den geophysikalischen Bohrlochmesskurven (GR-Log, GG-Log, NN-Log; Abb. 5-22). Die durch Flowmeter-messungen bestimmten Zuflussbereiche innerhalb des Plattendolomits waren bis auf eine Probe mit weniger als 3000 µg/kg Gesamtphenol belastet. Messungen mit dem Akustischen Bohrlochteleviewer (ABTV) zeigten, dass das Gestein intensiv durch steil stehende Klüfte sowie enge, flach nach E bzw. W einfallende Schichtung in Trennflächen zerlegt war (Richter 2002). Erwartungsgemäß konnte in den Zuflussbereichen eine hohe Anzahl von Trennflächen über ABTV-Messungen detektiert werden (Abb. 5-23). Die Existenz von dead-end-Klüften im Plattendolomit ist daher nicht zu vermuten. Da weder tonige Zwischenlagen noch hohe Gesteinsporositäten vorhanden waren, konnte sich in den Dolomitschichten ein schneller Austausch des Kluftwassers vollziehen, was zur Abnahme der Schadstoffgehalte im Gestein führte.

Der in der Übergangszone zum Plattendolomit als Tonstein ausgebildete Graue Salzton zeigte im ABTV eine erstaunlich hohe Anzahl von Klüften (Abb. 5-23), die jedoch in den tieferen tonigen Partien "blind" als sog. dead-end-Klüfte endeten.

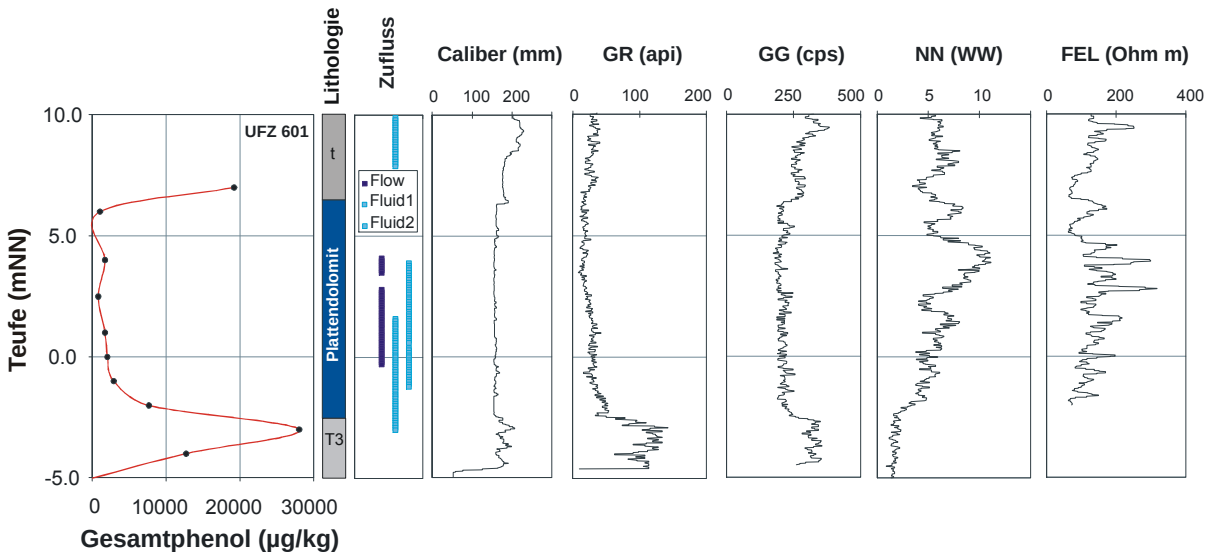


Abb. 5-22: Anreicherung an Gesamtphenol in den hydraulisch nicht aktiven Bereichen im Hangenden (t = tertiäres Einsturzgebirge) und Liegenden (T3 = Grauer Salzton) des Plattendolomits der UFZ 601. Die Logs der bohrlochgeophysikalischen Messungen (von links): Zuflussbereiche im Bohrloch aus Flowmeter (Flow) /Fluidlogging (Fluid), Caliber, Gamma-Ray, Gamma-Gamma, Neutron-Neutron, Fokussiertes Elektrolog sind Ausdruck von Veränderungen der Gesteinseigenschaften Dichte, Porosität, Klüftigkeit, Wasserführung, Tongehalt.

Die Molaren Verhältnisse der Phenolhomologe zeigten eine Zunahme des Phenol/Gesamtphenol-Verhältnisses in hydraulisch nicht aktiven Bereichen (Abb. 5-23). In den tonigen Partien im Hangenden und Liegenden lag das Phenol/Gesamtphenol-Verhältnis bei ~ 0.6. Kresole hatten einen Anteil von ~ 30 % am Gesamtphenol. Die in diesen Schichten nachgewiesenen dead-end-Klüfte haben aufgrund ihres eingeschränkten Stoffaustauschs mit dem Grundwasserstrom nicht nur wesentlich höhere Konzentrationen (Abb. 5-22), sondern auch ein anderes Molares Verhältnis (Abb. 5-23) gespeichert.

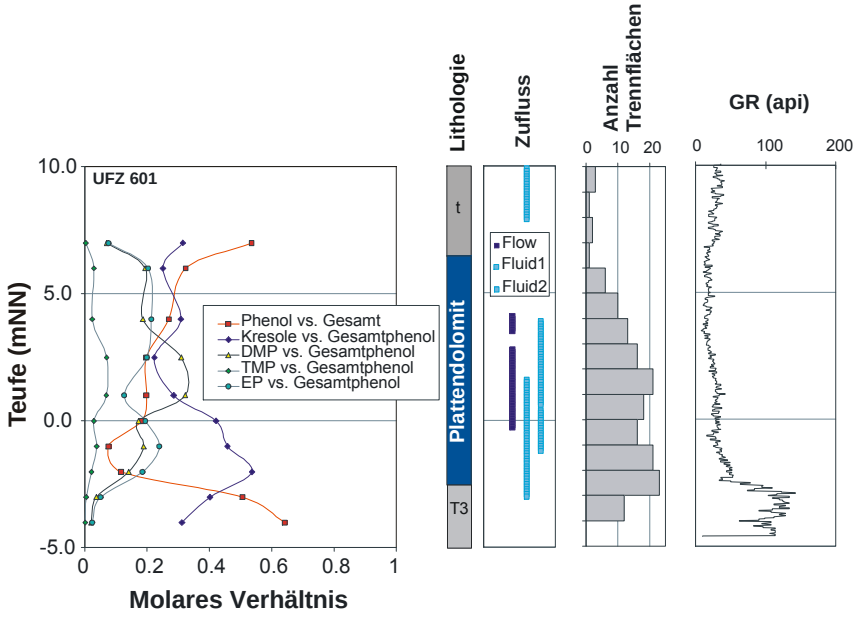


Abb. 5-23: Abnahme des Molaren Verhältnisses Phenol/Gesamtphenol in hydraulisch aktiven Bereichen des Plattendolomits der UFZ 601 durch zunehmenden Lösungsaustrag im Grundwasserabstrom. Diagramme von links: Molare Verhältnisse der Phenolhomologe, Zuflussbereiche im Bohrloch aus Flowmeter (Flow) und Fluidlogging (Fluid), Trennflächenanzahl aus ABTV-Messungen, Gamma-Ray-Log.

Die Zuflussbereiche im Plattendolomit waren überwiegend durch Kresole und DMP mit Anteilen zwischen 20 – 30 % am Gesamtphenol kontaminiert (Abb. 5-23). Phenol hatte deutlich geringere molare Anteile (< 20 %) als in den tonigen Schichten. TMP spielten kaum eine Rolle. Nur in den ohnehin gering kontaminierten Zuflussbereichen waren die molaren Anteile > 5 %. Aus dem Vergleich der Phenolkontaminationen des Plattendolomits im Grundwasserfließpfad (Abb. 5-17, Abb. 5-24) wurde folgendes deutlich:

Im Fließpfad (NE) verringerte sich die Konzentration des Gesamtphenols im Gestein. Der Phenolanteil reduzierte sich, während der Anteil der Alkylphenole (Kresole, DMP, EP, TMP) am Gesamtphenol zunahm.

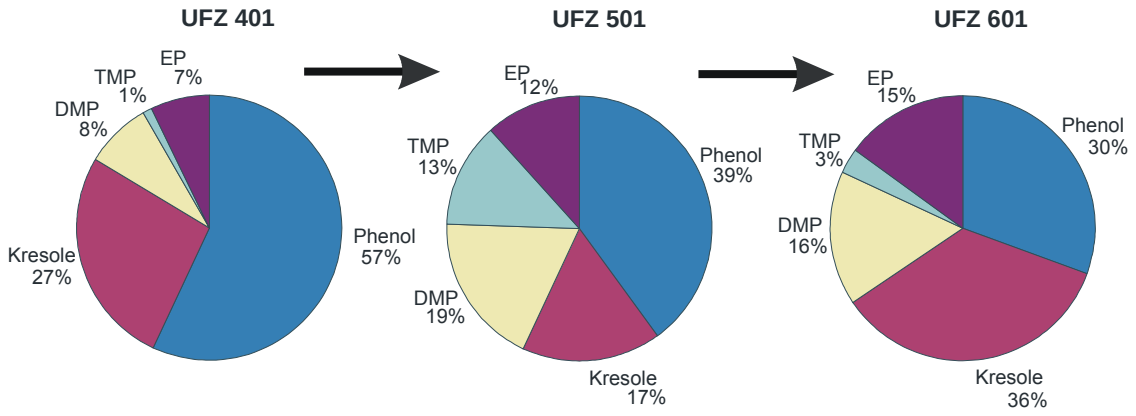


Abb. 5-24: Molare Anteile (in %) der Phenolhomologe am Gesamtphenol im Plattendolomit. Abnahme des Phenol-Anteils unter gleichzeitiger Zunahme des Anteils der Alkylphenole im Grundwasserabstrom (Pfeil).

5.6 Schwelwassertypische Kontaminationen des Grundwassers

5.6.1 Phenole im Grundwasser des Zechstein-Riffs Profen

Am Standort Profen wurde nur in den GWM UFZ 101 und UFZ 301 Grundwasser erbohrt. Das Grundwasser zeigte bereits bei der Probenahme durch bläulich-grünliche Färbung und charakteristischen Geruch Anzeichen einer schwelwassertypischen Kontamination durch Phenole.
In der **UFZ 101** wurde 9315 µg/l Gesamtphenol bestimmt, was die LAWA-Geringfügigkeitsschwelle (Tab. 5-4) um das 466fache überschreitet. Die im Grundwasserabstrom gelegene **UFZ 301** war mit 312003 µg/l Gesamtphenol im Grundwasser etwa 33-mal höher belastet als die UFZ 101 mit einer 15600fachen Überschreitung der LAWA-Geringfügigkeitsschwelle (Abb. 5-25). Das untersuchte Grundwasser der beiden GWM war demnach an Phenolen hoch kontaminiert.

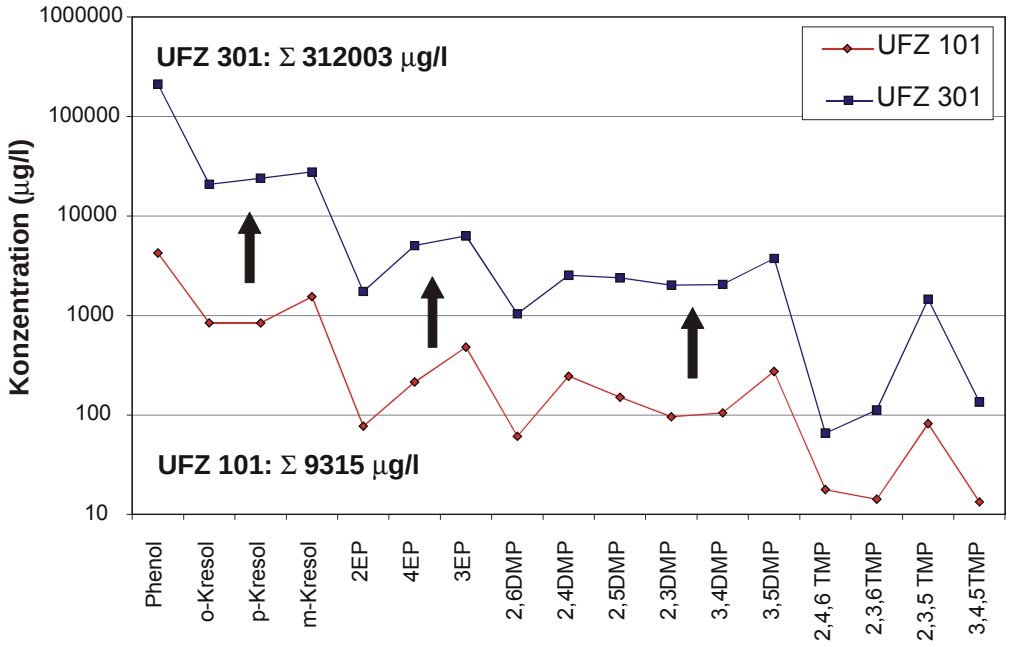


Abb. 5-25: Konzentrationsanstieg schwelwassertypischer C0-C3-Alkylphenole im Grundwasser entlang des Grundwasserfließpfades Profen (Pfeile). Schadstoffeintrag erfolgte in der Nähe der UFZ 101. Angabe der Gesamtphenol-Konzentrationen für jede Probe. Erläuterungen im Text.

Ein Konzentrationsvergleich der Einzelsubstanzen im Grundwasser beider GWM konnte ein identisches Verteilungsmuster aufzeigen (Abb. 5-25). Dadurch war von einer gemeinsamen Schadstoffquelle, dem Schwelwasser, auszugehen. Die Gesamtphenol-Konzentration war im Abstrom 33-mal höher als an der ehemaligen Eintragsstelle. Der Konzentrationsanstieg der Einzelverbindungen wurde durch Unterschiede in der Wasserlöslichkeit und des Kd-Wertes gesteuert. Phenol, als die Verbindung mit der höchsten Löslichkeit, erhöhte sich um den Faktor 50, während sich die TMP mit der geringsten Löslichkeit im Durchschnitt nur um den Faktor 14 erhöhten.

Im Grundwasserfließpfad kam es darüber hinaus zu Veränderungen der Molaren Verhältnisse. Das Phenol/Gesamtphenol-Verhältnis erhöhte sich von 0.5 auf 0.71 (Abb. 5-26). Gleichzeitig verringerten sich die Molaren Verhältnisse der C1-C3-Alkylphenole.
Mit der absoluten Konzentrationserhöhung aller Einzelverbindungen im Grundwasserabstrom kam es gleichzeitig zu einer überdurchschnittlichen Erhöhung des Phenols als die mobilste Verbindung.

An der Eintragstelle UFZ 101 waren sowohl im Grundwasser als auch im Gestein höhere Molare Verhältnisse der Alkylphenole zu beobachten als in der UFZ 301. Gleichzeitig waren die Unterschiede der Molaren Verhältnisse zwischen Grundwasser und Gestein in der UFZ 101 erheblich größer als in der UFZ 301. Auffällig war, dass im Grundwasser der UFZ 101 ein erheblich höheres Phenol/Gesamtphenol-Verhältnis vorlag als im Gestein, während die Alkylphenole ein umgekehrtes Verhalten zeigten.
Zwischen den Molaren Verhältnissen im Grundwasser und im Gestein der UFZ 301 waren kaum Unterschiede festzustellen (Abb. 5-26). Durch advektiven Stofftransport im Grundwasser gelöster (schwelwassertypischer) Phenole aus den im Anstrom gelegenen Schluckbrunnen wurde das Gestein und das Grundwasser im Abstrom kontaminiert. "Trappingeffekte" in dead-end-Poren und -Klüften führten zur Speicherung der Molaren Verhältnisse des Grundwassers im Aquifergestein.
Während des Transports führten Wechselwirkungen zwischen den gelösten Schadstoffen und dem Aquifergestein zu einer chromatographischen Auftrennung des Plumes, die sich in einer Veränderung der Molaren Verhältnisse zu Gunsten der leicht löslichen Verbindungen widerspiegelt.

Ursache für die chromatographische Auftrennung sind die bevorzugte Lösung und der Transport des leichtlöslichen Phenols im Vergleich zu den schwerer löslichen Alkylphenolen sowie das höhere Sorptionsvermögen der Alkylphenole, wie dies in ähnlicher Weise von King & Barker (1999) beobachtet wurde. Als Folge davon kommt es zu einer überproportionalen Phenol-Abreicherung im Riffgestein der Schadstoffquelle UFZ 101. Die stärker retardierten Alkylphenole werden im Gestein weniger abgereichert.

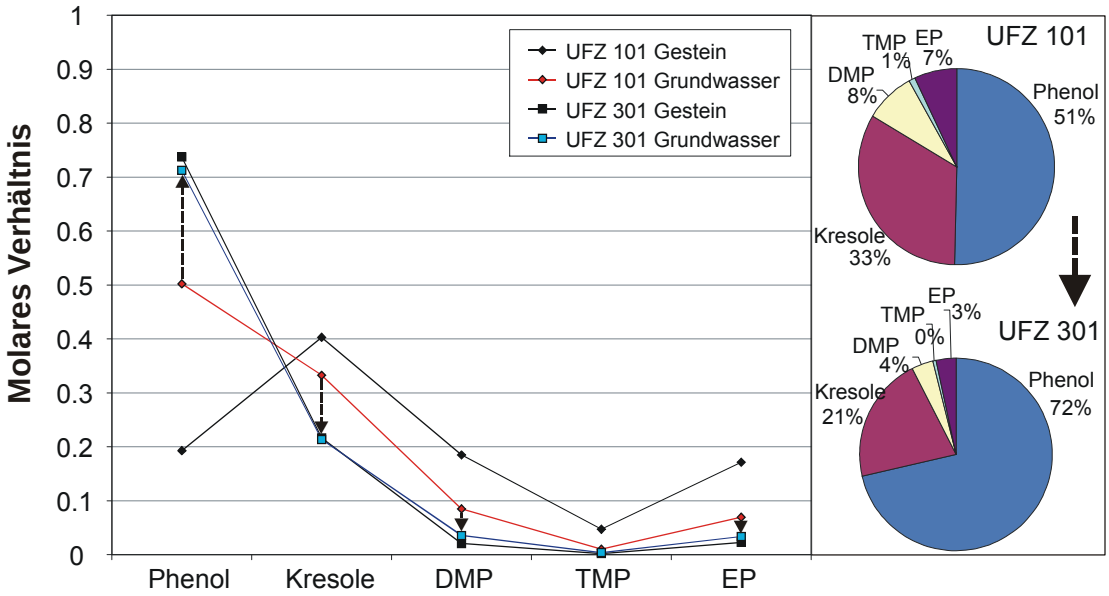


Abb. 5-26: Zunahme des Phenol/Gesamtphenol-Verhältnisses, Abnahme der Alkylphenol-Verhältnisse im Grundwasserabstrom vom Schadstoffeintrag (UFZ 101) zur UFZ 301. Als Vergleich sind die Molaren Verhältnisse der Gesteinsproben als Mittelwerte des jeweiligen Filterbereichs der GWM dargestellt. Rechtes Bild, molare Anteile in % am Gesamtphenol im Grundwasser als Pie-Chart. Pfeile markieren die Veränderung in Richtung des Grundwasserabstroms.

5.6.2 Phenole im Grundwasser des Plattendolomits von Deuben/Trebnitz

Am Standort Deuben/Trebnitz wurde in allen drei Bohrungen kontaminiertes Grundwasser erbohrt. Es konnte außerdem eine Schöpfprobe aus dem ehemaligen Schluckbrunnen Trebnitz 3/42 entnommen und analysiert werden. Diese Probe des Standwassers im Rohr hatte mit 4.3 g/l Gesamtphenol die höchsten im Wasser gemessenen Konzentrationen aller Proben. Die Gehalte lagen im Bereich der bekannten Gesamtphenol-Konzentrationen des Schwelwassers.
In der nur 10 m entfernten **UFZ 401** wurden nur 5129 µg/l Gesamtphenol bestimmt. Die LAWA-Geringfügigkeitsschwelle (Tab. 5-4) war um das 256fache überschritten. Die im Grundwasserabstrom gelegene **UFZ 501** hatte mit 154 µg/l Gesamtphenol im Grundwasser erstaunlich niedrige Werte. Dies wurde auf die starke Verdünnung durch hohe Spülwassereinträge beim Bohrprozess und auf zu geringe Klarpumpraten zurückgeführt. Die im Grundwasser der **UFZ 601** festgestellten Gesamtphenol-Gehalte lagen bei 13475 µg/l. In der UFZ 601, die sich etwa 3200 m von den Schluckbrunnen Trebnitz und etwa 1100 m von den Schluckbrunnen Deuben befindet, wurden die mit Abstand höchsten Konzentrationen an Gesamtphenol gemessen. Die LAWA-Geringfügigkeitsschwelle (Tab. 5-4) wurde um das 674fache überschritten.

Die relative Konzentrationsverteilung der Einzelsubstanzen in den untersuchten Grundwasserproben zeigte große Ähnlichkeiten zwischen der Probe Trebnitz 3/42 und der UFZ 401 (Abb. 5-27). In beiden Proben hatte Phenol die höchste Konzentration der bestimmten Einzelverbindungen, gefolgt von den Kresolen. Auch die einzelnen DMP, EP, und TMP hatten ähnliche relative Konzentrationen.

In der **UFZ 501** war 2,4-DMP die Verbindung mit der höchsten Konzentration, gefolgt von 2,3,5-TMP und 2,6-DMP. Die Konzentrationsverteilung entsprach nicht den bisher festgestellten und war vermutlich auf eine starke Abreicherung der leicht löslichen Verbindungen durch hohe Spülwasserverluste beim Bohrprozess zurückzuführen.
Diese Probe ist deshalb wenig repräsentativ und wurde bei der Auswertung nicht berücksichtigt.

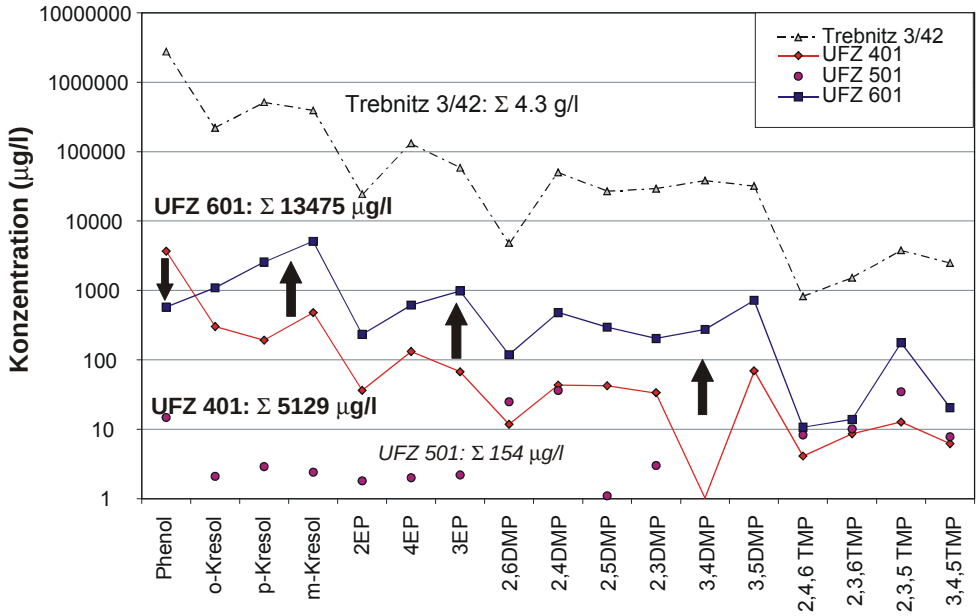


Abb. 5-27: Anstieg der C1-C3-Alkylphenol-Konzentrationen und Verringerung der Phenolkonzentrationen im Grundwasser entlang des Fließpfades Trebnitz – Deuben (Pfeil). Probe Trebnitz 4/43 ist Standwasser aus einem Schluckbrunnen. Probe UFZ 501 ist durch Spülwasser beeinflusst. Angabe der Gesamtphenol-Konzentrationen für jede Probe. Erläuterungen im Text.

Die Probe der **UFZ 601** hatte Ähnlichkeiten in den relativen Konzentrationen der C2-C3-Alkylphenole mit den Proben aus der UFZ 401 und Trebnitz 3/42, jedoch waren hier die Kresole (m-Kresol, p-Kresol, o-Kresol) am höchsten konzentriert. Phenol war in deutlich geringeren Konzentrationen vorhanden (Abb. 5-27).
Im etwa 3.2 km langen beobachteten Grundwasserfließpfad vom Schluckbrunnen 3/42 bis zur UFZ 601 wurden gravierende Veränderungen in den Molaren Verhältnissen beobachtet. Trotz stark unterschiedlicher Konzentrationen war die Zusammensetzung des Gesamtphenols in der UFZ 401 dem Standwasser des Schluckbrunnens Trebnitz 3/42 auffallend ähnlich. Das Phenol/Gesamtphenol-Verhältnis verringerte sich im weiteren Abstrom von ~ 0.7 auf 0.05 (Abb. 5-28). Während in der Nähe der Schluckbrunnen Phenol den Hauptschadstoff bildete, war es in der UFZ 601 kaum von Bedeutung. Kresole dagegen gewinnen an Bedeutung. Ihr Molares Verhältnis stieg von 0.17 (UFZ 401) auf 0.66 (UFZ 601). Die DMP- und EP-Anteile waren in der UFZ 401 < 5 %. Im Grundwasserabstrom (UFZ 601) lagen die DMP- und EP-Anteile jedoch mit 14 % bzw. 12 % deutlich darüber. Die Anteile der TMP am Gesamtphenol waren insgesamt relativ gering. Die Probe der UFZ 501 hatte nicht nur auffallend geringe Konzentrationen an Gesamtphenol, sondern auch eine ungewöhnliche Zusammensetzung. Die vermuteten Einflüsse des Spülwassers scheinen sich dadurch zu bestätigen.

Zum besseren Vergleich wurde in der Abb. 5-28 neben der Zusammensetzung des im Grundwasser gelösten Gesamtphenols auch die Zusammensetzung in der Aquifermatrix dargestellt. Darin zeigte sich, dass in der Nähe der Versenkungsbrunnen Trebnitz (Probe UFZ 401) nur das Phenol höhere Anteile am gelösten Gesamtphenol hatte als in der Aquifermatrix. Die Alkylphenole, mit generell höheren Molaren Verhältnissen in der Aquifermatrix, hatten in ihrer Verteilung zwischen Wasser und Feststoff größere Ähnlichkeiten.
Für die UFZ 501 waren kaum Zusammenhänge in der Verteilung der Phenolhomologe zwischen Wasser und Feststoff feststellbar.
In der UFZ 601 hingegen waren starke Ähnlichkeiten im Verteilungsmuster zwischen Feststoff und Wasser zu beobachten. Für Phenol, DMP, TMP und EP waren generell geringere Anteile im Grundwasser zu finden als im Gestein. Kresole, die Hauptschadstoffgruppe im Grundwasser, hatten deutlich niedrigere Anteile im Gestein (0.37) als im Grundwasser (0.67). Dennoch waren Kresole in beiden Matrices die Stoffgruppe mit den höchsten molaren Anteilen.

Im Grundwasserfließpfad wurde eine Verschiebung der Molaren Verhältnisse vom mobilen und relativ leicht abbaubaren Phenol zu den geringer löslichen und schwerer abbaubaren Kresolen und C2-C3-Alkylphenolen beobachtet. Dies könnte auf einen selektiven Phenolabbau und/oder bevorzugten Lösungstransport über den betrachteten Fließpfad hinaus hindeuten.

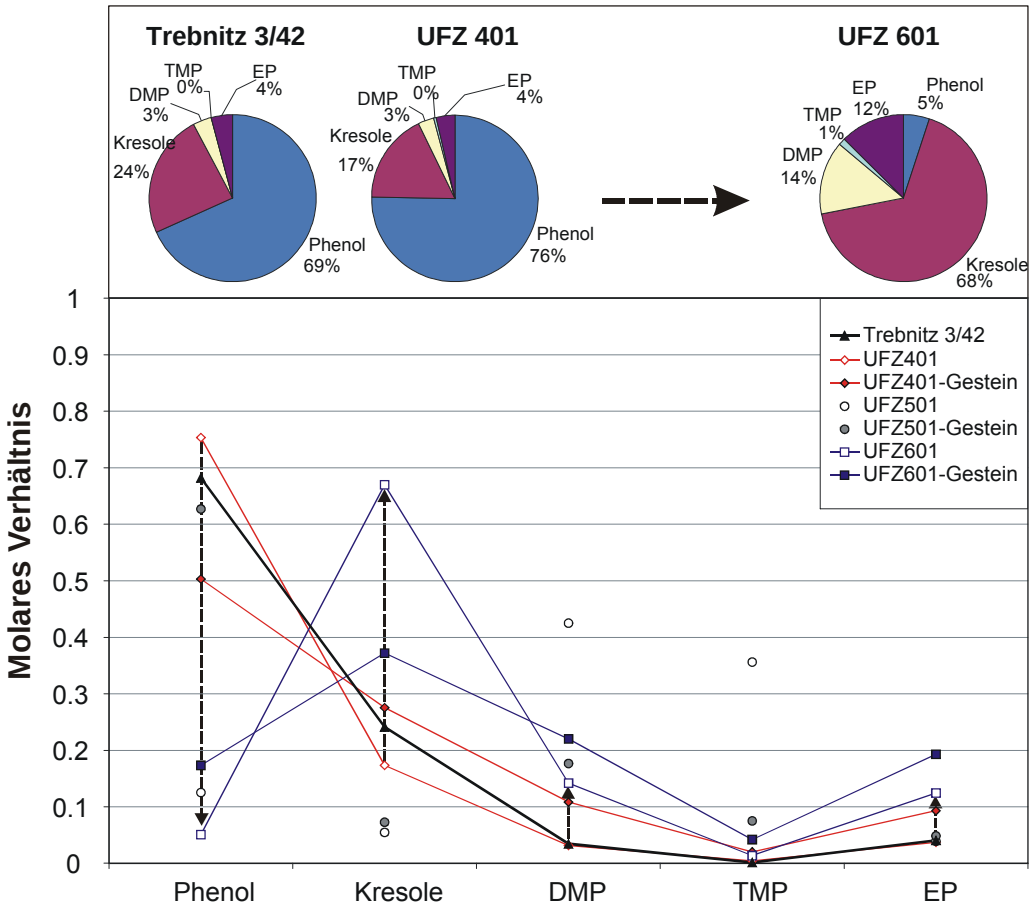


Abb. 5-28: Abnahme des Phenol/Gesamtphenol-Verhältnisses, Zunahme der Alkylphenol-Verhältnisse im Grundwasserabstrom (Pfeile) vom Schadstoffeintrag (Trebnitz 3/42, UFZ 401) zur GWM UFZ 601. Als Vergleich sind die Molaren Verhältnisse der Gesteinsproben als Mittelwerte des jeweiligen Filterbereichs der GWM dargestellt. Oberes Bild, molare Anteile in % am Gesamtphenol im Grundwasser als Pie-Chart. Wasserproben der UFZ 501 waren durch Spülwasser beeinflusst und daher nicht auswertbar.

5.7 Natural Attenuation von Phenolen

Durch den natürlichen Schadstoffabbau im Grundwasser kommt es nicht nur zu einer Konzentrationsabnahme des entsprechenden Schadstoffs, sondern ebenfalls zu Veränderungen sensitiver Parameter. Aufgrund der unterschiedlichen Biotoxizität der Einzelverbindungen und der Spezialisierung der Mikroorganismen auf den Abbau bestimmter Substanzen findet oft ein selektiver Schadstoffabbau statt. Damit verbunden sind Veränderungen in der Konzentration und den Molaren Verhältnissen der Einzelverbindungen zwischen Schadstoffquelle und dem Beobachtungsbrunnen.
Unter dem Aspekt des Natural Attenuation wurde untersucht, welche Verbindungen sich unter den vorherrschenden Redoxverhältnissen möglicherweise abbauen und welche sensitiven Parameter einen natürlichen Abbau anzeigen.

5.7.1 Hydrochemische Bedingungen im Aquifer

Der mikrobielle Abbau von Phenolen im Grundwasser ist abhängig von der Verfügbarkeit im Grundwasser gelöster Elektronenakzeptoren (O_2, NO_3^-, SO_4^{2-}, CO_2) bzw. von den in der Aquifermatrix enthaltenen Elektronenakzeptoren, z.B. Mn(IV)-, Fe(III)-Oxide, unter den jeweils vorherrschenden Redoxverhältnissen. In den untersuchten Gesteinsproben wurde Eisen mit 8.7 g/kg TS und Mangan mit 1.6 g/kg TS (Mittelwerte aus 82 Proben) bestimmt. Im Grundwasser der untersuchten Standorte Profen und Deuben wurden anaerobe Redoxverhältnisse mit Redoxpotenzialen bis –0.17 V bestimmt (Abb. 5-29). Die z.T. sehr hohen Konzentrationen an H_2S (aq) bis zu 69.6 mg/l (UFZ 301) waren ein weiterer eindeutiger Beleg für Sulfatreduktion im Aquifer. Eine Redoxzonierung im Grundwasserfließpfad konnte nicht festgestellt werden. Der pH-Wert lag im neutralen Bereich. Wichtigster Elektronenakzeptor war SO_4^{2-} mit Konzentrationen im Mittel von 400 mg/l. In Phenol-belasteten Proben war die Sulfatkonzentration deutlich niedriger als in unbelasteten Proben (Abb. 5-29). Gehalte an Nitrat und Eisen waren bis auf die UFZ 401 < 1 mg/l. Die hohen NH_4^+-Konzentrationen in den Phenol-belasteten Proben sind nicht auf Nitratreduktion, sondern vielmehr auf den direkten Eintrag als Bestandteil der Schwelwässer zurückzuführen (Tab. 5-1).

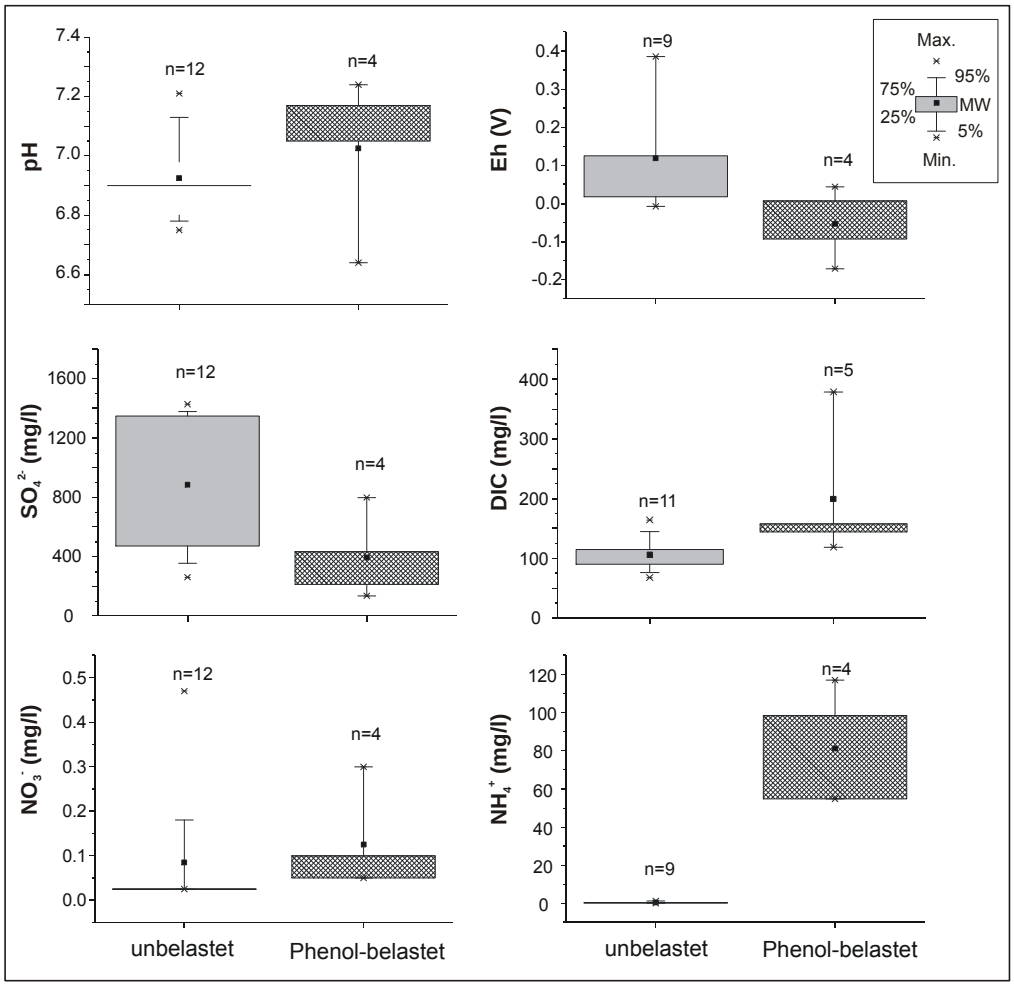


Abb. 5-29: Vergleich ausgewählter hydrochemischer Parameter zwischen unbelastetem Grundwasser des GWL II und Phenol-belastetem Grundwasser aus den GWM UFZ 101, 301, 401, 501, 601. Nitrat-Konzentrationen > 0.1 mg/l im Phenol-belasteten Grundwasser sind vermutlich auf geringe Spuren von Spülwasser aus dem Bohrprozess zurückzuführen. Weitere Erläuterungen im Text.

Der DIC war in Phenol-belasteten Proben im Mittel deutlich erhöht (Abb. 5-29). Die mit Abstand höchsten DIC-Konzentrationen wurden mit 379 mg/l in der UFZ 301 bestimmt. Im pH zeigten sich in den Phenol-belasteten Proben leicht erhöhte Werte. In den kontaminierten Teilen des Aquifers haben sich mikrobielle Aktivität und anaerobe Redoxverhältnisse entwickelt. Der Zugang von Sauerstoff kann aufgrund der mächtigen Überlagerung tertiärer Sedimente vernachlässigt werden. Auch durch das Verpressen der stark reduzierenden Schwelwässer gelangte kaum Sauerstoff in den Aquifer. Die abbausensitiven Parameter bestätigen die Mineralisation organischer Verbindungen im Grundwasser, ohne jedoch verbindungsspezifisch zu sein.

5.7.2 Reaktionswege des mikrobiellen Abbaus von Phenolen

Der mikrobielle Abbau aromatischer Verbindungen wie Phenol wird unter Berücksichtigung verschiedener Reaktionswege sowohl im aeroben als auch im anaeroben Milieu beobachtet.
Der **aerobe** Phenolabbau erfolgt nach Fritsche (1998) in 3 Stufen:

- Ringspaltung vorbereitende Reaktionen
- oxidative Spaltung des aromatischen Rings
- Metabolisierung der Spaltprodukte

Zunächst wird Phenol durch eine Monooxygenase-Reaktion zu Catechol oxidiert. Monooxygenasen katalysieren dabei den Einbau eines der Atome des Luftsauerstoffs in das Phenol. Die Ringspaltung des Catechols kann zwischen den beiden benachbarten Hydroxylgruppen (ortho-Weg) oder neben den beiden Hydroxylgruppen (meta-Weg) erfolgen (Fritsche 1998). Auf die nachfolgende Metabolisierung wird nicht näher eingegangen. Für Phenol, o-, m-, p-Kresol, 2,3-, 2,4-, 2,5-, 2,6-, 3,4- und 3,5-DMP konnte in zahlreichen Laborversuchen der vollständige Abbau unter aeroben Bedingungen nachgewiesen werden (u.a. Nielsen & Christensen 1994; Nielsen et al. 1995b; Milette et al. 1995; Dyreborg et al. 1996a,b; Broholm et al. 1999a,b, 2000; Arvin et al. 1991).

Der **anaerobe** Phenolabbau erfolgt nach Fritsche (1998) ebenfalls in 3 Stufen:

- Vorbereitung der Ringspaltung (Abb. 5-30)
- reduktive Ringspaltung
- Metabolisierung der Spaltprodukte

Phenol wird zunächst durch enzymatische Phosphorolysierung über eine bisher nicht nachgewiesene energiereiche Phosphorverbindung zu Phenylphosphat umgewandelt (Lack & Fuchs 1994). Dadurch wird der Benzolring für die CO_2-Aufnahme aus dem Wasser aktiviert. Die entstehende Zwischenverbindung 4-Hydroxybenzoesäure wird enzymatisch zu 4-Hydroxybenzoyl-CoA umgesetzt. Letzteres wird reduktiv zu Benzoyl-CoA, dem Zentral-Metaboliten dehydroxyliert (Harwood et al. 1999). Der aktivierte Benzolring wird durch enzymgebundenen Wasserstoff dearomatisiert. Anschließend wird der dearomatisierte Ring hydrolytisch zu einer Carboxylsäure gespalten, die über β-Oxidation und Decarboxylierung zu drei Acetyl-CoA-Einheiten abgebaut wird (Fritsch 1998).

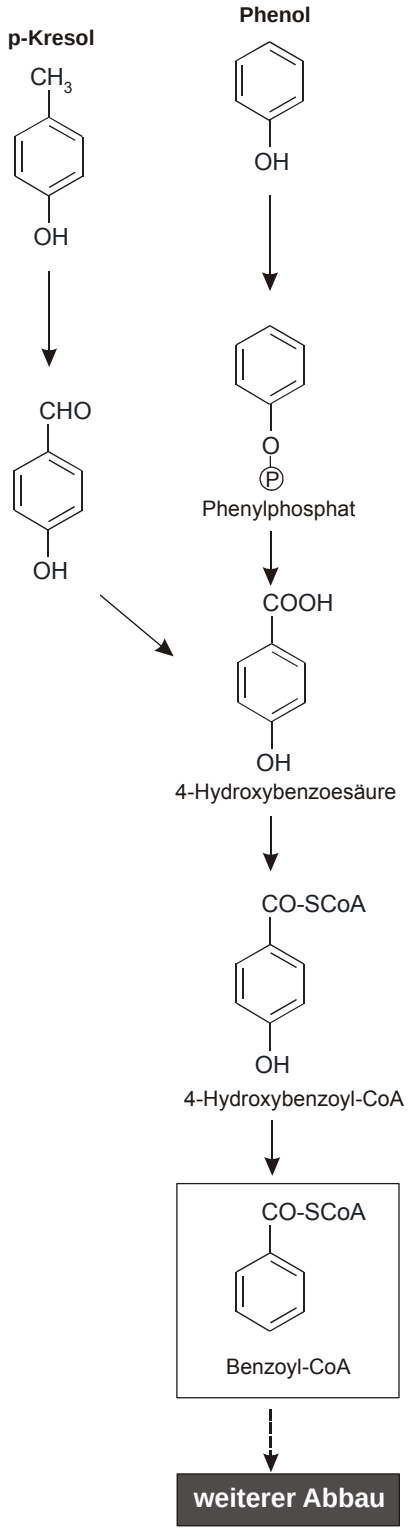


Abb. 5-30: Vorbereitung der Ringspaltung beim anaeroben Abbau von Phenol und p-Kresol (nach Harwood et al. 1999; Londry et al. 1999).

Potenzielle Metabolite des anaeroben Abbaus von Phenol und Alkylphenolen sind Dihydroxybenzen, Hydroquinone, Hydroxybenzylalkohole, Hydroxybenzaldehyd, Hydroxybenzoesäure und Benzoesäure (u.a. Smolenski & Suflita 1987; Ewers et al. 1989; Suflita et al. 1989; Tschech & Fuchs 1989; Lovley & Lonergan 1990; Roberts et al. 1990; Rudolphi et al. 1991).
Eine Übersicht über den nachgewiesenen Abbau bzw. die Persistenz schwelwassertypischer Verbindungen wurde in Abhängigkeit von den Redoxverhältnissen in Tab. 5-5 zusammengestellt. Obwohl der Kenntnisstand zum Abbau von DMP und TMP relativ gering ist, kann in Abhängigkeit von der Anzahl der Methylgruppen und der Struktur von einer zunehmenden Biotoxizität (Kahru et al. 2000) und Persistenz gegenüber dem anaeroben mikrobiellen Abbau ausgegangen werden.
Unterschiede im Abbauverhalten zwischen den Isomeren des Kresols zeigten z.B. einen deutlich schlechteren Abbau des o-Kresols im Vergleich zu m- und p-Kresol (Nielsen et al. 1995b; Flyvbjerg et al. 1993).

Aus den Ergebnissen der gemessenen Abbau-sensitiven Parameter im Grundwasser (E_H, SO_4, H_2S, DIC) könnte ein selektiver Abbau einzelner schwelwassertypischer Phenole unter sulfatreduzierenden bis methanogenen Redoxverhältnissen stattfinden. Abbaureaktionen durch Reduktion von Fe^{3+} und Mn^{4+} (Stone 1987) waren aufgrund geringer Eisen- und Mangangehalte des Aquifergesteins von untergeordneter Bedeutung. Nur die in Betracht kommenden Reaktionswege werden deshalb näher beschrieben.

Tab. 5-5: Mikrobieller Abbau bzw. Persistenz (kein Abbau) schwelwassertypischer Phenole im Grundwasser unter verschiedenen Redoxverhältnissen. (? = bisher nicht untersucht).

Verbindung	**Nitratreduktion**		**Sulfatreduktion**		**Methanogen**	
	Abbau	***kein Abbau***	***Abbau***	***kein Abbau***	***Abbau***	***kein Abbau***
Phenol	1,3,4,6,15	2,5,6,15	4,7,8		9,10,11,12, 17,24	5
o-Kresol	1,3,4,18	4,5,6,20	4,7,8,12	20	9,10,11,12, 17,18,23,24	5,20,21,22
m-Kresol	1,4,14		4,7,8,9,12,16 ,25,26		9,10,11,12, 17,19,22,24	
p-Kresol	1,4,14		7,8,12,13, 26,27		9,10,11,12, 17,22,24	
2,3 Dimethylphenol	1	4	?	4	?	?
2,4 Dimethylphenol	1,4		?	4	?	9
2,5 Dimethylphenol	1	4	?	4	?	21
2,6 Dimethylphenol	1	4,20	?	20	?	20
3,4 Dimethylphenol	1,4		?	?	?	21
3,5 Dimethylphenol	1	4	?	4	?	9
2-Ethylphenol	?	20	?	20	?	20,22
3-Ethylphenol	?	?	?	?	?	21,22
4-Ethylphenol	?	?	?	?	?	?
2,4,6 Trimethylphenol	?	?	?	?	?	?
2,3,5 Trimethylphenol	?	?	?	?	?	?
2,3,6 Trimethylphenol	?	?	?	?	?	?

1: Broholm & Arvin (2000); 2: Nielsen et al. (1995a); 3: Broholm et al. (1999b); 4: Flyvbjerg et al. (1993); 5: Nielsen et al. (1995b); 6: Higgo et al. (1996); 7: Mort & Dean-Ross (1994); 8: Suflita et al. (1989); 9: Goerlitz et al. (1985); 10: Godsy et al. (1992a); 11: Godsy et al. (1992b); 12: Smolenski & Suflita (1987); 13: Ramanand & Suflita (1991); 14: Kuhn et al. (1988); 15: Smith & Novak (1987); 16: Londry et al. (1997); 17: Bekins et al. (1993); 18: Rudolphi et al. (1991); 19: Roberts et al. (1990); 20: Puig-Grajales et al. (2000); 21: Razo-Flores et al. (1996); 22: Wang et al. (1988); 23: Bissaillon et al. (1991); 24: O'Conner & Young (1996); 25: Müller et al. (1999); 26: Londry et al. (1999); 27: Müller et al. (2001)

5.7.3 Phenolabbau durch sulfatreduzierende Bakterien

Unter sulfatreduzierenden Bedingungen wurde bisher nur der Abbau von Phenol und der Kresol-Isomere nachgewiesen. Die C2-C3-Alkylphenole verhielten sich in allen bisher durchgeführten Laborversuchen mit sulfatreduzierenden Bakterien persistent (Tab. 5-5). Alle bekannten phenolabbauenden Spezies gehören zu den Desulfobacteriaceae, wie z.B. *Desulfobacterium phenolicum*, eine Spezies die Phenol und p-Kresol abbauen kann (Heider & Fuchs 1997).

Das Abbauverhalten von Phenol und Alkylphenolen unter sulfatreduzierenden Bedingungen ist jedoch nur teilweise bekannt. Obwohl die Biochemie des Phenolabbaus unter sulfatreduzierenden Bedingungen noch nicht untersucht wurde, vermuteten Schink et al. (2000) den gleichen Abbauweg wie bei fermentierenden Bakterien mit 4-Hydroxybenzoesäure als Zwischenprodukt. Bisher konnte zwar der Abbau (u.a. Londry et al.

1997), nicht aber die direkte Bildung von 4-Hydroxybenzoesäure unter sulfatreduzierenden Bedingungen nachgewiesen werden (van Schie & Young 2000).

Kresole werden unter anaeroben Bedingungen in Abhängigkeit von der Stellung ihrer Methylgruppe (o-, m-, p-Stellung) unterschiedlich leicht abgebaut (Ramanand & Suflita 1991). Der Reaktionsweg des anaeroben Abbaus von p-Kresol ist bisher nicht eindeutig geklärt. So wurde zunächst die anaerobe Oxidation der Methylgruppe (Suflita et al. 1989; Häggblom et al. 1990; Loundry et al. 1999) als initiale Reaktion beschrieben. In den Versuchen von Müller et al. (2001) mit *Desulfobacterium cetonicum* wurde jedoch ein Abbau über die Bildung von 4-Hydroxybenzylsuccinat beobachtet, was gegen eine Oxidation der Methylgruppe spricht.
Über den Metabolismus des m-Kresolabbaus ist ebenfalls vergleichsweise wenig bekannt. Als initiale Reaktion wurden von Roberts et al. (1990) und Ramanand & Suflita (1991) para-Carboxylierung und von Londry et al. (1997, 1999) eine Oxidation der Methylgruppe vorgeschlagen. Die Anlagerung der Carboxylgruppe an den Benzolring, die nur über biologisch katalysierte Zwischenschritte stattfinden kann, ist im Einzelnen noch nicht geklärt. Auf rein chemischem Weg läuft die sog. Kolbe-Schmitt-Reaktion nur bei pH > 10 und Temperaturen > 100 °C ab.
Neuere Untersuchungen von Müller et al. (1999) konnten einen Abbau über 3-Hydroxybenzylsuccinat nachweisen, welches weiter zu 3-Hydroxybenzoyl-CoA umgesetzt wurde.
o-Kresol kann zu 4-Hydroxy-3-Methylbenzoat carboxyliert und dann weiter abgebaut werden (Bissaillon et al. 1991; Rudolphi et al. 1991). Beim Abbau über die Oxidation der Methylgruppe (Suflita et al. 1989) entsteht zunächst 3-Hydroxybenzoesäure, die anschließend zu Benzoesäure umgewandelt wird. Dieser Reaktionspfad wurde bereits von Bonting et al. (1995) und Rudolphi et al. (1991) für den m-Kresol-Metabolismus der denitrifizierenden Bakterien beschrieben. Ortho-substituierte Alkylphenole gelten allgemein als schwer abbaubar (u.a. Puig-Grajales et al. 2000).

Die stöchiometrische Reaktionsgleichung (Gl. 5-2) von Londry et al. (1997) beschreibt den Abbau von Kresol, ohne Berücksichtigung von Biosorption, unter Bildung von CO_2 und gleichzeitiger Reduktion des Sulfats zu Sulfid.

$$C_7H_8O + 4.25\ SO_4^{2-} \rightarrow 7\ CO_2 + 4.25\ S^{2-} + 4\ H_2O \qquad \text{Gl. 5-2}$$

5.7.4 Phenolabbau durch methanogene Bakterien

Unter methanogenen Bedingungen wurde bisher nur der Abbau von Phenol und der Kresol-Isomere nachgewiesen (Tab. 5-5). Die C2-C3-Alkylphenole waren in allen bisher durchgeführten Laborversuchen unter methanogenen Bedingungen nicht abbaubar. Eine vereinfachte Stöchiometrie der Phenol-Abbaureaktion geben Kobayashi et al. (1989):

$$C_6H_5OH + 4\ H_2O \rightarrow 3.5\ CH_4 + 2.5\ CO_2 \qquad \text{Gl. 5-3}$$

Durch O'Conner & Young (1996) konnte folgende Abbausequenz beobachtet werden:

Phenol ~ p-Kresol > m-Kresol >> o-Kresol.

Dies stimmt mit den Ergebnissen früherer Untersuchungen unter sulfatreduzierenden Bedingungen (vgl. Kap. 5.7.3) überein.

Der Phenolabbau verläuft unter methanogenen Bedingungen ebenfalls über Carboxylierung unter Bildung von Benzoesäure als Zwischenprodukt (Béchard et al. 1990; Knoll & Winter 1989; Kobayashi et al. 1989; Létourneau et al. 1995; Londry & Fedorak 1993). Unter Verwendung deuterierter und ^{13}C-markierter Phenole konnten Zhang et al. (1990) und Gallert et al. (1991) zeigen, dass die Carboxylgruppe der Benzoesäure tatsächlich an der Parastelle des Phenols angelagert wird.

Der Abbau der Kresol-Isomere verläuft unterschiedlich.
p-Kresol wird über die anaerobe Oxidation der Methylgruppe abgebaut (Häggblom et al. 1990). o-Kresol wird entweder über die para-Carboxylierung (Bissaillon et al. 1991) oder die Oxidation der Methylgruppe (O'Conner & Young 1996) abgebaut. m-Kresol hingegen kann nicht durch methanogene Bakterien an der Methylgruppe oxidiert werden (Roberts et al. 1987), sondern wird durch initiale para-Carboxylierung (Roberts et al. 1990), gefolgt von Demethylierung und Dehydroxylierung, zu Benzoesäure umgewandelt (Londry & Fedorak 1993).

Die Umwandlung des Phenols zu Methan erfolgt durch ein Konsortium syntrophischer Bakterien bestehend aus fermentierenden und Wasserstoff-oxidierenden methanogenen Bakterien (Szewzyk et al. 1985; Knoll & Winter 1987, 1989; Zhang & Wiegel 1994; Zhang et al. 1990; Li et al. 1996). Diese Organismen können jedoch nicht Phenol als ihre einzige Energie- und Kohlenstoffquelle nutzen, sondern benötigen Aminosäuren als Wachstumssubstrat und für die Carboxylierungsaktivität. Durch hohe Konzentrationen von C2-Alkylphenolen, z.B. 2,5-DMP, 3,4-DMP, 3,5-DMP, kann die Abbaurate des Phenolabbaus deutlich verringert werden (Fedorak & Hrudey 1984).

5.8 Sorption von Phenolen

Unter Sorption wird hier die Verlagerung eines in wässriger Phase gelösten Stoffs an Oberflächen (Adsorption, zweidimensional) bzw. in die Matrix eines Feststoffs (Absorption, dreidimensional) verstanden. Die Sorption aus der Gasphase wird in dem Fall nicht berücksichtigt. Sorption ist nicht immer ein einzelner Prozess, sondern eine Kombination verschiedener Wechselwirkungen zwischen einer chemischen Verbindung (Sorbat), einem Feststoff (Sorbenz) und der wässrigen Lösung.
Für die Verteilung der Phenole im System Kalkstein/Dolomit – Grundwasser – toniger Stauer wurden folgende sorptive Prozesse betrachtet:

- Sorption an natürlicher organischer Substanz (organischer Kohlenstoff im Gestein)
- Sorption an Gesteinsoberflächen (z.B. Kalkstein)
- Sorption an Tonmineralen

Die Sorptionsmechanismen können alle gleichzeitig auftreten und sind abhängig von den strukturellen Eigenschaften der organischen Verbindung und der Art des Feststoffs.

5.8.1 Sorption an natürlicher organischer Substanz

Für das Eindringen neutraler organischer Verbindungen in natürliche organische Substanz von Feststoffen müssen eng gebundene Wassermoleküle verdrängt werden. Das feste organische Material setzt sich zusammen aus Biopolymeren wie Proteinen, Lignin und Zellulose und einer Reihe von Makromolekülen und aus dem teilweisen Abbau und crosslinking organischer Reste (Schwarzenbach et al. 1993). Diese komplexen organischen Substanzen werden auch als Huminstoffe oder Kerogen bezeichnet.

Die partikulär gebundenen organischen Bestandteile in einem Aquifersediment bilden relativ unpolare Bereiche, in denen hydrophobe Stoffe ohne konkurrierende Prozesse des Wassers gebunden werden können. Das organische Material bildet oft Beläge auf Mineraloberflächen. Mit Hilfe struktureller Verwicklung minimiert die organische Substanz ihre der wässrigen Lösung exponierte hydrophobe Oberfläche. Aufgrund der "porösen" Natur solcher flexiblen Makromoleküle können unpolare Verbindungen eindringen und bleiben in der festen Phase gebunden (Schwarzenbach et al. 1993). Die "Bindungen" zwischen dem Sorbat und dem natürlichen organischen Sorbenz sind relativ schwache intermolekulare Anziehungskräfte.

Die Beziehung zwischen Konzentration einer an der Feststoffmatrix sorbierten Verbindung C_S (µg kg^{-1}) und Gleichgewichtskonzentration in der wässrigen Lösung C_W (µg l^{-1}) lässt sich durch Sorptionsisothermen (Abb. 5-31) beschreiben. Voraussetzung ist die Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichts bei konstanter Temperatur.
Aus dem Konzentrationsverhältnis des Sorbats in beiden Phasen ergibt sich der Verteilungskoeffizient zwischen Wasser und Feststoff Kd. Ansteigende Werte für Kd sind ein Anzeichen für ein größeres Sorptionsvermögen.

$$K_d = \frac{C_S}{C_W} \qquad \text{Gl. 5-4}$$

An unbelasteten Proben des Zechstein-Plattendolomits wurden durch Licha (2002) batch-Versuche zur Bestimmung der Sorptionskoeffizienten für ausgewählte schwelwassertypische Phenole durchgeführt. Die ermittelten Sorptionsisothermen (Abb. 5-31) zeigten keinen linearen Verlauf. Dies bedeutet, dass bei höherer Phenolfracht des Grundwassers der Verteilungskoeffizient Kd abnimmt.

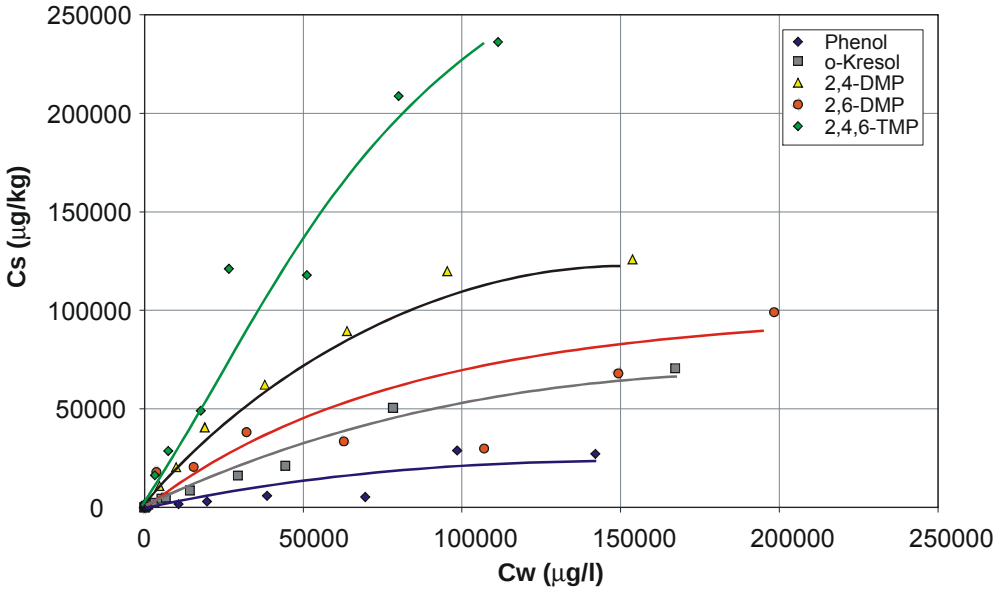


Abb. 5-31: Sorptionsisothermen für die Sorption von Phenol, o-Kresol, 2,4-DMP, 2,5-DMP und 2,4,6-TMP an Kalkstein bei pH 8 und 11 °C (Daten aus Licha 2002).

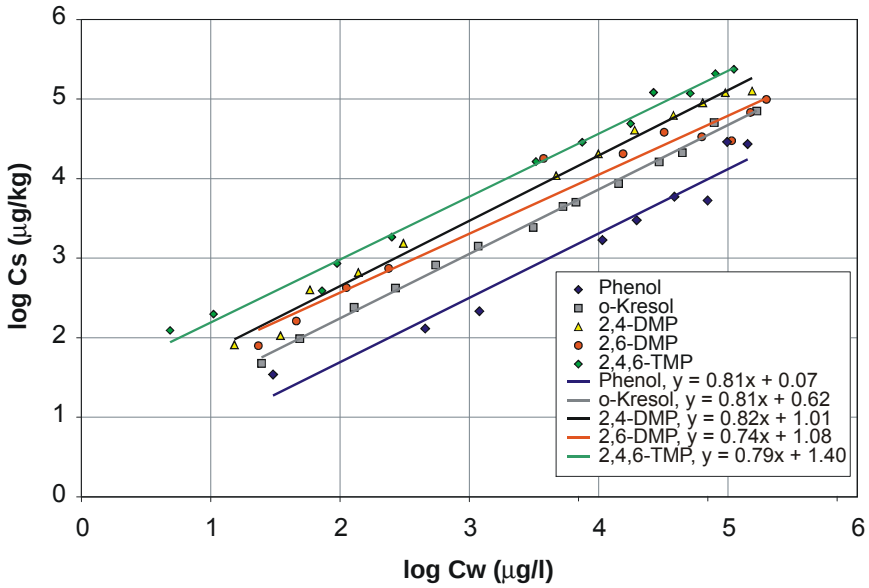


Abb. 5-32: Doppelt logarithmische Darstellung der Sorptionsisothermen. Der Anstieg der Geraden entspricht nF, der Schnittpunkt mit der y-Achse KF (Daten aus Licha 2002).

Die nichtlineare Sorption lässt sich mit der Freundlich-Isotherme nach der Beziehung (Gl. 5-5) beschreiben.

$$C_S = K_F \times C_W^{n_F} \qquad \text{Gl. 5-5}$$

C_S Konzentration im Feststoff
C_W Konzentration in wässriger Phase
K_F Freundlich-Konstante
n_F Maß für Sorptionsintensität

Wertesprünge, die bei höheren Gleichgewichtskonzentrationen in der Lösung vom Verlauf der Sorptionsisotherme abweichen, können mit Mehrschichtadsorption bzw. der Heterogenität des Sorbens in Zusammenhang stehen.
Durch Logarithmieren wird die Freundlich-Isotherme linearisiert (Abb. 5-32), und nach Gl. 5-6 wurden die Sorptionsparameter K_F und n_F (Tab. 5-6) bestimmt.

$$\log Cs = n_F \times \log Cw + \log K_F \qquad \text{Gl. 5-6}$$

Die ermittelten Sorptionskoeffizienten zwischen Wasser/Plattendolomit waren für die untersuchten Phenole sehr unterschiedlich. Phenol mit dem niedrigsten K_F von 1.17 sorbierte kaum am Feststoff, während 2,4,6-TMP mit 25.12 das höchste Sorptionsvermögen hatte.

Tab. 5-6: Abgeleitete Sorptionsparameter aus den batch-Versuchen von Licha (2002) und Wu et al. (2001) im Vergleich zur Löslichkeit in Wasser.

Verbindung	**log K_F**	**K_F (l/kg)**	**n_F**	**Löslichkeit (g/l)**
Phenol	0.07	1.17	0.81	82.8
o-Kresol	0.62	4.16	0.81	26.8
2,4-DMP	1.01	10.23	0.82	8.2
2,6-DMP	1.08	12.02	0.74	6.15
2,4,6-TMP	1.40	25.12	0.79	1.42
Phenol + Montmorillonit [(1)]	*0.59*	*3936*	*0.32*	*82.8*

[(1)] Wu et al. (2001)

Für alle Verbindungen war eine abnehmende Sorption mit steigenden Gleichgewichtskonzentrationen in der Lösung zu beobachten. Dies wird durch den positiven Anstieg der Geraden in Abb. 5-32 deutlich, der für alle Verbindungen < 1 war. Hinsichtlich der Sorptionskapazität des Plattendolomits bestehen für die untersuchten Verbindungen aufgrund ähnlicher n_F-Werte kaum Unterschiede.

Der Kd-Wert kann auch über den Anteil organischen Kohlenstoffs in der Aquifermatrix und den Verteilungskoeffizient zwischen Corg und Wasser (K_{OC}) nach Gl. 5-7 abgeschätzt werden. Dabei wird jedoch nur die Sorption an der organischen Substanz in der Aquifermatrix berücksichtigt. Dieser Zusammenhang wurde von Karickhoff et al. (1979) und Schwarzenbach & Westall (1981) in folgender Gleichung ausgedrückt:

$$K_d = K_{OC} \times f_{OC} \qquad \text{Gl. 5-7}$$

Koc Verteilungskoeffizient einer Verbindung zwischen organischem Kohlenstoff und Wasser (cm^3/g)

f_{OC} Gewichtsanteil des organischen Kohlenstoffs

Über die Korrelation des log K_{OC} und dem Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten log K_{OW} kann der K_{OC} durch nachfolgende Gleichungen berechnet werden:

Karickhoff et al. (1979)	$\log K_{OC} = -0.21 + \log K_{OW}$	Gl. 5-8
Schwarzenbach & Westall (1981)	$\log K_{OC} = 0.49 + 0.72 \log K_{OW}$	Gl. 5-9
Hasset et al. (1983)	$\log K_{OC} = 0.088 + 0.909 \log K_{OW}$	Gl. 5-10

Der Corg-Gehalt im unbelasteten Plattendolomit schwankte von 0.2 bis 2.0 %. Die K_D-Werte wurden deshalb für den maximalen Corg-Gehalt von 2 % berechnet (Tab. 5-7).

Tab. 5-7: Berechnete Kd-Werte unter Annahme eines Anteils an organischem Kohlenstoff von 2 %. k.A. = keine Angaben in der Literatur.

Verbindung	K_{OW}	Kd (Hasset et al. 1983)	Kd (Karickhoff et al. 1979)	Kd (Schwarzenbach & Westall 1981)
Phenol	30.20	0.5	0.4	0.7
o-Kresol	97.70	1.6	1.2	1.7
2,4-DMP	229.00	3.4	2.8	3.1
2,6-DMP	182.00	2.8	2.2	2.6
2,4,6-TMP	k.A.	--	--	--

Durch Ioppolo-Armanios et al. (1995) wurden Unterschiede in der Sorption von Isomeren der Alkylphenole festgestellt. Ortho-substituierte Phenole zeigten eine größere Affinität zu Huminstoffen als die meta- und para-substituierten Isomere.

Die festgestellten K_F-Werte sind für alle untersuchten Verbindungen als sehr gering einzuschätzen, wobei Phenol das geringste und 2,4,6-TMP das höchste Sorptionsvermögen hat.

5.8.2 Sorption an polaren Mineraloberflächen

Phenole sind schwache organische Säuren (pKa ~ 10) und liegen deshalb im Grundwasser bei pH 7 überwiegend in undissoziierter Form vor (Abb. 5-33). Erst bei pH > 10 gehen Phenole zunehmend in die dissoziierte Form des negativ geladenen Phenolat-Anions über (Abb. 5-33).

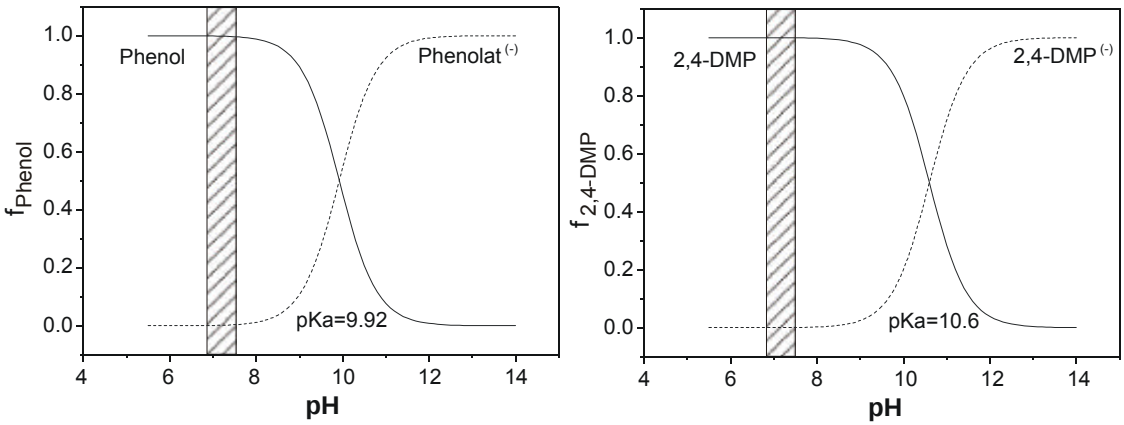


Abb. 5-33: Verteilung der Spezies nach Säure-Base-Reaktion von Phenol (linkes Diagramm) und 2,4-Dimethylphenol (rechtes Diagramm) in Abhängigkeit vom pH-Wert. Schraffierter Balken ist der gemessene pH-Bereich im Grundwasser.

An der Grenzfläche zwischen dem Mineralgitter und Wasser finden chemische Prozesse statt, welche die Adsorption von im Wasser gelösten Ionen beeinflussen. Eine Übersicht über die Untersuchungen zur Grenzflächenchemie von Carbonatmineralen geben Morse & Mackenzie (1990). Wassermoleküle und gelöste Spezies gehen chemische Bindungen mit exponierten gittergebundenen Ionen an den Mineraloberflächen ein. An einer frisch exponierten Mineraloberfläche bilden sich durch Adsorption und Dissoziation von Wassermolekülen primäre Hydrationsstellen aus (van Cappellen et al. 1993). Für oxidische/hydroxidische Minerale werden die primären Hydrationsstellen durch van Cappellen et al. (1993) als hydroxylierte Oberflächen-Kation-Zentren beschrieben ($>MeOH^0$), wobei '>' das

Mineralgitter und 'Me' das Mineral-Kation z.B. Calcium ist. Die Oberflächen-Hydroxylgruppe des $>MeOH^0$ kann in Abhängigkeit vom pH des Wassers deprotoniert ($>MeO^-$) oder protoniert ($>MeOH_2^+$) werden (van Cappellen et al. 1993). Folglich wird die Ladung der Mineraloberfläche vom pH der Oberflächenladung Null (pH zpc = zero point of charge) gesteuert. Bei pH_{Wasser} < pH zpc ist die Oberfläche positiv (Überschuss an $>MeOH_2^+$) und bei pH_{Wasser} > pH zpc ist die Oberfläche negativ (Überschuss an $>MeO^-$) geladen (Davis & Kent 1990). Gelöste Kationen oder Anionen können an der Grenzfläche durch Austausch gegen H^+ oder OH^- an der $>MeOH^0$ Stelle adsorbiert werden.

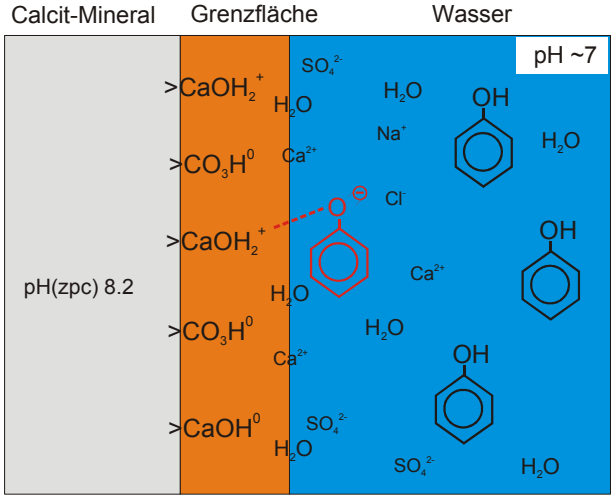


Abb. 5-34: Modell zur Sorption von Phenolat-Anionen an hydratisierten Gitter-Kationen des Calcits. Bei pH_{Wasser} < pH (zpc) ist die Mineraloberfläche positiv geladen.

Bei der Hydration einer frischen Calcitoberfläche entstehen folglich die primären $>CaOH^0$- und $>CO_3H^0$-Stellen. Bei einem pH < 8.2 in der umgebenden Lösung (Grundwasser, Porenwasser), wie er im Plattendolomit-Aquifer stets zu beobachten war (pH ~ 7), herrscht ein leichter Überschuss positiver Ladungen. Da jedoch bei diesem pH das Phenol zu 99.87 % in undissoziierter neutraler Form vorliegt, ist die Sorption des Phenolat-Anions an der Mineraloberfläche vernachlässigbar gering. Hinzu kommt, dass die wenigen Phenolat-Anionen in Konkurrenz zu den anderen Anionen im Grundwasser z.B. SO_4^{2-}, Cl^- stehen. Undissoziiertes Phenol ist aufgrund seiner Ladungsneutralität nicht in der Lage an Calcitoberflächen zu sorbieren.

5.8.3 Sorption an Tonmineralen

Die Sorption von Phenol an Tonmineralen wird nach Zhu et al. (2000) und Wu et al. (2001) durch folgende Faktoren gesteuert:

- pH der wässrigen Lösung
- Zeit zur Einstellung des Gleichgewichts
- basaler Gitterabstand
- Innere Oberfläche
- Mikroporenstruktur, Porengröße

Zur pH-Abhängigkeit werden von Wu et al. (2001) drei Sorptionsstadien beschrieben, die von der Säurekapazität (pka_{Phenol} = 9.96) bestimmt werden:

(1) pH 3 – 8, physikalische Adsorption: Phenol wird als neutrales Molekül von der Oberfläche adsorbiert. Sorptionskapazität ist relativ gering.
(2) pH 8 – 10, Sorption durch Kationenaustausch: Phenol ionisiert stärker und wird nicht nur physikalisch von der äußeren Oberfläche, sondern auch durch Kationenaustausch bzw. Reaktionen des Phenolat-Anions mit Zwischenschicht-Kationen sorbiert.
(3) pH > 10, Chemisorption: Phenol ist überwiegend ionisiert; Sorption durch physikalische Sorption und Kationenaustausch; Ausbildung von chemischen Bindungen zwischen Phenol und Tonmineral (Montmorillonit); Phenolat-Anion ($C_6H_5O^-$) reagiert mit Kationen in den Zwischenschichten; maximale Sorptionskapazität wird erreicht.

Die exponierten Oberflächen der hydrophilen Tonminerale werden zunächst durch eine Schicht Wasser zum Ladungsausgleich belegt, d.h. das semipolare Phenol muss zunächst Wassermoleküle verdrängen. Dies funktioniert jedoch nur sehr eingeschränkt (Boyd et al. 1988; Smith et al. 1990).

Der basale Gitterabstand des Montmorillonits reicht je nach Anzahl der Wassermolekülschichten von 10 – 21 Å (Deer et al. 1993). Die innere Oberfläche von natürlichem Montmorillonit ist mit 56 m^2/g im Vergleich zu Aktivkohle mit 1000 – 3000 m^2/g relativ gering (Wu et al. 2001; Shu et al. 1997).

Die Sorption als Oberflächenphänomen ist direkt von der inneren Oberfläche und der Porenstruktur der Tonminerale abhängig (Shu et al. 1997). Für die Sorption in Poren ist entscheidend, dass das Sorbat kleiner ist als der Porendurchmesser, denn Sorption ist nur in Poren möglich, in die das Sorbat eindringen kann. Der kritische Parameter ist der kleinste Querschnittsabstand, der für Phenol 4.3 Å beträgt (Shu et al. 1997). Durch die höhere innere Oberfläche sowie günstige Porengrößenverteilung haben Tonminerale im Allgemeinen eine höhere Sorptionskapazität als andere Minerale.

5.9 Schlussfolgerungen

An beiden ehemaligen Schwelereistandorten wurden hohe Konzentrationen an Phenol und Alkylphenolen sowohl im Grundwasser als auch im Gestein des Zechstein-Aquifers festgestellt. Ursache war die Tiefenversenkung von Schwelwässern. Ausgehend von den Schadstoffeintragsstellen erfolgte eine Ausbreitung der Phenole mit dem Grundwasserstrom, der an beiden Standorten nach NE gerichtet ist. Die hydraulischen Gradienten waren jedoch relativ gering. Trotz struktureller und lithologischer Unterschiede sind beide Standorte demselben Grundwasserleiter (GWL II) zuzuordnen. Dies bestätigten die ähnlichen Druckpotenziale an beiden Standorten sowie deren kontinuierlicher Anstieg im Beobachtungszeitraum.

Hauptschadstoffe des eingetragenen Schwelwassers waren Phenol und Kresole mit geringeren Anteilen an Ethylphenolen, Dimethylphenolen sowie Trimethylphenolen. Der Transport erfolgte ausgehend von den Schadstoffquellen (Schluckbrunnen) ausschließlich gelöst in neutraler undissoziierter Form. Die Lösung der Phenole im Grundwasser ist der erste Schritt in der Entwicklung eines Plumes. Sind wie im hier vorliegenden Fall die Löslichkeiten der Einzelverbindungen stark unterschiedlich, entwickelt sich kein einheitlicher Plume. Im Grundwasserfließpfad kommt es zu einer chromatographischen Auftrennung der Verbindungen als Folge unterschiedlicher Mobilität und Sorptionseigenschaften. Dies wurde bereits von King & Barker (1999) bzw. King et al. (1999) für die Entwicklung eines Kreosote-Plume festgestellt und konnte für die Ausbreitung der Phenole im Zechstein-Aquifer in ähnlicher Weise beobachtet werden. Der in das Grundwasser eingeleitete Schadstoffcocktail wird in eine Reihe von Einzelplumes aufgetrennt. Jeder dieser Einzelplumes repräsentiert eine Stoffgruppe mit identischen Löslichkeiten und Sorptionseigenschaften.
Lösung und chromatographische Auftrennung führen zu charakteristischen Verteilungen der phenolischen Stoffgruppen im Aquifergestein. Durch geophysikalische Bohrlochmessungen (Flowmeter, Sal-Temp, Fluidlogging, ABTV, GR, GG, NN, FEL) konnten charakteristische Verschiebungen in den Molaren Verhältnissen zwischen hydraulisch aktiven und hydraulisch nicht aktiven Bereichen innerhalb des Kluftaquifers erkannt werden. So war in den hydraulisch aktiven Zuflussbereichen meist eine Abnahme und in hydraulisch nicht aktiven Zonen eine Zunahme des Phenolanteils am Gesamtphenol zu beobachten.

In einem sehr dichten und mächtigen, hydraulisch nicht aktiven Gesteinsbereich des Profener Riffs (UFZ 101, 20 – 24 mNN) konnte eine Gesamtphenol-Zusammensetzung bestimmt werden, die vermutlich dem Schwelwasser entsprach und folgende molare Anteile aufwies:

Phenol (0.54) > Kresole (0.3) >

Ethylphenole (0.08) ~ Dimethylphenole (0.07) > Trimethylphenole (0.01)

Im advektiven Grundwasserstrom wurden Phenole mindestens 1160 m transportiert. Die Eintragsstellen der beiden ehemaligen Schwelereistandorte unterschieden sich weniger in den Konzentrationen an Gesamtphenol im Aquifergestein, wohl aber in den Molaren Verhältnissen. Während in Profen (UFZ 101) die Schadstoffquelle bereits an Phenol verarmt und durch Kresole dominiert war, hatte in Deuben/Trebnitz (UFZ 401, UFZ 501) Phenol die höchsten Anteile am Gesamtphenol. Im Grundwasser setzte sich das Gesamtphenol in Profen zu 50 % und in Deuben zu 75 % aus Phenol zusammen. Generell lagen die Anteile des leichtlöslichen Phenols in der Wasserphase deutlich über den in der Feststoffphase, wobei die geringer löslichen C1-C3-Alkylphenole höhere Anteile am Gesamtphenol in der Feststoffphase hatten. Das Profener Riff kann als sog. 'depleted source' der Plattendolomit in Deuben/Trebnitz hingegen als 'undepleted immature source' bezeichnet werden. Ursachen dafür könnte die längere Betriebszeit und die weitaus größeren Mengen an versenkten Schwelwässern am Standort Deuben/Trebnitz sein.
In Richtung des Grundwasserabstroms verdreifachten sich die maximalen Gesamtphenol-Konzentrationen im Riffgestein von 10200 µg/kg (UFZ 101) auf 30500 µg/kg (UFZ 301). Das Gesamtphenol setzte sich zu mehr als 50 % aus Phenol zusammen. Gleichzeitig war die Gesamtphenol-Konzentration im Grundwasser gegenüber dem Schadstoffeintrag 33fach erhöht. Im Zusammenhang mit der Übereinstimmung der Molaren Verhältnisse zwischen Aquifergestein und Grundwasser in der UFZ 301 kann für den Standort Profen eine kontinuierliche Plumeentwicklung entlang des Fließpfades ohne nennenswerten Abbau angenommen werden.

Im Gegensatz dazu war das Aquifergestein im Abstrom des Standortes Deuben/Trebnitz geringer belastet. Die maximalen Gesamtphenol-Konzentrationen von 15200 µg/kg (UFZ 401) verringerten sich im Grundwasserabstrom auf 7600 µg/kg (UFZ 601). Hier bestimmten Kresole und DMP das Gesamtphenol. Phenol war lediglich im Grauen Salzton in hohen Konzentrationen nachweisbar. Auch im Grundwasser der UFZ 601 waren Kresole die dominierende Stoffgruppe. Der molare Anteil der Kresole in der Wasserphase lag deutlich über dem der Feststoffphase. Für Phenol und die C2-C3-Alkylphenole waren die molaren Anteile in der Wasserphase geringer als im Feststoff. Daraus wurde geschlussfolgert, dass es im Abstrom von Deuben/Trebnitz zu einem Abbau des Phenols gekommen sein könnte.

In Multischadstoff-Plumes wurde durch King & Barker (1999) bzw. King et al. (1999) beschrieben, dass das unterschiedliche Abbauverhalten der Einzelverbindungen unter den vorherrschenden (anaeroben) Redoxverhältnissen die Zusammensetzung der Plumes im Fließpfad verändern kann. Phenol, als die am leichtesten abbaubare Verbindung, müsste im Grundwasser ohne Berücksichtigung von Sorption die kürzeste Transportweite erreichen (Godsy et al. 1992b). Im Fließpfad Profen konnte dies nicht beobachtet werden. Phenol-Konzentrationen im Abstrom (UFZ 301) sind 50fach höher als im Anstrom (UFZ 101). Auch die Konzentrationen der Alkylphenole waren deutlich erhöht. Insbesondere Konzentrationsveränderungen der Kresol-Isomere, die zwar nahezu identische physikochemische Eigenschaften aber unterschiedliches Abbauverhalten haben (O'Conner & Young 1996; Ramanand & Suflita 1991), können für die Bewertung des natürlichen Abbaus genutzt werden. Das Verhältnis des leicht abbaubaren p-Kresols zum schwer abbaubaren o-Kresol war im Fließpfad nahezu konstant. Auch das Phenol/p-Kresol-Verhältnis, das sich

nach der Abbausequenz von O'Conner & Young (1996) ebenfalls verringern müsste, stieg sogar deutlich an. Daher ist im untersuchten Grundwasserfließpfad am Standort Profen kein Abbau schwelwassertypischer Phenole festzustellen.

Im Abstrom von Deuben war zunächst ein Konzentrationsanstieg des Gesamtphenols im Grundwasser um den Faktor 2.6 feststellbar. Sowohl im Aquifergestein als auch im Grundwasser des Abstroms (UFZ 601) dominierten Kresole. Phenol war im Gestein und im Grundwasser deutlich abgereichert. Das Phenol/p-Kresol-Verhältnis im Grundwasser verringerte sich im Fließpfad von 6 auf 0.2 . Das p-Kresol/o-Kresol-Verhältnis im Abstrom ist mit den Werten des Schluckbrunnens Trebnitz 3/42 identisch. Für den untersuchten Grundwasserfließpfad Deuben/Trebnitz sind folglich Indikationen vorhanden, die einen Abbau des Phenols, nicht aber der Alkylphenole im Grundwasserabstrom andeuten.

Aus den Ergebnissen der Messung Abbau-sensitiver Parameter O_2, Fe, Mn, SO_4, H_2S, NO_3, NH_4, DIC konnte abgeleitet werden, dass im kontaminierten Aquifer anaerobe Abbaureaktionen organischer (Schad)-stoffe stattfinden. Da jedoch Braunkohlen-Schwelwässer neben Phenolen auch große Mengen an C1-C7-Fettsäuren sowie Polyphenole, Dihydroxybenzene, N-Heterozyklen enthalten (von Alberti 1983; Mangold et al. 1973; Leibnitz et al. 1957) sind Abbaureaktionen insbesondere der Fettsäuren sehr wahrscheinlich. So wurde durch Kuschk (1991) in Fermentationsexperimenten mit Schwelwässern nachgewiesen, dass Fettsäuren bereits nach 90 Tagen zu 90 % abgebaut waren und keine nachteilige Wirkung auf den kinetisch langsameren Phenolabbau hatten.

Die Sorption von Phenolen ist abhängig von den physikochemischen Eigenschaften der jeweiligen Einzelverbindung sowie von der Zusammensetzung und Struktur des Sorbenz. Für die von Licha (2002) durchgeführten batch-Versuche an unbelastetem Kalkstein/Dolomit des Zechsteins wurden als Sorptionsisothermen nach Freundlich ausgewertet und zeigten eine geringe Sorptionskapazität für Phenol (K_F = 1.2) und o-Kresol (K_F = 4.1) jedoch deutlich höhere für TMP (K_F = 25.1). Für die Hauptschadstoffe Phenol und Kresole ergibt sich daraus kein nennenswerter Rückhalt am Kalkstein/Dolomit. Grund dafür sind geringe Gehalte von Corg im Gestein und die hohe Löslichkeit des Phenols und der Kresole. Hinzu kommt, dass bei pH 7 Kalksteinoberflächen zwar positiv geladen sind, aber Phenol nahezu vollständig in neutraler Form vorliegt (van Capellen et al. 1993).
Die im Vergleich zum Plattendolomit/Riffdolomit deutlich höheren Gesamtphenol-Konzentrationen in den tonigen Gesteinen z.B. im liegenden Grauen Salzton waren vermutlich auf Matrixdiffusion und Sorption an Tonmineraloberflächen zurückzuführen. Diffusionsexperimente von Broholm et al. (1999b) an tonigem Grundmoränenmaterial zeigten, dass die Sorption von Phenol und 3,5-DMP an der Grenzfläche Lösung/Feststoff zunächst vernachlässigbar klein ist und dann mit abnehmenden Lösungskonzentrationen zunimmt. Als zusätzliche Sorptionsmechanismen können an Tonmineralen Kationenaustauschreaktionen stattfinden (Broholm et al. 1999b; Wu et al. 2001). Außerdem können Phenolmoleküle in eine geeignete Porenstruktur eindringen (Shu et al. 1997). Die Matrixdiffusion und Sorption der Phenole in tonigen Sedimenten ging nicht nur mit einer Konzentrationserhöhung im Feststoff, sondern gleichzeitig mit einer Verschiebung der Molaren Verhältnisse zu Gunsten der leicht löslichen Verbindungen (Phenol, Kresole) einher.

Die festgestellten hohen Konzentrationen an schwelwassertypischen Phenolen im Grundwasser und den Aquifersedimenten des Zechstein-Aquifers (GWL II) stellen in Verbindung mit dem beobachteten Anstieg der Druckpotenziale ein langfristiges Kontaminationsrisiko für das Stockwerk der tertiären Grundwasserleiter dar. Im nachfolgenden Kapitel wurde deshalb versucht, Phenole im Grundwasser des liegenden

tertiären Aquifers (GWL 6) und den möglichen Grundwasseraufstieg aus dem Zechstein-Aquifer regional nachzuweisen.

Die Verbreitung der Schadstoffplumes konnte bisher nur für die untersuchten Grundwasserfließpfade (Profen UFZ 101 → UFZ 301; Deuben UFZ 401 → UFZ 501 → UFZ 601) eingegrenzt werden. Durch die Wirkung von Dispersion und Advektion ist jedoch eine darüber hinausgehende Verbreitung in Richtung des Grundwasserstroms sowie quer dazu sehr wahrscheinlich.

6 Grundwasserabsenkung vs. Sulfat und Phenole im Grundwasser

6.1 Bisherige Kenntnisse

Das Grundwasser der tieferen tertiären Aquifere des Weißelsterbeckens (GWL 5, GWL 6) wird schon seit über einhundert Jahren intensiv für die Trinkwassergewinnung genutzt (Malyska 2000). Dies wurde notwendig, da bereits um 1860 die ersten Hausbrunnen als Folge des Braunkohlenbergbaus im Tiefbau trockenfielen (Genz 1930).
Mit der Erschließung der Tagebaue, z.B. Tgb. Waltersdorf 1908 bis 1935, Tgb. Profen 1941 bis 2034, Tgb. Schleenhain 1949 bis 2040 (Mibrag 2001), wurden gleichzeitig eine Reihe an Wasserwerken in Betrieb genommen, z.B. WW Maßnitz 1896, WW Draschwitz 1956 (Barthel 1962). Im Vorfeld der Tagebaue wurde und wird Grundwasser durch Wasserwerke zur Trinkwassergewinnung gefördert und gleichzeitig durch Sümpfungsbrunnen der Tagebaue z.B. Tgb. Profen gehoben.

6.1.1 Phenole im Grundwasser tertiärer Grundwasserleiter

Durch Picard (1944) wurde bereits vermutet, dass die Versenkung von Schwelwässern in den Zechstein-Plattendolomit/Riffdolomit (GWL II) möglicherweise auch für die wasserwirtschaftlich genutzten tertiären Aquifere ein Kontaminationsrisiko darstellt. Aufgrund der weit über dem Versenkungshorizont liegenden Brunnensohlen wurde jedoch das Risiko damals als gering eingeschätzt. Spätere Untersuchungen von Weber (1955) erkannten das Langzeitrisiko und forderten einen Stop der Versenkung. In den 70er Jahren konnten in einigen unveröffentlichten Untersuchungen, z.B. Huth (1972), Phenole im GWL 6 in der Region Zeitz nachgewiesen werden. In jüngeren Arbeiten von Malyska (2000) wurden keine Beeinträchtigungen der Trinkwasserqualität durch Phenole beobachtet. Aufgrund der in Kap. 5 festgestellten starken Kontaminationen durch schwelwassertypische Phenole sowie ansteigender Druckpotenziale im GWL II besteht für den GWL 6 ein latentes Kontaminationsrisiko durch hydraulischen Grundwasseraufstieg. Vor diesem Hintergrund ist es notwendig, den Grundwasseraufstieg aus dem GWL II zu untersuchen und ggf. Phenole nachzuweisen.

6.1.2 Sulfat im Grundwasser tertiärer Grundwasserleiter

In den letzten zwei Jahrzehnten wurden im Grundwasser der tertiären Aquifere GWL 5 und GWL 6 stark steigende Sulfatgehalte beobachtet. Ursache dafür könnten der hydraulische Aufstieg mineralisierter Grundwässer aus dem Zechstein-Aquifer (GWL II) oder die Oxidation sedimentärer Sulfide in den teilentwässerten tertiären Aquiferen sein.
In Fassungsbereichen inzwischen stillgelegter Wasserwerke wie Hagenest, Wintersdorf, Bruderzeche, Kammerforst wurden massive Druckentlastungen im Grundwasserleitersystem GWL 5/6 beschrieben (Kittler & Gräber 1995; Weber 1984, 1991). Dadurch konnte es vermutlich zu einem Aufstieg gespannter Grundwässer aus dem Zechstein-Aquifer (GWL II) kommen. Auch in Flankenbereichen von Kessel- und Rinnenstrukturen wurde ein Aufstieg von Zechsteinwässern (z.B. Löschützer Rinne, Pflichtendorfer Rinne) bzw. an Kreuzungspunkten von Störungen im Prätertiär von Wucher et al. (1994) vermutet.
Untersuchungen im Auftrag von Wasserversorgungsunternehmen (Gräber 1999; Kittler & Gräber 1995; Weber 1991) werteten langjährige hydrochemische und hydraulische Daten der Wasserfassungen aus und stellten die Oxidation sedimentärer Pyrite im teilentwässerten Aquifer als einzige Ursache heraus.
Im gehobenen Grundwasser der Wasserwerke kam es in der Vergangenheit zu einem deutlichen Anstieg der Nichtcarbonathärte, welcher mit dem Anstieg der Gesamthärte

korrelierte (Abb. 6-1). Dies war auf eine Konzentrationserhöhung des Sulfats als Hauptanteil der Nichtcarbonathärte zurückzuführen. Im rechten Teil der Abb. 6-1 ist erkennbar, dass der Anstieg der Sulfatkonzentration mit der Erhöhung der jährlichen Fördermengen, z.B. WW Hagenest, teilweise gut korreliert. Auch in den Chloridkonzentrationen war ein deutlicher Anstieg feststellbar.

Sollten sich in der untersuchten Region Zeitz eindeutige Hinweise auf den Aufstieg kontaminierter bzw. (noch) unkontaminierter Grundwässer aus dem Zechstein-Aquifer ergeben, würde dies das Kontaminationsrisiko durch den Aufstieg kontaminierter Grundwässer an den Standorten Profen und Deuben/Trebnitz bestätigen.

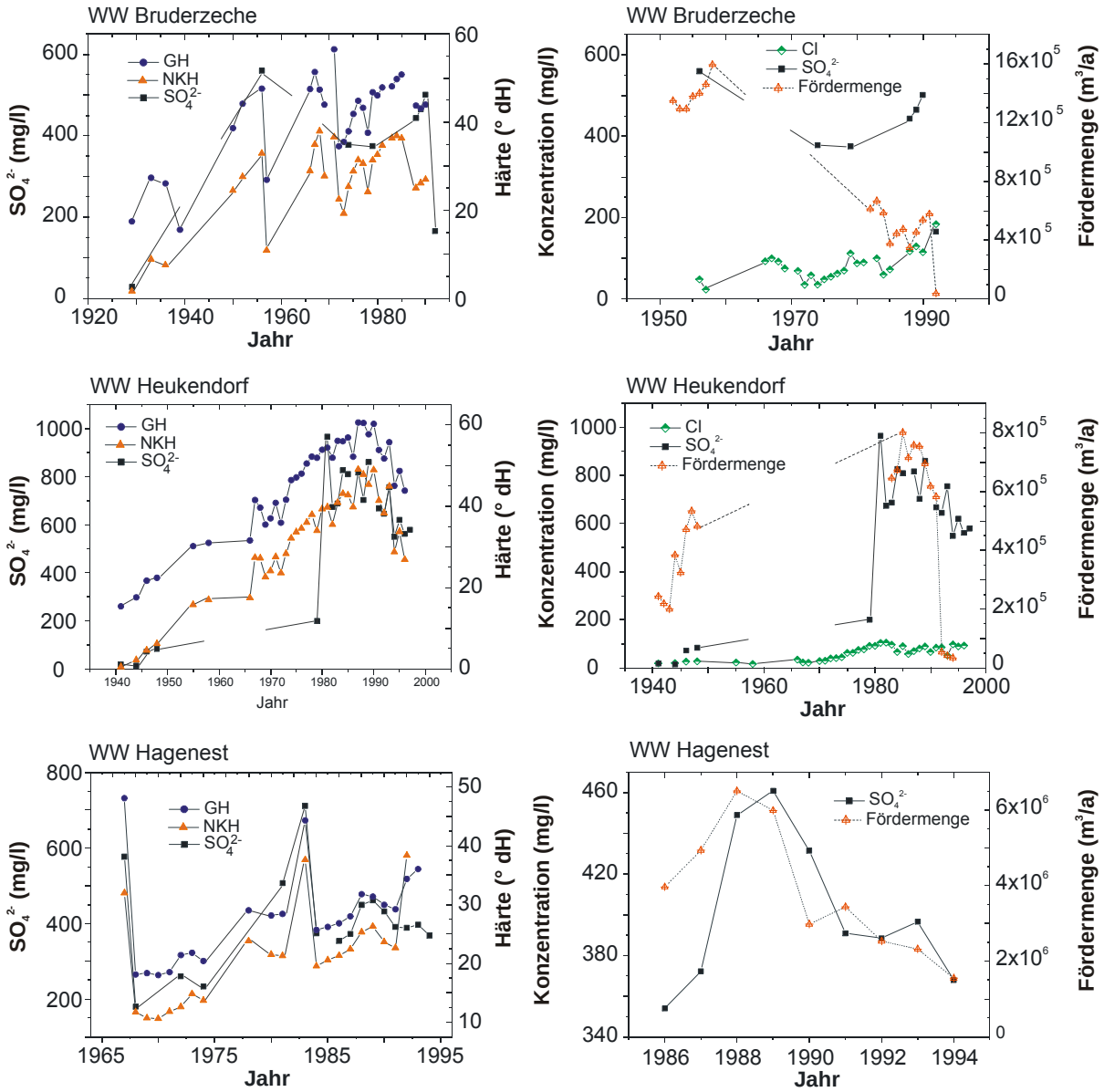


Abb. 6-1: Zeitliche Veränderung in der Zusammensetzung des gehobenen Grundwassers aus dem GWL 5–6 der Wasserwerke Hagenest, Heukendorf und Bruderzeche. Linker Teil, Veränderung der Gesamthärte (GH), Nichtcarbonathärte (NKH) und Sulfat. Rechter Teil, Veränderungen im Sulfat- und Chloridgehalt in Abhängigkeit von der durchschnittlichen Fördermenge pro Jahr. Daten aus Gräber (1999).

6.1.3 Möglichkeiten von Isotopenuntersuchungen am Sulfat

Bei allen in der Vergangenheit durchgeführten Untersuchungen zur Herkunftsbestimmung des Sulfats im Grundwasser des Weißelsterbeckens wurde auf die Anwendung von Isotopenmethoden verzichtet. Gerade für Sulfat im Grundwasser sind Isotopenuntersuchungen sehr gut geeignet, um zwischen verschiedenen Quellen und geochemischen Prozessen im Aquifer zu unterscheiden.
Der Vergleich von $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Isotopengehalten im Grundwasser gelöster Sulfate mit lithogenen, biogenen und atmosphärischen Quellen zur Bestimmung der Herkunft und zur Identifikation biogeochemischer Reaktionen wurde in der Vergangenheit von mehreren Autoren u.a. Knöller (2000), Mayer (1993), Balderer et al. (1991) erfolgreich angewendet. Neben der Bestimmung des $\delta^{34}S/\delta^{18}O$ am gelösten Sulfat im Grundwasser sollen in dieser Arbeit die Schwefelspezies der tertiären Aquifersedimente des Zechstein-Anhydrits untersucht werden. Damit kann die isotopische Zusammensetzung der Grundwasser-relevanten Schwefelquellen des Systems genau bestimmt werden. Auf dieser Grundlage werden die Isotopengehalte der Schwefelquellen mit den Isotopengehalten des Sulfats im Grundwasser verglichen, um die Sulfat-Bildungsreaktionen im Aquifer zu beschreiben.

Massive Eingriffe in den Grundwasserhaushalt durch Grundwasserabsenkungen rufen nicht nur hydraulische, sondern vor allem Veränderungen im geochemischen Milieu hervor. Insbesondere durch den diffusiven Eintrag von Sauerstoff in den Porenraum der entwässerten Bereiche eines Aquifers bzw. durch Lösung von Sauerstoff im Grundwasser kommt es zu Veränderungen der Redoxverhältnisse. Dadurch werden im anaeroben Milieu gebildete bzw. stabile Mineralphasen wie Sulfide reaktiv. Mit dem Wiederanstieg des Grundwassers kommt es zu einer Elution der löslichen Reaktionsprodukte SO_4^{2-} und Fe^{2+}. Ein verstärkter Eintrag von Sulfat aus der Pyritverwitterung in das Grundwasser führt zu ähnlichen $\delta^{34}S$-Isotopengehalten wie die Sulfidquelle. Die $\delta^{18}O$-Werte des Sulfats liegen in einem eng definierten für die Reaktion typischen Bereich. Anhand der Betrachtung der Isotopenverhältnisse des Schwefels und des Sauerstoffs im gelösten Sulfat kann der Einfluss der Pyritverwitterung auf die Zusammensetzung des Grundwassers festgestellt werden.

Quelle des Sulfats im GWL II ist die Lösung von Anhydrit in der randfaziellen Schichtenfolge des Zechsteins. Das Sulfat aufsteigender Wässer aus dem Zechstein hat eine charakteristische isotopische Zusammensetzung, die sich deutlich von den Sulfaten aus der Pyritverwitterung unterscheidet. Kann nachgewiesen werden, dass in einigen Bereichen des GWL 6 die isotopische Zusammensetzung des Grundwasser-Sulfats der des Zechsteins entspricht, so wäre dies auf den Grundwasseraufstieg aus dem GWL II zurückzuführen.

Folgende Prozesse, die zum Anstieg der Sulfatkonzentrationen geführt haben könnten, werden deshalb betrachtet:

(i) Aufstieg von Grundwasser aus dem GWL II

(ii) Pyritoxidation im GWL 6

(iii) Pyritoxidation und Hangendinfiltrationen aus dem GWL 5

6.2 Grundwasserrelevante Sulfatquellen

Für die Bestimmung der Herkunft des gelösten Sulfats im Grundwasser ist es notwendig, die globalen natürlichen Umsetzungen des Schwefels und die Interaktionen zwischen den einzelnen Sphären (Litho-, Hydro-, Bio- und Atmosphäre) zu verstehen (Abb. 6-2). Durch eine Vielzahl an mikrobiell katalysierten geochemischen Reaktionen in der ungesättigten und gesättigten Zone kommt es zu charakteristischen Transformationsprozessen der einzelnen Schwefelspezies. Menschliche Einflüsse auf den globalen Schwefelkreislauf führen ebenfalls zu Veränderungen im Chemismus des Grundwassers.
Seit dem Beginn der Industrialisierung erfolgt ein signifikanter Eintrag des Schwefels durch anthropogene Prozesse (z.B. Verbrennung fossiler Energieträger, Erzaufbereitung).
Für das hier betrachtete geochemische System Aquifer/Grundwasser sind folgende potenzielle Schwefelquellen zu betrachten:

(i) Atmosphäre (ii) Boden und ungesättigte Zone (iii) Gestein.

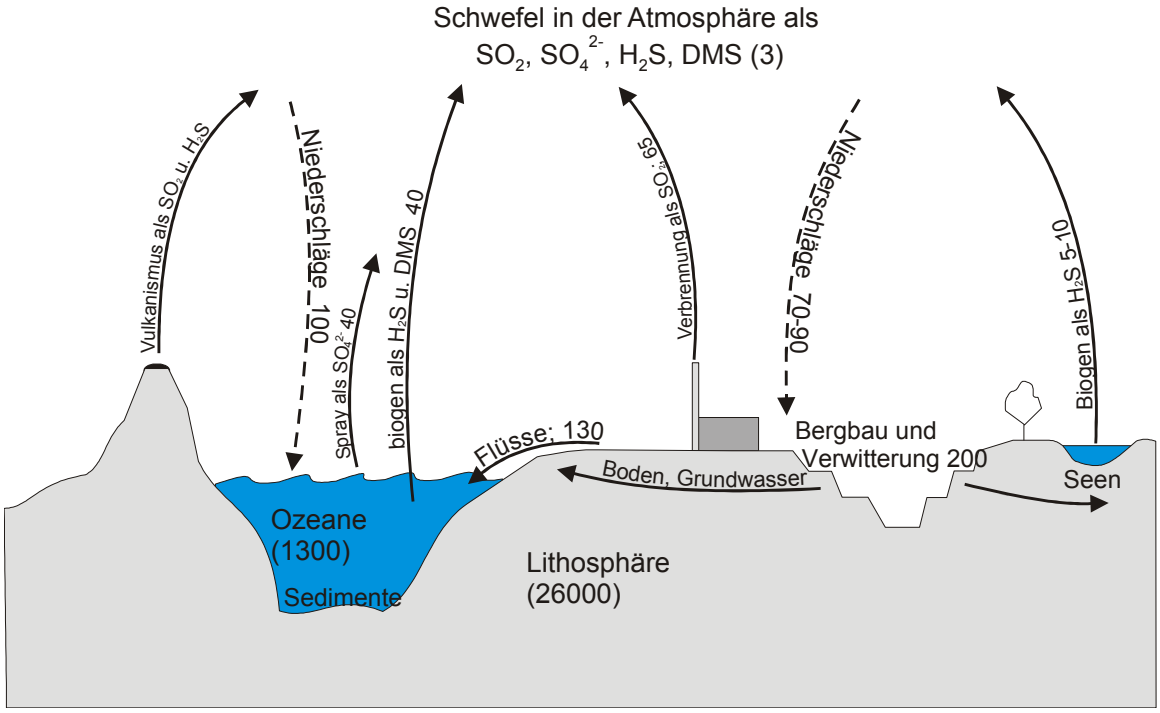


Abb. 6-2: Der globale Schwefelkreislauf. Pfeile: Stoff-Flux in 106 t/a. Klammern: Pools in 106 t. DMS = Dimethylsulfid. Sulfatreduktion und Schwefeloxidation sind eng mit dem Umsatz von Eisenmineralien z.B. Pyrit verbunden (verändert nach Fritsche 1998).

6.2.1 Sulfat atmosphärischer Niederschläge

Der in der Atmosphäre vorkommende Schwefel, teils aus natürlichen (Ozeanspray, biogene Emissionen, vulkanische Exhalationen), teils aus anthropogenen Quellen (Verbrennung fossiler Energieträger, Verhüttung von Sulfiderzen, Gipsproduktion) weist in seiner Isotopenzusammensetzung große Variationen auf (Tab. 6-1).

Atmosphärischer Schwefel tritt überwiegend als SO_2-Gas, als Dimethylsulfid (H_3C-S-CH_3), als Aerosol oder auch partikelgebunden auf, wobei SO_2 die größte Bedeutung besitzt (Fritsche 1998).

Tab. 6-1: Variationen der δ^{34}S-Isotopengehalte verschiedener Emissionsquellen im Vergleich zum Niederschlag.

Quellen	**d^{34}S (‰) CDT**	**d^{18}O (‰) SMOW**	**Autor**
fossile Brennstoffe	-3 ... +10	-	Clark & Fritz (1997)
Erdöl	-5 ... +10	-	Nielsen et al. (1991)
Kraftwerksemissionen, Erdöl	+5 ± 3	-	Newman & Forrest (1991)
sulfidische Erze	-30 ... +5	-	Krouse (1980)
Kraftwerksemissionen, Braunkohle	-1 ... +3	-	Nielsen et al. (1991)
Ozeanwasser/-spray	ca. +20	-	Nielsen (1978)
marine Aerosole	-10 … -16	-	Nielsen (1978)
biogene Emissionen	-22 … +12	-	Nielsen (1978)
Niederschläge			
Bad Lauchstädt	+1.1 ... +4.9	6.5 ... 13.8	Knief (1998)

In der Atmosphäre wird SO_2 zu SO_4^{2-} oxidiert, mit dem Niederschlag ausgewaschen und tritt somit in den Wasserkreislauf ein. Bei der Oxidation des SO_2 zu SO_4^{2-} werden bis zu drei der vier Sauerstoffatome des gebildeten SO_4^{2-} durch den δ^{18}O-Gehalt des atmosphärischen Wasserdampfes bestimmt (Holt et al. 1981, 1982). Daraus resultierende Variationen in den δ^{18}O-Werten des gelösten Sulfats können jahreszeitlichen Trends zugeordnet werden, wobei das $\delta^{18}O_{SO4}$ mit dem $\delta^{18}O_{H2O}$ korreliert.
In den Jahren vor 1990 kam es im Gebiet der neuen Länder, vor allem in den industriellen Regionen Sachsens, Sachsen-Anhalts und Thüringens, zu extremen SO_2-Belastungen. Im Jahresmittel wurden hier zum Teil großflächig Werte über 150 µg/m^3 festgestellt. Nach 1990 setzte ein deutlicher Rückgang ein, der sich von Jahr zu Jahr kontinuierlich fortsetzte. Hinsichtlich des Jahresmittels werden in Sachsen, Sachsen-Anhalt und Thüringen SO_2-Werte zwischen 25 und 50 µg/m^3, stellenweise auch über 50 µg/m^3 gemessen (Umweltbundesamt 2000). Jahreszeitliche Schwankungen in der Sulfat-Konzentration der Niederschläge reichen von 1.7 – 36 mg/l (Station Bad Lauchstädt, Knief 1998) bzw. 1.0 – 12.5 mg/l (Station Leipzig, mündl. Mitt. Strauch 2001).

6.2.2 Sulfat im Boden und der ungesättigten Zone

Schwefel liegt in Böden (ungesättigte Zone) in organischer und anorganischer Bindungsform vor, entstammt primär der Verwitterung des Ausgangsgesteins und sekundär atmosphärischen Einträgen und landwirtschaftlicher Düngung. Die Mobilität des Schwefels wird durch physikalische, chemische und mikrobielle Prozesse kontrolliert (Trudinger 1986). Physikalisch-chemische Prozesse sind vor allem Adsorption/Desorption, Lösung/Fällung sowie Mineralneubildung/Verwitterung (Singh 1984a,b). Durch mikrobielle Prozesse kann anorganischer Schwefel in eine organische Bindungsform (C-S) überführt werden (Immobilisierung). Sowohl Mikroorganismen selbst als auch die Vegetation nehmen dabei Sulfat auf. Im Gegenzug kann C-S durch Oxidation mineralisiert werden.
Sulfat gelangt über den Sickerwasserstrom aus der ungesättigten in die gesättigte Zone. Durch Mischungs- und/oder mikrobielle Transformationsprozesse, wie z.B. assimilatorische Sulfatreduktion oder Mineralisation von organischem Schwefel, kommt es während des

Schwefeltransportes von der ungesättigten in die gesättigte Zone zu Veränderungen des Isotopengehalts, welcher im Vergleich zum Ausgangssulfat um mehrere Promille abgereichert sein kann (Mayer 1993; Holt & Kumar 1986; Caron et al. 1986; van Stempvoort et al. 1987). Somit vermischt sich auf dem Transfer atmogenes mit pedogenem Sulfat. Als Folge davon können Differenzen in den δ^{34}S-Isotopengehalten des Grundwassers im Vergleich zum Niederschlag auftreten.
Sulfat-Einträge durch intensive landwirtschaftliche Nutzung insbesondere Düngung werden von Mallén (2000) beschrieben. Durch ungleichmäßige Ausbringung der Düngemittel kann die Aufnahmekapazität der Böden in Bezug auf Schwefel überschritten werden, was einen direkten Austrag in das Grundwasser begünstigt. Charakteristische Isotopengehalte einiger sulfathaltiger Mineraldünger und von organischem Dung sind in Tab. 6-2 zusammengefasst.

Tab. 6-2: δ^{34}S/δ^{18}O-Gehalte sulfathaltiger Düngemittel der ehemaligen DDR (nach Mallén 2000[(1)]; Knief 1998[(2)]). Bestimmung des δ^{18}O am Sulfat im Boden unter entsprechender Düngung (Knief 1998).

Düngerart	**Herstellungsverfahren**	**d^{34}S (‰) CDT**	**d^{18}O (‰) SMOW**
Stickstoffdünger[(1)]	Gipsverfahren	+10,9 ... +11,3	n.b.
Stickstoffdünger[(1)]	Sättigerverfahren	-0,8 ... +2,8	n.b.
Phosphatdünger[(1)]	Superphosphat	+8,3	n.b.
Kaliumdünger[(1)]	Kalirohsalz, K-angereichert	+9 ... +10	n.b.
NPK-Dünger[(2)]	k.A.	+6.3	+8.4
Gülle + Stallmist[(2)]	k.A.	~ +1.0	+5.0

6.2.3 Schwefel im Zechstein

Grundwasserverfügbarer Schwefel liegt in den Gesteinen des germanischen Zechsteins als Teil der evaporitischen Abfolgen vor. Der randfazielle Zechstein enthält mächtige Schichtglieder aus löslichem Anhydrit. Das Sulfat ist durch Ausfällung aus eingedampftem Meerwasser entstanden und weist über die Erdgeschichte typische Isotopengehalte auf, die z.B. von Claypool et al. (1980) und Strauss (1997) zusammengefasst wurden. Im Kontakt mit Grundwasser löst sich der Anhydrit (Subrosion) und es entstehen Wässer mit Sulfatkonzentrationen bis zur Gipssättigung. Die Isotopengehalte des untersuchten Zechstein-Anhydrits werden in Kap. 6.4.1 dargestellt.
In den Kernproben des Plattendolomits bzw. Riffdolomits der Erkundungsbohrungen UFZ 101 – UFZ 601 wurden Pyritmineralisationen auf Klüften und in Porenräumen festgestellt, die jedoch als sekundäre Bildungen angesehen werden. Da diese Pyrite in der grundwassergesättigten Zone lagen, ist nicht von einer Oxidation und Lösung im Grundwasser auszugehen. Deshalb wurde auf eine Bestimmung des Isotopengehalts verzichtet.

6.2.4 Schwefel in den Sedimenten der tertiären Aquifere

Schwefel lag in den tertiären Aquifersedimenten in zwei unterschiedlichen Bindungsformen vor: als disulfidisch gebundener Schwefel (sedimentärer Pyrit/Markasit FeS_2) und als wasserlöslicher Sulfat-Schwefel.
Andere Bindungsformen wie säureflüchtige Eisenmonosulfide FeS (AVS) konnten nicht nachgewiesen werden. Durch eingelagerte Braunkohlenstücke sind zusätzlich geringe Anteile an partikulärem organischen Schwefel vorhanden. Organisch gebundener Schwefel ist in der gesättigten Zone jedoch nur schwer mineralisierbar und daher für das Grundwasser nicht relevant. Auf quantitative sowie detaillierte mineralogische Untersuchungen wurde im Rahmen dieser Arbeit verzichtet.

Aus den schwer löslichen Disulfiden kann durch Oxidation lösliches Sulfat entstehen und ins Grundwasser gelangen. Beispiel hierfür ist die Entstehung von sauren Grubenwässern in den Kippen der Braunkohlentagebaue (u.a. Dohrmann 2000; Wisotzky 1994), die Sulfatkonzentrationen von mehreren g/l aufweisen. Auf die gemessenen Isotopengehalte wird ausführlich in Kap. 6.4.2 eingegangen.

6.3 Geochemische Prozesse im Aquifer

6.3.1 Bildung sedimentärer Sulfide

Bei der Entstehung sedimentärer Sulfide spielen biogeochemische Reaktionen eine wesentliche Rolle. Drei Hauptreaktionen können dabei unterschieden werden:

1. Metabolisierung der organischen Substanz
2. Reduktion des Sulfats
3. Ausfällung von Eisenmonosulfiden FeS, progressive Sulfidisierung zu FeS_2

Mikrobiell gesteuerte Sulfatreduktion

Sulfatreduktion ist eine mikrobiell gesteuerte Redoxreaktion, bei der das Sulfation (SO_4^{2-}) durch Aufnahme von acht Elektronen aus der Oxidation der organischen Substanz zum Sulfid-Ion (S^{-2}) reduziert wird (Gl. 6-1). Das entstehende Sulfid liegt bei saueren pH-Werten als H_2S, im neutralen Bereich als HS^- und im alkalischen pH-Bereich als S^{2-} vor. Die dissimilatorische Sulfatreduktion ist ein strikt anaerober Prozess, da sulfatreduzierende Bakterien nur in sauerstofffreier Umgebung existieren können.

$$2CH_2O + SO_4^{2-} + 2H^+ \rightarrow H_2S + 2CO_2 + 2H_2O \qquad \text{Gl. 6-1}$$

CH_2O ist eine vereinfachte Summenformel für organische Kohlenstoffverbindungen (Kohlenwasserstoffe, Kohlenhydrate, Aminosäuren, Fettsäuren), die im Redoxsystem als Elektronendonatoren wirken. Durch anaeroben Abbau werden komplexe organische Substanzen (z.B. DOC) in Bruchstücke zerlegt. Dabei werden Energie gewonnen und Bausteine für Synthesen bereitgestellt. Als Kohlenstoff- und Energiequelle dienen u.a. Glucose, Lactat, Malat, Benzoat, Ethanol. Nach den genutzten Substraten und den Endprodukten kann zwischen vollständigen (*Desulfotomaculum acetoxidans*, *Desulfobacter postgatei*, *Desulfonema limicola*) und unvollständigen Oxidierern (*Desulfovibrio desulfuricans, Desulfotomaculum nigrificans, Desulfobulbus propionicus)* unterschieden werden (Fritsche 1990). Endprodukte des Energiestoffwechsels sind ATP, CO_2 und Wasser.
Ein Modell der dissimilatorischen Sulfatreduktion von Harrison & Thode (1958), Rees (1973), Widdel & Hansen (1992) verdeutlicht die vier grundlegenden Teilreaktionen:

1. Sulfataufnahme durch Bakterien
2. Reaktion des Sulfats mit ATP zu APS
3. Reduktion des APS zu Sulfit
4. Reduktion des Sulfits zu H_2S über Zwischenprodukte $S_3O_6^{2-}$, $S_2O_3^{2-}$

Die Reduktion des Sulfats erfolgt in mehreren Stufen (Abb. 6-3). Zunächst ist eine Sulfat-Aktivierung notwendig, die über die Bildung von APS mit Hilfe von ATP erreicht wird. Das erste Reduktionsprodukt ist Sulfit, das intrazellulär weiter zu H_2S reduziert und von der Zelle ausgeschieden wird. Bei einigen Bakterien erfolgt die weitere Reduktion des Sulfits über Zwischenstufen, bei denen Trithionat ($S_3O_6^{2-}$) und Dithionat ($S_2O_3^{2-}$) auftreten.

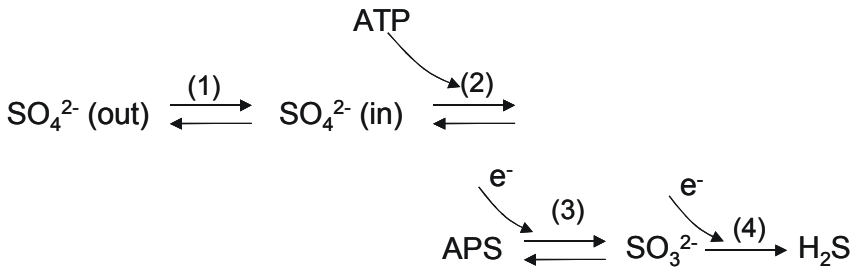


Abb. 6-3: Vereinfachter Reaktionspfad der dissimilatorischen Sulfatreduktion mit Kennzeichnung der Teilreaktionen (Widdel & Hansen 1992). Adenosintriphosphat (ATP), Adenosin-5-Phosphosulfat (APS). out = außerhalb der Zelle, in = innerhalb der Zelle.

Der Hauptteil (bis 90 %) des entstehenden H_2S wird durch chemische und biologische Prozesse unter Bildung von Sulfat und Zwischenverbindungen wie Thiosulfat, Sulfit, elementarem Schwefel, Polysulfiden und Polythionaten rückoxidiert (Jorgensen 1982; Thamdrup et al. 1994). Ein Teil des H_2S reagiert mit sedimentärem Eisen zu Eisensulfiden (Berner 1970, 1984) und mit organischem Material zu Organoschwefel-Verbindungen (Kohnen et al. 1989).
Die höchsten Sulfatreduktionsraten wurden an lithologischen Grenzflächen, z.B. Sand/Ton, bzw. im marinen Sedimentationsraum in den obersten Bereichen des Sedimentes festgestellt (Martino et al. 1998; Ulrich et al. 1998; Morse 1999). Dies wird mit der diffusiven Nachlieferung von Elektronendonatoren aus organisch-reichen Schichten und dem Zustrom von Sulfat über hydraulisch leitfähigen Horizonten bzw. direkt aus dem Meerwasser begründet. Als Reaktionsraten-limitierend können folgende Faktoren angenommen werden:

- Temperatur
- Konzentration und Zusammensetzung der organischen Substanz
- Sulfatkonzentration

Bildung von Eisensulfiden

Zahlreiche experimentelle Arbeiten (u.a. Wilkin & Barnes 1996; Wang & Morse 1996; Luther 1991; Berner 1970; Rickard 1975) untersuchten die Bildungsbedingungen und Reaktionen zur Entstehung sedimentärer Pyrite.
In rezenten marinen Sedimenten wurden neben Pyrit auch andere metastabile Eisensulfide wie amorphes FeS, Mackinatwit $FeS_{(1-x)}$, Greigit Fe_3S_4 beschrieben (Morse et al. 1987). Metastabile Eisensulfide sind säurelöslich und werden deshalb auch als AVS (acid volatile sulfur) bezeichnet. Unter oberflächennahen Bedingungen ist Pyrit die thermodynamisch stabilste Phase (Berner 1967).
Deshalb wird davon ausgegangen, dass sich metastabile Eisenmonosulfide diagenetisch in Pyrit umwandeln, z.B. in der von Schoonen & Barnes (1991a,b) beschriebenen Abfolge:

amorphes FeS – Mackinatwit $FeS_{(1-x)}$ – Greigit Fe_3S_4 – Pyrit FeS_2

Eine direkte Ausfällung von Pyrit aus einer übersättigten Lösung wie z.B. von Goldhaber & Kaplan (1974) vorgeschlagen, wird noch immer kontrovers diskutiert (Raiswell 1982; Prosser et al. 1994). Die Pyritbildung über Eisenmonosulfid-Vorläufer (Abb. 6-4) beinhaltet (1) die Ausfällung des Eisenmonosulfid-Vorläufers und (2) eine Reaktion, durch die sich der Vorläufer zu Pyrit umwandelt (Wilkin & Barnes 1996).

Für die Pyritbildung aus Eisenmonosulfiden werden zwei Modelle diskutiert:

(i) progressive Sulfidisierung

Eine sehr vereinfachte Reaktionsgleichung (Gl. 6-2) zur Bildung von Pyriten in sedimentären Bildungsräumen durch die Reaktion von Eisen (II) mit Disulfid stellten Roberts et al. (1969) auf.

$$Fe^{2+} + S_2^{2-} \rightarrow FeS_2 \qquad \text{Gl. 6-2}$$

Die Disulfid-Konzentrationen in natürlichen Wässern sind jedoch im Vergleich zu Polysulfiden (S_x^{2-}) gering (Murowchick & Barnes 1986). Wie bereits eingangs beschrieben, entstehen bei der Rückoxidation des H_2S Thiosulfat, Sulfit, elementarer Schwefel, Polysulfide und Polythionate.

In natürlichen Systemen wird von verschiedenen Autoren (z.B. Berner 1970; Goldhaber & Kaplan 1974) elementarer Schwefel (S^0) als Reaktionspartner angeführt (Gl. 6-3).

$$FeS + S^0 \rightarrow FeS_2 \qquad \text{Gl. 6-3}$$

Die wässrigen Schwefelspezies Thiosulfat, Polysulfide, Polythionate aber möglicherweise auch organische Schwefelspezies (Thiole, Sulfonate) stellen weitere potenzielle Reaktionspartner dar (Wilkin & Barnes 1996; Schoonen & Barnes 1991a,b). Polysulfide sind nach Rickard (1975) wahrscheinlich die reaktive Spezies und reagieren nach folgender Reaktionsgleichung unter Bildung von Pyritkristallen:

$$Fe^{2+} + S_x^{2-} + HS^- \rightarrow FeS_2 + S_{x-1}^{2-} + H^+ \qquad \text{Gl. 6-4}$$

Thiosulfat und Polythionate reagieren nach den Gl. 6-5, 6-6 mit Eisenmonosulfiden unter Bildung von Pyrit.

$$FeS + S_2O_3^{2-} \rightarrow FeS_2 + SO_3^{2-} \qquad \text{Gl. 6-5}$$

$$FeS + S_nO_6^{2-} \rightarrow FeS_2 + S_{n-1}O_6^{2-} \qquad \text{Gl. 6-6}$$

(ii) Eisenverlust

Anhand von Isotopenuntersuchungen an Pyriten, die unter Verwendung von Ausgangsstoffen bekannter isotopischer Zusammensetzung synthetisiert wurden, konnten Wilkin & Barnes (1996) feststellen, dass die Umwandlung von Eisenmonosulfid in Pyrit unter Freisetzung von Fe^{2+} (Gl. 6-7) und nicht durch den zusätzlichen Einbau von Schwefel (Reaktionstyp Gl. 6-4) verläuft.

$$2\,FeS + 2H^+ \rightarrow FeS_2 + Fe^{2+} + H_{2\,(g)} \qquad \text{Gl. 6-7}$$

Demnach würde Pyrit dieses Reaktionspfades den gleichen $\delta^{34}S$-Gehalt wie das H_2S bei der Bildung der Eisenmonosulfide aufweisen.

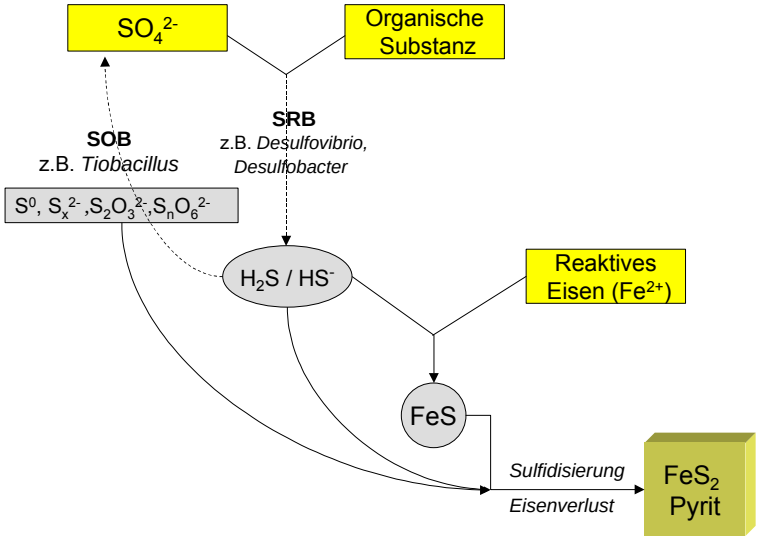


Abb. 6-4: Schematische Darstellung der Prozesse zur Bildung sedimentärer Pyrite. SRB = sulfate reducing bacteria, SOB = sulfide oxidizing bacteria (verändert nach Berner 1984).

Auf die Pyritbildung limitierend wirkende Faktoren sind demnach:

- Konzentration an SO_4^{2-}
- Konzentration an organischer Substanz
- Konzentration an Fe^{2+}
- bakterielle Aktivität
- pH

6.3.2 Isotopengeochemie der Sulfatreduktion und Pyritbildung

Für die quantitative Betrachtung der Isotopenfraktionierungen bei der Sulfatreduktion und Pyritbildung sind die Teilreaktionen der Sulfatreduktion entscheidend. Die isotopische Zusammensetzung des Schwefels im Pyrit unterscheidet sich kaum von der in den Eisenmonosulfiden. In durch Eisenverlust entstandenen Pyriten wurde kein zusätzlicher Schwefel eingebaut, so dass die Isotopengehalte identisch sind (Wilkin & Barnes 1996). Bei der progressiven Sulfidisierung wird zusätzlicher Schwefel aus den Produkten der Rückoxidation des H_2S eingebaut. Reaktionen zur Rückoxidation des H_2S sind jedoch nicht mit größeren Isotopenfraktionierungen verbunden (Habicht et al. 1998). Der zusätzlich im Pyrit eingebaute Schwefel hat somit die gleiche Isotopensignatur wie der Schwefel in den Eisenmonosulfiden.
Im Folgenden soll auf die mit den einzelnen Teilreaktionen der dissimilatorischen Sulfatreduktion verbundenen Isotopenfraktionierung näher eingegangen werden.
Innerhalb der Teilreaktionen sind unterschiedliche Isotopenfraktionierungen möglich (Harrison & Thode 1957; Rees 1973; Thode 1991).

1.	Sulfataufnahme durch Bakterien	[+3 ‰]
2.	Reaktion des Sulfats mit ATP zu APS	[--]
3.	Reduktion des APS zu Sulfit	[-25 ‰]
4.	Reduktion des Sulfits zu H_2S über Zwischenprodukte $S_3O_6^{2-}$, $S_2O_3^{2-}$	[-25 ‰]

Die intrazelluläre Sulfataufnahme ist mit geringen Isotopenfraktionierungen von +3 ‰ verbunden. Teilreaktion 2 läuft ohne Fraktionierung ab, da keine Veränderung der Reaktionszahl des Schwefels eintritt. Während der APS-Reduktion (Teilreaktion 3) und der Sulfitreduktion (Teilreaktion 4) treten die jeweils mit –25 ‰ größten Isotopenfraktionierungen auf. Im Allgemeinen ist die Isotopenfraktionierung abhängig von der Teilreaktion, die die Reaktionsrate bestimmt. Die gesamte Isotopenfraktionierung ist die Summe der kinetischen Isotopieeffekte der einzelnen Reaktionsschritte bis die Reaktionsraten-bestimmende Reaktion erreicht ist (Rees 1973). Die Gesamtfraktionierung kann im Bereich zwischen –47 ‰ ... +3 ‰ liegen. Das Ausmaß der Isotopenfraktionierung verhält sich invers zur Sulfatreduktionsrate (Habicht & Canfield 1997), mit starken Fraktionierungen bei geringen Reduktionsraten und geringer Fraktionierung bei hohen Reduktionsraten.
In Laborversuchen und unter natürlichen Verhältnissen beobachtete Gesamtfraktionierungen zwischen dem Ausgangssulfat und dem gebildeten H_2S konnten die theoretischen Fraktionierungsbeträge bestätigen (Harrison & Thode 1958; Kaplan & Rittenberg 1964; Kemp & Thode 1968; Chambers et al. 1976; Habicht et al. 1998).

Die Abhängigkeit der Gesamtfraktionierung von der Reduktionsrate untersuchten Chambers & Trudinger (1979). Sie konnten bei geringen Reduktionsraten Schwankungen für die Gesamtfraktionierung zwischen –46 ‰ ... –9 ‰ beobachten, wohingegen bei hohen Reduktionsraten weitaus geringere Schwankungen von –10 ‰ ... –7 ‰ auftraten. Für die Sulfatreduktion bei unlimitiertem Sulfatangebot legten Chambers & Trudinger (1979) als Summe der kinetischen Isotopieeffekte für die Teilreaktionen 1-3 eine Mindestfraktionierung von ca. –10 ‰ fest. Wirkt die Sulfitreduktion (4) limitierend, so geben Chambers & Trudinger (1979) einen kinetischen Isotopieeffekt von –19 ‰ ... –14 ‰an. Daraus wird deutlich, dass die Summe der kinetischen Isotopieeffekte nicht der beobachteten Gesamtfraktionierung entspricht und deshalb zusätzliche Effekte z.B. Isotopenaustausch berücksichtigt werden müssen (Kaplan & Rittenberg 1964; Kemp & Thode 1968; Chambers & Trudinger 1979).

Das bei der Sulfatreduktion gebildete H_2S reagiert mit gelöstem Eisen unter Bildung von Eisenmonosulfiden. Dabei treten nur geringe $\delta^{34}S$-Fraktionierungen zwischen –1.4 ‰ ... +2.5 ‰ auf (Böttcher et al. 1998). Daraus lässt sich schlussfolgern, dass im Sediment gebildetes H_2S und sekundäre Eisensulfide ähnliche $\delta^{34}S$-Werte aufweisen. Maximale $\delta^{34}S$-Abreicherungen von bis zu –70 ‰ in natürlichen sedimentären Pyriten (Ohmoto et al. 1990) stehen im Gegensatz zu Abreicherungen von –47 ‰ durch dissimilatorische Sulfatreduktion. Bei der Rückoxidation des H_2S kann es zur bakteriellen Disproportionierung der intermediären Schwefelverbindungen zu H_2S und SO_4^{2-} kommen (Gl. 6-8, 6-9), was mit größeren Isotopieeffekten verbunden ist (Jorgensen 1990; Canfield & Thamdrup 1994; Habicht & Canfield 1997; Habicht et al. 1998).

$$4SO_3^{2-} + 2H+ \rightarrow H_2S + 3SO_4^{2-} \qquad \text{Gl. 6-8}$$

$$S_2O_3^{2-} + H_2O \rightarrow H_2S + SO_4^{2-} \qquad \text{Gl. 6-9}$$

Für die SO_3^{2-}-Disproportionierung wurden von Habicht et al. (1998) zwischen SO_3^{2-} und H_2S eine Fraktionierung von –28 ‰ und zwischen SO_3^{2-} und SO_4^{2-} von +9 ‰ ermittelt. Bei der Disproportionierung von S^0 kommt es im gebildeten H_2S zu einer Abreicherung von –9 ‰ und im SO_4^{2-} zu einer Anreicherung von +17 ‰ (Canfield & Thamdrup 1994; Habicht &

Canfield 1997; Canfield et al. 1998). Für die $S_2O_3^{2-}$-Disproportionierung konnten Habicht et al. (1998) nur geringe Fraktionierungen < 4 ‰ feststellen.

Die stärkere Abreicherung im $\delta^{34}S$ sedimentärer Sulfide über die Fraktionierung der Sulfatreduktion hinaus kann mit der Bildung von isotopisch leichterem H_2S durch die bakterielle Disproportionierung erklärt werden.
Die $\delta^{34}S$-Verarmung der Sulfide wird entscheidend von der Reduktionsrate und anderen Faktoren wie Sulfat-Konzentration, Substrat, Temperatur, pH, bakterielle Spezies und Wachstumsbedingungen beeinflusst.

Bei der Sulfatreduktion erfolgt aufgrund des bevorzugten Umsatzes von isotopisch leichtem Sulfat eine Anreicherung des schweren $\delta^{18}O$-Isotops im residualen Sulfat. Während am Anfang der Reaktion der Anreicherungsfaktor $\varepsilon^{34}S$ etwa 2.5 bis 4 mal größer ist als der $\varepsilon^{18}O$ konnten Fritz et al. (1989) mit fortschreitender Reaktion einen Anstieg dieses Verhältnisses und eine Annäherung des $\delta^{18}O$ im residualen Sulfat auf einen konstanten Wert beobachten. Dieser Wert steht in engem Zusammenhang zum thermodynamischen Gleichgewicht zwischen Wasser und Sulfat. Als Anreichungsfaktor $\varepsilon^{18}O_{SO4\text{-}H2O}$ im Grundwasser werden ~29 ‰ angenommen (Fritz et al. 1989).

Bei der Betrachtung der $\delta^{18}O$-Istopenfraktionierung kann der $\delta^{18}O$-Isotopenaustausch zwischen Sulfat und Wasser zu Verschiebungen im $\delta^{18}O_{SO4}$ führen. Der $\delta^{18}O_{SO4\text{-}H2O}$ Isotopenaustausch im Grundwasser bei normalen Grundwassertemperaturen und neutralem pH wurde von Chiba & Sakai (1985) in einer Größenordnung von mehreren Millionen Jahren angegeben und spielt demzufolge keine Rolle. Von Fritz et al. (1989) wurde die Bildung von Sulfat-Enzymkomplexen als intermediäre Zwischenprodukte vermutet, die den Isotopenaustausch Sulfat-Wasser beschleunigen. Bei niedrigen pH-Werten kann das bei der Rückoxidation (Abb. 6-4) gebildete Sulfit beschleunigt Sauerstoffisotope mit dem Wasser austauschen (van Stempvoort & Krouse 1994; Taylor & Wheeler 1994).

6.3.3 Sulfatbildung durch Pyritoxidation

Die Oxidation von Sulfiden in Nebengesteinen der Braunkohle und sulfidischen Erzlagerstätten führt zur Bildung von sauren Kippen- oder Grubenwässern (AMD acid mine drainage), die in vielen Bergbauregionen der Welt ein massives Problem darstellen. Zahlreiche Untersuchungen in den Gebieten des Braunkohlenbergbaus in Deutschland (u.a. Wisotzky & Obermann 2001; Wisotzky 1994; Dohrmann 2000; Knöller 2000) beschäftigten sich vorrangig mit Kippen und Restseen. Stark hydraulisch beanspruchte, teilentwässerte Aquifere z.B. im Absenkungsbereich von Wasserfassungen oder im Vorfeld von Tagebauen wurden bisher kaum untersucht.
Pyritoxidation ist ein komplexer biogeochemischer Prozess, der inzwischen recht gut verstanden wird. Die Reaktionsprodukte der Pyritoxidation Eisen, Sulfat und H^+-Ionen führen zu nachhaltigen Veränderungen der Qualität von Grubenwässern, Kippenwässern aber auch in natürlichen Grundwässern. Für die vollständige Oxidation von Pyrit sind zwei Reaktionswege bekannt: (a) die rein chemische Oxidation (Gl. 6-10, 6-11) und (b) die bakteriell katalysierte Oxidation (Gl. 6-12, 6-13). Im ersten Schritt wird das Sulfid (S_2^{2-}) oxidiert. Im nachfolgenden zweiten Schritt wird das entstehende Fe^{2+} zu Fe^{3+} oxidiert und kann in Abhängigkeit vom pH als Eisenhydroxid ausfallen (Gl. 6-11). Mit der Ausfällung kommt es zu einer zusätzlichen Säurefreisetzung. Die überwiegend chemisch gesteuerte Reaktion kann auch durch chemoautotrophe acidophile Bakterien wie *Thiobacillus thiooxidans* katalysiert werden (Sasaki et al. 1998).

$FeS_2 + 3.5\ O_2\ (aq) + H_2O \rightarrow Fe^{2+} + 2\ SO_4^{2-} + 2H^+$ Gl. 6-10

$FeS_2 + 3.75\ O_2\ (aq) + 3.5\ H_2O \rightarrow Fe(OH)_3(s) + 2SO_4^{2-} + 4H^+$ Gl. 6-11

Der zweite Reaktionsweg, die Oxidation durch Fe^{3+}, wird entscheidend durch eisenoxidierende Bakterien wie *Thiobacillus ferrooxidans* beschleunigt und erreicht wesentlich größere Reaktionsraten.

$FeS_2 + 14Fe^{3+} + 8H_2O \rightarrow 15Fe^{2+} + 2SO_4^{2-} + 16H^+$ Gl. 6-12

$2Fe^{2+} + 0.5O_2 + 2H^+ \rightarrow 2Fe^{3+} + H_2O$ Gl. 6-13

Das zur chemischen Oxidation des Pyrits notwendige Fe^{3+} wird zunächst bakteriell durch Oxidation des Fe^{2+} bereitgestellt. Das nach Gl. 6-12 entstehende Fe^{2+} wird dann wieder zu Fe^{3+} oxidiert und kann erneut als Oxidationsmittel für Gl. 6-13 eingesetzt werden.

Experimentelle Arbeiten zur Pyritoxidation (Moses et al. 1987; Luther 1987; Goldhaber 1983; McKibben & Barnes 1986) zeigten deutlich, dass Fe^{3+} das Hauptoxidationsmittel zur Pyritoxidation in biotischen und/oder abiotischen natürlichen Systemen ist. Eine Abhängigkeit der Dominanz eines Oxidationsmittels (O_2 vs. Fe^{3+}) vom pH konnte durch Arbeiten von Moses et al. (1987) und Moses & Herman (1991) nicht festgestellt werden. Vielmehr zeigte sich, dass Fe^{3+} ein effektives Oxidationsmittel im Bereich von pH 2 – pH 9 sein kann. Dies konnte durch theoretische Betrachtungen von Moses et al. (1987), Luther (1987, 1991) und Luther et al. (1992) basierend auf den magnetischen Eigenschaften und/oder der molekularen Orbitaltheorie der beteiligten Reaktionspartner bestätigt werden. Die schnellere Reaktionsrate der Pyritoxidation durch Fe^{3+} gegenüber O_2 wurde von Luther (1987) mit der Eigenschaft des Fe^{3+} sich an die Oberfläche des Pyritkristalls zu binden erklärt. O_2 besitzt diese Eigenschaft nicht. Während Fe^{3+} das Hauptoxidationsmittel ist, wird durch O_2 die Reaktion aufrechterhalten, in dem Fe^{3+} regeneriert wird.
Die Oxidation des Schwefels verläuft über metastabile Zwischenverbindungen (Sulfoxy-Ionen) z.B. Sulfit SO_3^{2-}, Thiosulfat $S_2O_3^{2-}$ und Polythionate $S_nO_6^{2-}$. In Anwesenheit eines starken Oxidationsmittels (z.B. Fe^{3+}, O_2) werden Sulfoxy-Ionen schnell zu SO_4^{2-} oxidiert.
Sulfoxy-Ionen werden durch Fe^{3+} schneller oxidiert als durch O_2, so dass Sulfoxy-Ionen häufiger in Systemen auftreten, in denen O_2 das einzige Oxidationsmittel ist (Moses et al. 1987). Die Sauerstoffquelle für die Sulfoxy-Zwischenverbindungen und/oder das Sulfat ist das Wassermolekül, wie Taylor et al. (1984a,b) anhand der $\delta^{18}O$-Isotopenzusammensetzung des gebildeten Sulfats nachweisen konnten.

Die Pyritoxidation kann in Abhängigkeit vom dominierenden Prozess für den O_2-Transport vereinfacht in zwei hydrogeologischen Systemen beobachtet werden (Appelo & Postma 1999):

(1) Advektives System
- sauerstoffreiches Grundwasser durchströmt eine pyrithaltige Schicht
- die maximale Löslichkeit von O_2 in Wasser (0.33 mmol/l) ist eine Einschränkung für den maximalen Stoffumsatz
- geringe Freisetzung von Sulfat und Eisen

(2) Diffusives System

- eine pyrithaltige Schicht wird entwässert – O_2 dringt kontinuierlich diffusiv ein
- hohe Sulfat- und Eisenkonzentrationen, saure pH-Werte sind das Resultat

Größere Stoffumsätze werden bei der Pyritoxidation vor allem durch diffusiven O_2-Transport in entwässerten Schichten beobachtet. Der O_2-Transport wird nur durch die Mächtigkeit der überlagernden ungesättigten Zone (Fick'sches Diffusions-Gesetz) limitiert. Advektion spielt nur eine untergeordnete Rolle. Dem O_2-Transport, der durch substrattypische Parameter wie kf-Wert, Wassersättigung, Porosität und Corg-Gehalt gesteuert wird, kommt die größte Bedeutung bei der Pyritoxidation zu.
Eine weitere ratenkontrollierende Variable ist die reaktive Oberfläche der Pyritaggregate. Im Sediment disseminierte feinkörnige Pyritminerale besitzen aufgrund ihrer größeren reaktiven Oberfläche eine höhere Reaktionskinetik als euhedrale, massive Pyrite. Durch die Ausfällung einer $Fe(OH)_3$-Produktschicht auf der Oberfläche des reagierenden Minerals kommt es zu einem verzögerten Transport von O_2 zum reaktiven Kern. Dieser als 2-Stufen-Diffusions-Prozess betrachtete Transport wird durch das shrinking-core-Model (Davis & Ritchie 1986) beschrieben.

In einem durch Grundwasserabsenkung teilentwässerten Aquifer dringt der Luftsauerstoff über entwässerte Filterstrecken von Brunnen oder GWM in den Porenraum des Sedimentes ein. Hauptprozess ist die Gasdiffusion. Diese Bereiche sind die potenziellen Reaktionsräume für die Pyritoxidation. Der Sauerstoff wird jedoch ähnlich wie im Boden zusätzlich durch Oxidation organischer Substanz rasch verbraucht.
An exponierten Kippensedimenten kann das Problem veranschaulicht werden. In den nahezu vollständig entwässerten Kippen des Tgb. Garzweiler ist die durchschnittliche Oxidationszone nach atmosphärischer Exposition nur ca. 2 m mächtig (Wisotzky & Obermann 2001).
Daraus lässt sich schlussfolgern, dass sich die Pyritoxidation im teilentwässerten Vorfeld bzw. in Grundwasser-Absenkungstrichtern möglicherweise nur auf räumlich sehr eng begrenzte Bereiche im Umfeld der O_2-Eintragsstellen (Brunnen) beschränkt.

6.3.4 Isotopengeochemie der Pyritoxidation

Die Untersuchung der Isotopenverhältnisse des Schwefels und des Sauerstoffs am Sulfat aus der Pyritverwitterung gibt wertvolle Anhaltspunkte hinsichtlich des Reaktionsweges. Für die bakteriell katalysierte Pyritoxidation konnten Toran & Harris (1989) im gebildeten Sulfat eine Abreicherung im $\delta^{34}S$ von 2 – 5 ‰ feststellen. Im Allgemeinen wird jedoch davon ausgegangen, dass die $\delta^{34}S$-Werte des Sulfats ähnlich den Sulfidquellen sind, da Isotopenfraktionierungen durch Pyritoxidation unter natürlichen Bedingungen in vielen Fällen gering sind (Taylor et al. 1984a,b; Taylor & Wheeler 1994). Zudem sind die $\delta^{34}S$-Gehalte der Sulfide oft sehr variabel.

Im Gegensatz zur geringen Fraktionierung des $\delta^{34}S$ wird bei der Pyritoxidation die $\delta^{18}O$-Isotopenzusammensetzung im Sulfat nachhaltig verändert. Unter normalen Temperaturbedingungen im Grundwasser ist der Isotopenaustausch zwischen Sulfat und Wasser selbst bei niedrigem pH vernachlässigbar klein (Lloyd 1968; Chiba & Sakai 1985). Im Gegensatz dazu kann bei niedrigem pH ein beschleunigter Isotopenaustausch zwischen den metastabilen Zwischenverbindungen z.B. Sulfit und Wasser auftreten (van Stempvoort & Krouse 1994; Taylor & Wheeler 1994). Da die Zwischenverbindungen in natürlichen Systemen relativ schnell oxidiert werden, wird davon ausgegangen, dass das gebildete Sulfat das isotopische Signal der Sauerstoffquellen speichert.

Der $\delta^{18}O$-Gehalt des gebildeten Sulfats ist eine Mischung aus den zwei an der Reaktion beteiligten O_2-Quellen, dem atmosphärischen Sauerstoff ($\delta^{18}O$ +23 ‰) und dem Sauerstoff des Wassermoleküls ($\delta^{18}O$ –9 ‰) sowie Fraktionierungseffekten (Krouse 1980; Longinelli 1989; Toran & Harris 1989).
Als Anreicherungsfaktoren für den Sulfat-Sauerstoff bei der Pyritoxidation geben Taylor et al. (1984a,b), Taylor & Wheeler (1994) mit $\varepsilon^{18}O_{SO4-O2}$ –11.2 ‰ und $\varepsilon^{18}O_{SO4-H2O}$ +4.1 ‰ an. Somit kann aus den relativen Anteilen an Luftsauerstoff und Wasser unter Berücksichtigung der entsprechenden Anreichungsfaktoren der $\delta^{18}O$ des neu gebildeten Sulfats nach dem vereinfachten Isotopenbilanzmodell Gl. 6-14 von Taylor & Wheeler (1994) berechnet werden.

$$\delta^{18}O_{SO4} = f_{O2}\,(\delta^{18}O_{O2} + \varepsilon\,{}^{18}O_{SO4-O2}) + f_{H2O}\,(\delta^{18}O_{H2O} + \varepsilon\,{}^{18}O_{SO4-H2O}) \qquad \text{Gl. 6-14}$$

f_{O2}	Anteil Sulfatsauerstoff aus der Luft
f_{H2O}	Anteil Sulfatsauerstoff aus dem Wasser
$\varepsilon\,{}^{18}O_{SO4-O2}$	Anreicherungsfaktor für Sauerstoff aus Luft
$\varepsilon\,{}^{18}O_{SO4-H2O}$	Anreicherungsfaktor für Sauerstoff aus Wasser

Der $\delta^{18}O$-Wert des neu gebildeten Sulfats ist abhängig vom $\delta^{18}O$ des Wassers und den Bedingungen unter denen die Oxidation abläuft (Toran & Harris 1989). Durch die Oxidationsbedingungen wird der Einbau von Sauerstoff aus dem O_2 und H_2O beeinflusst. Unter wassergesättigten Bedingungen hat das gebildete Sulfat ähnliche $\delta^{18}O$-Werte wie das umgebende Wasser. Dies deutet auf einen minimalen Einbau von atmosphärischem O_2 in das gebildete Sulfat hin. In der bakteriell katalysierten Pyritoxidation in Anwesenheit von *Thiobacillus ferrooxidans* und *Thiobacillus thiooxidans* stammen 50 – 80 % des Sulfatsauerstoffs aus dem Wasser. Je nach Wassersättigung des Sedimentes reicht der Anteil des $\delta^{18}O$ aus dem Wasser von 25 % (ungesättigt) bis 75 % (gesättigt, anoxisch) (Lloyd 1968; Taylor et al. 1984a,b; Toran & Harris 1989).

6.4 Isotopengeochemie des Schwefels

6.4.1 Isotopengehalte des Zechstein-Anhydrits

Zur möglichst genauen Charakterisierung der lokalen Zechstein-Isotopensignatur wurden sechs Proben des Zechstein-Anhydrits aus dem südlich des Untersuchungsgebietes gelegenen Steinbruchs Krölpa untersucht. Die gemessenen $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Isotopengehalte (Tab. 6-3) lagen im typischen Bereich des globalen marinen Zechstein-Sulfats von Claypool et al. (1980) und Clark & Fritz (1997).

Tab. 6-3: Isotopengehalte des Zechstein-Anhydrits aus Krölpa (Mittelwerte aus 6 Proben) im Vergleich zu globalen Referenzwerten für marines Zechstein-Sulfat.

	$d^{34}S$ (‰ CDT)	**$d^{18}O$ (‰ SMOW)**
Krölpa, eigene Messung	+10.6 ±0.3	+13.6 ±2.0
global, Claypool et al. (1980), Clark & Fritz (1997)	+9.0 … +13.5	+9.5 … +14.5

6.4.2 Isotopengehalte des Schwefels in den Aquifersedimenten

Disulfide

Sulfide weisen aufgrund ihrer Entstehung charakteristische δ^{34}S-Isotopengehalte zwischen –40 ‰ ... +10 ‰ CDT auf. Die δ^{34}S-Gehalte sedimentärer Disulfide der GWL 5 und 6 zeigten große Variationen.
Während der δ^{34}S im GWL 5 zwischen +11 ‰ ... +30 ‰ CDT schwankt, war die Streuung in den isotopisch deutlich leichteren Disulfiden des GWL 6 mit Werten von –50 ‰ ... +5 ‰ CDT wesentlich größer (Abb. 6-5). Da die Messwerte für beide Grundwasserleiter keiner Normalverteilung folgten (Abb. 6-17), ist vermutlich von einer höheren Variation im δ^{34}S auszugehen, als sie die Messwerte vorgeben.

Für die Disulfide des GWL 6 wird ein System mit diskontinuierlichem Sulfatangebot angenommen. Geringe Reduktionsraten und bakterielle Disproportionierung führten zu einer Abreicherung im δ^{34}S über –47 ‰ hinaus. Disulfide mit δ^{34}S-Werten < –36 ‰ waren die Folge (Abb. 6-6). Isotopisch schwerere Disulfide wurden bei höheren Reduktionsraten gebildet. Die Reduktionsraten waren größer als die Nachlieferung des Sulfats.

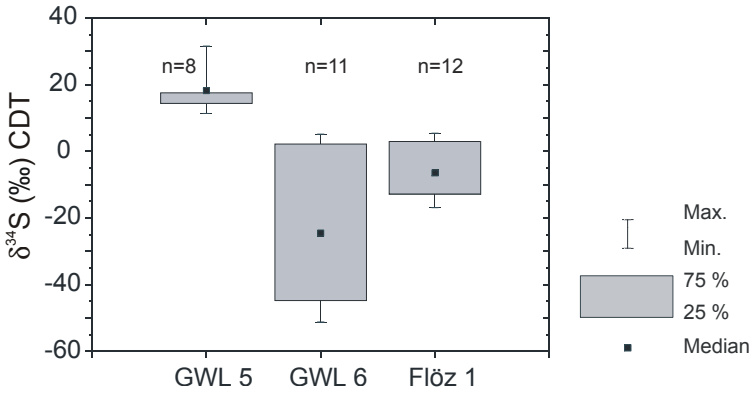


Abb. 6-5: Vergleich der δ^{34}S-Isotopengehalte sedimentärer Disulfide des GWL 5, des GWL 6 und der Braunkohle des Flözes 1.

Im GWL 5 waren die untersuchten Disulfide mit δ^{34}S-Werten ≥ +11 ‰ deutlich isotopisch angereichert. Daraus wird für die Disulfidbildung ein halb geschlossenes System mit eingeschränktem Sulfatangebot und hohen Reduktionsraten geschlussfolgert: Die Disulfide wurden aus einem isotopisch stark angereicherten Sulfat gebildet (Abb. 6-6).

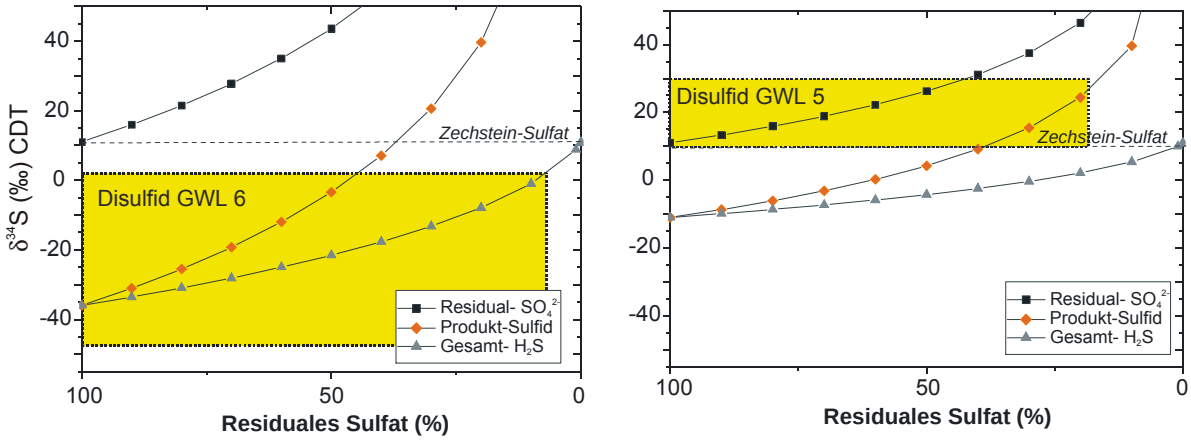


Abb. 6-6: δ^{34}S-Isotopengehalte der Disulfide aus den Aquifersedimenten des GWL 5 und GWL 6 im Vergleich zu berechneten Isotopengehalten aus der Rayleigh-Fraktionierung mit kinetischen Fraktionierungsfaktor von –47 ‰ (links) und von –22 ‰ (rechts). Ausgangssulfat ist gelöstes Zechstein-Sulfat.

Lösliche Sulfate

An den wasserlöslichen Sulfaten der Sedimente des GWL 5 und GWL 6 wurden $\delta^{34}S$ und $\delta^{18}O$ bestimmt. Im Vergleich der $\delta^{34}S$-Werte des Sulfats mit den gemessenen Isotopengehalten der Disulfide konnten Übereinstimmungen festgestellt werden (Abb. 6-6, Abb. 6-7). Die $\delta^{18}O_{SO4}$-Werte einiger Eluatproben lagen außerdem im für die Pyritoxidation typischen Bereich < +5 ‰ SMOW. Daraus wurde geschlussfolgert, dass das lösliche Sulfat in den Aquifersedimenten teilweise aus der Oxidation der Disulfide stammt. Zu beachten war weiterhin, dass das Sulfat aus der mikrobiell katalysierten Pyritoxidation im Vergleich zum Original-Pyrit im $\delta^{34}S$-Gehalt etwa +2 ‰ ... +5.5 ‰ leichter ist (Toran & Harris 1989). Dieser Isotopieeffekt ist auf das bevorzugte Aufbrechen der ^{32}S-Fe-Bindungen durch Bakterien zurückzuführen, da dieser Prozess energetisch günstiger ist. Die $\delta^{18}O$-Gehalte des Sulfats geben sehr zuverlässige Hinweise auf dessen Herkunft. Werte < +5 ‰ sind Anzeichen für die Oxidation von Sulfiden während Werte > +5 ‰ charakteristisch für andere Sulfatquellen sind. Die in einigen Proben des GWL 6 festgestellten höheren $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Werte wurden mit einer zweiten Sulfatquelle, dem Zechstein-Anhydrit, in Verbindung gebracht. Das eluierte Sulfat ist demnach eine Mischung aus Sulfat der Pyritverwitterung und Zechstein-Sulfat. Die Proben des GWL 5 zeigten erwartungsgemäß keinerlei Einflüsse durch Zechstein-Sulfat.

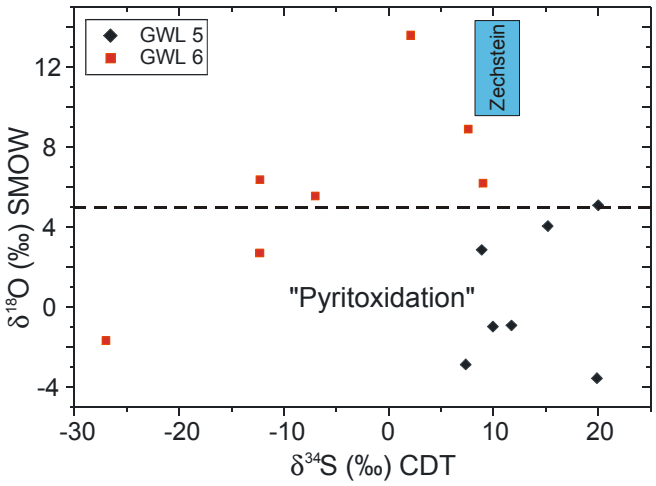


Abb. 6-7: $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Gehalte löslicher Sulfate aus den Sedimenten des GWL 5 und GWL 6 im Vergleich zu typischen Bereichen für Zechstein-Sulfat und Sulfaten aus der Pyritoxidation.

6.4.3 Pyritbildung in den Aquifersedimenten

Die fluviatilen Sedimente der Bornaer Folge A und Folge B (GWL 5, GWL 6) wurden in zyklischer Abfolge in einem aktiven Senkungsraum abgelagert. Ursache für Absenkung des Untergrundes war u.a. die Subrosion des Zechstein-Anhydrits.

Mit zunehmender Sedimentation gerieten die Sedimente der Bornaer Folge unter Luftabschluss. Sauerstoff reagierte mit reduzierten Substanzen im Aquifersediment, z.B. organischer Substanz und Fe(II)-Mineralen. Das Ausmaß dieser Reaktion wird durch die Reaktivität der organischen Substanz bestimmt. Torf gilt als sehr reaktiv, gefolgt von der Braunkohle bis hin zu wenig reaktiven Kohlenfragmenten. In den obersten Sedimentschichten und an lithologischen Grenzflächen zwischen Sanden-Kiesen/Ton-Kohle bildeten sich Reduktionszonen aus. Die Porenwässer enthielten anfänglich hohe Konzentrationen an Sulfat aus der Lösung des Zechstein-Anhydrits. Infiltrationen von Meerwasser der Oligozän-Transgression sind für die Sedimente des GWL 5 und GWL 6 aufgrund mächtiger Stauer im Hangenden (Haselbacher Ton, Flöz 23, Luckenauer Ton) nicht sehr wahrscheinlich. Tonig-schluffige Sedimente sind oft die Quellen für reaktive Eisenminerale aber auch für organischen Kohlenstoff. In dem reduzierenden Porenwasser reagierte ein Teil des durch die dissimilatorische Sulfatreduktion entstandenen H_2S (s. Kap. 6.3.1) mit gelöstem Fe^{2+} zunächst zu Eisenmonosulfiden, die später durch progressive Sulfidisierung zu Pyrit und Markasit umgewandelt werden können. Im Sediment konnten Eisendisulfide (Pyrit, Markasit) durch

Chromreduktion nur qualitativ nachgewiesen werden. Feinkörnige Horizonte z.B. Feinsande enthielten generell mehr Pyrit als grobkörnige Sande und Feinkiese. Eisenmonosulfide (AVS) wurden in keiner der untersuchten Proben festgestellt. Eisendisulfide konnten nur durch Chromreduktion jedoch nicht makroskopisch nachgewiesen werden.

6.5 Sulfat im Grundwasser – Hydrochemische Indikatoren

Im Untersuchungsgebiet wurden über einen Zeitraum von 1999 bis 2001 eine Auswahl an GWM und Brunnen mit Filterausbau in den Grundwasserleitern GWL 5, GWL 6 und GWL II beprobt und die Proben analysiert. Zusätzlich wurden Quellaustritte untersucht.

6.5.1 Physikochemische Parameter

Die Messung der physikochemischen Parameter war für die exakte Beurteilung des Grundwasserchemismus hinsichtlich der Speziesverteilung notwendig. Durch Oxidations- und Reduktionsprozesse wird die Speziesverteilung im Grundwasser gesteuert. Die Stabilität der hier vordergründig betrachteten Schwefel- und Eisenspezies war abhängig von pH, E_H, T und der Konzentration in der Lösung (Abb. 6-8).
Die Messergebnisse der physikochemischen Parameter pH, Lf, E_H und T sind in Abb. 6-9 zusammengefasst.

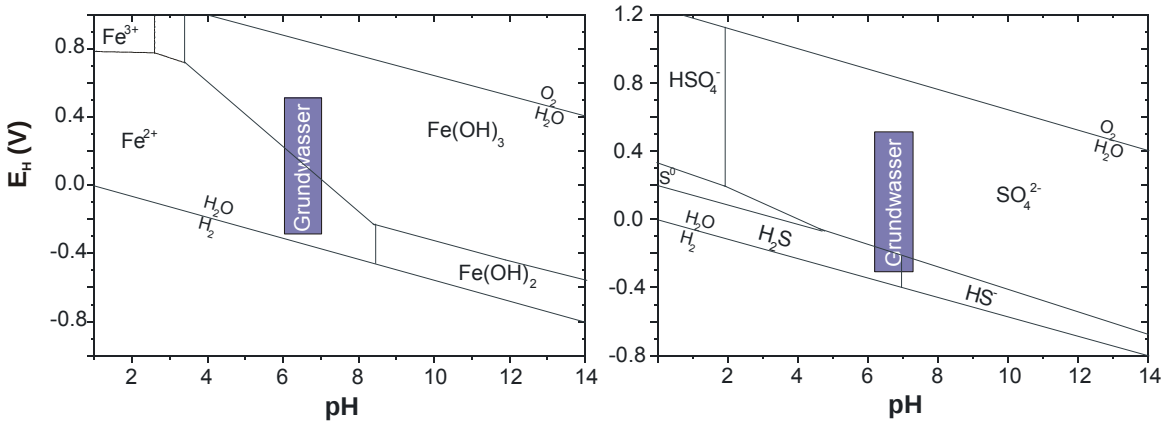


Abb. 6-8: Stabilitätsdiagramme für das System S-O-H (S = 10^{-3} mol/l) und Fe-O-H (Fe = 10^{-4} mol/l) für 25 °C, 1 bar (nach Brookins 1988). Die E_H/pH-Werte der Grundwässer im Untersuchungsgebiet sind gekennzeichnet.

Die pH-Werte der meisten untersuchten Proben lagen im Bereich zwischen pH 6 – pH 7. Einzelne Proben im GWL 5 und GWL 6 waren < pH 6. Nur eine einzige Probe lag im sauren pH-Bereich (GWM 41094, pH 2.5) und war vermutlich durch Infiltrationen saurer Kippenwässer der Kippe Phönix-Ost beeinflusst. Grundwässer des GWL II waren überwiegend pH-neutral. Einzelne Proben waren aufgrund mikrobieller Abbaureaktionen organischer Schadstoffe mit CO_2-Freisetzung und Gesteinslösung leicht alkalisch.
Die höchsten elektrischen Leitfähigkeiten konnten im Grundwasser des GWL 5 festgestellt werden. Maximalwerte von > 2000 µS/cm waren bedingt durch andere Kontaminationen des Grundwassers (z.B. ehem. Teerverarbeitungswerk Rositz) bzw. Infiltrationen von sauren Kippenwässern (GWM 41094). Auch die Proben des GWL 6 und GWL II zeigten große Schwankungen in der elektrischen Leitfähigkeit.
Der Lf-Medianwert war für das Grundwasser des GWL II am höchsten, gefolgt vom GWL 5 und GWL 6. Die Grundwassertemperaturen der hier untersuchten Grundwässer werden vor allem durch exotherme Reaktionen im Aquifer (z.B. Schadstoffabbau) aber auch durch

Aufstieg von tieferen Grundwässern aus dem Zechstein (GWL II) beeinflusst. Während die Grundwässer des GWL 5 und GWL 6 ähnliche Temperaturen aufwiesen, war das Grundwasser des GWL II deutlich wärmer, mit Maximalwerten bis 17 °C (Tgb. Schleenhain). Das Redoxpotenzial im Grundwasser ist abhängig vom Gehalt an gelöstem O_2, DOC und der Aktivität reduzierender Bakterien. Niedrige Redoxpotenziale bis zu –0.3 V, die im Bereich der Sulfatreduktion liegen, waren vor allem in Proben im Abstrom bzw. innerhalb von bekannten Kontaminationsherden (z.B. Rositz) feststellbar. Die E_H-Medianwerte für alle Grundwasserleiter waren > 0 V, wobei der GWL 6 die durchschnittlich höchsten Redoxpotenziale aufwies.

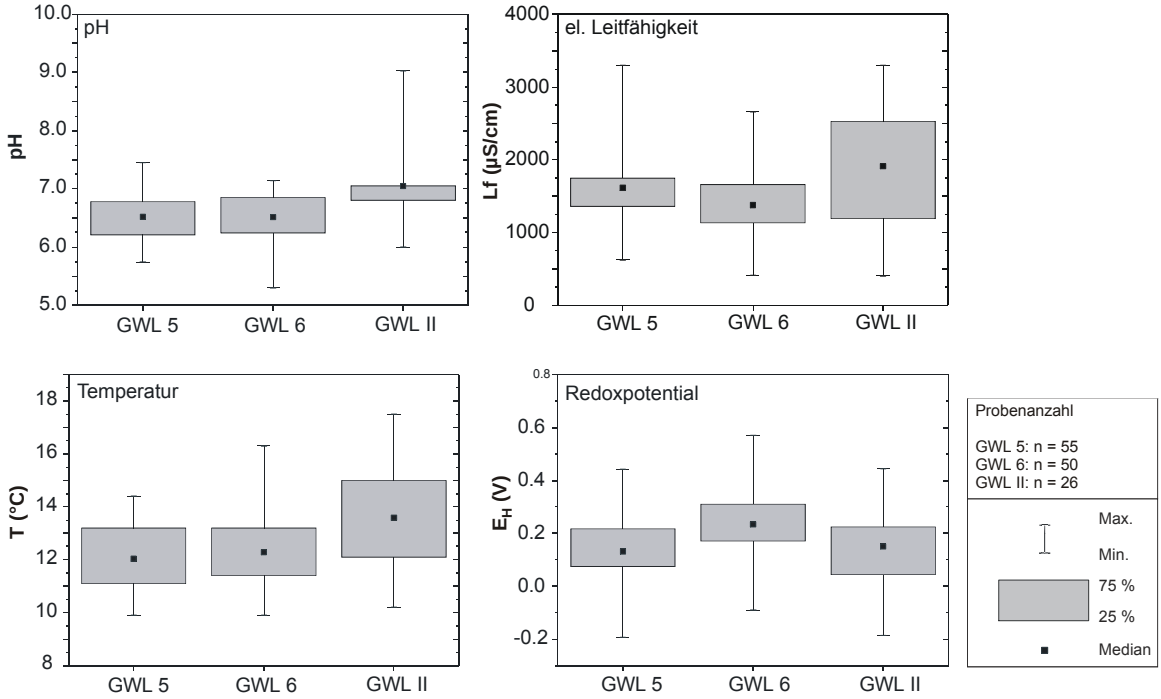


Abb. 6-9: Vergleich der physikochemischen Parameter pH, Lf, E_H und T für Grundwässer des GWL 5, GWL 6 und GWL II im Box-Whisker-Diagramm.

6.5.2 Sulfat, Eisen und andere gelöste Stoffe

Zur Beurteilung der Qualität der Analysenergebnisse wurde der Ionenbilanzfehler berechnet. Die Mehrzahl der Analysen lag im Bereich ±5 % und besser. Die relativen Hauptionenanteile (meq%/l) sämtlicher Proben der untersuchten Grundwasserleiter wurden zu Vergleichszwecken in einem Piper-Diagramm (Abb. 6-10) dargestellt. Daraus konnten ähnliche Mineralisationsverhältnisse mit Calcium, Magnesium, Sulfat und Hydrogencarbonat als Hauptionen für alle Grundwässer abgeleitet werden.

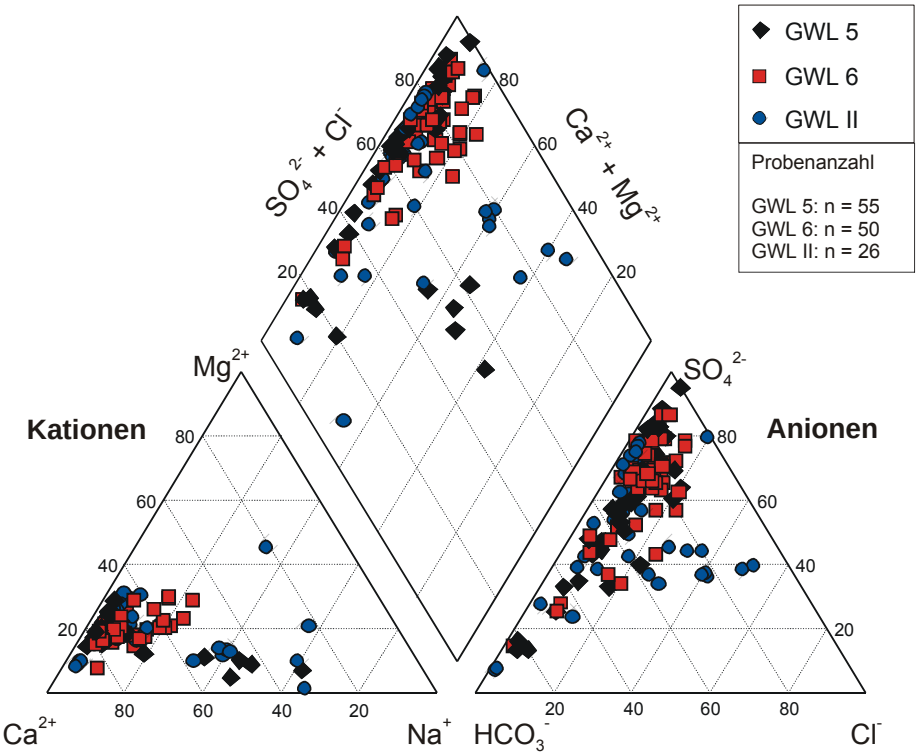


Abb. 6-10: Darstellung der Hauptionenverhältnisse (meq%/l) in Grundwasserproben des Untersuchungsgebietes im Piper-Diagramm. Abweichungen von den Hauptionen Ca^{2+}, $S0_4^{2+}$, HCO_3^- durch leichte Zunahme der Na^+- und Cl^--Konzentrationen in den Grundwasserleitern GWL 5 und GWL II.

Der Hauptgrundwasser-Typ im GWL 5 und 6 war ein Ca-Mg-SO_4-HCO_3 bis Ca-Mg-HCO_3-SO_4–Typ, wobei in kontaminierten Bereichen des GWL 5 (Altlast Rositz) eine deutliche Zunahme an gelöstem NaCl zu verzeichnen war. Im GWL 6 dominierte in vielen Proben SO_4^{2-} gegenüber HCO_3^- .
Das Grundwasser im GWL II war in seiner Hauptionenzusammensetzung variabel. Ca-Mg-SO_4-HCO_3 bis Ca-Na-Cl-SO_4-HCO_3–Typen bildeten die Endglieder einer Mischungsreihe.

Die Konzentrationen an Spurenelementen und Schwermetallen waren bis auf Eisen, Mangan, SiO_2 und Strontium an der Nachweisgrenze.
Die **Eisen**-Konzentrationen (Fe_{ges}) waren im Grundwasser der tertiären Aquifere deutlich höher als im GWL II (Abb. 6-11). Die durchschnittlich höchsten Konzentrationen waren im GWL 5 festzustellen. Extreme Fe_{ges}-Konzentrationen > 75 mg/l traten im GWL 5 im Anstrom des ehem. WW Hagenest auf (GWM 41094, 41194, 41294, 41394). Für den GWL 6 konnte von Storch (1998) im Brunnen 6e/79 (Hagenest) Fe_{ges}-Konzentrationen von 95 mg/l nachweisen. Die GWM im Abstrom des ehem. WW Hagenest (GWM 41194, 41294, 413954) zeigten maximale Fe_{ges}-Konzentrationen von 37 mg/l. Da die genannten GWM mit PVC ausgebaut waren, konnten Einflüsse des Ausbaumaterials ausgeschlossen werden. Im Grundwasser des GWL II waren die Eisenkonzentrationen überwiegend < 1 mg/l. Werte von bis zu 16 mg/l waren vermutlich auf korrodiertes Ausbaumaterial (Stahl) zurückzuführen.
Die Konzentrationen an **Sulfat** im Grundwasser lagen bei ~ 500 mg/l, wobei der GWL II die höchsten Werte aufwies. Die niedrigsten Werte wurden für den GWL 6 bestimmt. Die Maximalwerte lagen jedoch im gleichen Bereich wie die des GWL II. Im GWL 5 wurde an der GWM 41094 1900 mg/l Sulfat gemessen, was vermutlich auf Zuflüsse saurer Kippenwässer zurückzuführen war.
Strontium-Konzentrationen im Grundwasser der untersuchten Aquifere schwankten zwischen 0.5 – 4 mg/l. Die mit Abstand höchsten Werte waren im Grundwasser des

Zechstein-Aquifers nachweisbar, doch auch im Grundwasser des GWL 5 und GWL 6 konnten Konzentrationen bis 2.5 mg/l gemessen werden. Erhöhte Strontium-Konzentrationen können Anzeichen für den Aufstieg von Zechstein-Grundwasser aus dem GWL II sein, wie dies z.B. für den GWL 6 (GWM 5681, 2.2 mg/l) im Tgb. Schleenhain festgestellt wurde.

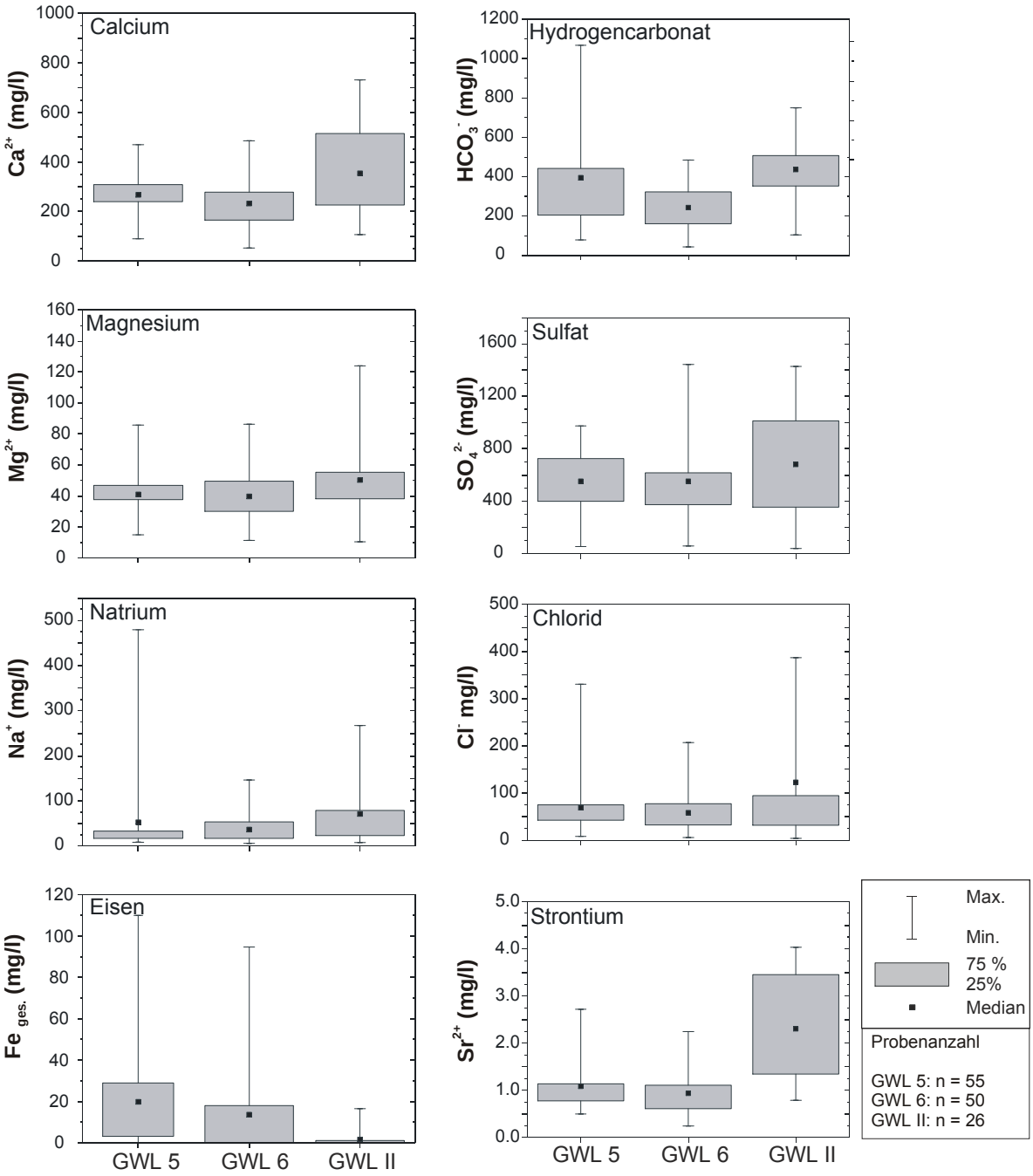


Abb. 6-11: Variationen in der Konzentration ausgewählter Ionen im Grundwasser der Grundwasserleiter GWL 5, GWL 6 und GWL II als Box-Whisker-Diagramm. Analysen mit Ionenbilanz-Fehler $|IB| > 5$ wurden nicht berücksichtigt.

Sulfat und Eisen im GWL 5

Im Grundwasser des GWL 5 wurden Konzentrationen an Sulfat und Eisen festgestellt, die zum Teil weit über den Grenzwerten der TVO von 240 mg/l bzw. 0.2 mg/l lagen. Als Ursache dafür wurde die Oxidation von Sulfiden im Aquifersediment vermutet. Dieser geochemische Prozess lässt sich, wie bereits ausführlich in Kap. 6.3.3 erläutert, u.a. an folgenden hydrochemischen Trends im Grundwasser nachweisen:

(i) Zunahme der Fe-Konzentration
(ii) Zunahme der SO_4-Konzentration
(iii) Abnahme der HCO_3-Konzentration
(iv) Abnahme des pH

Wie die Darstellung der untersuchten Grundwasserproben in Abb. 6-12 zeigt, sind im GWL 5 Trends dieser Art zu erkennen. Mit steigender Sulfatkonzentration war eine Abnahme des HCO_3-Gehalts und des pH-Werts zu verzeichnen. Dies ist auf die Pufferwirkung des HCO_3 und anderer Carbonate im Aquifersediment zurückzuführen, die freiwerdende H^+-Ionen zunächst puffern, bevor der pH-Wert sinkt. Gleichzeitig erhöhten sich die Fe-Konzentrationen im Grundwasser.

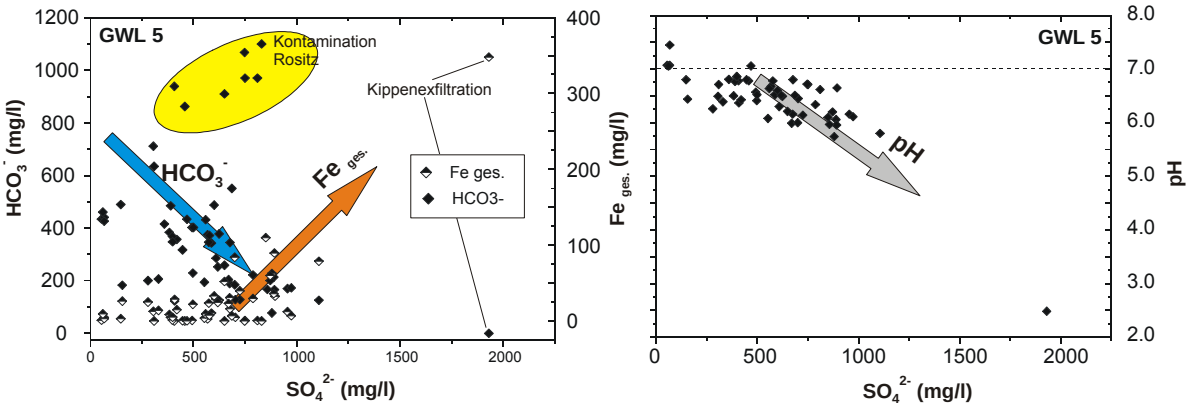


Abb. 6-12: Hydrochemische Trends für SO_4^{2-}/HCO_3^- , $SO_4^{2-}/Fe_{ges.}$ (links) sowie SO_4^{2-}/pH (rechts) im Grundwasser des GWL 5. Pfeile kennzeichnen die typische Entwicklung als Folge zunehmender Beeinflussung des Grundwassers durch Sulfidoxidation. Erläuterungen im Text. Ergänzende Analysen aus Wucher et al. (1994); Kittler & Gräber (1995); Eccarius (2000).

Für die Konzentration der Ca-Ionen deutete sich eine Abhängigkeit vom pH an (Abb. 6-13). Dies ist auf die Lösung von Calcit durch H^+-Ionen zurückzuführen. Auch eine Korrelation von Ca^{2+} und SO_4^{2-} war teilweise erkennbar (Abb. 6-13), was z.B. mit der Lösung von im entwässerten Porenraum des Aquifers kristallisiertem Gips durch den Wiederanstieg des Grundwassers erklärt werden kann.

Die hydrochemischen Trends im Grundwasser des GWL 5 gaben eindeutige Hinweise auf Pyritverwitterung.

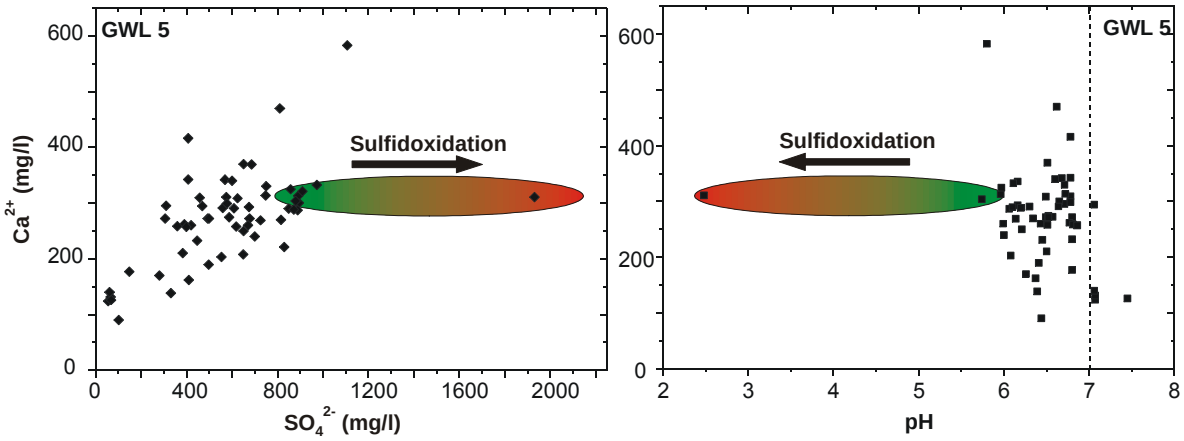
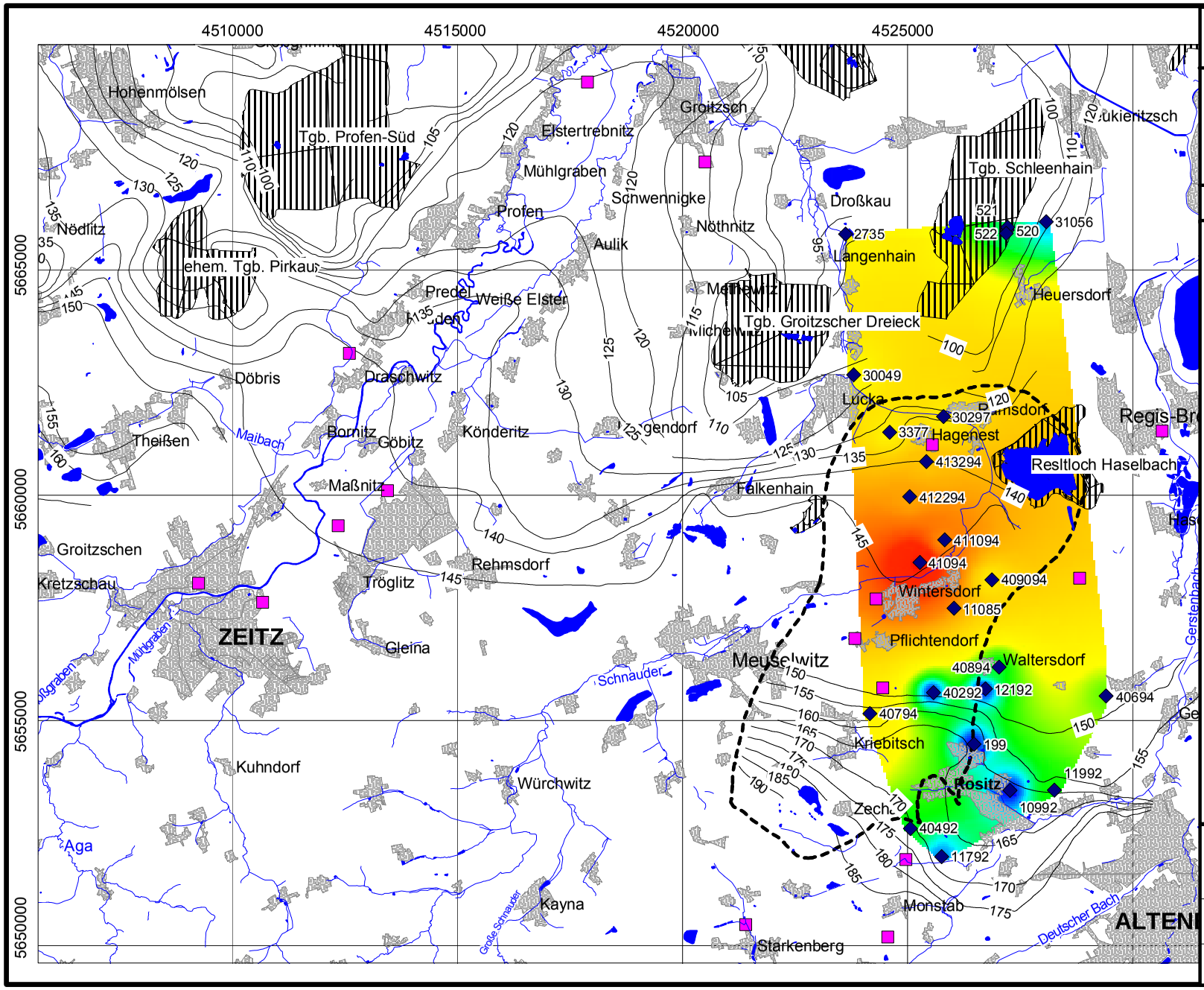


Abb. 6-13: Beziehung zwischen Ca^{2+} und SO_4^{2-} (links) und die Ca^{2+}-Konzentrationen in Abhängigkeit vom pH-Wert des Grundwassers (rechts). Ergänzende Analysen aus Wucher et al. (1994); Kittler & Gräber (1995); Eccarius (2000).

Von Interesse sind darüber hinaus regionale Unterschiede in den hydrochemischen Leitparametern SO_4 und Fe, die z.B. Hinweise auf lokale geologische, hydraulische oder hydrochemische Phänomene geben können. Dazu wurden die Konzentrationen der Leitparameter SO_4 und Fe durch Interpolation nach der IDW-Methode (Inverse Distance Weighting; Isaaks & Srivastava 1989) für einen ausgewählten Bereich regionalisiert. Daraus ließ sich erkennen, dass die mit Abstand höchsten Konzentrationen an Sulfat (max. GWM 41094, 1930 mg/l) und Eisen (max. GWM 41094, 348 mg/l) im Anstrom des ehem. WW Hagenest (Karte 6-1, Karte 6-3) lagen. Dies ist auf den Eintrag von Verwitterungsprodukten der Sulfidoxidation ins Grundwasser zurückzuführen, auch wenn diese nicht zweifelsfrei im entwässerten Teil des Aquifers entstanden sein müssen, sondern auch als Zuflüsse aus Kippenbereichen, z.B. Kippe Phönix-Ost, eingetragen worden sein können.
Die aus der gewachsenen Ost-Böschung des Tgb. Schleenhain austretenden Wässer (Proben 520, 521, 522, Karte 6-1, Karte 6-3) waren mit 700 – 970 mg/l SO_4 und 4. 5 – 12 mg/l Fe zwar ebenfalls durch Sulfidoxidation beeinflusst, jedoch kann durch die geologischen Verhältnisse ein Kippenzufluss ausgeschlossen werden. In Richtung des östlichen Tagebauvorfeldes waren in der GWM 31056 deutlich geringere SO_4-/Fe-Konzentrationen von 550 mg/l bzw. 3.8 mg/l feststellbar. Dies spricht für einen deutlich geringeren Einfluss der Sulfidverwitterung auf den Grundwasserchemismus im teilentwässerten Vorfeld.

Geringere SO_4-/Fe-Gehalte von 450 – 700 mg/l bzw. < 0.1 mg/l waren hingegen im Abstrom der Altlast Rositz (Karte 6-1) zu beobachten. Gleichzeitig konnte in zahlreichen GWM, z.B. 199, 10992, qualitativ H_2S nachgewiesen werden. In diesen Proben lagen die Hydrogencarbonat-Konzentrationen über 800 mg/l, z.B. GWM 12192, 10992. Daraus wurde geschlussfolgert, dass in dem kontaminierten Bereich des Aquifers durch (mikrobielle) Abbaureaktionen organische Schadstoffe mineralisiert werden, wobei das Sulfat als Elektronenakzeptor zu H_2S reduziert wird (Abb. 6-12). Durch das im Wasser gelöste H_2S kann gelöstes Eisen als Eisenmonosulfid/-disulfid fixiert werden.



Industrielle Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 6-1:
Eisen-Konzentrationen
im Grundwasser des GWL 5

Legende

- GWM
- ehem. Wasserfassung
- Grundwasserisohypse mNN (nach MIBRAG 2001)
- Fluss
- Einzugsgebiet ehem. WW Hagenest
- Tagebau
- See
- Ortschaft

Fe ges. (mg/l)

- 0
- 5
- 10
- 20
- 50
- 75
- 100
- 150
- 200
- > 250

N W E S

Maßstab

0 2,5 5

Kilometer

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Thüringen, Sachsen (2000)
- MIBRAG (2001)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem: Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

Sulfat und Eisen im GWL 6

Im Grundwasser des GWL 6 waren ebenfalls deutliche Überschreitungen der TVO-Grenzwerte für Sulfat und Eisen festzustellen. Im Vergleich zum GWL 5 zeigten sich gegensätzliche Trends (Abb. 6-14). Mit ansteigenden SO_4-Konzentrationen konnten weder steigende Fe-Konzentrationen noch sinkende HCO_3-Konzentrationen festgestellt werden. Im Gegensatz dazu war zwischen einigen Proben ein Zusammenhang zwischen steigenden SO_4 - und HCO_3-Gehalten erkennbar. Eine pH-Abhängigkeit der SO_4-Konzentrationen im Grundwasser war nicht zu beobachten.

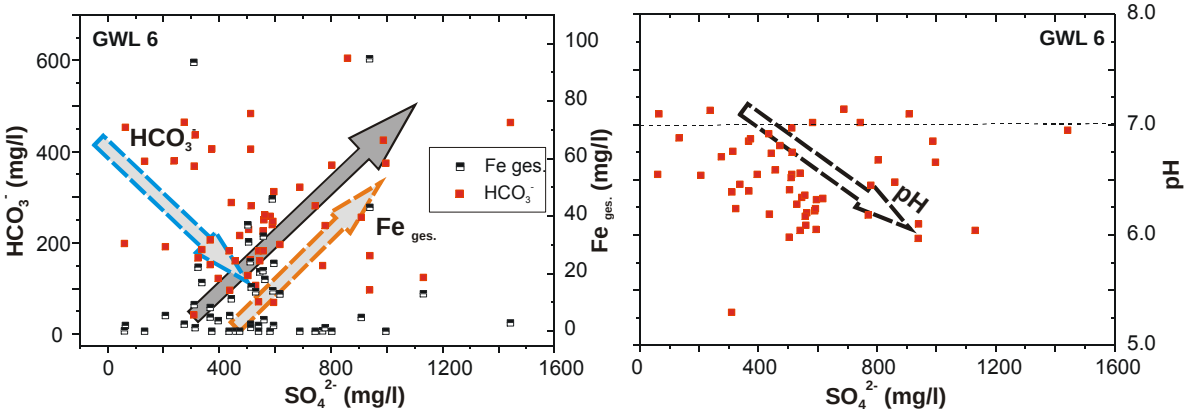


Abb. 6-14: Hydrochemische Trends für SO_4^{2-}/HCO_3^-, $SO_4^{2-}/Fe_{ges.}$ (links) sowie SO_4^{2-}/pH (rechts) im Grundwasser des GWL 6. Gestrichelte Pfeile kennzeichnen theoretische hydrochemische Trends der Sulfidoxidation. Ausgefüllter Pfeil markiert die gleichzeitige Zunahme der SO_4^{2-}- und HCO_3^--Konzentrationen, typisch für die Zumischung von Zechstein-Grundwasser des GWL II. Erläuterungen im Text. Ergänzende Analysen aus Wucher et al. (1994); Kittler & Gräber (1995); Eccarius (2000).

Gleichzeitig war die Korrelation des SO_4 mit Ca ausgeprägter als im GWL 5 (Abb. 6-15). Die Konzentrationen an Calcium zeigten im Gegensatz zum GWL 5 keinerlei Abhängigkeit vom pH. Im GWL 6 geht demzufolge kaum Calcit durch Pufferung von H^+-Ionen in Lösung. Der Zusammenhang zwischen Calcium und Sulfat könnte als ein Hinweis auf den Aufstieg von Ca-SO_4-HCO_3-Grundwässern aus dem GWL II angesehen werden.

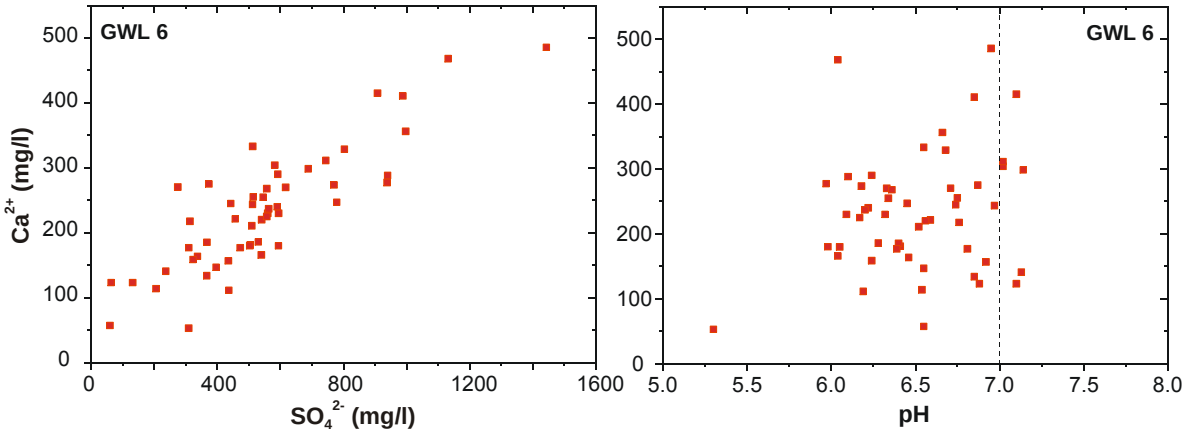


Abb. 6-15: Beziehung zwischen Ca^{2+} und SO_4^{2-} (links) und die Ca^{2+}-Konzentrationen in Abhängigkeit vom pH-Wert des Grundwassers (rechts). Ergänzende Analysen aus Wucher et al. (1994); Kittler & Gräber (1995); Eccarius (2000).

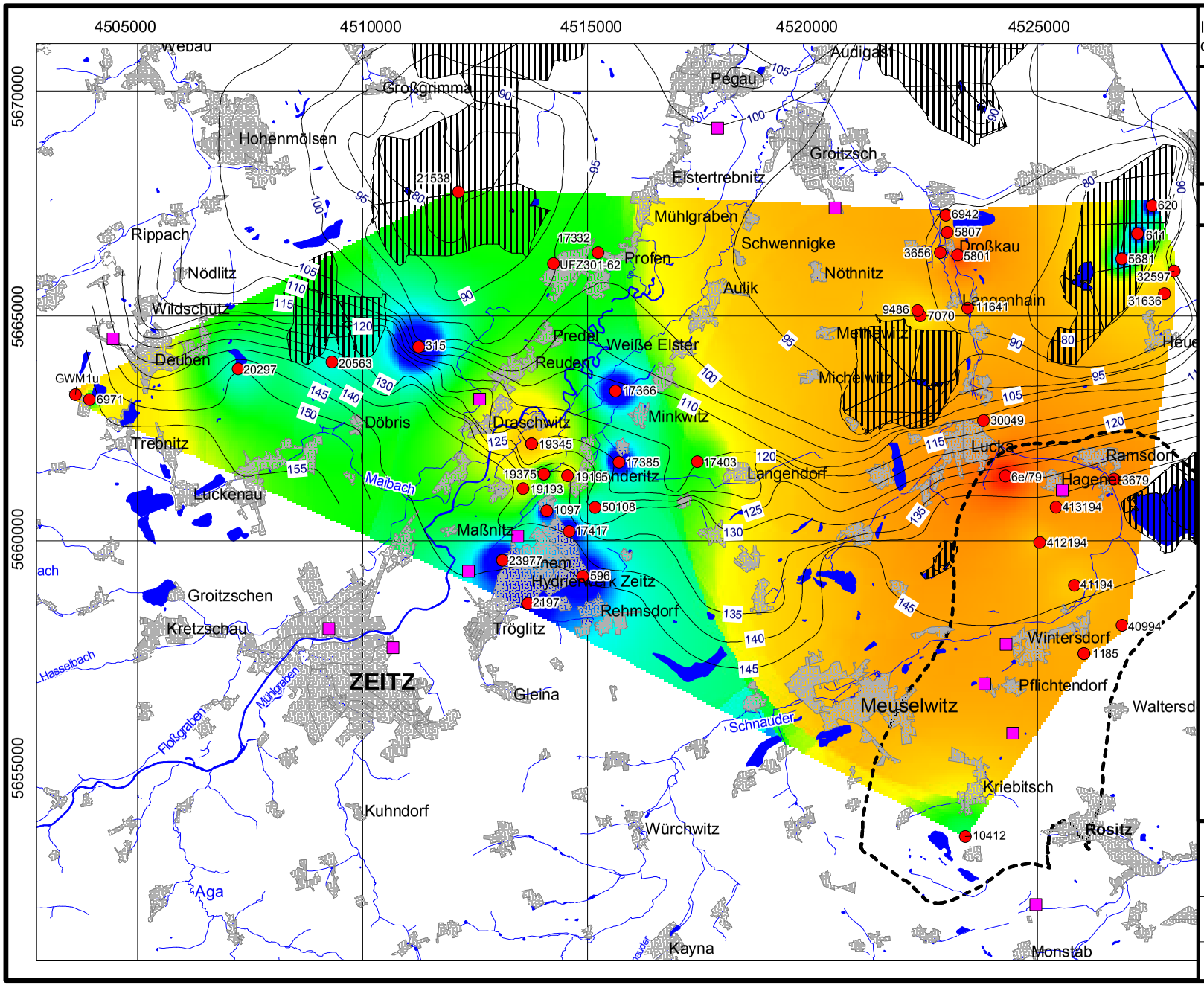
Aus den hydrochemischen Trends im Grundwasser des GWL 6 konnten keine eindeutigen Hinweise auf Pyritverwitterung festgestellt werden.

Analog zum GWL 5 wurden die Konzentrationen der Leitparameter SO_4 und Fe durch Interpolation nach der IDW-Methode für das gesamte Untersuchungsgebiet regionalisiert. Aus der Verteilung der Fe-Konzentrationen (Karte 6-2) konnten zwei Bereiche ausgehalten werden, ein Bereich hoher Konzentrationen im Osten des UG mit bis zu 100 mg/l (GWM 6e/79, Brunnengalerie WW Hagenest) und ein Bereich niedrigerer Konzentrationen im Westen des UG mit max. 15 mg/l (GWM 19345). In letzterem Bereich betrug die durchschnittliche Fe-Konzentration 2.5 mg/l mit einzelnen GWM < 0.5 mg/l, z.B. im Umfeld des ehem. Hydrierwerkes Zeitz. Im östlichen Bereich lag die durchschnittliche Fe-Konzentration zwischen 10 – 25 mg/l. An der Sohle des Tgb. Schleenhain austretende Quellen im GWL 6 (Probe 611, 620) hatten ebenso wie die GWM 5681 Fe-Konzentrationen < 0.1 mg/l.
Die Verteilung der Sulfat-Konzentrationen ließ die auf Basis der Fe-Konzentrationen vorgenommene Differenzierung nicht erkennen (Karte 6-4). Vielmehr war die regionale Verteilung der SO_4-Konzentrationen im Grundwasser mit durchschnittlichen Werten um 500 mg/l relativ ausgeglichen. Die höchsten SO_4-Konzentrationen mit ca. 750 mg/l konnten im Bereich des WW Hagenest, des Tgb. Profen sowie im östlichen Vorfeld des Tgb. Schleenhain gemessen werden. In den Quellaustritten des Tgb. Schleenhain (Probe 611, 620) wurden jedoch nur max. 240 mg/l SO_4 bestimmt.

Die Sulfidoxidation beeinflusst das Grundwasser des GWL 6 vermutlich nur in räumlich eng begrenzten Grundwasser-Absenkungsbereichen, z.B. im Umfeld des WW Hagenest oder des Tgb. Profen.
Für den Anstieg der SO_4-Konzentrationen scheint ein weiterer Prozess verantwortlich zu sein, der eine gleichzeitige Konzentrationserhöhung im HCO_3 bewirkt.

Industrielle Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 6-2: Eisen-Konzentrationen im Grundwasser des GWL 6



Legende

- GWM
- ehem. Wasserfassung
- Grundwasserisohypse mNN (nach MIBRAG 2001)
- Einzugsgebiet ehem. WW Hagenest
- Fluss
- Tagebau
- See
- Ortschaft

Fe ges. (mg/l)

- <0.5
- 1
- 2,5
- 5
- 10
- 25
- 50
- 75
- 100

N W E S

Maßstab

0 2,5 5

Kilometer

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Thüringen, Sachsen (2000)
- MIBRAG (2001)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem: Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

Sulfat im GWL II

Die Mineralisation des Grundwassers im GWL II wurde durch Lösung des Zechstein-Anhydrits und des Aquifergesteins (Dolomit, Kalkstein) bestimmt. In Bezug auf Sulfat ergab sich daraus eine deutliche Korrelation mit Calcium durch die Lösung von Anhydrit. Aufgrund von Lösungs-/Fällungsreaktionen im Carbonat-Gleichgewicht war der Zusammenhang zwischen Sulfat und Hydrogencarbonat nur als wenig ausgeprägter Trend erkennbar (Abb. 6-16). Wie Berechnungen von Sättigungsindices mit Phreeqc (Parkhurst & Appelo 1999) ergaben, konnte es auch zur Ausfällung von Calcit aus übersättigten Lösungen kommen. Eine Steuerung der Sulfat-Konzentration durch den pH des Wassers war nicht festzustellen. Die geogen bedingten Eisen-Konzentrationen waren < 0.5 mg/l. Höhere Werte waren auf das Ausbaumaterial oder auf Lösungserscheinungen an Quellaustritten, z.B. Liegendwasserdurchbrüche Tgb. Profen, Tgb. Schleenhain, zurückzuführen. Auf eine graphische Darstellung wurde verzichtet.

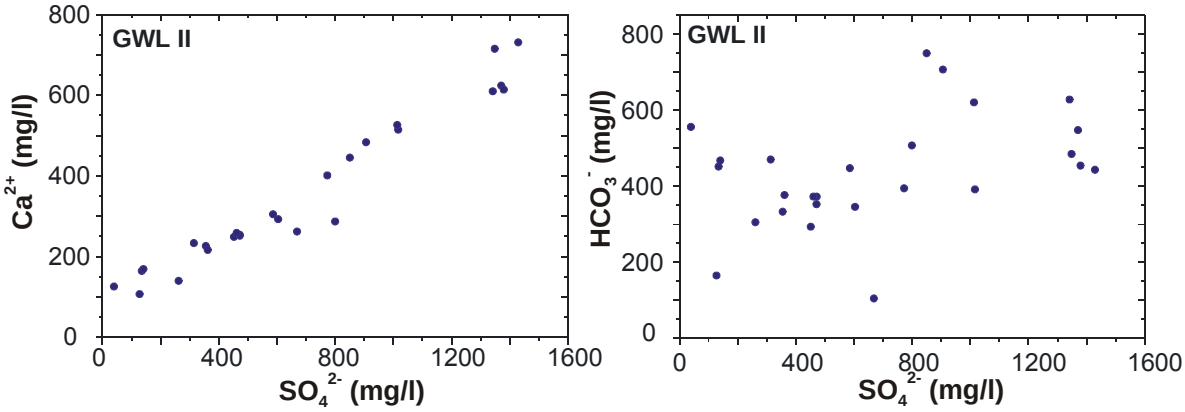


Abb. 6-16: Verhalten von Sulfat in Abhängigkeit von Calcium (links) und Hydrogencarbonat (rechts) im Grundwasser des GWL II.

Aus den hydrochemischen Zusammenhängen konnte eine Oxidation von Pyritmineralen im GWL II ausgeschlossen werden. Die Sulfationen stammen aus der Lösung des Zechstein-Anhydrits.

Aus den hydrochemischen Trends konnten zwei Prozesse, die den Sulfat-Eintrag in das Grundwasser der tertiären Aquifere GWL 5 und GWL 6 steuern, identifiziert werden.
Dies umfasst im GWL 5 die Pyritoxidation und im GWL II die Lösung von Zechstein-Anhydrit. Für den GWL 6 ergaben die hydrochemischen Untersuchungen keine eindeutige Zuordnung. In diesem Aquifer kommt es vermutlich zu Überlagerungen von Pyritoxidation und Grundwasseraufstieg aus dem GWL II. Um die einzelnen Prozesse eindeutiger erkennen und lokalisieren zu können, wurden umfangreiche Isotopenuntersuchungen am Grundwasser-Sulfat durchgeführt.

6.6 Sulfat im Grundwasser – Isotopenhydrologische Indikatoren

Anhand der $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Isotopenzusammensetzung der gelösten Sulfate im Grundwasser des GWL 5 und GWL 6 sollen die hydrochemisch identifizierten Prozesse durch isotopenhydrologische Methoden verifiziert werden.

6.6.1 Isotopie des Sulfats im GWL 5

Der $\delta^{34}S$-Gehalt des Grundwasser-Sulfats lag im Bereich zwischen –7 ‰ ... + 25 ‰ CDT, mit einem Häufigkeitsmaximum bei ca. +5 ‰ (Abb. 6-17).
Im Vergleich der Häufigkeitsverteilung der $\delta^{34}S$-Werte des Grundwasser-Sulfats mit den $\delta^{34}S$-Werten der sedimentären Pyrite war eine Verschiebung zwischen den Maxima zu erkennen. In den sedimentären Pyriten wurden $\delta^{34}S$-Gehalte im Bereich zwischen +11 ‰ ... +31.5 ‰ CDT festgestellt. Da bei der Oxidation des Pyrits nach Taylor & Wheeler (1994) bzw. Toran & Harris (1989) keine oder nur geringe Isotopieeffekte von +2 ‰ ... +5.5 ‰ zu erwarten waren, musste von einer weitaus stärkeren Variation der $\delta^{34}S$-Werte der sedimentären Pyrite ausgegangen werden, als dies von den Messwerten angezeigt wurde. Erste Anzeichen dafür liefern Untersuchungen an Sulfat aus Eluaten der Aquifersedimente (Kap. 6.4.2).

In der Häufigkeitsverteilung der $\delta^{18}O$-Werte des Grundwasser-Sulfats (Abb. 6-17) war ein Maximum bei +15 ‰ SMOW erkennbar. Die gemessenen Werte lagen im Bereich zwischen +1 ‰ ... +15 ‰ SMOW und folgten keiner Normalverteilung. Geochemische Reaktionen im Aquifer können zu charakteristischen Veränderungen im $\delta^{18}O$ des gelösten Sulfats führen. Für den GWL 5 wurden durch die Pyritoxidation Sulfate mit $\delta^{18}O$ < +5 ‰ gebildet.
Bei der Oxidation von Pyriten werden je nach Wassersättigung des Sedimentes unterschiedliche Anteile an Sauerstoff aus dem Wasser ($\delta^{18}O$ ~ –9 ‰) und der Luft ($\delta^{18}O$ +23 ‰) eingebaut (Kap. 6.3.4). Der Anteil des $\delta^{18}O$ aus dem Wasser reicht von 25 % (ungesättigt) bis 75 % (gesättigt, anoxisch) (Lloyd 1968; Taylor et al. 1984a,b; Toran & Harris 1989).

Zur Bestimmung der unterschiedlichen Anteile des $\delta^{18}O_{SO4}$ wurden Referenzgeraden mit dem Isotopenbilanzmodell nach Taylor & Wheeler (1994) berechnet. Die $\delta^{18}O$-Werte wurden mit den Referenzgeraden in Abb. 6-18 graphisch dargestellt.
Nur ein Teil der Proben zeigte einen Anteil an ^{18}O aus dem Wasser > 25 % an, obwohl keine ungesättigten Verhältnisse vorlagen. Selbst in Sulfaten aus Kippenwässern (ungesättigte Zone) konnte Knöller (2000) Anteile des ^{18}O aus dem Wasser von 50 – 100 % feststellen. Für exponierte Bereiche des Aquifers, z.B. an Böschungen der Tagebaue, könnte dieser erhöhte Anteil an Luftsauerstoff teilweise erklärt werden. Proben mit $\delta^{18}O_{SO4}$ > +5 ‰ könnten durch Pyritoxidation mit Luftsauerstoff (Anteil Wasser < 25 %) oder durch isotopische Anreicherung bei der Sulfatreduktion gebildet worden sein (Fritz et al. 1989).

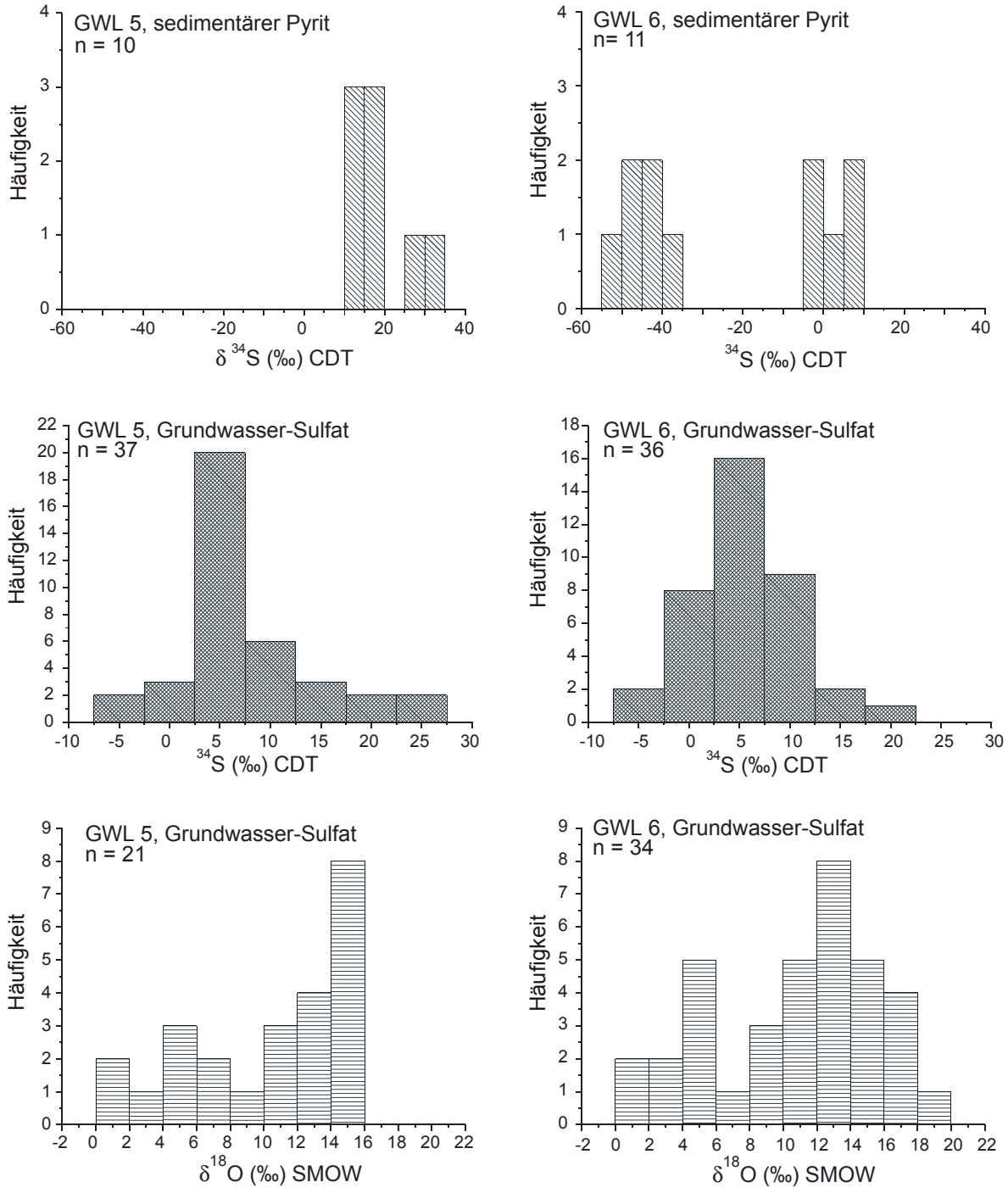


Abb. 6-17: Häufigkeitsverteilung der $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Werte des Grundwasser-Sulfats und sedimentärer Pyrite in den Grundwasserleitern GWL 5 und GWL 6.

Bei der Sulfatreduktion kommt es zu einer Anreicherung des schweren Isotops ($\delta^{34}S$, $\delta^{18}O$) im Restsulfat. Proben, die durch Sulfatreduktion beeinflusst wurden, müssten demzufolge höhere $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Werte als das Ausgangssulfat aufweisen. Das Ausgangssulfat kommt aus der Oxidation sedimentärer Pyrite im Aquifer. Aufgrund der sehr variablen Isotopenzusammensetzung der sedimentären Pyrite werden Ausgangssulfate mit unterschiedlichen $\delta^{34}S$- aber sehr ähnlichen $\delta^{18}O$-Werten (ca. –4 ‰) gebildet.

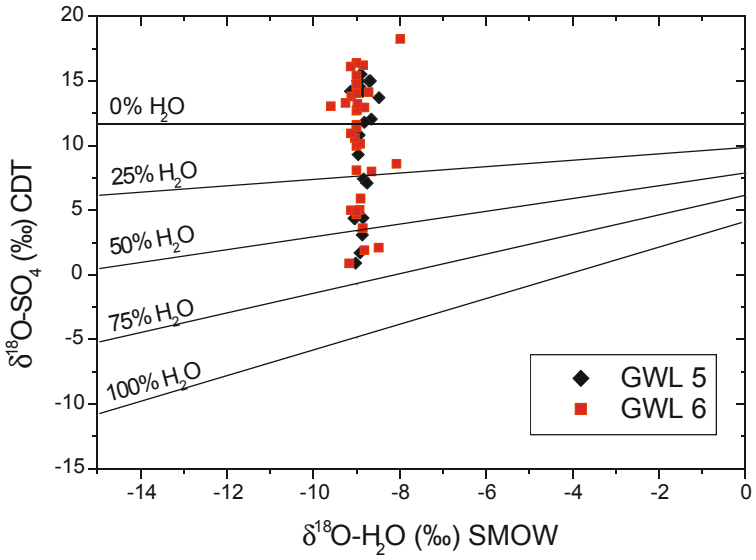


Abb. 6-18: Abhängigkeit des $\delta^{18}O_{SO4}$ vom $\delta^{18}O_{H2O}$ im GWL 5 und GWL 6 bei der Bildung von Sulfat durch Sulfidoxidation. Linien repräsentieren unterschiedliche Anteile an $^{18}O_{H2O}$ beim Einbau in das Sulfation. Grundlage Isotopenbilanz mit ε_{O2} = -11.4 ‰, ε_{H2O} = +4.1 ‰ (nach Taylor & Wheeler 1994).

Primäres Sulfat aus der Pyritverwitterung mit $\delta^{18}O_{SO4}$ von –5 ‰ ... –4 ‰ wurde z.B. von Knöller (2000) in Kippenwässern des Tgb. Cospuden nachgewiesen. Im Grundwasser des GWL 5 konnten solche isotopisch leichten Sulfate nicht bestimmt werden. Lösliche Sulfate aus dem Aquifersediment mit $\delta^{18}O_{SO4}$-Werten von –3.5 ‰ waren jedoch ein Beleg für die Existenz dieses primären Sulfats aus der Pyritverwitterung im GWL 5.

Für die isotopische Zusammensetzung des Grundwasser-Sulfats spielt die Sulfatreduktion eine entscheidende Rolle. Dies konnte in Gebieten des Braunkohlenbergbaus u.a. von Knöller (2000) für oberflächennahe Aquifere und von Schulte et al. (1997) für tiefe Aquifere bestätigt werden. Da für den GWL 5 von isotopisch variablen Schwefelquellen ausgegangen werden muss, können in diesem Aquifer mehrere parallele Reduktionstrends ablaufen, die sich im $\delta^{34}S$ des Ausgangssulfats unterscheiden. Für den in Abb. 6-19 postulierten Reaktionstrend (B) wird ein Ausgangssulfat mit $\delta^{34}S$ +5 ‰ angenommen, während für den Reduktionstrend (A) isotopisch deutlich leichtere Sulfate wahrscheinlich sind.
Bei der Sulfatreduktion wird organischer Kohlenstoff ($\delta^{13}C$ ca. –25 ‰ PDB) als Elektronendonator zu CO_2 mineralisiert. Damit wird isotopisch leichter Kohlenstoff in den DIC-Pool des Grundwassers eingetragen. Veränderungen im $\delta^{13}C_{DIC}$ zu Werten < –15 ‰ PDB, dem Durchschnittswert für "normale" Grundwässer, konnten als indirekter Hinweis auf Sulfatreduktion herangezogen werden. Für einige Proben vorliegende $\delta^{13}C_{DIC}$-Werte wurden in die Abb. 6-19 einbezogen. Daraus ließ sich erkennen, dass alle Proben mit isotopischen Anreicherungen im Sulfat auch negativere $\delta^{13}C_{DIC}$-Werte < –15 ‰ PDB aufwiesen.

Da auch Proben zwischen den zwei postulierten Reduktionstrends an $\delta^{13}C$ abgereichert waren, sind Mischungsprozesse im Aquifer wahrscheinlich.

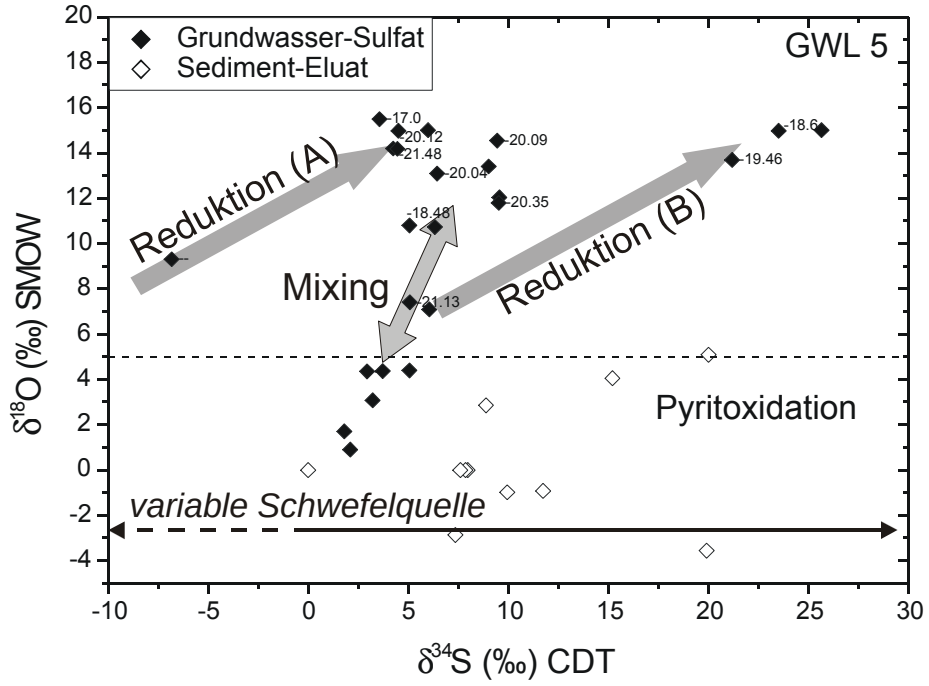
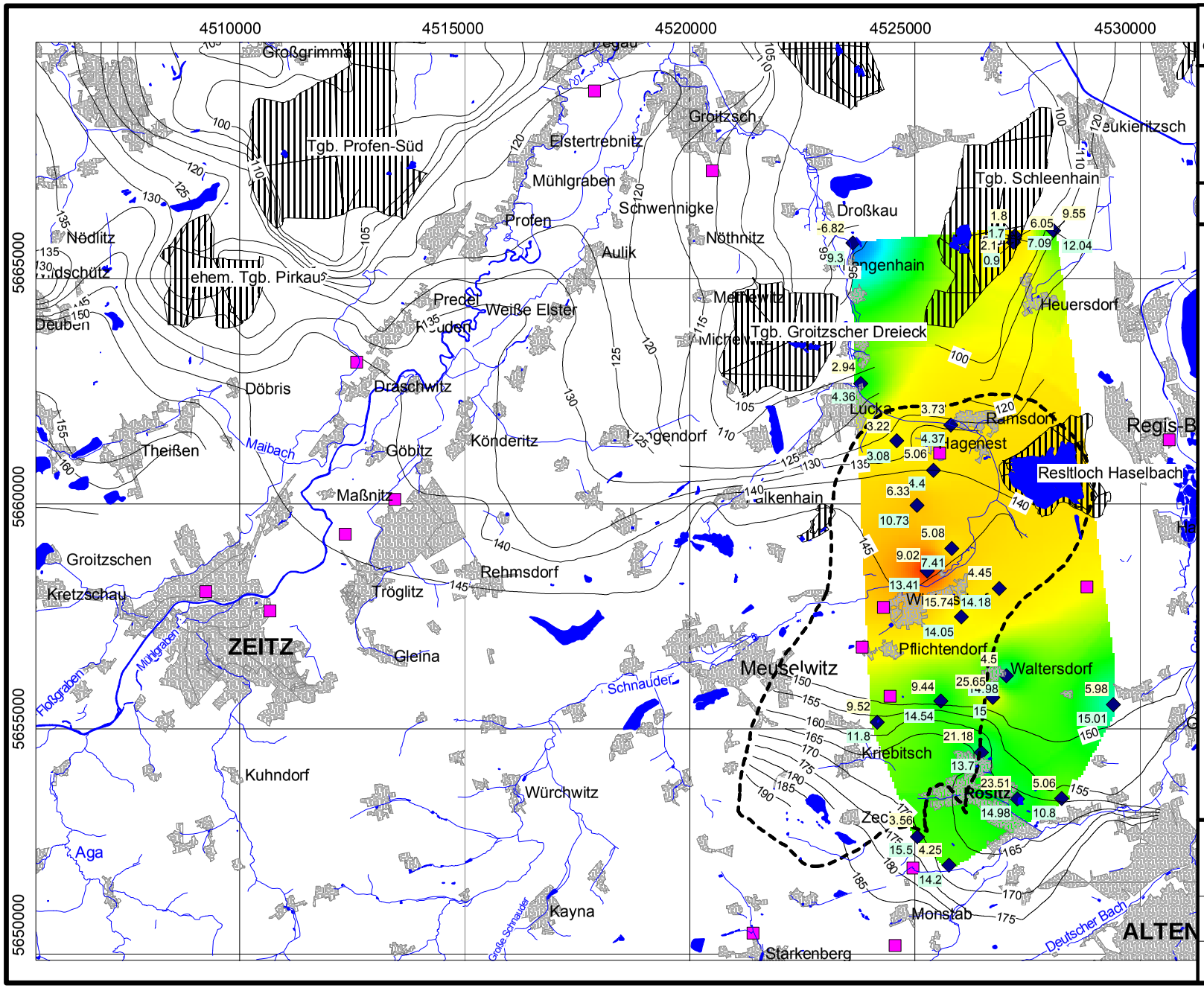


Abb. 6-19: $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Werte des Grundwasser-Sulfats und des löslichen Sulfats aus dem Aquifersediment des GWL 5. Isotopische Veränderungen durch Sulfatreduktion (Reduktion A und B) sowie Mixing. Ausgangssulfat stammt aus ^{34}S-variablen Schwefelquelle, vermutlich sedimentärer Pyrit. Zahlenwerte an den Datenpunkten geben die $\delta^{13}C_{DIC}$-Gehalte in ‰ PDB an.

Die räumliche Verteilung der $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Werte im regionalen Fließfeld ist in Karte 6-3 dargestellt. Im Abstrom des ehem. Teerverarbeitungswerkes Rositz waren im gelösten Sulfat deutliche isotopische Anreicherungen im $\delta^{34}S$ (max. +25.6 ‰ CDT, GWM 12192) feststellbar, die auf mikrobiellen Schadstoffabbau sulfatreduzierender Bakterien zurückzuführen waren. Im Grundwasseranstrom bzw. abseits des Schadstoffplumes war das gelöste Sulfat im $\delta^{34}S$ isotopisch deutlich leichter. Die $\delta^{18}O$-Werte hingegen zeigten allgemein relativ hohe Werte um +15 ‰ SMOW, unabhängig von der Kontamination des Grundwassers. Wie von Fritz et al. (1989) festgestellt wurde, streben die $\delta^{18}O$-Werte bei der Sulfatreduktion einen konstanten Wert an, der abhängig ist von $\delta^{18}O$ des Wassers und dem Anreicherungsfaktor $\varepsilon^{18}O_{SO4\text{-}H2O}$ ~ 30 ‰. Bei einem $\delta^{18}O_{H2O}$ von ~ –9 ‰ und einem angenommenen konstanten $\delta^{18}O_{SO4}$ von +15 ‰ würde der $\varepsilon^{18}O_{SO4\text{-}H2O}$ ~ 24 ‰ betragen. Damit würde der Anreicherungsfaktor etwas unterhalb des von Fritz et al. (1989) angegebenen Wertes von 30 ‰ liegen. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass das isotopische Gleichgewicht zwischen Sulfat und Wasser in diesem System noch nicht erreicht ist.

Im Absenkungsbereich des ehem. WW Hagenest waren im gelösten Sulfat deutlich leichtere $\delta^{18}O$-Werte bis +3 ‰ SMOW zu beobachten. Durch Pyritoxidation eingetragenes Sulfat mit $\delta^{18}O$-Werten um –4 ‰ vermischt sich hier mit dem anströmenden Grundwasser ($\delta^{18}O_{SO4}$ ~ +10 ‰).

Im östlichen Randbereich des Tgb. Schleenhain zeigt sich im gelösten Sulfat auf einem Fließweg von ~ 1000 m (GWM 31056 – Quelle 522) eine deutliche isotopische Veränderung von $\delta^{34}S$ +9.5 ‰ , $\delta^{18}O$ +12 ‰ im unverritzten Grundwasserleiter zu $\delta^{34}S$ +2.1 ‰ , $\delta^{18}O$ +0.9 ‰ in Quellaustritten der Böschung. Diese isotopische Entwicklung wird durch zunehmenden Einfluss der Pyritoxidation bei abnehmender Sulfatreduktion bestimmt.



Industrielle Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 6-3:
Konzentration und Isotopie des Sulfats im Grundwasser des GWL 5

Legende

- GWM
- ehem. Wasserfassung
- Grundwasserisohypse mNN (nach MIBRAG 2001)
- Einzugsgebiet ehem. WW Hagenest
- Tagebau
- See
- Ortschaft

SO4 (mg/l)

- 50
- 250
- 500
- 750
- 1.000
- 1.250
- 1.500
- 1.750
- 2.000

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Thüringen, Sachsen (2000)
- MIBRAG (2001)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem: Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

6.6.2 Isotopie des Sulfats im GWL 6

Die Schwankungsbreite der $\delta^{34}S$-Werte im gelösten Grundwasser-Sulfat erstreckte sich über einen Bereich von –3 ‰ ... +21 ‰ CDT. Das Häufigkeitsmaximum lag bei ~ +5 ‰ CDT und stimmte damit mit dem GWL 5 recht gut überein (Abb. 6-17). Die Werte folgten nahezu einer Normalverteilung. Im Vergleich dazu wurden in den sedimentären Pyriten $\delta^{34}S$-Gehalte im Bereich zwischen –50 ‰ ... +5 ‰ CDT festgestellt. Diese Variationsbreite konnte für das Grundwasser-Sulfat nicht bestätigt werden. Ursachen hierfür könnten in der isotopischen Variabilität der pyritischen Sulfatquelle, der sekundären isotopischen Anreicherung oder der Zumischung einer weiteren Sulfatquelle (z.B. Zechstein-Sulfat) liegen.

Die $\delta^{18}O$-Werte des gelösten Sulfats schwankten zwischen +1 ‰ ... +18 ‰ SMOW. Aus der Häufigkeitsverteilung ließ sich ein Maximum bei +13 ‰ SMOW erkennen, ohne dass die Werte normalverteilt waren.
Für die Pyritoxidation waren im Vergleich zum GWL 5 veränderte Reaktionsmechanismen zu berücksichtigen, da der GWL 6 technologisch bedingt kaum direkt im Tagebau exponiert ist. Grundwasserproben mit $\delta^{18}O_{SO4}$ < +5 ‰ wurden der Pyritoxidation zugeordnet. Nur wenige Grundwasserproben, die zumeist aus Sümpfungsbrunnen bzw. aus dem Absenkungsbereich des ehem. WW Hagenest stammten, wiesen eine der Pyritoxidation entsprechende Isotopensignatur auf. Nach der Stilllegung des WW Hagenest im Jahre 1998 und der Flutung des Restlochs Haselbach werden derzeit im GWL 6 steigende Wasserstände beobachtet (mündl. Mitt. Mann 2001). Als Folge davon werden die Oxidationsprodukte der Pyritverwitterung im ansteigenden Grundwasser gelöst.

Anhand der gemessenen $\delta^{18}O_{SO4}$-Werte war nur für wenige Grundwasserproben ein Anteil an ^{18}O aus dem Wasser > 25 % im Sulfat feststellbar (Abb. 6-18). Luftsauerstoff hingegen konnte in die Aquifersedimente des GWL 6 nur lokal über trockene Filterstrecken stark abgesenkter Brunnen eindringen.
Die teilweise stark erhöhten $\delta^{18}O_{SO4}$-Werte sind, wie bereits für den GWL 5 festgestellt wurde, die Folge von isotopischen Anreicherungen durch die Sulfatreduktion. Ausgehend von Pyriten, die in ihren $\delta^{34}S$-Gehalten eine sehr variable Schwefelquelle darstellen, bildete sich durch Pyritoxidation Sulfat mit charakteristischen $\delta^{18}O$-Werten von –2 ‰ ... –4 ‰. Wie in Abb. 6-20 angedeutet wird, war das residuale Sulfat durch Sulfatreduktion isotopisch angereichert. Die für einzelne Proben gemessenen $\delta^{13}C_{DIC}$-Werte < –15 ‰ PDB waren ein indirekter Hinweis auf Sulfatreduktion.

Ausgehend von der Vermutung, dass es bei hydraulischer Entlastung im GWL 6 zum Aufstieg von sulfatreichen Grundwässern aus dem Zechstein (GWL II) kommen kann, wurde in Abb. 6-20 das Zechstein-Sulfat als zusätzliche Quelle gekennzeichnet. Durch den Grundwasseraufstieg aus dem GWL II kam es zu Mischungen unterschiedlich mineralisierter Grundwässer. Es erscheint deshalb wenig wahrscheinlich, dass einzelne Proben, die direkt im Zechstein-Feld lagen, 100 % Zechstein-Isotopensignatur aufweisen. Die $\delta^{13}C_{DIC}$-Werte einiger Proben waren < –15 ‰ PDB und bestätigen damit eine Mineralisation organischen Kohlenstoffs durch sulfatreduzierende Bakterien.
Durch Mischung mindestens zweier unterschiedlicher Sulfat-Quellen entstanden Mischwässer. Die Isotopie des Sulfats dieser Mischwässer wird durch die isotopische Zusammensetzung der Sulfat-Quellen bestimmt. Während primäres Sulfat und Zechstein-Sulfat vergleichsweise einfach zu definieren waren, veränderte sich die isotopische Zusammensetzung des Grundwasser-Sulfats durch Sulfatreduktion.

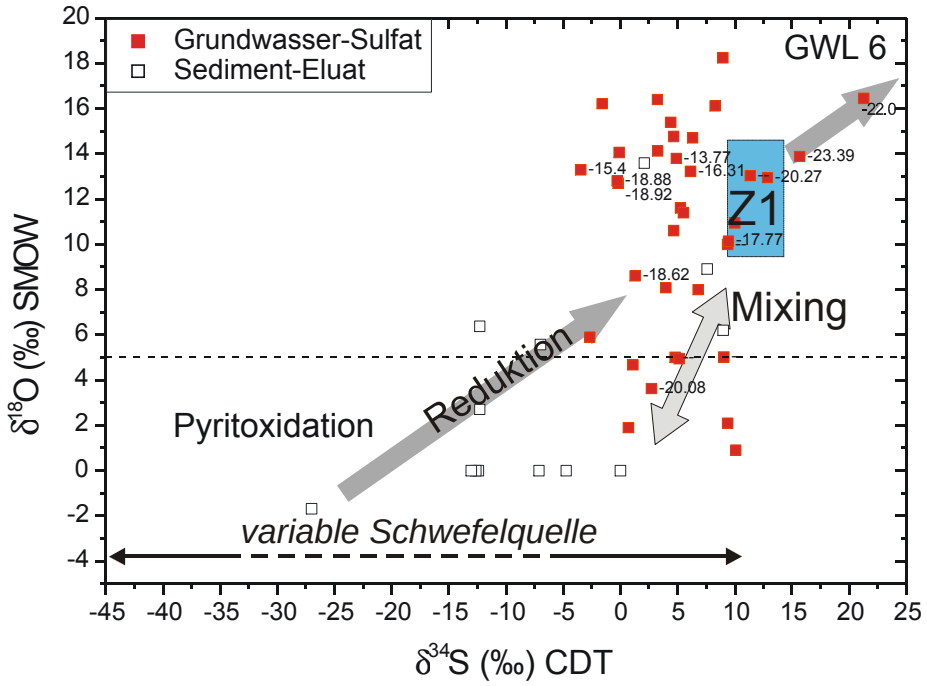
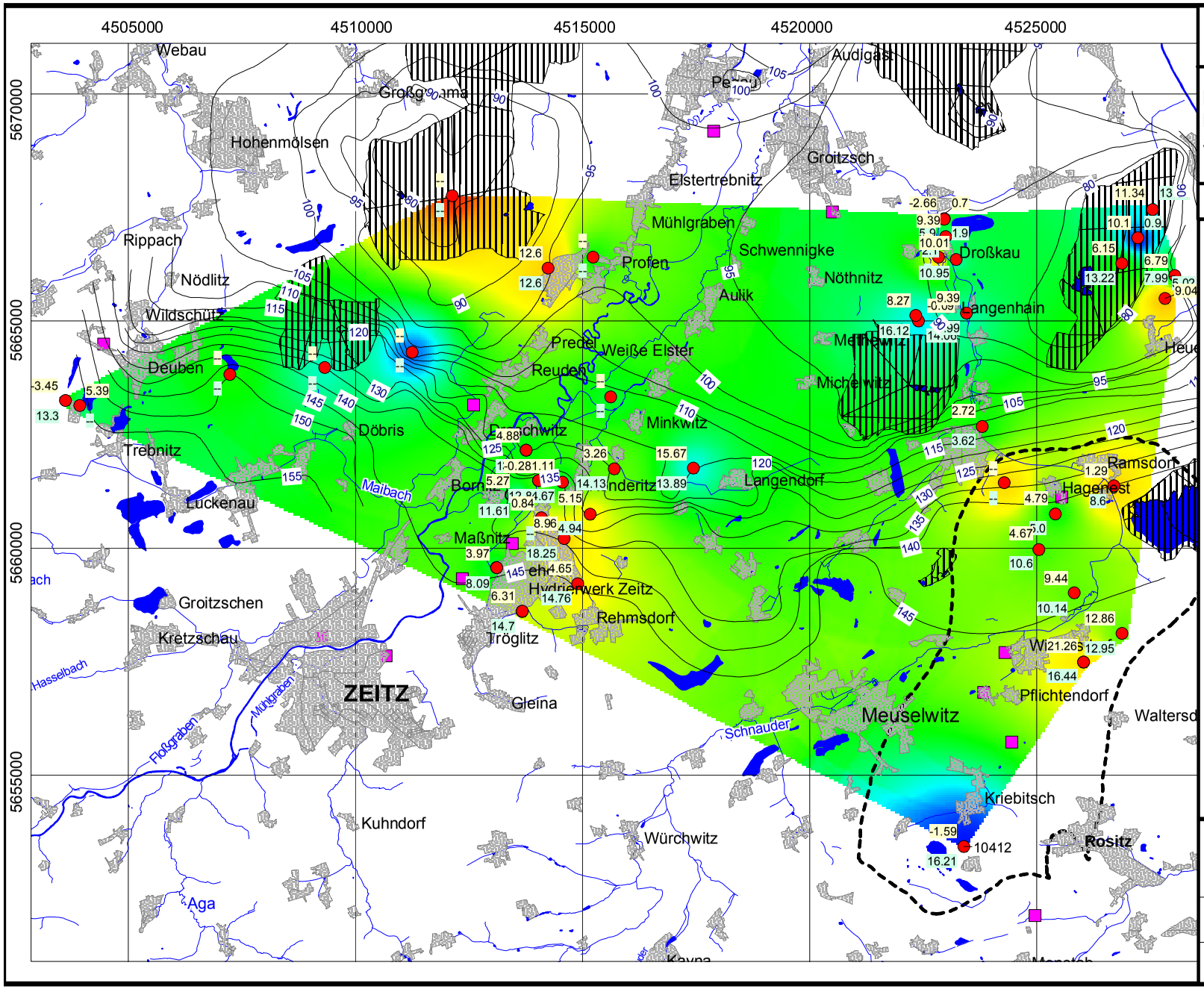


Abb. 6-20: $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Werte des Grundwasser-Sulfats und des löslichen Sulfats aus dem Aquifersediment des GWL 6. Isotopische Veränderungen durch Sulfatreduktion und Mischung mit Zechstein-Sulfat (Z1-Feld). Ausgangssulfat für die Sulfatreduktion stammt aus ^{34}S-variablen Schwefelquellen, vermutlich sedimentärer Pyrit. Zahlenwerte an den Datenpunkten geben die $\delta^{13}C_{DIC}$ Gehalte in ‰ PDB an.

Für die Proben unterhalb des Zechstein-Feldes zwischen dem angedeuteten Reduktionstrend und dem Mixing wird eine Zumischung von Zechstein-Sulfat angenommen. Dies betraf GWM im Raum Hagenest, z.B. GWM 40994, 41194, aber auch einzelne Sümpfungsbrunnen im Tgb. Schleenhain (GWM 5681).
Auch für die Probe aus dem GWL 6 im Abstrom der ehem. Schwelerei Profen (UFZ 301-62) wurde eine Zechstein-Isotopensignatur bestimmt.
Zusammensetzungen des gelösten Sulfats im $\delta^{34}S$ von +7 ‰ ... +10 ‰ CDT und im $\delta^{18}O$ von +6 ‰ ... +10 ‰ konnten im GWL 6 als Indikation für den Aufstieg von Zechstein-Wässern genutzt werden. Eine genaue quantitative Abschätzung der Mischwasseranteile ist aufgrund der isotopischen Variabilität des Pyrits nicht möglich.

Aus der räumlichen Verteilung der $\delta^{34}S$- und $\delta^{18}O$-Werte im regionalen Fließfeld des GWL 6 (Karte 6-4) ergaben sich deutliche Hinweise für Einflüsse durch Pyritoxidation, z.B. im Absenkungsbereich des ehem. WW Hagenest (GWM 41394) und im Bereich des Tgb. Schleenhain (Probe 611). Dort konnte anhand von $\delta^{18}O$-Werten im gelösten Sulfat ≤ +5 ‰ ein Eintrag von Reaktionsprodukten aus der Pyritverwitterung nachgewiesen werden. Durch hydraulische Entlastung im GWL 6 kann es zum Aufstieg von Grundwässern aus dem Zechstein-Aquifer kommen. Dies wurde für den Quellaustritt aus dem GWL 6 an der Sohle des Tgb. Schleenhain (Probe 620) und den Sümpfungsbrunnen 5681 nachgewiesen. Die zahlreichen Förderbrunnen des ehem. WW Hagenest erzeugten während der Betriebsphase einen ausgedehnten Absenktrichter, so dass auch für diese Brunnen mit der Förderung von Zechsteinwasser zu rechnen war. Heutige Isotopenwerte des gelösten Sulfats wurden jedoch durch den Eintrag von isotopisch leichtem Sulfat aus der Pyritverwitterung überlagert. Durch Sulfatreduktion erfolgte eine sekundäre isotopische Anreicherung im Sulfat und eine Freisetzung von isotopisch leichtem DIC.



Industrielle Beeinflussung des Grundwassers durch Phenole und Sulfat in der Region Zeitz

Karte 6-4:
Konzentration und Isotopie des Sulfats im Grundwasser des GWL 6

Legende

Datenbasis:
- ATKIS-Daten Landesvermessungsämter Sachsen-Anhalt, Thüringen, Sachsen (2000)
- MIBRAG (2001)

UFZ Leipzig/Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
MLU Halle/Wittenberg, Institut f. Geol. Wissenschaften

Koordinatensystem: Gauss-Krüger, Bessel

Rehberg (2002)

6.7 Phenole im Grundwasser des GWL 6 und Oberflächenwasser

Einzelne Grundwasserproben aus dem GWL 6 wurden auf schwelwassertypische Phenole (vgl. Kap. 5) untersucht. Die Konzentrationen der schwelwassertypischen Verbindungen (Phenol, Kresole, C2-C3-Alkylphenole) lagen in der Summe meist unterhalb von 50 µg/l. Die mit 53 µg/l höchste Konzentration konnte im GWL 6 im direkten Grundwasserabstrom der Schwelerei Profen in einem Kurzpumpversuch der Bohrung UFZ 301 bestimmt werden. Darüber hinaus konnten auch in anderen Proben geringe Spuren von schwelwassertypischen Verbindungen im Konzentrationsbereich von 1-20 µg/l (Tab. 6-4) festgestellt werden.

Tab. 6-4: Konzentration schwelwassertypischer Phenole im Grundwasser des GWL 6 sowie im Oberflächenwasser der Weißen Elster. Angaben in µg/l. nn = nicht nachweisbar, nb = nicht bestimmt.

	Elster 1	**Elster 2**	**17385**	**17417**	**17366**	**19248**	**20297**	**21538**	**UFZ 101-62**	**UFZ 301-62**
	µg/l	**µg/l**	**µg/l**	**µg/l**	**µg/l**	**µg/l**	**µg/l**	**µg/l**	**µg/l**	**µg/l**
Phenol	42.69	nn	nn	nn	nn	6.52	5.74	5.89	nb	32.1
Kresole	0.15	20	0.22	0.18	nn	8.75	7.42	0.14	nb	8
2-EP	0.06	nb	nb	nb	nb	0.27	nn	nn	nb	1
4-EP	nn	nb	nb	nb	nb	1.06	nn	nn	nb	0.8
2,5-DMP + 2,4-DMP	0.02	27	nn	nn	nn	1.87	0.08	nn	nb	4.4
2.6-DMP	nb		nb	nb	nb	nb	nb	nb	nb	4.1
2,3-DMP	nn		nn	nn	nn	nb	1.09	nn	nb	0.5
3,5 DMP	nb		nb	nb	nb	0.99	0.06	4.15	nb	nn
3,4-DMP	nn		nn	nn	nn	0.38	0.02	nn	nb	nn
C3-Phenole	nb	nb	nb	nb	nb	2.46	0.1	0.29	nb	2.1
Summe	**42.92**	**47**	**0.22**	**0.18**	**0**	**22.3**	**14.51**	**10.47**	nb	**53**
Phenol-Index	nb	nb	nb	nb	nb	nb	nb	nb	**180**	**340**

In unmittelbarer Nähe der Versenkungsbrunnen der Schwelerei Profen konnte in der Bohrung UFZ 101 und UFZ 301 bei einem Kurzpumpversuch im GWL 6 ein erhöhter Phenol-Index-Wert bestimmt werden. Da der Phenol-Index auch auf andere Verbindungen wie z.B. Huminstoffe reagiert, ist dieser Parameter nur wenig belastbar.

In den untersuchten Proben des Oberflächenwassers der Weißen Elster waren geringe Gehalte an schwelwassertypischen Phenolen messbar. Da die einzelnen Proben bei unterschiedlicher Wasserführung entnommen wurden, ist eine Veränderung in den Phenolhomologen von Phenol (Elster1 = Niedrigwasser) zu Kresolen und 2,5-/2,4-DMP (Elster2 = Hochwasser) als Funktion der Löslichkeit erklärbar. Durch den Nachweis von Phenolen im Oberflächenwasser konnte bestätigt werden, dass Schwelwässer in die Weiße Elster gelangten und noch heute nachweisbar sind.

Neben Spuren schwelwassertypischer Phenole aus dem GWL II konnten im östlichen Untersuchungsgebiet Phenole aus der Altlast "Teerverarbeitungswerk Rositz" identifiziert werden. Davon betroffen war jedoch überwiegend der GWL 5 im Grundwasserabstrom des Werkes.
Im Raum Trebnitz (Schwel Vollert) wurde durch Eccarius (2000) ein punktueller Phenolaustrag aus der Schwelwasserdeponie Vollert in das Grundwasser beschrieben. Die Austräge waren jedoch mit Anteilen von 0.5 – 1 % kontaminiertem Seewasser im Grundwasser zu vernachlässigen.

Braunkohle und sedimentäre organische Substanz (SOM) sind nach Untersuchungen von van Heemst et al. (1999) und Ioppolo-Armanios et al. (1995) natürliche Phenolquellen. Für das Grundwasser des UG wird ein geogener Hintergrundwert von ≤ 5 µg/l Gesamtphenol angenommen.

6.8 Schlussfolgerungen

Die im Grundwasser des liegenden tertiären Aquifers (GWL 6) am Standort Profen nachgewiesenen Konzentrationen schwelwassertypischer Phenole lagen ausnahmslos im Spurenbereich. Die erhöhten Phenol-Index-Werte konnten nicht durch SPME-GC-MS-Messungen nach der Methode von Licha et al. (2001a,b) bestätigt werden. In allen anderen Proben waren ebenfalls nur Spuren von Phenol und verschiedenen Alkylphenolen nachzuweisen. Damit findet unter den gegenwärtigen Randbedingungen

- Druckpotenzialdifferenz GWL 6 – GWL II (Profen 0 m, Trebnitz 59 m)
- Grundwasserdynamik im GWL II (Fließrichtung NE)
- Ausdehnung der Schadstoffplumes im GWL II (min. 1160 m vom Eintrag)

keine Kontamination des GWL 6 durch den Aufstieg kontaminierter Grundwässer aus dem GWL II statt. Dies bedeutet jedoch nicht, dass ein hydraulischer Aufstieg von bisher unkontaminierten sulfatreichen Grundwässern aus dem GWL II auszuschließen ist. Starke hydraulische Entlastungen und steigende Sulfat-Gehalte im Grundwasser des GWL 6 waren Anlass für Isotopenuntersuchungen an Sediment- und Grundwasserproben der Aquifere GWL II, GWL 6 und GWL 5. Im Vergleich der charakteristischen Isotopengehalte konnten unter Berücksichtigung geochemischer Prozesse die für jeden Aquifer wirkenden Sulfat-Quellen identifiziert werden.

Im **GWL 5** sind sedimentäre Disulfide (Pyrit) die Hauptquelle des Sulfats. Zumischung von Grundwasser aus dem Zechstein-Aquifer (GWL II) durch hydraulischen Aufstieg wurde nicht festgestellt. Einträge in das Grundwasser durch Niederschläge und landwirtschaftliche Düngung spielten aufgrund der vergleichsweise geringen Sulfat-Konzentration im Niederschlag und der Überdeckung des Aquifers kaum eine Rolle. Auch in den Neubildungsbereichen des Aquifers im Süden des Untersuchungsgebietes konnten keine typischen Isotopensignaturen, die auf Düngung hinweisen, festgestellt werden.

Durch die weiträumige Teilentwässerung des Aquifers infolge wasserwirtschaftlicher Nutzung, bergbaulicher Wasserhaltung und offene Strecken des Altbergbaus wird die Oxidation sedimentärer Pyrite ausgelöst, die zum Eintrag von Fe, SO_4 und H^+ in das Grundwasser führt. Lokal begrenzt infiltrieren saure Kippenwässer (Kippe Phönix-Ost) in den GWL 5. Die Hydrochemie war durch einen charakteristischen Anstieg der SO_4- und Fe-Konzentrationen bei gleichzeitig sinkenden HCO_3-Konzentrationen und sinkendem pH geprägt. Isotopenuntersuchungen an sedimentären Disulfiden, am löslichen Sulfat des Aquifersedimentes sowie des Grundwasser-Sulfats bestätigten die hydrochemischen Trends. Einige Proben zeigten für Pyritoxidation charakteristische $\delta^{18}O_{SO4}$-Werte < +5 ‰ SMOW, während der $\delta^{34}S_{SO4}$-Wert durch die Variabilität der sedimentären Disulfide zwischen –10 ‰ ... +20 ‰ CDT schwankte. Die Isotopengehalte der Sulfate aus Eluatproben lagen ohne Ausnahme in dem für die Pyritoxidation typischen Bereich. Die Mehrzahl der Proben war als Folge der Sulfatreduktion isotopisch schwerer als das primäre aus der Pyritoxidation gebildete Sulfat, da die Sulfatreduktion zur isotopischen Anreicherung im $\delta^{34}S$ und $\delta^{18}O$ des Restsulfats führt. Dadurch wird das primäre Isotopensignal des aus der Sulfidoxidation stammenden Sulfats verändert. Sulfatreduzierende Bakterien verwenden zur Energiegewinnung organischen Kohlenstoff, der mineralisiert wird und zu einer Veränderung

des $\delta^{13}C_{DIC}$ zu Werten < –15 ‰ PDB führt. Die an einigen Proben gemessenen $\delta^{13}C_{DIC}$-Werte bis zu –20 ‰ PDB waren ein weiterer Beweis für Sulfatreduktion.

Veränderungen in der Konzentration hydrochemischer Leitparameter Fe, SO_4 und der Isotopengehalte (Karte 6-1, Karte 6-3) im Grundwasserfließpfad sind die Folge von:

- hydraulischen Veränderungen
  - bergbauliche Wasserhaltung (Tgb. Schleenhain)
  - wasserwirtschaftliche Nutzung (WW Hagenest)
- anthropogenen Stoffeinträgen ins Grundwasser
  - organische Schadstoffe (ehem. Teerverarbeitungswerk Rositz)
  - saure Kippenwässer (Halde Phönix-Ost)

Für den **GWL 6** konnte der Grundwasseraufstieg aus dem Zechstein-Aquifer (GWL II) in Bereichen mit hydraulischer Entlastung nachgewiesen werden. Als weitere Hauptquelle spielen sedimentäre Disulfide (Pyrite) eine große Rolle. Niederschläge, landwirtschaftliche Düngung oder die Braunkohle sind, wie bereits für den GWL 5 festgestellt wurde, kaum von Bedeutung.
Wasserwirtschaftliche Nutzung und bergbauliche Wasserhaltung führten zur Druckentlastung und Teilentwässerung des Aquifers auf lokalen Hochlagen. Die hydrochemischen Trends waren dem GWL II ähnlicher als dem GWL 5. Eindeutige hydrochemische Belege für den vermuteten Grundwasseraufstieg fanden sich jedoch nicht. Erst durch die Ergebnisse der Isotopenuntersuchungen zeigte sich, dass nur wenige Grundwasserproben die für die Sulfidoxidation typischen $\delta^{18}O_{SO4}$-Werte < +5 ‰ SMOW aufwiesen. Die $\delta^{34}S_{SO4}$-Werte schwankten zwischen –3 ‰ ... +21 ‰ CDT. In einigen Proben südlich des ehem. WW Hagenest, in Liegendwasserdurchbrüchen und Sümpfungsbrunnen des Tgb. Schleenhain sowie im Raum Profen konnten anhand der Isotopensignaturen Zumischungen von Grundwasser aus dem GWL II belegt werden. Durch Mischungen aus der Sulfat-Freisetzung isotopisch variabler Disulfide (–50 ‰ ... +5 ‰ CDT) sowie dem Aufstieg von Grundwässern aus dem GWL II (+10.6 ‰ CDT) entsteht ein Grundwasser-Sulfat mit isotopischer Mischzusammensetzung. Gleichzeitig verringert die auch im GWL 6 wirkende Sulfatreduktion die Sulfat-Konzentrationen im Grundwasser, was zur isotopischen Anreicherung des Restsulfats führt. Die damit verbundenen Veränderungen im $\delta^{13}C_{DIC}$ konnten durch Proben mit $\delta^{13}C_{DIC}$ von –23 ‰ ... –18 ‰ PDB ebenfalls belegt werden. Auch anhand der gemessenen Redoxpotenziale (bis –0.1 V) und dem Nachweis von H_2S (aq) bis 5 mg/l konnte Sulfatreduktion bestätigt werden.

Im GWL 6 führt die Grundwasserabsenkung zu lokaler Sulfidoxidation. Gleichzeitig wird durch Druckentlastung ein hydraulischer Grundwasseraufstieg aus dem GWL II ermöglicht. Als Folge beider Prozesse wird ein Anstieg der Sulfat-Konzentration im Grundwasser beobachtet. Sowohl im Vorfeld der Tagebaue als auch im Absenkungsbereich der Wasserfassungen wurde in der Vergangenheit das Ausmaß der Pyritoxidation im teilentwässerten Aquifer deutlich überschätzt (Kittler & Gräber 1995; Gräber 1999). So fand auch Wisotzky (1994) im teilentwässerten, unverritzten Vorfeld des Tgb. Garzweiler I keine Anzeichen für Pyritoxidation.

Bis zum Ende dieser Untersuchungen ist es zu keiner nennenswerten Kontamination des wasserwirtschaftlich bedeutsamen Aquifers GWL 6 durch den Aufstieg hoch kontaminierter Grundwässer aus dem Zechstein-Aquifer (GWL II) gekommen. Dennoch zeigen die Ergebnisse, dass ein Aufstieg möglich ist und unter bestimmten hydraulischen Randbedingungen tatsächlich stattfindet. Da die zukünftige Entwicklung der Wasserstände und auch der Grundwasserdynamik sowohl im GWL 6 als auch im GWL II entscheidend

durch den voranschreitenden Tagebaubetrieb und der damit verbundenen Wasserhaltung geprägt wird, muss dieses Problem weiterhin berücksichtigt werden.

7 Zusammenfassung

Die tiefen Grundwasserleiter der Region Zeitz wurden als Folge jahrzehntelanger industrieller Nutzungen durch Bergbau, carbochemische Industrie und Wasserwirtschaft auf lange Zeit durch Schadstoffeinträge und hydraulisch induzierte Prozesse beeinflusst.
Die Versenkung von 5 Mio. m^3 hoch kontaminierter Schwelwässer in den Zechstein-Aquifer (GWL II) im Zeitraum von 1940 bis 1975 zu einer erheblichen Kontamination des Grundwassers und des Zechstein-Plattendolomits bzw. Riffgesteins durch Phenol und C1-C3-Alkylphenole (Kresole, Dimethylphenole, Ethylphenole, Trimethylphenole). Dieses bisher ignorierte Problem wurde erstmalig durch das gezielte Abteufen von sechs Forschungsbohrungen an den Schadstoffquellen und im direkten Grundwasserabstrom untersucht. Zwischen den beiden ehem. Schwelereistandorten Profen und Deuben/Trebnitz wurden deutliche Unterschiede im geologischen Untergrund aber auch in der Schadstoffverteilung und im Schadstofftransport festgestellt.
Am Standort Profen wurden die Abwässer in ein 110 m mächtiges poröses Bryozoen-Riff (Porosität max. 24.5 %) verpresst. Das erstmalig durchteufte Riff sitzt einem Schiefer des Grundgebirges auf und wird durch 56 m Lockersedimente des Tertiärs und Quartärs überlagert. Am Standort Deuben/Trebnitz hingegen wurden die Abwässer in den stark klüftigen ~ 20 m mächtigen Plattendolomit (Porosität max. 3 %) versenkt. Das Liegende bildete hier der Graue Salzton, die hangende Schichtenfolge verwitterter Unterer Buntsandstein (10 – 22 m) sowie Tertiär/Quartär (80 – 90 m). Trotz lithologischer und struktureller Unterschiede zwischen beiden Standorten ergaben Datenloggermessungen der Wasserstände, dass beide Standorte nicht nur ähnliche Druckpotenziale, sondern im kontinuierlichen Anstieg der Wasserstände auch ein gleichartiges hydraulisches Verhalten aufwiesen. Im Vergleich zu deutlich höheren Wasserständen von 1944 ist von einer Entspannung zwischen 31 – 35 m auszugehen, die bei der Einstellung natürlicher Verhältnisse ausgeglichen wird. Die Grundwasserfließrichtung ist an beiden Standorten nach NE.

Durch die stark unterschiedlichen Löslichkeiten der 17 untersuchten phenolischen Einzelverbindungen kommt es im Grundwasserfließpfad zu einer chromatographischen Auftrennung des Plumes als Folge unterschiedlicher Mobilität und Sorptionseigenschaften. Dies führte zu charakteristischen Verschiebungen in den Molaren Verhältnissen der Isomeren-Gruppen zum Gesamtphenol in Abhängigkeit von der Durchströmung des Gebirges. In hydraulisch aktiven Zonen (Zuflussbereiche) war meist eine Abnahme und in hydraulisch inaktiven Zonen eine Zunahme des Phenolanteils am Gesamtphenol zu beobachten. Phenol war aufgrund der höchsten Löslichkeit die generell mobilste Verbindung gefolgt von Kresolen.

Die maximalen Gesamtphenol-Konzentrationen im Riffgestein Profen verdreifachten sich in Richtung des Grundwasserabstroms von 10200 µg/kg (UFZ 101, Quelle) auf 30500 µg/kg (UFZ 301, Abstrom). An der Schadstoffquelle war das Gestein an Phenol verarmt. Hier bildeten Kresole den Hauptanteil am Gesamtphenol im Gestein. Im Abstrom war das Aquifergestein überwiegend durch Phenol kontaminiert. Im Grundwasser erhöhten sich die Gesamtphenol-Konzentrationen im Fließpfad von 9300 µg/l auf 312000 µg/l.

Im Plattendolomit von Deuben/Trebnitz war ein umgekehrter Trend zu beobachten. Hier verringerten sich die maximalen Gesamtphenol-Konzentrationen in Richtung des

Grundwasserabstroms von 15200 µg/kg (UFZ 401, Quelle) auf 7600 µg/kg (UFZ 601, Abstrom). Während an der Schadstoffquelle Phenol dominierte, bildeten im Abstrom Kresole und Dimethylphenole den Hauptanteil am Gesamtphenol im Gestein. Im Grundwasser war eine Konzentrationszunahme von 5100 µg/l auf 13500 µg/l zu beobachten. Im Abstrom enthielt das Grundwasser deutlich mehr Kresole als Phenol. Da diese Verteilung auch im Gestein erkennbar war, wird ein natürlicher Abbau des Phenols im Grundwasserfließpfad vermutet. Im Vergleich Abbau-sensitiver Parameter zwischen Phenol-belasteten und unkontaminierten Referenzproben des GWL II ergaben sich weitere Indikationen für mikrobiellen Schadstoffabbau, wie negativere Redoxpotenziale (– 0.1 V), stark erhöhte DIC-Gehalte, geringere SO_4-Konzentrationen, H_2S-Bildung. Aus dem Fehlen von O_2 (aq) und NO_3 im Grundwasser sowie dem Angebot an SO_4 und CO_2 (aq) als Elektronenakzeptoren wurde auf mikrobiellen Abbau durch sulfatreduzierende und/oder methanogene Bakterien geschlossen. Trotz eindeutiger Anzeichen eines tatsächlich stattfindenden mikrobiellen Abbaus organischer Schadstoffe stehen toxische Phenole in Konkurrenz zu anderen, weniger oder nicht-toxischen Stoffen z.B. Fettsäuren, die als Bestandteil des Schwelwassers ebenfalls in großen Mengen in das Grundwasser eingetragen wurden. Fettsäuren bauen sich jedoch deutlich schneller ab als Phenole und waren im Grundwasser noch nachweisbar. Daraus wurde geschlussfolgert, dass die mikrobiellen Konsortien vermutlich primär Fettsäure-Abbau und nur sekundär Phenol-Abbau betreiben.
Die Sorption von Phenol und Alkylphenolen an Kalkstein/Dolomit ist als sehr gering einzuschätzen. Die in Kooperation mit der Uni Jena von Licha (2002) durchgeführten batch-Versuche ergaben Freundlich-Koeffizienten (K_F) von 1.2 (Phenol) bis 25.1 (2,4,6-TMP) und verdeutlichen das unterschiedliche Sorptionsvermögen der Einzelverbindungen. Dass in den Kalksteinen bzw. Dolomiten dennoch hohe Gehalte an Phenolen gefunden wurden, hängt mit der unterschiedlichen Durchströmung des Kluftaquifers zusammen. Hydraulisch aktive Zonen des Aquifers waren generell weniger kontaminiert als hydraulisch inaktive. Durch Matrixdiffusion erfolgt ein Schadstofftransport in gering durchlässige Gesteinsbereiche (dead-end-Poren/-Klüfte) sowie tonige Schichten des Liegenden (Grauer Salzton). Diese Bereiche waren grundsätzlich am höchsten kontaminiert. Die Verbreitung der Schadstoffplumes konnte erwartungsgemäß für keinen der beiden Standorte eingegrenzt werden. Es wird angenommen, dass die Ausbreitung durch Advektion, Dispersion und geringe Abbauraten über die bisher untersuchten Fließpfade hinausreicht.

Für den tertiären Basisaquifer (GWL 6) konnte ein potenzielles Kontaminationsrisiko durch hydraulischen Grundwasseraufstieg aus dem GWL II bestätigt werden. Das hangende tertiäre Grundwasserstockwerk (GWL 5, GWL 6) wurde und wird zudem durch intensive Wasserhaltungsmaßnahmen der umliegenden Tagebaue und die wasserwirtschaftliche Förderung von Grundwasser stark hydraulisch beansprucht. Phenole wurden jedoch nur im Spurenbereich bis 53 µg/l (Gesamtphenol) bestimmt, was derzeit nicht für einen Aufstieg kontaminierter Grundwässer aus dem GWL II spricht. Dennoch gaben die steigenden Sulfat-Konzentrationen im Grundwasser des GWL 6 Anlass für weitere Untersuchungen.
So konnte durch $\delta^{34}S/\delta^{18}O$-Isotopenuntersuchungen des im Grundwasser gelösten Sulfats ein Aufstieg von sulfatreichem (unkontaminierten) Grundwasser aus dem GWL II in den tertiären Basisaquifer (GWL 6) nachgewiesen werden, während das Sulfat im Grundwasser des GWL 5 aus der Sulfidoxidation stammte. Grundlage dafür bildeten Bestimmungen der Isotopengehalte Grundwasser-verfügbarer Schwefelquellen, der sedimentären Disulfide in den Aquifersedimenten sowie des Zechstein-Anhydrits. Für den GWL 5 lag der Median des $\delta^{34}S_{Disulfid}$ bei ~ +18 ‰, für den GWL 6 bei –24 ‰ CDT. Für den Zechstein-Anhydrit wurde eine Isotopensignatur von $\delta^{34}S$ +10.6 ±0.3 ‰ CDT, $\delta^{18}O$ +13.6 ±2.0 ‰ SMOW bestimmt.

Die Oxidation sedimentärer Disulfide im teilentwässerten Porenraum des betroffenen Aquifers ist für den GWL 6 eine weitere wichtige Sulfatquelle, die sich jedoch nur anhand der Reaktions-typischen $\delta^{18}O$-Werte des gebildeten Sulfats (< + 5 ‰ SMOW) identifizieren ließ. Charakteristische hydrochemische Trends im Grundwasser, z.B. SO_4/Fe, SO_4/pH, aus denen für den GWL 5 Sulfidoxidation abzuleiten war, lieferten für den GWL 6 keine eindeutigen Aussagen. In beiden Aquiferen konnte durch $\delta^{34}S/\delta^{18}O$-Isotopenanreicherungen im Grundwassersulfat Sulfatreduktion festgestellt werden, die zur Verringerung der Sulfatkonzentration führt. Gleichzeitig verringerte sich durch die Mineralisation organischen Kohlenstoffs der $\delta^{13}C_{DIC}$ auf Werte < –15 ‰ PDB.

Der Nachweis des hydraulischen Grundwasseraufstiegs aus dem Zechstein-Aquifer (GWL II) in den tertiären Basisaquifer (GWL 6) in Bereichen hydraulischer Entlastung, z.B. Tgb. Profen, Tgb. Schleenhain, macht deutlich, dass im Hinblick auf künftige hydraulische Veränderungen die Kontaminationen des GWL II nicht auf diesen Aquifer beschränkt bleiben müssen. Veränderungen des Druckpotenzials sowie der Grundwasserfließrichtung im GWL II führen zwangsläufig zu einer Ausbreitung der Plumes möglicherweise in Richtung bevorzugter Aufstiegszonen. Daher ergibt sich die Notwendigkeit weiterführender Untersuchungen.

8 Literatur

Adler, E. (1977): Lignin chemistry - past, present, and future.- Wood Sci. Technol. 11: 169 - 218.

Al-Dahir, Z.A., Morgenstern, N.R. (1969): Intake factors for cylindrical piezometer tips.- Soil Sci. 107(1): 17 - 21.

Appelo, C.A.J., Postma, D. (1999): Geochemistry, groundwater and pollution.- 536 S., Balkema, Rotterdam.

Arvin, E., Jensen, B.K., Gundersen, A.T. (1991): Biodegradation kinetics of phenols in an aerobic biofilm at low concentrations.- Wat. Sci. Tech. 23: 1375 - 1384.

Azadpour-Keeley, A., Russell, H.H., Sewell, G.W. (1999): Microbial processes affecting monitored natural attenuation of contaminants in the subsurface.- US EPA Office of Research and Development. EPA/540/S-99/001: 18 S., Ada, Oklahoma.

Balderer, W., Pearson, F.J., Soreau, S. (1991): Sulphur and oxygen isotopes in sulphate and sulphide.- In: Pearson, F.J. (ed), Applied hydrogeology: a case study in northern Switzerland. Studies in the environmental sciences No.43. 297 - 322, Elsevier, Amsterdam, Oxford, New York.

Barthel, H. (1962): Braunkohlenbergbau und Landschaftsdynamik. Ein Beitrag zum Problem der Beeinflussung der Kulturlandschaft in den Braunkohlenrevieren, dargestellt am Beispiel des Zeitz-Weißenfelser Reviers.- Ergänzungsbd. Petermanns Geogr. Mitt., -270 S.

Bekins, B.A., Godsy, E.M., Goerlitz, D.F. (1993): Modeling steady state methanogenic degradation of phenols in groundwater.- Journal of Contaminant Hydrology 14: 279 - 294.

Berner, R.A. (1967): Thermodynamic stablility of iron sulfides.- American Journal of Science 265: 773 - 785.

Berner, R.A. (1970): Sedimentary pyrite formation.- American Journal of Science 268: 1 - 23.

Berner, R.A. (1984): Sedimentary pyrite formation: an update.- Geochimica et Cosmochimica Acta 48: 605 - 615.

Béchard, G., Bisaillon, J.-G., Beaudet, R., Sylvestre, M. (1990): Degradation of phenol by a bacterial consortium under methanogenic conditions.- Can. J. Microbiol. 36: 573 - 578.

Bissaillon, J.G., Lépine, F., Beaudet, R., Sylvestre, M. (1991): Carboxylation of o-cresol by an anaerobic consortium under methanogenic conditions.- Appl. Environ. Microbiol. 57: 2131 - 2134.

Bohnwagner, N., Schenke, G. (1992): Hydrogeologisches Projekt VE Plattendolomit Zeitz.- DFA GmbH: 35 S., Chemnitz, unveröffentlicht.

Bonting, C.F.C., Schneider, S., Schmidtberg, G., Fuchs, G. (1995): Anaerobic degradation of m-cresol via methyl oxidation to 3-hydroxybenzoate by a denitrifying bacterium.- Arch. Microbiol. 164: 63 - 69.

Bossert, I.D., Young, L.Y. (1986): Anaerobic oxidation of p-cresol by a denitrifying bacterium.- Appl. Environ. Microbiol. 52: 1117 - 1122.

Boyd, S.A., Mortland, M.M., Chiou, C.T. (1988): Sorption characteristics of organic compounds on hexadecyltrimethylammonium-smectite.- Soil Sci. Soc. Am. 52: 652 - 657.

Böttcher, M.E., Smock, A.M., Cypionka, H. (1998): Sulfur isotope fractionation during experimental precipitation of iron(II) and manganese(II) sulfide at room temperature.- Chemical Geology 146: 127 - 134.

Brasier, F.M., Kobelski, B.J. (1996): Injection of industrial wastes in the United States.- In: Tsang, C. (ed), Deep Well Disposal of Hazardous Waste: Scientific and Engineering Aspects. 1 - 8, Academic Press, New York.

Broholm, K., Jorgensen, P.R., Hansen, A.B., Arvin, E., Hansen, M. (1999a): Transport of creosote compounds in a large, intact, macroporous clayey till column.- Journal of Contaminant Hydrology 39(3-4): 309 - 329.

Broholm, K., Hansen, A.B., Jorgensen, P.R., Arvin, E., Hansen, M. (1999b): Transport and biodegradation of creosote compounds in a large, intact, fractured clayey till column.- Journal of Contaminant Hydrology 39(3-4): 331 - 348.

Broholm, M.M., Arvin, E. (2000): Biodegradation of phenols in a sandstone aquifer under aerobic conditions and mixed nitrate and iron reducing conditions.- Journal of Contaminant Hydrology 44(3-4): 239 - 273.

Broholm, M.M., Crouzet, C., Arvin, E., Mouvet, C. (2000): Concurrent nitrate and Fe(III) reduction during anaerobic biodegradation of phenols in a sandstone aquifer.- Journal of Contaminant Hydrology 44: 275 - 300.

Brookins, D.G. (1988): Eh-pH Diagrams for Geochemistry.- 176 S., Springer, Berlin, Heidelberg, New York.

Canfield, D.E., Raiswell, R., Westrich, J.T., Reaves, C.M., Berner, R.A. (1986): The use of chromium reduction in the analysis of reduced inorganic sulfur in sediments and shales.- Chemical Geology 54(1-2): 149 - 155.

Canfield, D.E., Thamdrup, B. (1994): The production of 34S depleted sulfide during bacterial disproportionation of elemental sulfur.- Science 266: 1973 - 1975.

Canfield, D.E., Thamdrup, B., Fleischer, S. (1998): Isotope fractionation and sulfur metabolism by pure and enrichment cultures of elemental sulfur-disproportionating bacteria.- Limnology and Oceanography 43(2): 253 - 264.

Caron, F., Tessier, A., Schwarcz, H.P., Rees, C.E. (1986): Sulfur and oxygen isotopes of sulfate in precipitation and lakewater, Quebec, Canada.- Appl. Geochem. 1: 601 - 606.

Chambers, L.A., Trudinger, P.A., Smith, J.W., Burns, M.S. (1976): A possible boundary condition in bacterial sulfur isotope fractionation.- Geochimica et Cosmochimica Acta 40(10): 1191 - 1194.

Chambers, L.A., Trudinger, P.A. (1979): Microbiological fractionation of stable sulfur isotopes; a review and critique.- Geomicrobiology Journal 1(3): 249 - 293.

ChemExpo (1999): Annual phenol production in the U.S.- http://chemexpo.com/news/Profile990329.cfm.

Chiba, H., Sakai, H. (1985): Oxygen isotope exchange rate between dissolved sulfate and water at hydrothermal temperatures.- Geochimica et Cosmochimica Acta 49: 993 - 100.

Clark, I.D., Fritz, P. (1997): Environmental Isotopes in Hydrogeology.- 328 S., CRC Press, Boca Raton.

Claypool, G.E., Holser, W.T., Kaplan, I.R., Sakai, H., Zak, I. (1980): The age curves of sulfur and oxygen isotopes in marine sulfate and their mutual interpretation.- Chemical Geology 28(3-4): 199 - 260.

Davis, G.B., Ritchie, S.C. (1986): A model of oxidation in pyritic mine waste wastes: part 1:Equations and approximate solution.- Appl. Math. Modell. 10: 314 - 322.

Davis, J.A., Kent, D.B. (1990): Surface complexation modeling in aqueous geochemistry.- Rev. Mineral., 177 - 260.

Deer, W.A., Howie, R.A., Zussman, J. (1993): An introduction to the rock-forming minerals.- 685 S., Longman Scientific & Technical, Essex.

DIN 38409/H16 (1984): Summarische Wirkungs- und Stoffgrößen, Gruppe H, Bestimmung des Phenolindex (H16).- Deutsches Institut für Normung e.V..

Dohrmann, H. (2000): Untersuchungen zu hydraulischen und hydrochemischen Prozessen im Initialstadium bindiger Mischbodenkippen des Mitteldeutschen Braunkohlenreviers Beispiel:

Tagebaukippe Zwenkau/Cospuden.- UFZ Umweltforschungszentrum Leipzig/Halle. 34/2000: 136 S., Leipzig.

Doll, G. (1982): Zur Geologischen Entwicklung des zentralen Weißelsterbeckens unter besonderer Berücksichtigung der Braunkohlenfelder Peres, Groitzscher Dreieck und Schleenhain.- Dissertation, Karl-Marx-Universität Leipzig. –162 S.

Döring, F., Priemke, G. (1991): Erkundung des Schadenumfanges und die Erarbeitung von Vorschlägen zur Sanierung des kontaminierten Untergrundes im Schwelereigelände Deuben.- GFE GmbH: 64 S., Halle, unveröffentlicht.

DVWK (1997): Tiefenorientierte Probennahme aus Grundwassermeßstellen.- DVWK Merkblatt 245: 1 - 14.

Dyreborg, S., Arvin, E., Broholm, M.M. (1996a): Effects of creosote compounds on the aerobic biodegradation of benzene.- Biodegradation 7: 191 - 201.

Dyreborg, S., Arvin, E., Broholm, M.M. (1996b): Effects of creosote compounds on the aerobic biodegradation of toluene.- Biodegradation 7: 97 - 107.

Eccarius, B. (2000): Dreidimensionale Grundwasserströmungs- und Schadstofftransport-modellierung im Umkreis des phenolverseuchten Tagebaurestloches Vollert-Süd, Sachsen-Anhalt.- Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH. 11/2000: 128 S., Leipzig.

Ehrlich, G.G., Goerlitz, D.F., Godsy, E.M., Hult, M.F. (1982): Degradation of phenolic contaminants in ground water by anaerobic bacteria: St. Louis Park, Minnesota.- Ground Water 20: 703 - 710.

Eissmann, L. (1970): Geologie des Bezirkes Leipzig- Eine Übersicht.- Natura regionis Lipsiensis 1/2: 1 - 174.

Eissmann, L. (1994a): Leitfaden der Geologie des Prätertiärs im Saale-Elbe-Gebiet.- Altenburger Naturwissenschaftliche Forschungen 7: 11 - 53.

Eissmann, L. (1994b): Grundzüge der Quartärgeologie Mitteldeutschlands.- Altenburger Naturwissenschaftliche Forschungen 7: 55 - 136.

Ewers, J., Rubio, M.A., Knackmuss, H.-J., Freier-Schroeder, D. (1989): Bacterial metabolism of 2,6-xylenol.- Appl. Environ. Microbiol. 55: 2904 - 2908.

Fedorak, P.M., Hrudey, S.E. (1984): The effects of phenol and some alkyl phenolics on batch anaerobic methanogenesis.- Water Res. 18(3): 361 - 367.

Flyvbjerg, J., Arvin, E., Jensen, B.K., Olsen, S.K. (1993): Microbial degradation of phenols and aromatic hydrocarbons in creosote-contaminated groundwater.- Journal of Contaminant Hydrology 12: 133 - 150.

Fricke, S., Schön, J. (1999): Praktische Bohrlochgeophysik.- 254 S., Enke im Thieme Verlag, Stuttgart.

Fritsche, W. (1990): Mikrobiologie.- 497 S., G. Fischer, Jena.

Fritsche, W. (1998): Umwelt-Mikrobiologie : Grundlagen und Anwendungen.- 252 S., Fischer, Jena.

Fritz, P., Basharmal, G.M., Drimmie, R.J., Ibsen, J., Qureshi, R.M. (1989): Oxygen isotope exchange between sulphate and water during bacterial reduction of sulphate.- Chemical Geology 79: 99 - 105.

Gallert, C., Knoll, G., Winter, J. (1991): Anaerobic carboxylation of phenol to benzoate: Use of deuterated phenols revealed carboxylation exclusively in C4-position.- Appl. Microbiol. Biotechnol. 36: 124 - 129.

Genz, H. (1930): Die Veränderung der Kulturlandschaft zur Industrielandschaft im Braunkohlenrevier Weißenfels-Zeitz. Eine bevölkerungsstatistische und kulturgeschichtliche Betrachtung.- Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.

Gläßer, W. (1995): Erläuterungen zur Geologischen Karte 1:25.000 von Thüringen Blatt Altenburg, Nr. 5040.- 288 S., Thüringer Landesanstalt für Geologie, Weimar.

Godsy, E.M., Goerlitz, D.F., Grbic-Galic, D. (1992a): Methanogenic degradation kinetics of phenolic compounds in aquifer derived microcosms.- Biodegradation 2: 211 - 221.

Godsy, E.M., Goerlitz, D.F., Grbic-Galic, D. (1992b): Methanogenic biodegradation of creosote contaminants in natural and simulated ground-water systems.- Ground Water 30: 232 - 242.

Goerlitz, D.F., Troutman, D.E., Godsy, E.M., Franks, B.J. (1985): Migration of woodpreserving chemicals in contaminated groundwater in a sandy aquifer at Pensacola, Florida.- Environmental Science & Technology 19: 955 - 961.

Goldhaber, M.B., Kaplan, I.R. (1974): The sulfur cycle.- In: Goldberg, E.D. (ed), The Sea. 569 - 655, Wiley, New York.

Goldhaber, M.B. (1983): Experimental study of metastable oxyanion formation during pyrite oxidation at pH 6-9 and 30°C.- American Journal of Science 283: 193 - 217.

Gräber, M. (1999): Erweiterung des hydrogeologischen Gutachtens Hagenest.- GEOS Freiberg Ingenieurgesellschaft mbH: 19 S., Freiberg, unveröffentlicht.

Habicht, K.S., Canfield, D.E. (1997): Sulfur isotope fractionation during bacterial sulfate reduction in organic-rich sediments.- Geochimica et Cosmochimica Acta 61(24): 5351 - 5361.

Habicht, K.S., Canfield, D.E., Rethmeier, J. (1998): Sulfur isotope fractionation during bacterial reduction and disproportionation of thiosulfate and sulfite.- Geochimica et Cosmochimica Acta 62(15): 2585 - 2595.

Hanzlik, P., Dölz, F., Böhme, O., Häntze, W. (1993): Hydrogeologische Untersuchungen im Raum Schmölln 1991/1992.- GFE GmbH: 55 S., Halle, unveröffentlicht.

Harrison, A.G., Thode, H.G. (1957): The kinetic isotope effect in the chemical reduction of sulphate.- Transactions of the Faraday Society 53: 1648 - 1651.

Harrison, A.G., Thode, H.G. (1958): Mechanisms of the bacterial reduction of sulphate from siotope fractionation studies.- Transactions of the Faraday Society 54: 84 - 92.

Harwood, C.S., Burchardt, G., Fuchs, G. (1999): Anaerobic metabolism of aromatic compounds via the benzoyl-CoA pathway.- Fems Microbiology Rev. 22(5): 439 - 458.

Hasset, J.J., Banwart, W.L., Griffin, R.A. (1983): Correlation of compound properties with sorption characteristics of nonpolar compounds by soils and sediments: Concepts and limitations.- In: Francis, C.W., Auerbach, S.I. (eds), Environment and Solid Wastes: Characterization, Treatment and Disposal. 161 - 178, Butterworth Publishers.

Häggblom, M.M., Rivera, M.D., Bossert, I.D., Rogers, J.E., Young, L.Y. (1990): Anaerobic biodegradation of para-cresol under three reducing conditions.- Microb. Ecol. 20: 141 - 150.

Hecht, G. (1991): Hydrogeologisches Projekt Vorlauferkundung Dobitschen.- HGN GmbH: 61 S., Jena, unveröffentlicht.

Heider, J., Fuchs, G. (1997): Anaerobic metabolism of aromatic compounds.- Eur. J. Biochem. 243: 577 - 596.

Higgo, J.J.W., Nielsen, P.H., Bannon, M.P. (1996): Effect of geochemical conditions on fate of organic compounds in groundwater.- Environmental Geology 27: 335 - 346.

Hoefs, J. (1997): Stable isotope geochemistry .- 201 S., Springer Verlag, Berlin.

Holt, B.D., Kumar, R., Cunningham, P.T. (1981): Oxygen-18 study of the aqueous phase oxidation of sulphur dioxide.- Atmos. Environ. 15: 557 - 566.

Holt, B.D., Kumar, R., Cunningham, P.T. (1982): Primary sulfates in atmopheric sulfates: estimation by oxygen isotope ratio measurement.- Science 217: 51 - 52.

Holt, B.D., Kumar, R. (1986): Oxygen-18 study of the atmopspheric-aquatic linkage in Adirondack watersheds.- Water Air and Soil Pollution 31: 175 - 186.

Hug, F.W. (1991): Gutachten zur Notwasserversorgung des Landkreises Zeitz.- Dr. Hug Geoconsult GmbH: 37 S., Zeitz, unveröffentlicht.

Hug, F.W. (1992): Untersuchung der Wasserversorgungsbedingungen des Landkreises Zeitz.- Dr. Hug Geoconsult GmbH: 44 S., Halle, unveröffentlicht.

Hug, F.W. (1993): Untersuchungen zur Herkunft von Sulfationen in den Grundwasserleitern des westlichen Weißelsterbeckens.- Dr. Hug Geocosult GmbH: 47 S., Halle, unveröffentlicht.

Huth, W. (1972): Ergebnisbericht zu hydrogeologischen Untersuchungen über Phenolwasserversenkung im Raum Profen-Deuben.- VEB Hydrogeologie: 74 S., Nordhausen, unveröffentlicht.

Ioppolo-Armanios, M., Alexander, R., Kagi, R.J. (1995): Geosynthesis of organic compounds: I. Alkylphenols.- Geochimica et Cosmochimica Acta 59(14): 3017 - 3027.

Isaaks, E.H., Srivastava, R.M. (1989): Applied Geostatistics.- 561 S., Oxford University Press, Oxford.

Johansen, S.S., Hansen, A.B., Mosbaek, H., Arvin, E. (1997): Identification of heteroaromatic and other organic compounds in ground water at creosote-contaminated sites in Denmark.- Ground Water Monitoring and Remediation 17(2): 106 - 115.

Jorgensen, B.B. (1982): Mineralization of organic matter in the sea bed - the role of sulphate reduction.- Nature 296: 643 - 645.

Jorgensen, B.B. (1990): A thiosulfate shunt in the sulfur cycle of marine sediments.- Science 249: 152 - 154.

Kahru, A., Pollumaa, L., Reiman, R., Ratsep, A., Liiders, M., Maloveryan, A. (2000): The toxicity and biodegradability of eight main phenolic compounds characteristic to the oil-shale industry wastewaters: A test battery approach.- Environmental Toxicology 15(5): 431 - 442.

Kaplan, I.R., Rittenberg, S.C. (1964): Microbial fractionation of sulphur isotopes.- J. Gen. Microbiol. 34: 195 - 212.

Karickhoff, S.W., Brown, D.S., Scott, T.A. (1979): Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments.- Water Res. 13: 241 - 248.

Kemp, A.-L.W., Thode, H.G. (1968): The mechanism of the bacterial reduction of sulphate and of sulphite from isotope fractionation studies.- Geochimica et Cosmochimica Acta 32(1): 71 - 91.

Kiesl, C. (1997): Erstbewertung und orientierende Erkundung des Schwelereigeländes Groitzschen/ Zeitz.- Diplomarbeit, Universität Hannover, Inst. f. Geologie, –111 S.

Kiilerich, O., Arvin, E. (1996): Groundwater contamination from creosote sites.- Ground Water Monitoring Review 16(1): 112 - 117.

King, M.W.G., Barker, J.F. (1999): Migration and natural fate of a coal tar creosote plume: 1. Overview and plume development.- Journal of Contaminant Hydrology 39(3-4): 249 - 279.

King, M.W.G., Barker, J.F., Devlin, J.F., Butler, B.J. (1999): Migration and natural fate of a coal tar creosote plume: 2. Mass balance and biodegradation indicators.- Journal of Contaminant Hydrology 39(3-4): 281 - 307.

Kittler, Gräber (1995): Hydrogeologisches Gutachten zur Situation und Perspektive des Wasserwerkes Hagenest- Abschlußbericht.- GEOS Freiberg Ingenieurgesellschaft mbH: 59 S., Freiberg, unveröffentlicht.

Klecka, G.M., Davis, J.W., Gray, D.R., Madsen, S.S. (1990): Natural bioremediation of organic contaminants in ground water; Cliffs-Dow superfund site.- Ground Water 28(4): 534 - 543.

Knief, K. (1998): Isotopenbiogeochemische Untersuchungen über Umsetzungsprozesse des Schwefels in Agrarökosystemen mittels der stabilen Isotope 34S und 18O.- UFZ Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle. 12/1998: 174 S., Leipzig.

Knoll, G., Winter, J. (1987): Anaerobic degradation of phenol in sewage sludge.- Appl. Microbiol. Biotechnol. 25: 384 - 391.

Knoll, G., Winter, J. (1989): Degradation of phenol via carboxylation to benzoate by defined, obligate syntrophic consortium of anaerobic bacteria.- Appl. Microbiol. Biotechnol. 30: 318 - 324.

Knöller, K. (2000): Anwendung stabiler Umweltisotope zur Bewertung hydrochemischer Zustände und Prozesse in Folgelandschaften des Braunkohlebergbaus.- UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig/Halle. 33/2000: 153 S., Leipzig.

Kobayashi, T., Hashinaga, T., Mikami, E., Suzuki, T. (1989): Methanogenic degradation of phenol and benzoate in acclimated sludges.- Water Sci. Technol. 21: 55 - 65.

Koch, T. (1988): Hydrogeologischer Bericht zur Grundwasservorratsberechnung VE Maßnitz.- VEB GFE Halle, VEB Hydrogeologie Nordhausen: 107 S., unveröffentlicht.

Kohnen, M.E.T., Damsté, J.S., ten Haven, H.L., de Leeuw, J.W. (1989): Early incorporation of polysulphides in sediment organic matter.- Nature 341: 640 - 641.

Krouse, H.R. (1980): Sulphur isotopes in our environment.- In: Fritz, P., Fontes, J.-C. (eds), Handbook of Environmental Isotope Geochemistry, Vol. 1 The Terrestrial Environment. 435 - 471, Elsevier, Amsterdam.

Kuhn, E.P., Zeyer, J., Eicher, P., Schwarzenbach, R.P. (1988): Anaerobic degradation of alkylated benzenes in denitrifying laboratory aquifer coloums.- Appl. Environ. Microbiol. 54: 490 - 496.

Kuschk, P. (1991): Untersuchungen zur mikrobiologisch anaeroben Reinigung von Braunkohlen-pyrolyseabwässern.- Dissertation, Universität Oldenburg. –125 S.

Kussmann, A. (1993): Ergebnisbericht Dobitschen, Teilobjekt Starkenberg.- Hydrogeologie GmbH: 46 S., Jena.

Lack, A., Fuchs, G. (1994): Evidence that phenol phosphorylation to phenylphosphate is the first step in anaerobic phenol metabolism in a denitifying Pseudomonas sp.- Arch. Microbiol. 161: 306 - 311.

Lauer, D., Pretschold, H.-H., Zimmermann, G., Matthes, P. (1990): Umweltgeologische Erstbewertung des Standortbereiches Hydrierwerk Zeitz.- GFE GmbH: 55 S., Halle, unveröffentlicht.

Lehr, J.L. (1986): Underground injection.- Conference Proceedings, International Symposium on the Subsurface Injection of Liquid Wastes New Orleans.

Leibnitz, E., Behrens, U., Roos, G., Stein, H.-U. (1957): Die papier- und säulenchromatographische Bestimmung der flüchtigen Fettsäuren in Schwel- und Abwässern.- Wasserwirtschaft-Wassertechnik 7: 354 - 365.

Lerner, D., Thornton, S.F., Spence, M.J., Banwart, S.A., Bottrell, S., Higgo, J.J., Mallison, H., Pickup, R.W.W.G.M. (2000): Ineffective natural attenuation of degradable organic compounds in a phenol-contaminated aquifer.- Ground Water 38(6): 922 - 928.

Létourneau, L., Bisaillon, J.-G., Lépine, F. (1995): Spore-forming bacteria that carboxylate phenol to benzoic acid under anaerobic conditions.- Can. J. Microbiol. 41: 266 - 272.

Li, T., Villemur, R., Létournaud, L., Bernard, K., Lépine, F., Beaudet, R. (1996): Isolation and characterization of a new bacterium carboxylating phenol to benzoic acid under anaerobic conditions.- J. Bacteriol. 178: 2551 - 2558.

Licha, T., Herfort, M., Sauter, M. (2001a): Phenolindex- ein sinnvoller Parameter für die Altlastenbewertung?- Grundwasser 6(1): 8 - 14.

Licha, T., Herfort, M., Sauter, M., Dermietzel, J., Rehberg, K., Geyer, S. (2001b): Natural Attenuation Monitoring Beispiel: Kohleveredelung, Gaswerke, Teerseen.- Conference Proceedings, 3. Symposium "Natural Attenuation- Umsetzung, Finanzierung, Perspektiven, DECHEMA, Frankfurt.

Licha, T. (2002): Short Chained Alkyl Phenols (SCAP) in Groundwater- Chemical Analysis, Adsorption Mechanism and Field Cases (In Vorbereitung).- Dissertation, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Inst. für Geologie.

Lissner, A., Thau, A. (1953): Die Chemie der Braunkohle. Band II - Chemisch-Technische Veredelung.- 559 S., VEB Wilhelm Knapp, Halle (Saale).

Lloyd, R.M. (1968): Oxygen isotope behavior in the sulfate-water system.- J. Geophys. Res. 73: 6099 - 6110.

Londry, K.L., Fedorak, P.M. (1993): Use of fluorinated compounds to detect aromatic metabolites from m-cresol in a metanogenic consortium: evidence for a demethylation reaction.- Appl. Environ. Microbiol. 59: 2229 - 2238.

Londry, K.L., Fedorak, P.M., Suflita, J.M. (1997): Anaerobic degradation of m-cresol by a sulfate-reducing bacterium.- Appl. Environ. Microbiol. 63(8): 3170 - 3175.

Londry, K.L., Suflita, J.M., Tanner, R. (1999): Cresol metabolism by the sulfate-reducing bacteria Desulfotomaculum sp. strain Groll.- Can. J. Microbiol. 45: 458 - 463.

Longinelli, A. (1989): Oxygen-18 and sulphur-34 in dissolved oceanic sulphate and phosphate.- In: Fritz, P., Fontes, J.-C. (eds), Handbook of Environmental Isotope Geochemistry, Vol.3, The Marine Environment. 219 - 255, Elsevier, Amsterdam.

Lovley, D.R., Lonergan, D.J. (1990): Anaerobic oxidation of tolouene, phenol and p-cresol by dissimilatory iron-reduction.- Appl. Environ. Microbiol. 56: 1858 - 1864.

Luther, G.W. (1987): Pyrite oxidation and reduction: Molecular orbital theory considerations.- Geochimica et Cosmochimica Acta 51: 3193 - 3199.

Luther, G.W. (1991): Pyrite synthesis via polysulfide compounds.- Geochimica et Cosmochimica Acta 55: 2839 - 2849.

Luther, G.W., Kostka, J.E., Chruch, T.M., Sulzberger, B., Stumm, W. (1992): Seasonal cycling in the saltmarsh sedimentary environment: the importance of ligand complexes with Fe(II) and Fe(III) in the dissolution of Fe(III) minerals and pyrite, respectively.- Marine Chemistry 40: 81.

Mai, D.H., Walther, H. (2000): Die Fundstellen eozäner Floren des Weißelsterbeckens und seiner Randgebiete.- Altenburger Naturwissenschaftliche Forschungen 13: 1 - 59.

Mallén, G. (2000): Isotopenanalytische Charakterisierung hydrodynamischer und biogeochemischer Prozesse in Uferfiltrat und landseitigen Grundwässern der Torgauer Elbtalwanne unter besonderer Berücksichtigung der Herkunft und Umwandlungen von Kohlenstoff- und Schwefelspezies.- UFZ Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle. 9/2000: 191 S., Leipzig.

Malyska, G. (2000): Einflüsse des Berbaus auf die Trinkwasserversorgung im Süden von Sachsen-Anhalt - ein historischer Rückblick.- Hercynia N.F. 33: 5 - 30.

Mangold, K.-H., Kaeding, I., Lorenz, K., Schuster, H. (1973): Abwasserreinigung in der chemischen und artverwandten Industrie.- 207 S., Deutscher Verl. für Grundstoffindustrie, Leipzig.

Martino, D.P., Grossman, E.L., Ulrich, G.A., Burger, K.C., Schlichenmeyer, J.L., Suflita, J.M., Ammerman, J.W. (1998): Microbial abundance and activity in a low-conductivity aquifer system in east-central Texas.- Microbial Ecology 35(3): 224 - 234.

Mayer, B. (1993): Untersuchungen zur Isotopengeochemie des Schwefels in Waldböden und neu gebildeten Grundwasser unter Wald.- GSF- Forschungszentrum für Umwelt und Gesundheit. 2/93: 179 S., Neuherberg.

McKibben, M.A., Barnes, H.L. (1986): Oxidation of pyrite in low temperature acidic solutions.- Geochimica et Cosmochimica Acta 50: 1509 - 1520.

Meyer, G. (1950): Der Einfluss der geologischen Strukturen im Meuselwitz-Bornaer Braunkohlenrevier auf Planung und Abbau.- Freiberger Forschungshefte 1: 49 - 51.

Meyer, G. (1952): Die bergbauliche Verwertung der Braunkohlenvorkommen im Westteil des Meuselwitzer Reviers.- Geol. Archiv: 52 S., Leipzig, unveröffentlicht.

MIBRAG (2001): Arbeitskarten zur Grundwasserdynamik in den Grundwasserleitern (Prätertiär, GWL 62, GWL 61, GWL 52) für den Bereich Tagebau Profen-Tagebau Schleenhain.- MIBRAG mbH: 4 S., Theißen, unveröffentlicht.

MIBRAG (2002): Geschichte der Tagebaue Profen und Schleenhain.- http://www.mibrag.de.

Michel, G. (1960): Hydrogeologie des Weißelsterbeckens.- Freiberger Forschungshefte C 94: 1 - 128.

Milette, D., Barker, J.F., Comeau, Y., Butler, D.-J., Friend, E.O., Clément, B., Samoson, R. (1995): Substrate interaction during aerobic biodegradation of creosote relate compounds.- Environmental Science & Technology 29: 1944 - 1952.

Montgomery, J.H. (1996): Groundwater Chemicals.- 1345 S., Lewis, Boca Raton.

Morse, J.W., Millero, F.J., Cornwell, J.C., Rickard, D. (1987): The chemistry of hydrogen sulfide and iron sulfide systems in natural waters.- Earth Sci. Rev. 24: 1 - 42.

Morse, J.W., Mackenzie, F.T. (1990): Geochemistry of Sedimentary Carbonates.- 707 S., Elsevier.

Morse, J.W. (1999): Sulfides in sandy sediments: New insights on the reactions responsible for sedimentary pyrite formation.- Aquatic Geochemistry 5(1): 75 - 85.

Mort, S.L., Dean-Ross, D. (1994): Biodegradation of phenolic compounds by sulfate reducing bacteria from contaminated sediments.- Microb. Ecol. 28: 67 - 77.

Moses, C.O., Nordstrom, K.K., Herman, J.S., Mills, A.L. (1987): Aqueous pyrite oxidation by dissolved oxygen and by ferric iron.- Geochimica et Cosmochimica Acta 51: 1561 - 1571.

Moses, C.O., Herman, J.S. (1991): Pyrite oxidation at circumneutral pH.- Geochimica et Cosmochimica Acta 55: 471 - 482.

Möder, M., Schrader, S., Franck, U., Popp, P. (1997): Determination of phenolic compounds in waste water by solid-phase micro extraction.- Fresenius J. Anal. Chem. 357: 326 - 332.

Murowchick, J.B., Barnes, H.L. (1986): Marcasite precipitation from hydrothermal solutions.- Geochimica et Cosmochimica Acta 50: 2615 - 2629.

Mühlmann, R. (1981): Zu Problemen der paläogeographischen Entwicklung des Prätertiärs und Tertiärs im südwestlichen Weißelsterbecken und zu Beziehungen zwischen Prätertiär und Tertiär.- Dissertation, Karl-Marx-Universität Leipzig . –128 S.

Müller, A. (1983): Fauna und Palökologie des marinen Mitteloligozäns der Leipziger Tieflandsbucht.- Altenburger Naturwissenschaftliche Forschungen 2: 1 - 152.

Müller, J.A., Galushko, A.S., Kappler, A., Schink, B. (1999): Anaerobic degradation of m-cresol by Desulfobacterium cetonicum is initiated by formation of 3-hydroxybenzylsuccinate.- Arch. Microbiol. 172: 287 - 294.

Müller, J.A., Galushko, A.S., Kappler, A., Schink, B. (2001): Initiation of anaerobic degradation of p-cresol by formation of 4-hydroxybenzylsuccinate in Desulfobacterium cetonicum.- Journal of Bacteriology 183(2): 752 - 757.

Newman, L., Forrest, J. (1991): Sulphur isotope measurments relevant to power plant emissions in the Northern United States.-Stable isotopes: Natural and anthropogenic sulfur in the environment, SCOPE 43, 331 - 343, Wiley, Chichester.

Nielsen, H. (1978): Sulphur isotopes.- In: Wedepohl, K.H. (ed), Handbook of Geochmistry. 16B1-16B40, Springer, Berlin.

Nielsen, H., Grinenko, L.N., Grinenko, V.A., Lein, A.Y., Smith, J.W., Pankina, R.G. (1991): Lithospheric sources of sulphur.- Stable isotopes: Natural and anthropogenic sulfur in the environment, SCOPE 43, 65 - 132, Wiley, Chichester.

Nielsen, P.H., Christensen, T.H. (1994): Variability of biological degradation of phenolic hydrocarbons in an aerobic aquifer determined by laboratory batch experiments.- Journal of Contaminant Hydrology 17(1): 55 - 67.

Nielsen, P.H., Albrechtsen, H.-J., Heron, G., Christensen, T.H. (1995a): In situ and laboratory studies on the fate of specific organic compounds in an anaerobic landfill leachate plume; 1, Experimental conditions and fate of phenolic compounds.- Journal of Contaminant Hydrology 20(1-2): 27 - 50.

Nielsen, P.H., Bjerg, P.L., Nielsen, P., Smith, P., Christensen, T.H. (1995b): In situ and laboratory studies on the fate of specific organic compounds in an anaerobic aquifer.- Environ. Sci. Technol. 30: 31 - 37.

Nyer, E.K., Duffin, M.K. (1997): The state of art of bioremediation.- Ground Water Monitoring and Remediation 17(2): 64 - 69.

O'Connor, O.A., Young, L.Y. (1996): Effects of six different functional groups and their position on the bacterial metabolism of monosubstituted phenols under anaerobic conditions.- Environmental Science & Technology 30(5): 1419 - 1428.

Ohmoto, H., Kaiser, C.J., Geer, K.A. (1990): Systematics of sulphur isotopes in recent marine sediments and ancient sediment-hosted basemetal deposits.- Stable Isotopes and Fluid Processes in Mineralisation, 70 - 120, Univ. Western Australia Publ.

Parkhurst, D.L., Appelo, C.A.J. (1999): User's Guide to PHREEQC (Version 2)--A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport and Inverse Geochemical Calculations.- USGS. 99 - 4259: 312 S., Denver, Colorada.

Picard, E. (1944): Gutachten des Reichsamtes für Bodenforschung über Versenkung phenolhaltiger Abwässer der Schwelerei Profen der Anhaltinischen Kohlenwerke in den Untergrund: 41 S., Halle, unveröffentlicht.

Plöttner, P. (1977): Hydrogeologisches Gutachten zur Phenolwassergefährdung des Wasserwerkes Draschwitz.- Rat des Bezirkes Halle, Abt. Geologie: 24 S., unveröffentlicht.

Porath, S. (1999): Erzeugung von Chemierohstoffen aus Kukersit durch Pyrolyse.- Dissertation, Fachbereich Chemie Universität Hamburg. –123 S.

Pörschmann, J., Kopinke, F.D., Pawliszyn, J. (1998): Solid-Phase microextraction for determining the binding state of organic pollutants in contaminated water rich in humic organic matter.- J.Chromatogr. A 816: 159 - 167.

Präger, R. (2002): Dokumentationsbericht Geo-Standortmanagement zu den Forschungsbohrungen an den Standorten Phenolversenkung Altschwelerei Profen und Deuben.- GFE Consult GmbH: 120 S., Halle, unveröffentlicht.

Pretschold, H.-H., Szymzcak, P., Albrecht, W. (1980): Hydrologischer Ergebnisbericht mit GW-Vorratsberechnung Schmölln 1979-80.- VEB Hydrogeologie: 86 S., Nordhausen, unveröffentlicht.

Prosser, D.J., Daws, J.A., Fallick, A.E., Williams, B.P.J. (1994): The occurrence and 34S of authigenic pyrite in middle Jurassic brent group sediments.- J. Pet. Geol. 17: 407 - 428.

Puig-Grajales, L., Tan, N.G., van der Zee, F., Razo-Flores, E., Field, J.A. (2000): Anaerobic biodegradability of alkylphenols and fuel oxygenates in the presence of alternative electron acceptors.- Appl. Microbiol. Biotechnol. 54: 692 - 697.

Raiswell, R. (1982): Pyrite texture, isotopic composition and the availability of iron.- American Journal of Science 282(8): 1244 - 1263.

Ramanand, K., Suflita, J.M. (1991): Anaerobic degradation of m-cresol in anoxic aquifer slurries: carboxylation reactions in a sulfate reducing bacterial enrichment.- Appl. Environ. Microbiol. 57: 1689 - 1695.

Razo-Flores, E., Donlon, B., Field, J., Lettinga, G. (1996): Biodegradation of n-substitued aromatics and alkylphenols under methanogenic conditions using granular sludge.- Wat. Sci. Tech. 33: 47 - 57.

Rees, C.E. (1973): A steady-state model for sulphur isotope fractionation in bacterial reduction processes.- Geochimica et Cosmochimica Acta 37(5): 1141 - 1162.

Rehberg, K. (1997): Geologische und hydrogeologische Untersuchungen zur Phenolwasserversenkung im Raum Zeitz-Profen unter Einbeziehung des GIS ARC/INFO.- Diplomarbeit, Martin-Luther-Universität Halle/Wittenberg. –72 S.

Reichardt, G., Schulze, G. (1990): Studie zur Vorbereitung der Erkundungs- und Erschließungsprogramme auf Grundwasser im Buntsandstein und Zechstein für die Objekte Zeitz-Dobitschen.- Wismut AG, Geologischer Betrieb: 56 S., Grüna, unveröffentlicht.

Richter, C. (2002): Ergebnisbericht zu geophysikalischen Bohrlochmessungen und Ausbaukontrollmessungen im Rahmen des Forschungsvorhabens zur Phenolwasserversenkung in Profen und Deuben.- HGN Hydrogeologie GmbH: 24 S., Torgau, unveröffentlicht.

Rickard, D.T. (1975): Kinetics and mechanisms of pyrite formation at low temperatures.- American Journal of Science 275: 636 - 652.

Rippen, G. (1995): Handbuch Umweltchemikalien: Stoffdaten, Prüfverfahren, Vorschriften; Loseblattsammlung.- ecomed-Verlag, Landsberg/Lech.

Roberts, D.J., Fedorak, P.M., Hrudey, S.E. (1987): Comparison of the fates of the methyl carbons of m-cresol and p-cresol in methanogenic consortia.- Can. J. Microbiol. 33: 335 - 338.

Roberts, D.J., Fedorak, P.M., Hrudey, S.E. (1990): CO2 incorporation and 4-hydroxy-2-methylbenzoic acid formation during the anaerobic metabolism of m-cresol by a methanogenic consortium.- Appl. Environ. Microbiol. 56: 472 - 478.

Roberts, W.M.B., Walker, A.L., Buchanan, A.S. (1969): The chemistry of pyrite formation in aqueous solution and its relation to the depositional environment.- Mineral. Deposita 4: 18 - 29.

Rolfes, J. (1999): Bestimmung von Alkylphenolen in Rohölen.- Dissertation, Universität Münster. – 274 S.

Rosenfeld, J.K., Plumb, R.H. (1991): Ground water contamination at wood treatment facilities.- Ground Water Monitoring Review 11(2): 133 - 140.

Rudolphi, A., Tschech, A., Fuchs, G. (1991): Anaerobic degradation of cresols by denitrifying bacteria.- Arch. Microbiol. 155: 238 - 248.

Sasaki, K., Tsunekawa, M., Ohtsuka, T., Konno, H. (1998): The role of sulfur-oxidizing bacteria Thiobacillus thiooxidans in pyrite weathering.- Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 133: 269 - 278.

Schink, B., Philipp, B., Müller, J. (2000): Anaerobic degradation of phenolic compounds.- Naturwissenschaften 87: 12 - 23.

Schoonen, M.A.A., Barnes, H.L. (1991a): Reactions forming pyrite and marcasite from solution: II. Via FeS precursors below 100°C.- Geochimica et Cosmochimica Acta 55: 1505 - 1514.

Schoonen, M.A.A., Barnes, H.L. (1991b): Reactions forming pyrite: I. Nucleation of FeS2 below 100°C.- Geochimica et Cosmochimica Acta 55: 1495 - 1504.

Schulte, U., Strauss, H., Bergmann, A., Obermann, P. (1997): Isotopenverhältnisse der Schwefel- und Kohlenstoffspezies aus Sedimenten und tiefen Grundwässern der Niederrheinischen Bucht.- Grundwasser 3/97: 103 - 110.

Schwarzenbach, R.P., Westall, J.C. (1981): Transport of nonpolar organic compounds from surface water to groundwater: laboratory sorption studies.- Environ. Sci. Technol. 15: 1360 - 1367.

Schwarzenbach, R.P., Gschwend, P.M., Imboden, D.M. (1993): Environmental organic chemistry.- 681 S., John Wiley & Sons, Inc., New York.

Shu, H.-T., Danyun, L., Scala, A.A., Ma, Y.H. (1997): Adsorption of small organic pollutants from aqueous streams by aluminosilicate-based macroporous material.- Separation Purification Tech. 11: 27 - 36.

Singh, B.R. (1984a): Sulfate sorption by acid forest soils: 2. Sulfate adsorption isotherms with and without organic matter and oxids of aluminium and iron.- Soil Sci. 138: 294 - 297.

Singh, B.R. (1984b): Sulfate sorption by acid forst soils: 3. Desorption of sulfate from adsorbed surfaces as a function of time, desorbing ion, pH and amount of adsorption.- Soil Sci. 138: 346 - 353.

Smith, J.A., Novak, J.T. (1987): Biodegradation of chlorinated phenols in subsurface soils.- Water Air Soil Pollut. 33: 29 - 42.

Smith, J.A., Jaffé, P.R., Chiou, C.T. (1990): Effect of ten quaternary ammonium cations on tetrachloromethane sorption to clay from water.- Environ. Sci. Technol. 24: 1167 - 1172.

Smith, R.E. (1996): EPA mission research in support of hazardous waste injection 1986 - 1904.- In: Apps, J.A., Tsang, C. (eds), Deep Well Disposal of Hazardous Waste: Scientific and Engineering Aspects. 9 - 24, Academic Press, New York.

Smolenski, W.J., Suflita, J.M. (1987): Biodegradation of cresol isomers in anoxic aquifers.- Appl. Environ. Microbiol. 53: 710 - 716.

Spence, M.J., Bottrell, S.H., Thornton, S.F., Lerner, D.N. (2001): Isotopic modelling of the significance of bacterial sulphate reduction for phenol attenuation in a contaminated aquifer.- Journal of Contaminant Hydrology 53(3-4): 285 - 304.

Stone, A.T. (1987): Reductive dissolution of Manganese(III/IV) oxides by substituted Phenols.- Environ. Sci. Technol. 21: 979 - 988.

Strauss, H. (1997): The isotopic composition of sedimentary sulfur through time.- Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology 132: 97 - 118.

Streit, B. (1994): Lexikon Ökotoxikologie.- 899 S., VCH, Weinheim.

Struzina, A. (1997): Deubener Extrablätter.- Spektrum Mitarbeiter Zeitschrift der MIBRAG mbH Extra-Ausgabe zu Jubiläumsfeier Juni 1997.

Suflita, J.M., Liang,L., Saxena,A. (1989): The anaerobic biodegradation of o-, m- and p-cresol by sulfate-reducing bacterial enrichment cultures obtained from a shallow anoxic aquifer.- J. Ind. Microbiol. 4: 255 - 266.

Szewzyk, U., Szewzyk, R., Schink, B. (1985): Methanogenic degradation of hydroquinone and catechol via reductive dehydroxylation to phenol.- FEMS Micrbiol.Lett. 31: 79 - 87.

Szurlies, M. (1998): Upper Zechstein to Lower Buntsandstein near Caaschwitz.- Hall. Jhb. Geowiss.Reihe B, Beiheft 6: 155 - 157.

Taylor, B.E., Wheeler, M.C., Nordstrom, D.K. (1984a): Isotope composition of sulphate in acid mine drainage as a measure of bacterial oxidation.- Nature 308: 538 - 541.

Taylor, B.E., Wheeler, M.C., Nordstrom, D.K. (1984b): Stable isotope geochemistry of acid mine drainage: Experimental oxidation of pyrite.- Geochimica et Cosmochimica Acta 48: 2669 - 2678.

Taylor, B.E., Wheeler, M.C. (1994): Sulfur- and oxygen-isotope geochemistry of acid mine drainage in the Western United States: field and experimental studies revisited.- In: Alpers, C.N., Blowes, D.W. (eds), Environmental Geochemistry of Sulfide Oxidation. 481 - 514, Amer. Chem. Soc., Washington DC.

Taylor, P., Larter, S., Jones, M., Dale, J., Horstad, I. (1997): The effect of oil-water-rock partitioning on the occurrence of alkylphenols in petroleum systems.- Geochimica et Cosmochimica Acta 61(9): 1899 - 1910.

Teutsch, G., Grathwohl, P., Schiedek, T. (1997): Literaturstudie zum natürlichen Rückhalt / Abbau von Schadstoffen im Grundwasser.- Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg. 35/97: 51 S., Karlsruhe.

Thamdrup, B., Fossing, H., Finster, K., Hansen, J.W., Jorgensen, B.B. (1994): Thiosulfate and sulfite distributions in pore water of amrine sediments related to maganese, iron and sulfur geochemistry.- Geochimica et Cosmochimica Acta 58: 67 - 73.

Thode, H.G. (1991): Sulphur isotopes in nature and the environment: An overview.- In: Krouse, H.R., Grinenko, V.A. (eds), Stable Isotopes. Natural and Anthropogenic Sulphur in the Environment, SCOPE 43. 1 - 26, Wiley, New York.

Thornton, S.F., Quigley, S., Spence, M.J., Banwart, S.A., Bottrell, S., Lerner, D.N. (2001): Processes controlling the distribution and natural attenuation of dissolved phenolic compounds in a deep sandstone aquifer.- Journal of Contaminant Hydrology 53(3-4): 233 - 267.

Tonndorf, H. (1965): Beiträge zur Geochemie des randnahen Zechsteins in den Mulden von Zeitz-Schmölln und Borna.- Freiberger Forschungshefte C 187: 1 - 96.

Tonndorf, H. (1994): Metallogenie des Urans im ostdeutschen Zechstein.- Abh. Sächs. Akad. Wiss. Leipz., Math. Naturwiss. Klasse 58(3): 1 - 132.

Toran, L., Harris, R.F. (1989): Interpretation of sulfur and oxygen isotopes in biological an abiological sulfide oxidation.- Geochimica et Cosmochimica Acta 53: 2341 - 2348.

Trudinger, P.A. (1986): Chemistry of the sulfur cycle.- Sulfur in agriculture, Agronomy Monograph, 1 - 22, Academic Press, New York.

Tschech, A., Fuchs, G. (1989): Anaerobic degradation of phenol via carboxylation to 4-hydroxybenzoate: in vitro study of isotope exchange between 14CO2 and 4-hydroxybenzoate.- Arch. Microbiol. 152: 594 - 599.

Tuttle, M.L., Goldhaber, M.B., Williamson, D.L. (1986): An analytical scheme for determining forms of sulphur in oil shales and associated rocks.- Talanta 33: 953 - 961.

U.S.EPA (1996a): Soil Screening Guidance: Technical Background Document.- US EPA Office of Solid Waste and Emergency Response . EPA/540/R95/128: 161 S., Washington DC.

U.S.EPA (1996b): Superfund Chemical Data Matrix.- Office of Emergency and Remedial Response. EPA/540/R-96/028: 49 S., Washington, DC.

U.S.EPA (1999): Methods for organic chemical analysis of municipal and industrial wastewater, appendix A to part 136, method 604- phenols.- U.S. Environnmental Protection Agency: 22 S., http://www.epa.gov/waterscience/methods/guide/methods.html.

Ulrich, G.A., Martino, D., Burger, K., Routh, J., Grossman, E.L., Ammerman, J.W., Suflita, J.M. (1998): Sulfur cycling in the terrestrial subsurface: Commensal interactions, spatial scales and microbial heterogeneity.- Microbial Ecology 36(2): 141 - 151.

Ulrich, H. (1964): Zur Stratigraphie und Paläontologie der marin beeinflussten Randfazies des Zechsteins in Ostthüringen und Sachsen.- Freiberger Forschungshefte C169: 1 - 162.

Umweltbundesamt (2000): Daten zur Umwelt 2000: Zustand der Umwelt in Deutschland.- E. Schmidt : 380 S., Berlin.

van Cappellen, P., Charlet, L., Stumm, W., Wersin, P. (1993): A surface complexation model of carbonate mineral-aqueous solution interface.- Geochim. Cosmochim. Acta 57: 3505 - 3518.

van Heemst, J.D.H., van Bergen, P.F., Stankiewicz, B.A., de Leeuw, J.W. (1999): Multiple sources of alkylphenols produced upon pyrolysis of DOM, POM and recent sediments.- J. Anal. and Appl. Pyrolysis 52: 239 - 256.

van Schie, P.M., Young, L.Y. (2000): Biodegradation of Phenol: Mechanisms and Applications.- Bioremediation Journal 4(1): 1 - 18.

van Stempvoort, D.R., Fritz, P., Drimmie, R.J., Wills, J.J. (1987): The oxygen isotopic compositions of sulphates in the upland forest of the Plastic lake watershed.- Conference Proceedings, International Symposium on acidification and water pathways Bolkesjo.

van Stempvoort, D.R., Krouse, H.R. (1994): Controls of d18O in sulfate- review of experimental data and application to specific environments.- In: Alpers, C.N., Blowes, D.W. (eds), Environmental geochemistry of sulfide oxidation. 447 - 480, Amer. Chem. Soc., Washington D.C.

Verschueren, K. (1996): Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals.- 2064 S., Van Nostrand Reinhold, New York.

Viehweg, M., Bohnwagner, N. (1994): Hydrogeologischer Ergebnisbericht Grundwassermeßstellen Plattendolomit Zeitz.- DFA GmbH: 41 S., Chemnitz, unveröffentlicht.

von Alberti, H.-J. (1983): Schwelfibel.- 107 S., VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig.

von der Trenck, K.T., Röder, R., Slama, H., Markard, C., Kühl, C. (1999): Ableitung von Geringfügigkeitsschwellen zur Beurteilung von Grundwasserverunreinigungen.- Umweltmed. Forsch. Prax. 4(6): 335 - 346.

von Storch, K. (1998): Herkunft der balneologisch wertbestimmenden Eigenschaften in sächsischen Mineral- und Thermalwässern.- Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, 24/1998: 161 S., Leipzig.

Wagenbreth, O. (1958): Beziehungen zwischen dem Tertiär und dem prätertiären Untergrund im Weißelsterbecken.- Freiberger Forschungshefte C 53: 1 - 144.

Wang, Q.W., Morse, J.W. (1996): Pyrite formation under conditions approximating those in anoxic sediments- 1. Pathway and morphology.- Marine Chemistry 52(2): 99 - 121.

Wang, Y.T., Suidan, J.T., Pfeffer, J.T., Najm, I. (1988): Effects of some alkyl phenols on methanogenic degradation of phenol.- Appl. Environ. Microbiol. 54: 1277 - 1279.

Weber, E.H. (1955): Gutachterliche Stellungnahme zur Phenolwasserversenkung im Gebiet Profen und Deuben-Trebnitz.- Bezirksstelle für Geologie: Halle/Saale, unveröffentlicht.

Weber, W. (1984): Hydrogeologischer Ergebnisbericht Vorerkundung Wasserwerk Hagenest.- VEB Hydrogeologie Nordhausen BT Torgau: 72 S., unveröffentlicht.

Weber, W. (1991): Hydrogeologisches Gutachten zur Frage des geogen oder anthropogen beeinflussten Chemismus der Grundwässer der Wasserwerke Pegau, Groitzsch und Hagenest.- HGN Hydrogeologie GmbH NL Torgau: 30 S., unveröffentlicht.

Widdel, F., Hansen, T.A. (1992): The dissimilatory sulfate and sulfur-reducing bacteria.- In: Balows, A. (ed), The Procaryotes. 583 - 624, Springer, Berlin,Heidelberg, New York.

Wilkin, R.T., Barnes, H.L. (1996): Pyrite formation by reactions of iron monosulfides with dissolved inorganic and organic sulfur species.- Geochimica et Cosmochimica Acta 60(21): 4167 - 4179.

Williams, G.M., Pickup, R.W., Thornton, S.F., Lerner, D.N., Mallinson, H.E.H., Moore,Y., White, C. (2001): Biogeochemical characterisation of a coal tar distillate plume.- Journal of Contaminant Hydrology 53(3-4): 175 - 197.

Wisotzky, F. (1994): Untersuchungen zur Pyritoxidation in Sedimenten des Rheinischen Braunkohlereviers und deren Auswirkungen auf die Chemie des Grundwassers.- Bes. Mitt. Dt. Gewässerk. Jhb. 58: -158.

Wisotzky, F., Obermann, P. (2001): Acid mine groundwater in lignite overburden dumps and its prevention- the Rhineland lignite mining area (Germany).- Ecological Engineering 17: 115 - 123.

Wu, P.X., Lioa, Z.W., Zhang, H.F., Guo, J.G. (2001): Adsorption of phenol on inorganic-organic pillared montmorillonite in polluted water.- Environment International 26: 401 - 407.

Wucher, K., Wunderlich, J., Roselt, U., Rietzler, J., Wolf, G. (1994): Lage und Bemessung von Entnahmebrunnen zur Grundwassersanierung sowie Varianten zur Grundwasseraufbereitung im Werksgelände der ehemaligen VVG Rositz und in dessen Abstrombereich: Teil 1 Hydrogeologische Grundlagen.- GEOS Ingenieurbüro GmbH; Ingenieurgesellschaft Wasser- und Tiefbau mbH: 145 S., Jena, Weimar, unveröffentlicht.

Zhabina, N.N., Volkov, I.I. (1978): A method of determination of various sulfur compounds in sea sediments and rocks.- In: Krumbein, W. E. ed. (ed), Environmental Biogeochemistry and Geomicrobiology, Vol.3: Methods, Metals and assessment. 735 - 746, Ann Arbor Science Publishers, Ann Arbor, MI.

Zhang, X., Wiegel, J. (1990): Isolation and Partial Characterization of a Clostridium Species Transforming para-Hydroxybenzoate and 3,4-Dihydroxybenzoate and Producing Phenol at the Final Transformation Products.- Microb. Ecol. 20: 103 - 121.

Zhang, X., Morgan, T.V., Wiegel, J. (1990): Conversion of 13C-1 Phenol to 13C-4 Benzoate, an Intermediate Step in the Anaerobic Degradation of Chlorophenols.- FEMS Microbiol. Lett. 67 : 63 - 66.

Zhang, X., Wiegel, J. (1994): Reversible conversions of 4-hydroxybenzoate and phenol by Clostridium hydrobenzoicum.- Appl.Environ.Microbiol. 60: 4182 - 4185.

Zhu, L.Z., Chen, B.L., Shen, X.Y. (2000): Sorption of phenol, p-nitrophenol, and aniline to dual-cation organobentonites from water.- Environmental Science & Technology 34(3): 468 - 475.

ANLAGEN

Anlage 1: Brunnenausbau des Schluckbrunnen Trebnitz 3/42

Anlage 2: Schichtenverzeichnisse und Ausbaupläne der UFZ-Forschungsbohrungen an den Standorten Profen und Deuben

Anlage 3: Analysenmethoden und Nachweißgrenzen der untersuchten anorganischen chemischen Parameter sowie DOC

Anlage 4: Chemische/Physikalische Eigenschaften von Phenol und Alkylphenolen (Varhanickova et al. 1995; U.S. EPA (1996a,b); k.A. = keine Angaben in der Literatur verfügbar.

Anlage 5: Nachweisgrenze (NWG), Erfassungsgrenze (EFG), Bestimmungsgrenze (BSG) des SPEME-GC-MS-Analyseverfahrens von Licha et al. (2001a,b) nach DIN 32645

Anlage 6: Organischer Kohlenstoff im unbelasteten Plattendolomit aus Thüringen TIC mit Kohlenstoff-Schwefelanalysator CS 500 (Analytik Jena AG)

Anlage 7: Analysenergebnisse Phenole (Gestein)

Anlage 8: Analysenergebnisse Phenole (Grundwasser GWL II)

Anlage 9: Analysenergebnisse der untersuchten anorganischen Parameter und Isotope im Grundwasser des GWL II.

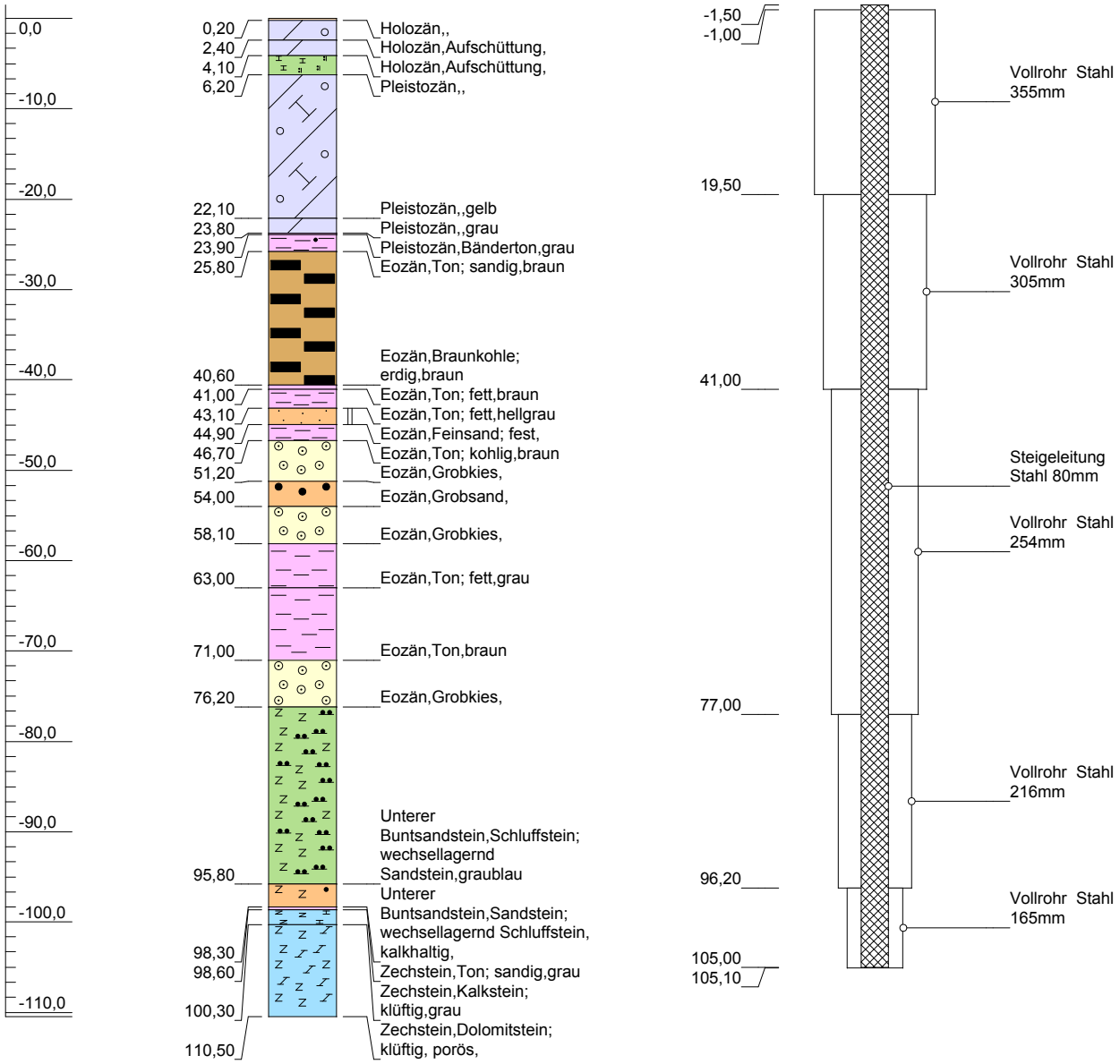
Anlage 10: Isotopengehalte des untersuchten Zechstein-Anhydrits aus Krölpa, Thüringen.

Anlage 11: Isotopengehalte des Sulfats aus Eluaten der Aquifersedimente sowie der sedimentären Disulfide.

Anlage 12: Analysenergebnisse der untersuchten anorganischen Parameter und Isotope im Grundwasser (GWL 5, GWL 6) und im Oberflächenwasser der Weißen Elster.

m u. GOK (196,86 m NN)

Schluckbrunnen Trebnitz 3/42



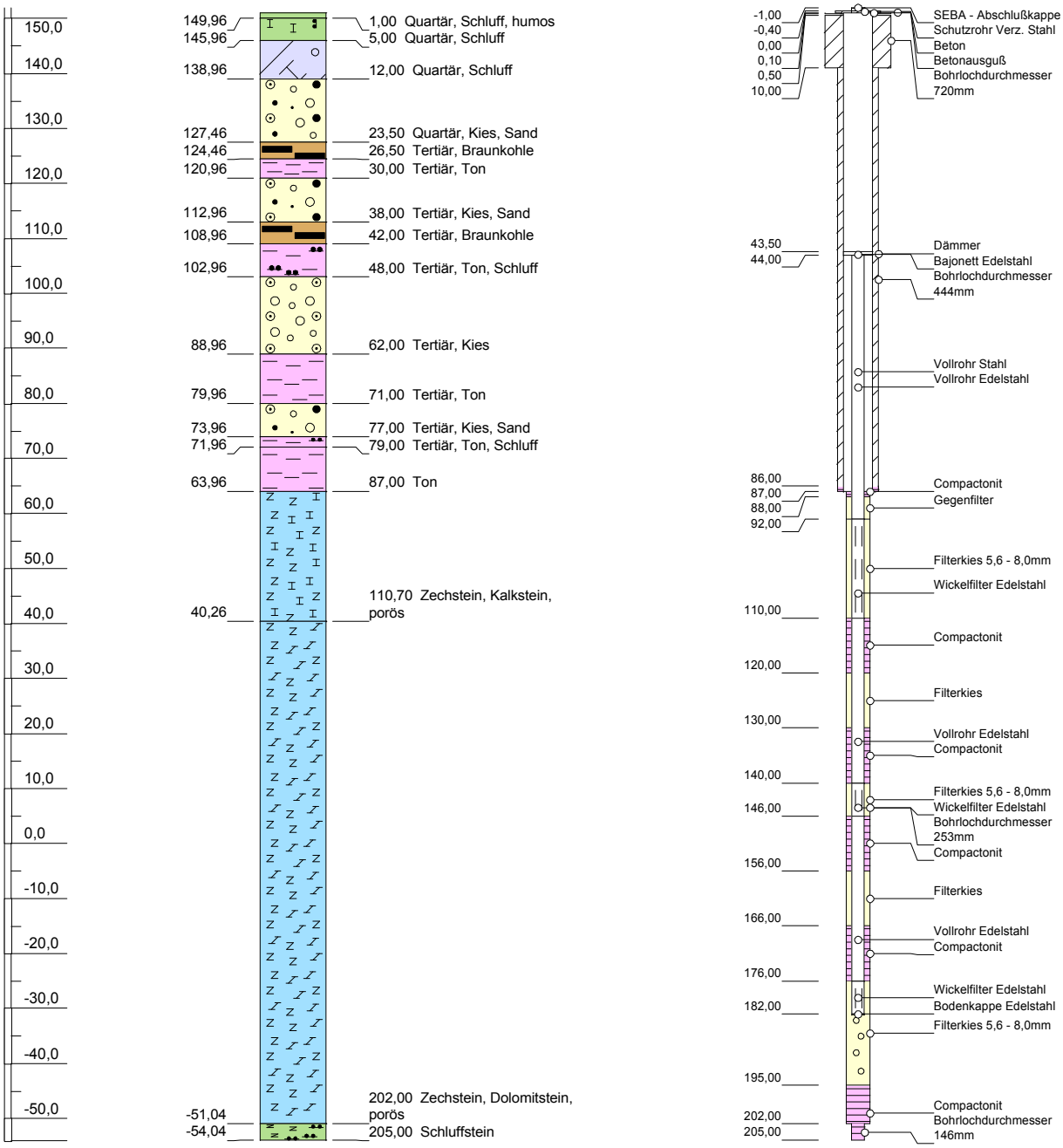
Höhenmaßstab: 1:750 Horizontalmaßstab: 1:20

Blatt 1 von 1

Projekt:	**Phenolversenkung Profen Deuben**		Anlage 1
Bohrung:	**Trebnitz 3/42**		
Auftraggeber:	A. Riebeck'sche Montanwerke AG	Rechtswert:	4504180
Bohrfirma:	Gebr. Schmidt	Hochwert:	5662710
Bearbeiter:	Krummhaar, Rehberg	Ansatzhöhe:	196,86m
Datum:	20.06.1942	Endtiefe:	110,50m

m u. GOK (150,96 m NN)

UFZ 101



Höhenmaßstab: 1:1200 Horizontalmaßstab: 1:20

Blatt 1 von 1

Projekt:	**Phenolversenkung Profen Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 101**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum GmbH	Rechtswert:	4514041
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert:	5665475
Fachaufsicht:	Präger, GFE Consult GmbH	Ansatzhöhe:	150,96m
Datum:	15.01.2002	Endtiefe:	205,00m

UFZ 101

m u. GOK (150,96 m NN)

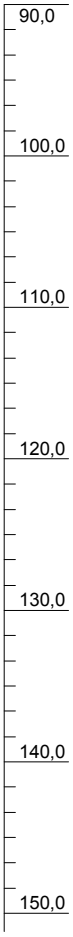
149,96	Holozän, Schluff, stark feinsandig, humos, Mutterboden, dunkelbraun
145,96	Pleistozän, Grobschluff, stark feinsandig, humos, Löß, hellocker
142,96	Pleistozän, Schluff, schwach tonig, sehr schwach feinsandig, Geschiebemergel, hellbraun
141,96	Pleistozän, Feinkies bis Mittelkies, schwach feinsandig, schwach mittelsandig, grobsandig, schwach grobkiesig, braun
138,96	Pleistozän, Schluff, schwach tonig, schwach feinsandig, Geschiebemergel, hellbraun
135,96	Pleistozän, Mittelkies, schwach grobsandig, feinkiesig, grobkiesig, hellbraungrau
128,46	Pleistozän, Feinkies, grobsandig, mittelkiesig, schwach grobkiesig, hellgrau bis hellbraun
124,46	Tertiär, Braunkohle, schwach schluffig, dunkelbraun
121,96	Tertiär, Ton, schwach schluffig, hellgraubraun
120,96	Tertiär, Ton, kohlig, braungrau, geschliert
118,96	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, sehr schwach feinsandig, dunkelgrau, stark mit kohligem Ton versetzt, gerundete Gerölle
114,96	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, grau, mit dunkelgrauem, kohligem Ton durchsetzt, fast ausschließlich Quarz
113,96	Tertiär, Feinkies, grobsandig, mittelkiesig, schwarzgrau, mit schwarzgrauem, kohligem Ton durchsetzt
112,96	Tertiär, Feinkies, grobsandig, schwach mittelkiesig, dunkelgrau, mit zahlreichen grauen Tonbrocken
108,96	Tertiär, Braunkohle, dunkelbraun
107,96	Tertiär, Ton bis Schluff, stark kohlig, dunkelbraun
106,96	Tertiär, Schluff, schwach tonig, stark kohlig, dunkelbraun
102,96	Tertiär, Ton, sehr schwach schluffig, hellgrau bis dunkelgrau, mit einzelnen Braunkohlenbröckchen und Xylitstückchen
100,96	Tertiär, Feinkies, mittelkiesig, grau, fast ausschließlich Quarzgerölle, sehr vereinzelt Kohleflitter
99,96	Tertiär, Feinkies, schwach grobsandig, schwach mittelkiesig, dunkelgrau, mit dunkelgrau-schwarzem, kohligem Ton durchsetzt
95,96	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, schwach grobsandig, grau, an der Krone einzelne graue Tonbröckchen
94,96	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, dunkelgrau, mit einzelnen kohligen Tonbröckchen
93,96	Tertiär, Mittelkies, dunkelgrau, vermengt mit dunkelgrauem Ton
88,96	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, grau, sehr vereinzelt graue Tonbröckchen
80,96	Tertiär, Ton, sehr schwach schluffig, hellgrau, sehr vereinzelt Kohlebröckchen bis 2 mm
79,96	Tertiär, Ton, hellgrau, mit einzelnen Kiesen
78,96	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, grau bis dunkelgrau, hauptsächlich Quarzgerölle, einzelne Tonbrocken
75,96	Tertiär, Mittelkies, hellgrau, fast ausschließlich schwach gerundete Quarzgerölle, einzelne Tonbröckchen
74,96	Tertiär, Feinkies, schwach grobsandig, stark mittelkiesig, hellgrau, Gerölle überwiegend splittrig, mit hellgrauen Tonbröckchen
73,96	Tertiär, Mittelkies, stark feinkiesig, stark grobkiesig, grau, mit grauen Tonbrocken durchsetzt
72,96	Tertiär, Ton bis Schluff, dunkelgrau, mit Grobkiesen durchsetzt
71,96	Tertiär, Ton bis Schluff, dunkelgrau
70,96	, Ton, dunkelgrau bis blaugrau, mit einzelnen Kalksplittern, (? Einsturzgebirge)
64,96	, Ton, stark schluffig, dunkelgrau, bei 82,0 m einzelne Kalkgerölle, (? Einsturzgebirge)
63,96	, Ton, stark schluffig, dunkelgrau, zahlreiche kalkige, kristalline Gerölle bis 2 cm, (? Einsturzgebirge)
62,96	Zechstein, Kalkstein, kristallin, porös, Riff, dunkelgrau
60,96	Zechstein, Kalkstein, Riff, grau bis dunkelgrau, kristalline Einschlüsse in mm-Größe, tonig verkittet, stark kalkhaltig

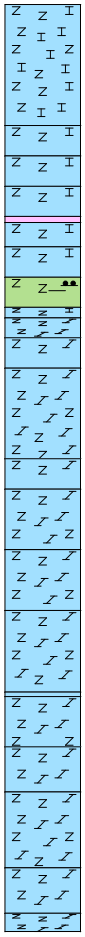
Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 101**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4514041	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5665475	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 150,96m	
Datum:	11.05.2001	Endtiefe: 205,00m	

UFZ 101

m u. GOK (150,96 m NN)





52,96 Zechstein, Kalkstein, stark porös, Riff, grau bis braungrau, Hohlräume bis 1 cm, geschätzte Porosität 20 %, mit Kalkspatkristallbelägen, unstrukturiert, geringer Kerngewinn (10-30%)

50,96 Zechstein, Kalkstein, dunkelgrau, wie zuvor, etwas dichter, ab 99,0 m vereinzelt geschichtete Bereiche zu erkennen, Kerngewinn 40%

48,96 Zechstein, Kalkstein, Riff, grau bis dunkelgrau, Porosität ca. 15 %, , Kavernen bis 1,5 cm, mit Kalkspatkristallen bis 0,1 mm (Hohlraumbeläge), Kerngewinn 35%

46,96 Zechstein, Kalkstein, porös, Riff, hellgrau bis grau, mit Kavernen bis 1 cm, Textur nicht erkennbar, einzelne Bryozoenreste, Kerngewinn 30%

46,56 Zechstein, Tonstein, dicht, Riff, dunkelgrau, unstrukturiert, vermutlich durchsetzt von Kalk, mit Harnischstriemungen

44,96 Zechstein, Kalkstein, zellig bis porös, Riff, hellgrau bis grau, Kavernen bis 1 cm, geschätzte Porosität 15-20%, bei 105 m schräge Klüftung 45° mit Tonsteinfüllungen

42,96 Zechstein, Kalkstein, Riff, grau bis hellgrau, wie zuvor, mit mm-starken, tonigen, grauen Zwischenlagen und Geröllen (Riffschutt), Kerngewinn 30%

40,96 Zechstein, Schluffstein, tonig, sandig, dolomitisch, Riff, hellbraun, deutlich geschichtet, haarfeine schwärzl. Strukturen (Algenrasen), daneben Einzelstücke von porösen Kalksteinen, Kerngewinn 30%

40,26 Zechstein, Kalkstein, porös, kavernös, Riff, braungrau, Kavernen bis 1,5 cm, mit pyritschen Belägen, ohne erkennbare Textur

38,96 Zechstein, Dolomitstein, porös, Riff, hellbraun, zellig strukturiert

36,96 Zechstein, Dolomitstein, kavernös, porös, Riff, hellbraungrau, mit zahlreichen Fossilresten (dunkelgrauer Belag), einzelne 30-50° einfallende Risse, mit Algenrasenbelag, Kerngewinn 100%

30,96 Zechstein, Dolomitstein, kavernös, stark porös, Riff, hellbraungrau, geschätzte Porosität 25-30%,zahlr.weiße Röhren (Pflanzenreste),zahlr.Muscheln (Skelettgefüge), einz.Risse mit dunkelgr. Belägen, Kerngewinn 98%

28,96 Zechstein, Dolomitstein, stark porös, Riff, hellbraungrau, Kavernen bis 3 cm Länge, geschätzte Porosität 25-30%, zahlreiche Reste von Riffbildnern (Korallen, Muscheln, Schnecken)

24,96 Zechstein, Dolomitstein, porös, Riff, hellbraungrau, Kavernen bis 2 cm, Fossilreste teilweise lagenweise eingeregelt, einz. Risse bis 45° geneigt, Kerngewinn 100%

20,96 Zechstein, Dolomitstein, porös, Riff, hellbraungrau, Kavernen bis 3 cm, zahlreiche Bryozoenreste, keine Risse erkennbar, Kerngewinn 100%

15,56 Zechstein, Dolomitstein, porös, Riff, hellbraungrau, Kavernen bis 4 cm, insgesamt erscheint Riff kompakter, bei 134,4 eine schräggestellte Schlufflage (fossilleer), Kg 100%

15,26 Zechstein, Dolomitstein, Riff, hellgraubraun, wie zuvor nur deutlich dichter, Kerngewinn 100%

11,96 Zechstein, Dolomitstein, porös, Riff, hellgraubraun, selten Kavernen bis 2 cm, einz. dichtere, feinkörnigere Bereiche, einz. Risse mit 45-90° fallend, einz. Pyritkristalle, schwarze Ausblühungen, Kerngewinn 100%

8,96 Zechstein, Dolomitstein, Riff, hellgraubraun, Wechsel von porösen und dichteren Bereichen, zahlreiche Bryozoenreste, Kerngewinn 47%

3,96 Zechstein, Dolomitstein, schwach porös, Riff, graubraun, stark zerbohrt, kaum Kavernen, teilw. körnig, einz. weiße und schw. Ausscheidungen, unt. Teil unregelmäßig zerfallend, Kerngewinn 32%

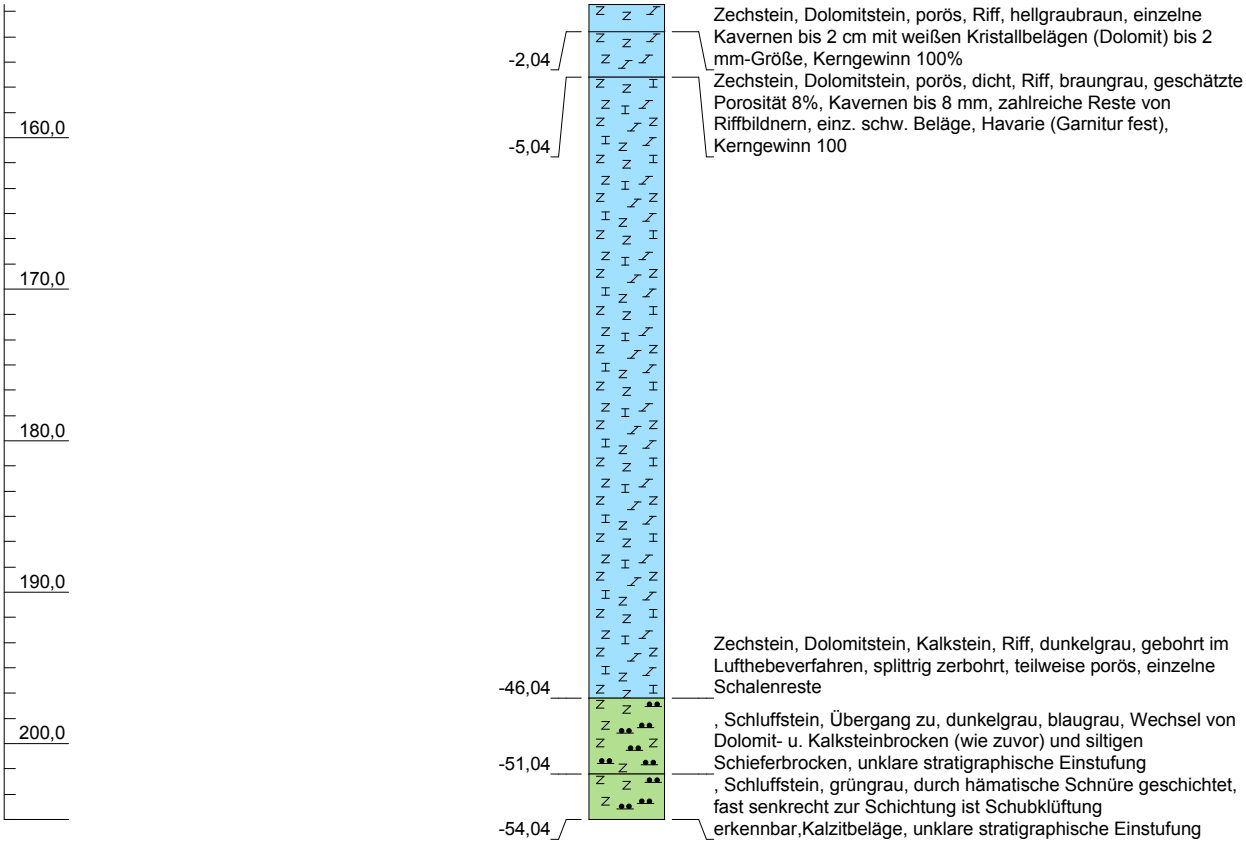
0,96 Zechstein, Dolomitstein, sehr schwach porös, Riff, graubraun, nur sehr vereinz. Kavernen, einz. steilgestellte Risse mit dunkelgrauen Belägen, Kerngewinn 80%

-0,24 Zechstein, Dolomitstein, dicht, sehr schwach porös, Riff, dunkelgraubraun, kiesig zerbohrt, mit harnischartigen Bewegungsflächen bis 1 cm Länge, einz. schwarze Beläge, Kerngewinn 58%

Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 101**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4514041	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5665475	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 150,96m	
Datum:	11.05.2001	Endtiefe: 205,00m	

UFZ 101

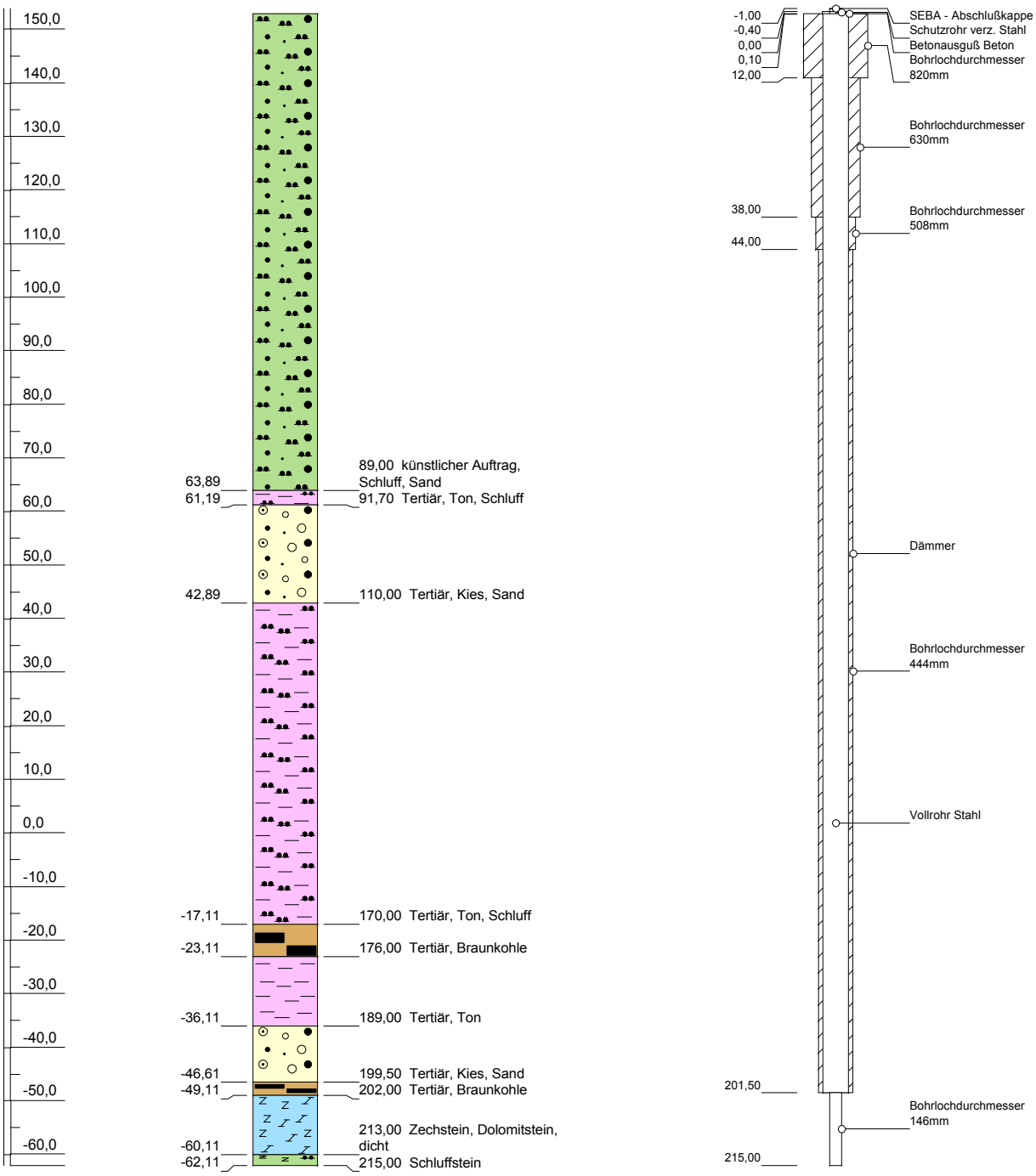


Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 101**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4514041	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5665475	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 150,96m	
Datum:	11.05.2001	Endtiefe: 205,00m	

m u. GOK (152,89 m NN)

UFZ 201



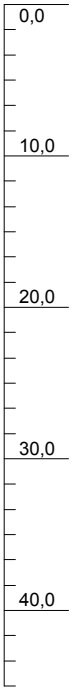
Höhenmaßstab: 1:1200 Horizontalmaßstab: 1:20

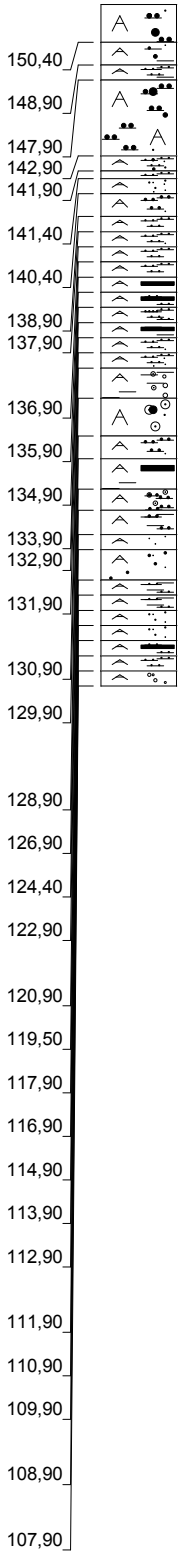
Blatt 1 von 1

Projekt:	**Phenolversenkung Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 201**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum GmbH	Rechtswert:	4513081
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert:	5666065
Fachaufsicht:	Präger, GFE Consult GmbH	Ansatzhöhe:	152,89m
Datum:		Endtiefe:	215,00m

UFZ 201

m u. GOK (152,90 m NN)





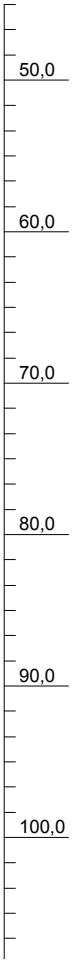
150,40	, Aufschüttung, Sand, schwach schluffig, schwach humos, schwach feinkiesig, sehr schwach grobkiesig, dunkelgraubraun, vereinzelt Steine , bei 0,8m Holz- u. Plastereste, stark kalkhaltig
148,90	, Aufschüttung, Sand, tonig, schwach schluffig, hellbraun, graubraun, kalkfrei bis kalkhaltig
147,90	, Aufschüttung, Schluff, tonig, feinsandig bis mittelsandig, gelbbraun bis graubraun, mit Sandlagen, stark kalkhaltig
142,90	, Aufschüttung, Schluff, sandig, tonig, kiesig, gelbbraun
141,90	, Aufschüttung, Schluff, stark sandig, tonig, kiesig, gelbbraun
141,40	, Aufschüttung, Schluff, feinsandig, gelbbraun, mit Geröllen durchsetzt, kalkhaltig
140,40	, Aufschüttung, Mittelsand, schluffig, stark feinsandig, gelbbraun, kalkhaltig
138,90	, Aufschüttung, Schluff, feinsandig, schwach mittelsandig, gelbbraun, mit Geröllen durchsetzt, kalkhaltig
137,90	, Aufschüttung, Schluff, braungrau, mit Ziegelresten
136,90	, Aufschüttung, Schluff, feinsandig, schwach mittelsandig, gelbbraun, mit Kalkschmitzen, Kohlelinsen (sekundär) und Geröllen, kalkhaltig
135,90	, Aufschüttung, Schluff, gelbbraun, dunkelgraubraun, vermengt mit Braunkohle, Ziegelreste
134,90	, Aufschüttung, Schluff, gelbbraun, dunkelgraubraun, einzelne Kohlelinsen
133,90	, Aufschüttung, Quarzit, Braunkohle, dunkelbraun, sandig vermengt
132,90	, Aufschüttung, Braunkohle, schluffig, sandig, dunkelbraun
131,90	, Aufschüttung, Braunkohle, schluffig, sandig, Schluff, tonig, feinsandig, dunkelbraun, grau, mit Kohlebröckchen
130,90	, Aufschüttung, Braunkohle, tonig, schluffig, sandig, dunkelbraun, grau, vermengt mit grauem Schluff, Feinsand u.Oberbodenmaterial, humos
129,90	, Aufschüttung, Schluff, feinsandig, dunkelbraun, gelbbraun, vermengt mit Braunkohle, Humusboden u. Geröllen
128,90	, Aufschüttung, Schluff, stark feinsandig, schwach mittelsandig, schwach tonig, sehr schwach feinkiesig, sehr schwach kohlig, hellbraun bis dunkelbraun, einzelne Fe-konkretionen, schwache Fließstruktur, kalkhaltig
126,90	, Aufschüttung, Ton, stark kiesig, stark kohlig, dunkelbraun bis schwarzbraun, unregelmäßige Lagerung, kalkfrei bis kalkhaltig
124,40	, Aufschüttung, Feinkies bis Grobkies, stark sandig, schluffig, kohlig, dunkelgrau, kalkfrei
122,90	, Aufschüttung, Schluff, feinsandig, hellocker, mit Kohlepartikeln, rostfarben u. hellgrau gefleckt, kalkhaltig
120,90	, Aufschüttung, Ton, Braunkohle, dunkelbraun bis schwarzbraun, mit grüngrauen Schlufflinsen, Kohlestücken (Fettkohle), im Liegenden mit Kiesen, kalkfrei
119,50	, Aufschüttung, Mittelkies bis Grobkies, stark schluffig, sandig, Ton, kohlig, hellbraun, blaugrau, kalkhaltig bis stark kalkhaltig
117,90	, Aufschüttung, Ton, schluffig, dunkelblaugrau, mit Kohleeinschlüssen
116,90	, Aufschüttung, Braunkohle, Feinsand bis Mittelsand, kohlig, grau, einzelne braune Ton- u. Schluffbrocken, kalkfrei
114,90	, Aufschüttung, Mittelsand, feinsandig, grobsandig, feinkiesig, kohlig, grau, mit Kohle-, Ton- u. Schluffbröckchen, kalkfrei
113,90	, Aufschüttung, Ton, schluffig, feinsandig, weißgrau bis beige, kalkfrei
112,90	, Aufschüttung, Ton, schluffig, grau, vermengt mit grauen, kohleführenden Mittel- bis Grobsanden, kalkfrei
111,90	, Aufschüttung, Mittelsand, feinsandig, grobsandig, schwach feinkiesig bis schwach grobkiesig, kohlig, grau, einzelne Kohlebröckchen bis 2 cm Größe, kalkfrei
110,90	, Aufschüttung, Mittelsand, feinsandig, grobsandig, schwach feinkiesig bis schwach grobkiesig, kohlig, grau, kalkfrei
109,90	, Aufschüttung, Braunkohle, schluffig, tonig, braun, vermengt mit Mittelsand, braun, feinsandig, schwach grobsandig, kalkfrei
108,90	, Aufschüttung, Schluff, kohlig, braun bis hellgraubraun, vermengt mit Braunkohle und braunem Mittelsand wie zuvor, kalkfrei
107,90	, Aufschüttung, Mittelkies, feinkiesig, grobkiesig, schwach tonig, schwach schluffig, Aufschüttung, hellbraungrau, hauptsächlich Quarz, Flint, kalkhaltig

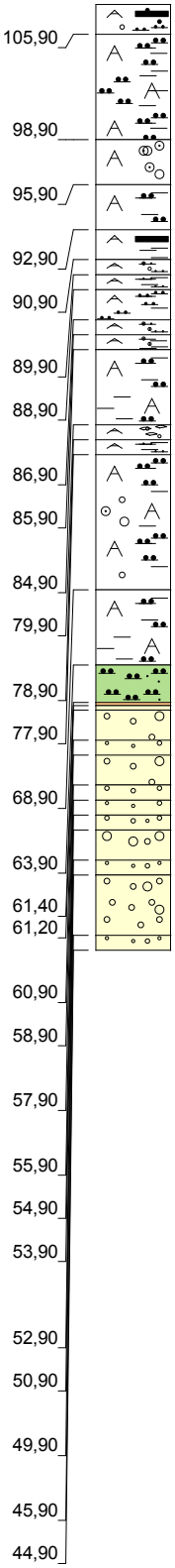
Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 201**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4513081	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5666065	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 152,90m	
Datum:	24.04.2001	Endtiefe: 215,00m	

UFZ 201

m u. GOK (152,90 m NN)





, Aufschüttung, Mittelkies, grobsandig, feinkiesig, Braunkohle, Schluff, Aufschüttung, schwarzbraun, kalkfrei

, Aufschüttung, Schluff, stark tonig, feinkiesig bis mittelkiesig, schwach grobkiesig, sehr schwach kohlig, dunkelgrau bis grau, kalkfrei

, Aufschüttung, Grobkies, mittelkiesig, schwach feinkiesig, schwach sandig, schwach tonig, schwach schluffig, hellgraubraun, überwiegend Quarz (angewittert, porös), kalkfrei

, Aufschüttung, Ton, schluffig, schwach grobkiesig, schwach feinsandig, schwach kohlig, grau, braun, unregelmäßig eingelagerte Kohlestücken, kalkfrei

, Aufschüttung, Braunkohle, stark tonig, schluffig, schwach feinkiesig, schwarz bis braun, unregelmäßig gelagert, kalkfrei

, Aufschüttung, Feinkies bis Mittelkies, schluffig, tonig, sehr schwach kohlig, dunkelgraubraun, überwiegend Quarz, seltener Kieselschiefer, kalkfrei

, Aufschüttung, Ton, schluffig, sehr schwach feinkiesig, hellbraungrau, kalkfrei

, Aufschüttung, Schluff, tonig, schwach kiesig, schwach sandig, schwach kohlig, dunkelbraun, bei 65,5 m gelbbraune, sandige Einlagerungen, kalkhaltig

, Aufschüttung, Mittelkies bis Grobkies, schluffig, feinkiesig, kohlig, hellgraubraun, überwiegend Quarz, kalkfrei

, Aufschüttung, Feinkies bis Grobkies, stark tonig, sehr schwach kohlig, dunkelgraubraun, vorwiegend Quarz, Porphyr, Xylithe 2cm bis 5cm Größe, schwach inkohlt, kalkfrei

, Aufschüttung, Ton, schluffig, schwach feinkiesig, schwach mittelkiesig, schwach kohlig, schwarzbraun, kalkfrei

, Aufschüttung, Grobkies, Steine, mittelkiesig, schwach feinkiesig, hellgrau, Geröllbestand: Qarz, Quarzit, Porphyr, Sandstein, kalkfrei

, Aufschüttung, Ton, schluffig, schwach kiesig, schwach kohlig, hellgrau, kalkfrei

, Aufschüttung, Kies, Schluff, tonig, schwach sandig, sehr schwach kohlig, dunkelgrau, überwiegend Quarz, Quarzit, Kieselschiefer, kohlige Tonbröckchen, kalkfrei

, Aufschüttung, Ton, schluffig, stark kohlig, schwach feinkiesig, graubraun bis schwarz, unregelmäßig strukturiert, mit Kohlebröckchen, kalkfrei

Tertiär, Schluff, stark feinsandig, schwach tonig, hellgrau, glimmerhaltig, kalkfrei

Tertiär, Feinsand, schwach schluffig, glimmerhaltig, kalkfrei

Tertiär, Feinkies, mittelkiesig, hellgrau, fast ausschließlich schwach gerundete Quarzgerölle, mit darüberlagerndem Ton vermengt, kalkfrei

Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, hellgrau, schwach gerundeter Quarzkies, kalkfrei

Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, hellgrau, vermengt mit Schluffbrocken, dunkelbraun, kohlig, feinsandig, glimmerig u. Tonbrocken, dunkelbraun, kalkfrei

Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, sehr schwach grobkiesig, hellgrau, an Kopf vermengt mit einz. Schluffbrocken, dunkelbraun,kohlig, feinsandig,glimmrig

Tertiär, Mittelkies, hellgrau, viel Quarz, (stark mit Antisolbrocken durchsetzt), kalkfrei

Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, hellgrau, vermengt mit Schluffbrocken, dunkelbraun, stark kohlig, kalkfrei

Tertiär, Mittelkies, feinkiesig, grobkiesig, grau bis dunkelgrau, vermengt mit Schluff-Ton-Brocken, dunkelgrau, feinsandig, kohlig und vereinzelt dunkelbraune, kohlige Schluff-Brocken, kalkfrei

Tertiär, Mittelkies, feinkiesig, grobkiesig, grau bis dunkelgrau, mit zahlreichen Schluffbrocken, dunkelbraun, kohlig, kalkfrei

Tertiär, Feinkies, mittelkiesig, schwach grobkiesig, grau, nur vereinzelt dunkelgraue Schluffbocken u. dunkelbraune kohlige Schluffbrocken (etwas Antisol), kalkfrei

Tertiär, Feinkies, mittelkiesig, schwach grobkiesig, grau, mit zahlreichen dunkelbraunen Kohle-Schluff-Brocken vermengt, (viel Antisol-gallertartig ausgefallen), kalkfrei

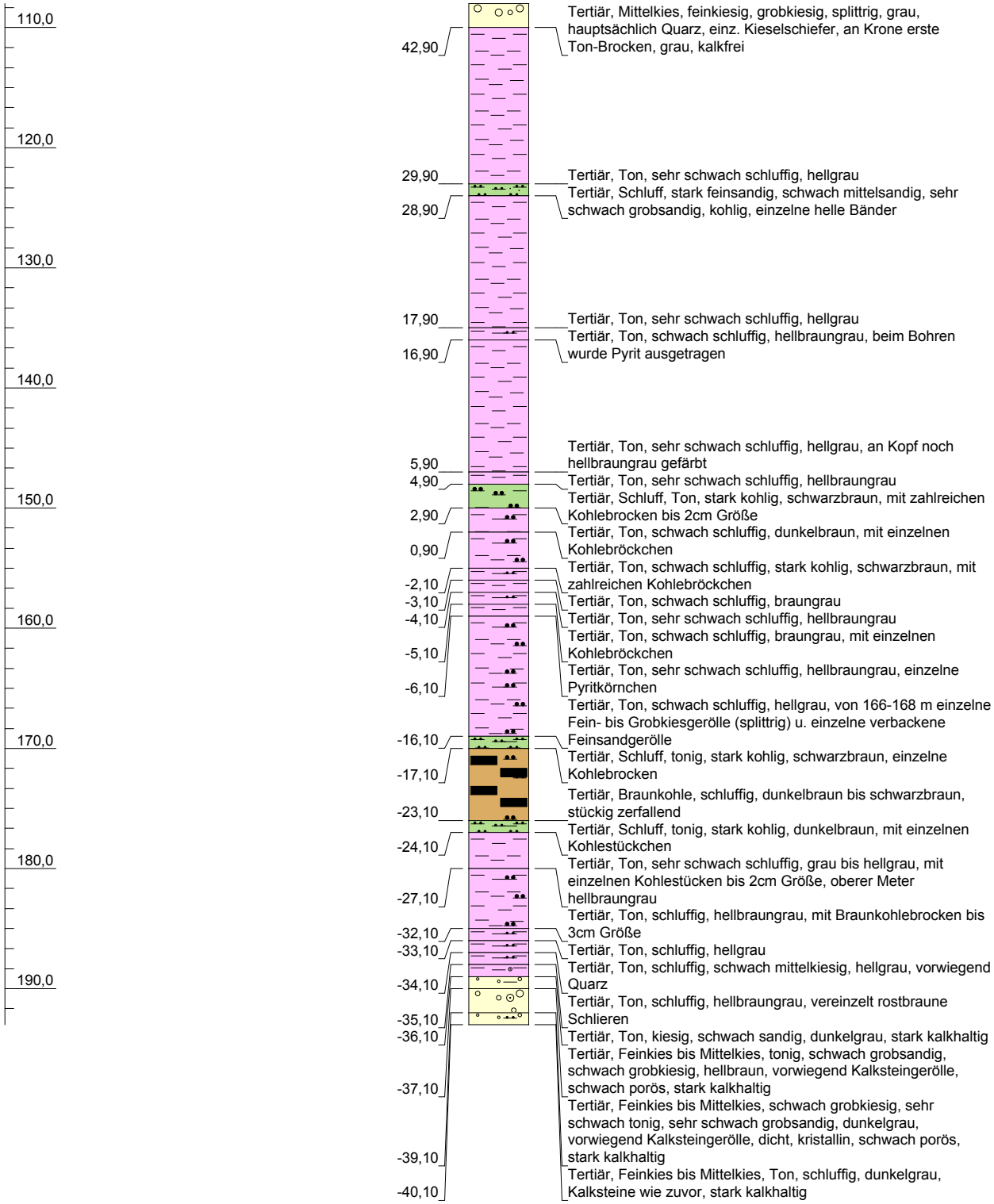
Tertiär, Feinkies, mittelkiesig, schwach grobkiesig, grau, nur vereinzelte dunkelbraune Schluffbrocken, kalkfrei

Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 201**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4513081	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5666065	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 152,90m	
Datum:	24.04.2001	Endtiefe: 215,00m	

UFZ 201

m u. GOK (152,90 m NN)



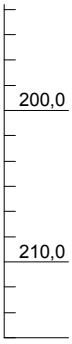
Höhenmaßstab: 1:500

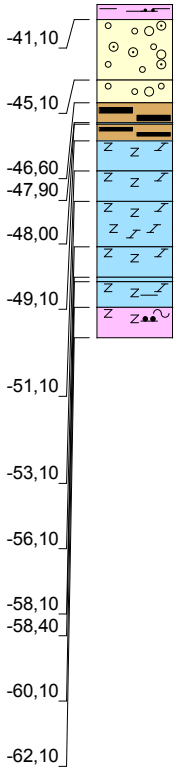
Blatt 3 von 4

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 201**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4513081	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5666065	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 152,90m	
Datum:	24.04.2001	Endtiefe: 215,00m	

UFZ 201

m u. GOK (152,90 m NN)





Tertiär, Ton, schluffig, braungrau, mit Braunkohlestückchen < 1cm, kalkfrei

Tertiär, Feinkies, Grobkies, mittelkiesig, schwach grobsandig, schwach tonig, weißbraungrau, vorwiegend gerundete Quarze, kalkfrei

Tertiär, Feinkies, schwach mittelkiesig, schwach grobsandig, schwach tonig, schwach schluffig, hellgrau, vorwiegend eckige und kantengerundete Quarze, kalkfrei

Tertiär, Braunkohle, hellbraun, stückig, kalkfrei

Tertiär, Dolomitstein, plattig, Braunkohle, schwach tonig, Pyritbeläge, stark kalkhaltig

Tertiär, Braunkohle, striemig, schwarzbraun bis grau, stückig, mit Ton, grau vermengt, bei 201,5-201,8m häufig weiße, tonige Sprenkel, kalkfrei

Zechstein, Dolomitstein, dicht, selten porös, Riff, hellgrau, in Bruchstücken von Grobsand bis Grobkiesgröße vorliegend, scharfkantig, mit Braunkohlen- und Tonbeimengungen (Nachfall?), stark kalkhaltig

Zechstein, Dolomitstein, dicht, sehr schwach geklüftet, Riff, grau bis dunkelgrau, ab 205m stark zerbrochen, einzelne Poren, Klüfte 80-90°, in Abständen von 10-15cm treten 5mm starke, fast horizontale Tonlagen, auf, fast horizontal geschichtet

Zechstein, Dolomitstein, dicht, sehr schwach geklüftet, Riff, grau bis dunkelgrau, Kluftbeläge: Pyrit, Schichteinfallen 5-10°, einz. Calzit- u. Tonlagen bis 4cm Stärke

Zechstein, Dolomitstein, dicht, Riff, grau bis dunkelgrau, sehr schwach geklüftet, Schichteinfallen 5-10°, bei 209,9m eine cm-starke Tonlage

Zechstein, Dolomitstein, Riff, grau bis dunkelgrau, wie zuvor

Zechstein, Dolomitstein, tonig, Riff, dunkelgrau, Schichteinfallen 5-10°, ungeklüftet, einz. dünne Calzit- u. Pyritlagen, vereinz. Calzitlinsen bis 0,5cm

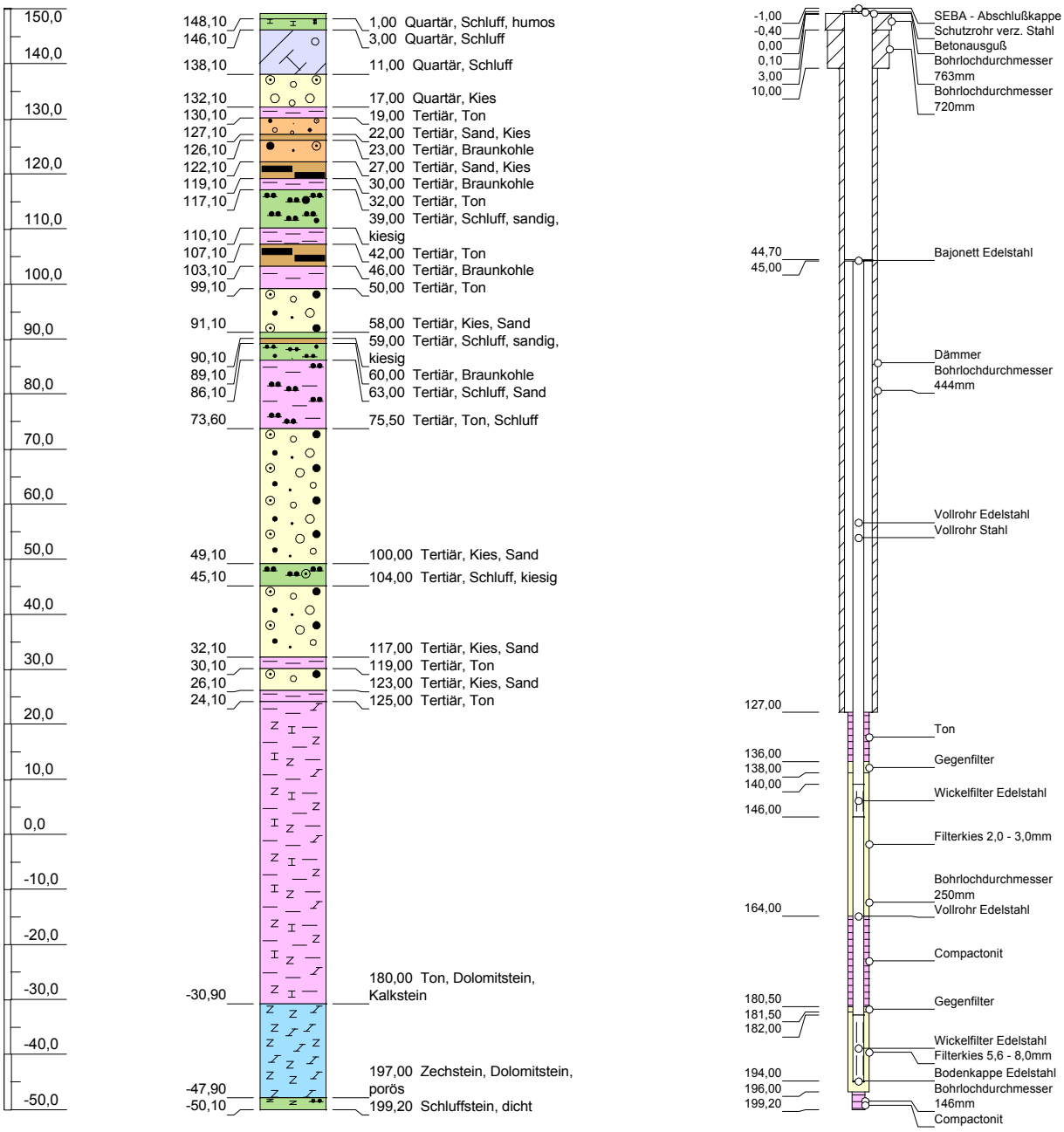
, Schiefer, schluffig, rotbraun, graugrün, marmoriert, Schichteinfallen 70°, 70-80°steile Klüfte, eine 80° steile, mit 1mm Hämatit gefüllte Kluft, unklare stratigraphische Einstufung

Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 201**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4513081	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5666065	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 152,90m	
Datum:	24.04.2001	Endtiefe: 215,00m	

m u. GOK (149,10 m NN)

UFZ 301



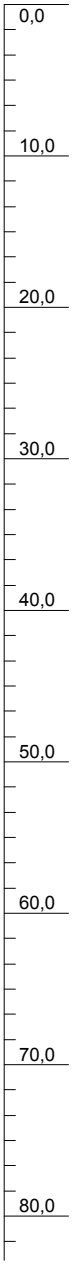
Höhenmaßstab: 1:1200 Horizontalmaßstab: 1:20

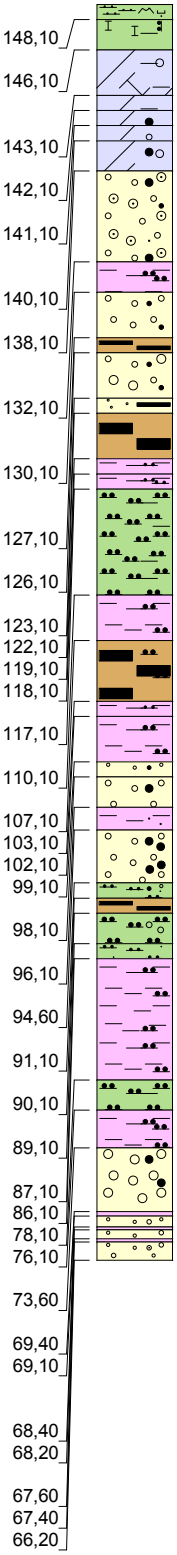
Blatt 1 von 1

Projekt:	**Phenolversenkung Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 301**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum GmbH	Rechtswert:	4514258
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert:	5666161
Fachaufsicht:	Präger, GFE Consult GmbH	Ansatzhöhe:	149,10m
Datum:	15.01.2002	Endtiefe:	199,20m

UFZ 301

m u. GOK (149,10 m NN)





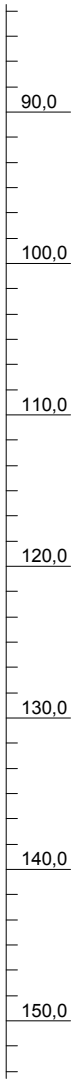
m u. GOK	
148,10	Holozän, Schluff, feinsandig, schwach humos, Mutterboden, dunkelbraun, einzelne Mittel- und Grobsande
146,10	Pleistozän, Schluff, schwach tonig, schwach feinsandig, Löß, hellocker, stark kalkhaltig
143,10	Pleistozän, Schluff, schwach tonig, schwach feinsandig, schwach feinkiesig bis schwach mittelkiesig, Geschiebemergel, hellbraun, stark kalkhaltig
142,10	Pleistozän, Schluff, tonig, schwach feinsandig, schwach feinkiesig, Geschiebemergel, braun, rostfleckig, stark kalkhaltig
141,10	Pleistozän, Schluff, tonig, stark sandig, feinkiesig bis mittelkiesig, Geschiebemergel, braun, zur Sohle zunehmend kiesig, kalkhaltig
140,10	Pleistozän, Mittelkies, schwach schluffig, schwach sandig, feinkiesig, grobkiesig, Geschiebemergel, braun, mit zahlreichen Schluffbrocken, kalkhaltig
138,10	Pleistozän, Schluff, schwach tonig, sandig, feinkiesig bis mittelkiesig, Geschiebemergel, braun, kalkhaltig
132,10	Pleistozän, Feinkies bis Grobkies, schwach sandig, schwach steinig, hellbraun, weiß, überwiegend Quarz, Quarzit, Kieselschiefer
130,10	Tertiär, Ton, stark schluffig, sehr schwach feinsandig, grau, mit schwarzgrauen Schlieren, rostbraunen Sprenkeln, leicht fauliger Geruch, glimmerhaltig, stark kalkhaltig
127,10	Tertiär, Feinkies, mittelsandig bis grobsandig, mittelkiesig, schwach grobkiesig, hellgrau, hellbraun, zur Sohle mit Braunkohlebröckchen durchsetzt, einzelne Schluffbrocken
126,10	Tertiär, Braunkohle, dunkelbraun, schwach schluffig, vereinzelt mit Feinkiesen durchsetzt
123,10	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, mittelsandig bis grobsandig, grobkiesig, hellgrau
122,10	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, Braunkohle, dunkelbraun
119,10	Tertiär, Braunkohle, dunkelbraun, bröckelig, selten stückig
118,10	Tertiär, Ton, schluffig, hellgrau, mit kohligen Schlieren
117,10	Tertiär, Ton, stark schluffig, schwach sandig, schwarzbraun, kohlig
110,10	Tertiär, Schluff, tonig, kohlig, dunkelbraun, mit Sanden und Kiesen durchsetzt
107,10	Tertiär, Ton, schluffig, schwach feinsandig, hellgrau, mit dunkelbraunen Schmitzen
103,10	Tertiär, Braunkohle, schwach schluffig, dunkelbraun, stückig
102,10	Tertiär, Ton, schluffig, hellbraun, gehäuft Kohlestückchen
99,10	Tertiär, Ton, schluffig, hellbraun, selten Kohlestückchen
98,10	Tertiär, Feinkies, sandig, mittelkiesig, hellgraubraun, häufig Ton- und Schluffbrocken, einzelne Kohlebröckchen
96,10	Tertiär, Feinkies, schwach mittelsandig, grobsandig, mittelkiesig, hellgrau, gehäuft Quarz
94,60	Tertiär, Ton, schluffig, stark feinsandig, mittelsandig, hellgrau, im unteren Teil mit Kohlebröckchen
91,10	Tertiär, Feinkies, schwach schluffig, mittelsandig, stark grobsandig, mittelkiesig, grau, mit Ton- und Kohlebröckchen
90,10	Tertiär, Schluff, Feinkies, stark sandig, grau, mit einzelnen Kohlestückchen
89,10	Tertiär, Braunkohle, schwarzbraun, stückig, mit hellgrauen Tonbrocken und Feinkiesen durchsetzt
87,10	Tertiär, Schluff, tonig, sandig, stark feinkiesig bis stark mittelkiesig, grau, mit Tonbrocken und Kohlestückchen
86,10	Tertiär, Schluff, Feinsand, grau, stark glimmerhaltig
78,10	Tertiär, Ton, schluffig, hellgrau, mit kohligen Schmitzen bis 3 mm
76,10	Tertiär, Schluff, tonig, feinsandig, schwach mittelsandig, hellgrau
73,60	Tertiär, Ton, stark schluffig, feinsandig, hellgrau, im unteren Teil einzelne Kiese
69,40	Tertiär, Mittelkies, schwach mittelsandig, grobsandig, feinkiesig bis grobkiesig, hellgrau, fast ausschließlich Quarze
69,10	Tertiär, Ton, schluffig, weißgrau
68,40	Tertiär, Feinkies, schwach mittelsandig, schwach grobsandig, mittelkiesig, schwach grobkiesig, hellgrau, fast ausschließlich Quarz
68,20	Tertiär, Ton, schluffig, weißgrau
67,60	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, hellgrau, ab 81,0 m einzelne Tonstein- und Schluffsteinbrocken, bei 81,5 m häufig Pyrite
67,40	Tertiär, Ton, schluffig, weißgrau
66,20	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, schwach grobkiesig, hellgrau

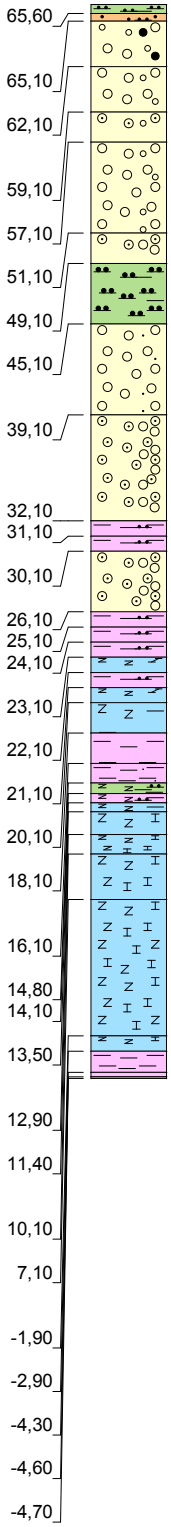
Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen- Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 301**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4514258	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5666161	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 149,10m	
Datum:	31.05.2001	Endtiefe: 199,20m	

UFZ 301

m u. GOK (149,10 m NN)





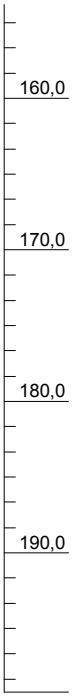
65,60	Tertiär, Schluff, tonig, schwach feinsandig, hellgrau
65,10	Tertiär, Mittelsand, schwach tonig, stark schluffig, feinsandig, weißgrau, mit dunkelgrauen Einschlüssen (? verwitterte Sandsteinbröckchen)
62,10	Tertiär, Feinkies bis Mittelkies, schwach mittelsandig, grobsandig, grobkiesig, hellgrau, vereinzelt Schluffbröckchen
59,10	Tertiär, Mittelkies, schwach mittelsandig, schwach grobsandig, feinkiesig, grobkiesig, weißgrau, vereinzelt weiße, sandig-tonige Schluffbrocken
57,10	Tertiär, Grobkies, schwach grobsandig, feinkiesig, mittelkiesig, weißgrau, einzelne verbackene Ton-Schluff-Sand-Klumpen
51,10	Tertiär, Mittelkies, schwach grobsandig, feinkiesig bis grobkiesig, weißgrau, Gerölle teilweise mit Schluff/Ton ummantelt
49,10	Tertiär, Grobkies, schwach mittelsandig, schwach grobsandig, feinkiesig, stark mittelkiesig, weißgrau
45,10	Tertiär, Schluff, tonig, feinkiesig bis mittelkiesig, weißgrau, teilweise mit kiesigen Zwischenlagen
39,10	Tertiär, Mittelkies, feinsandig, mittelsandig, feinkiesig, grobkiesig, weißgrau, mit einzelnen Schluffbrocken, fast ausschließlich Quarzgerölle
32,10	Tertiär, Grobkies, schwach feinkiesig, stark mittelkiesig, weißgrau
31,10	Tertiär, Ton, schluffig, dunkelgrau, einzelne Kohleschmitzen
30,10	Tertiär, Ton, schwach schluffig, grau, einzelne dunkelgraue Schmitzen und Schlieren
26,10	Tertiär, Grobkies, schwach feinkiesig, stark mittelkiesig, weißgrau
25,10	Tertiär, Ton, schluffig, dunkelgrau, mit einzelnen Quarzgeröllen
24,10	Tertiär, Ton, schluffig, grau
23,10	, Ton, schluffig, mit zahlreichen dolomitischen Splittern, schwach auf HCl reagierend, (? Einsturzgebirge)
22,10	, Dolomitstein, hellgrau, zerbohrt in Mittel- bis Grobkiesgröße (? Einsturzgebirge)
21,10	, Ton, schluffig, schwach feinkiesig bis schwach mittelkiesig, grau bis dunkelgrau, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
20,10	, Dolomitstein, kristallin, grau, gehäuft weißer Belag auf den Bruchstücken (? Einsturzgebirge), kalkhaltig
18,10	, Dolomitstein, Ton, grau bis dunkelgrau, (Einsturzgebirge ?), kalkhaltig
16,10	, Ton, grau, mit stark verwitterten Sandsteinbröckchen brekziös verbacken, rostfarbene Kluftbeläge, Kalzitbeläge, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
14,80	, Ton, feinsandig, grau, mit Bruchstücken von Kalkstein und Tonstein, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
14,10	, Schluffstein, stark tonig, grau, (? Einsturzgebirge), kalkhaltig
13,50	, Tonstein, schluffig, grau, einzelne Kalksteinbröckchen (? Einsturzgebirge)
12,90	, Kalkstein, Tonstein, hellgrau, in Wechsellagerung, Hohlräume mit Ton gefüllt, einzelne Kalzitkristalle, unregelmäßig geklüftet (? Einsturzgebirge)
11,40	, Kalkstein, porös, grau, Klüfte ca. 80°, teils offen, teils tonig gefüllt, (? Einsturzgebirge)
10,10	, Kalkstein, hellgrau, bis 138,5 stark mürbe (zu Sand zerfallend), darunter konsolidiert, Schichtung 45°,dunkelgraue Schichtbeläge (? Einsturzgebirge)
7,10	, Kalkstein, 1 Sandsteinbruchstück, 4 Kalksteinbruchstücke, porös, nur 25 cm Kerngewinn (? Einsturzgebirge)
-1,90	, Kalkstein, porös, kavernös, grau bis dunkelgrau, in Stücke zwischen 2 und 9 cm zerfallen, in Kavernen tonig- sandiges Material, (? Einsturzgebirge)
-2,90	, Kalkstein, grau, Klüfte und Spalten sind mit Ton und einzelnen schiefrigen Geröllen gefüllt (? Einsturzgebirge)
-4,30	, Ton, dunkelgrau, mit zahlreichen Kalksteinbruchstücken (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
-4,60	, Tonstein, dunkelgrau, schräg geschichtet (45-50°), tektonisch überprägt (Harnischflächen) (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
-4,70	, Feinsandstein, stark tonig, mürbe, grau, mit Kalksteinstückchen vermengt (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig

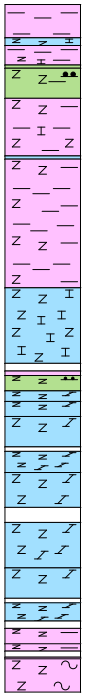
Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen- Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 301**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4514258	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5666161	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 149,10m	
Datum:	31.05.2001	Endtiefe: 199,20m	

UFZ 301

m u. GOK (149,10 m NN)





-6,90	, Ton, dunkelgrau, mit Kalksteinbruchstücken und gerundeten Quarzgeröllen, (? Einsturzgebirge)
-7,40	, Kalkstein, porös, grau, mit Ton versetzt, (? Einsturzgebirge)
-8,70	, Ton, Tonstein, Kalkstein, grau, stückig (? Einsturzgebirge)
-8,90	, Schluff, tonig, feinsandig, braun, geschichtet, hellbraungrau gefleckt (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
-10,90	, Schluffstein, tonig, feinsandig, grau, breckziös, mit porösen Kalksteinbruchstücken durchsetzt (? Einsturzgebirge)
-14,70	, Tonstein, Ton, Kalkstein, grau, stückig zerfallend, mürbe, (? Einsturzgebirge)
-14,90	, Kalkstein, schwach porös, grau, tonflasrig, waagerecht und steil geschichtet, (? Einsturzgebirge)
-23,40	, Tonstein, Ton, grau, mit Kalksteinbruchstücken, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
-28,40	, Kalkstein, hellbraungrau, rauhe Oberfläche, schwach porös, ab 176 m mit pyritschen Belägen (? Einsturzgebirge)
-28,90	, Kernverlust
-29,20	, Ton, grau, vermengt mit dolomitischen Schluffsteinbröckchen, Stücke bis 3 cm (? Einsturzgebirge), kalkhaltig
-30,20	, Schluffstein, grau, geschichtet, teilweise flasrig, Poren bis 1,5 cm, mit dolomitischen Einschlüssen (? Einsturzgebirge)
-30,90	Zechstein, Dolomitstein, dicht, Riff, grau, kaum Schichtung erkennbar, einz. Poren bis 5 mm, ein Muschelabdruck, an Krone einz. schwarze mm-starke Lagen, Glimmerbeläge
-31,90	Zechstein, Dolomitstein, dicht, selten geklüftet, schwach geschichtet, Riff, grau, einz. Poren bis 2 mm, einz. schwarze Tonlagen bis max. 1,5 cm
-33,90	Zechstein, Dolomitstein, porös, Riff, grau, fast senkrecht geklüftet, Poren bis 2cm, einzelne schwarze, tonige Lagen, kalkhaltig
-34,20	, Kernverlust
-35,60	Zechstein, Dolomitstein, schwach porös, Riff, grau, überwiegend zerbrochen, fast senkrechte Kluftflächen, schwarze Beläge
-37,90	Zechstein, Dolomitstein, dolomitisch, Riff, grau, fast horizontal geschichtet, mit schwarzen tonigen Lagen, Calzitbeläge in Poren
-38,90	, Kernverlust
-41,90	Zechstein, Dolomitstein, dolomitisch, Riff, grau bis braungrau, an Kopf und Krone poröse Abschnitte, Poren bis 2 cm, einz. Klüfte, horizontal bis 70°, schwarze Beläge
-43,90	, Dolomitstein, dicht, Riff, hell bis dunkelgrau, gemasert,mit schwarzgrauen,tonigen, 2 cm starken Lagen im Abstand von 20cm,Schichteinfall.10°,keine Klüfte,selten Löcher bis 2cm, sehr schwach kalkhaltig, einz. Pyrite (5 mm), keine Fossilführung
-44,20	, Kernverlust
-45,40	, Dolomitstein, dicht, schwach geklüftet, Riff, ?, hell bis dunkelgrau, gemasert,mit schwarzgrauen, tonigen 1 cm starken Lagen im Abstand von 20 cm,Schichteinfallen 10°,nur sporadisch Löcher bis 3 cm,, sehr schwach kalkhaltig, Kluftfallen 70-80°, Klüfte (0,01mm) mit Gips verheilt, keine Fossilführung
-45,90	, Kernverlust
-46,90	, Tonstein, dicht, dolomitisch, dunkelgrau bis schwarzgrau, mit 5 mm starken Lagen von Pyrit und Fasergips, an Kopf hellgraue Dolomitsteingerölle(Übergang zum Grundgebirge ?), sehr schwach kalkhaltig
-47,40	, Tonstein, dicht, dolomitisch, dunkelgrau bis schwarzgrau, wie zuvor, (Übergang zum Grundgebirge ?), sehr schwach kalkhaltig
-47,80	, Bruchstücke von Tonstein, dolomitisch, dunkelgrau, und Schluffstein, hellgrau, geschiefert, kalkfrei
-47,90	, Schiefer?, hellgrau bis braungrau, Schieferung 70-80° fallend, kalkspatverheilte Risse senkrecht zur Schieferung, unklare stratigraphische Stellung, kalkfrei
-50,10	, Schiefer?, grüngrau, rotbraun gemasert, Schieferung 70° fallend, Schichtung ca 60^fallend, Hämatit und Kalkspat als Kluftfüllung, unklare stratigraphische Stellung

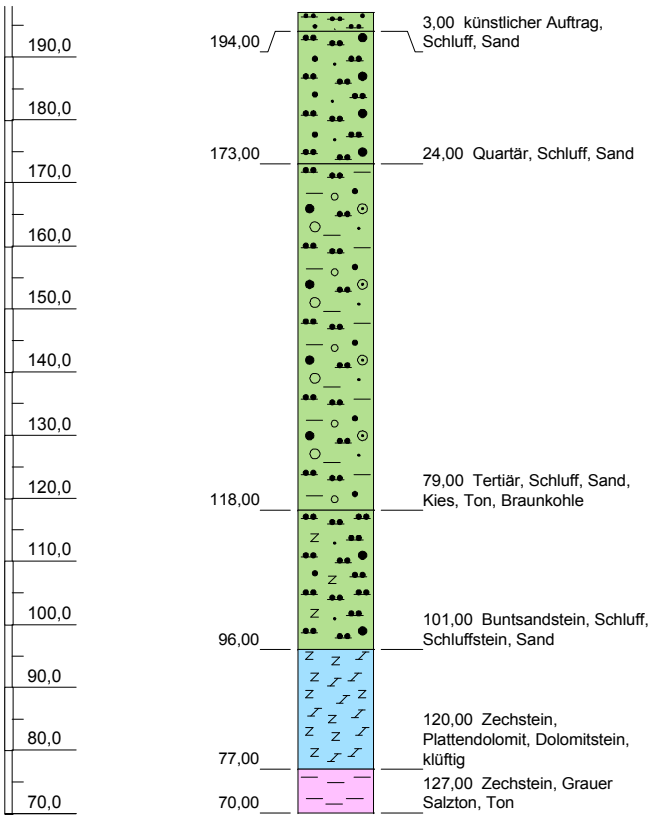
Höhenmaßstab: 1:500

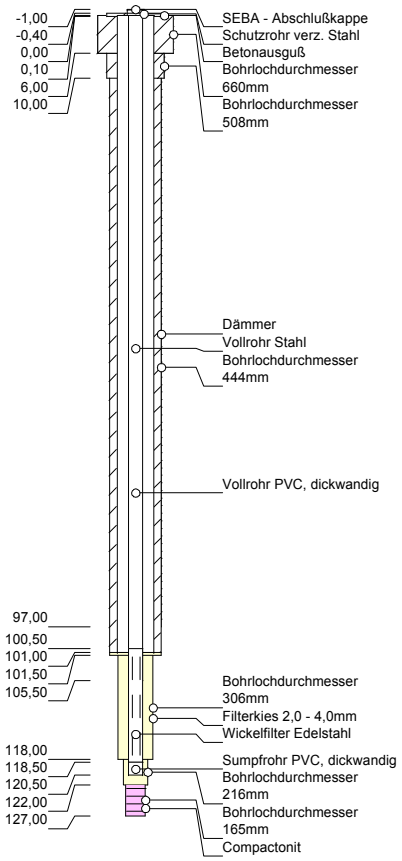
Blatt 3 von 3

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen- Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 301**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4514258	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5666161	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 149,10m	
Datum:	31.05.2001	Endtiefe: 199,20m	

m u. GOK (197,00 m NN)

UFZ 401



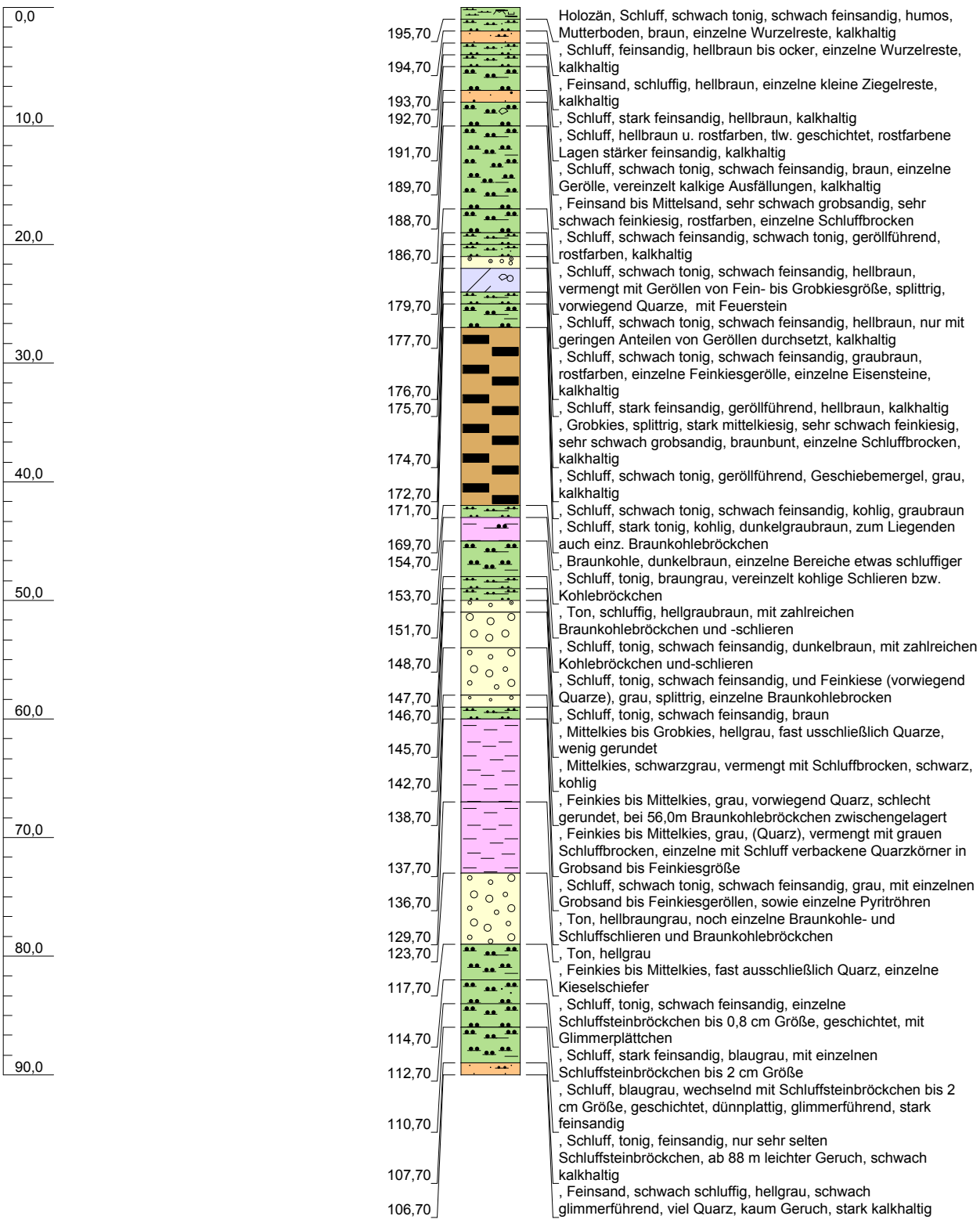


Höhenmaßstab: 1:1200 Horizontalmaßstab: 1:20

Blatt 1 von 1

Projekt:	**Phenolversenkung Profen Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 401**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum GmbH	Rechtswert:	4504230
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert:	5662616
Fachaufsicht:	Präger, GFE Consult GmbH	Ansatzhöhe:	197,00m
Datum:	15.01.2002	Endtiefe:	127,00m

UFZ 401



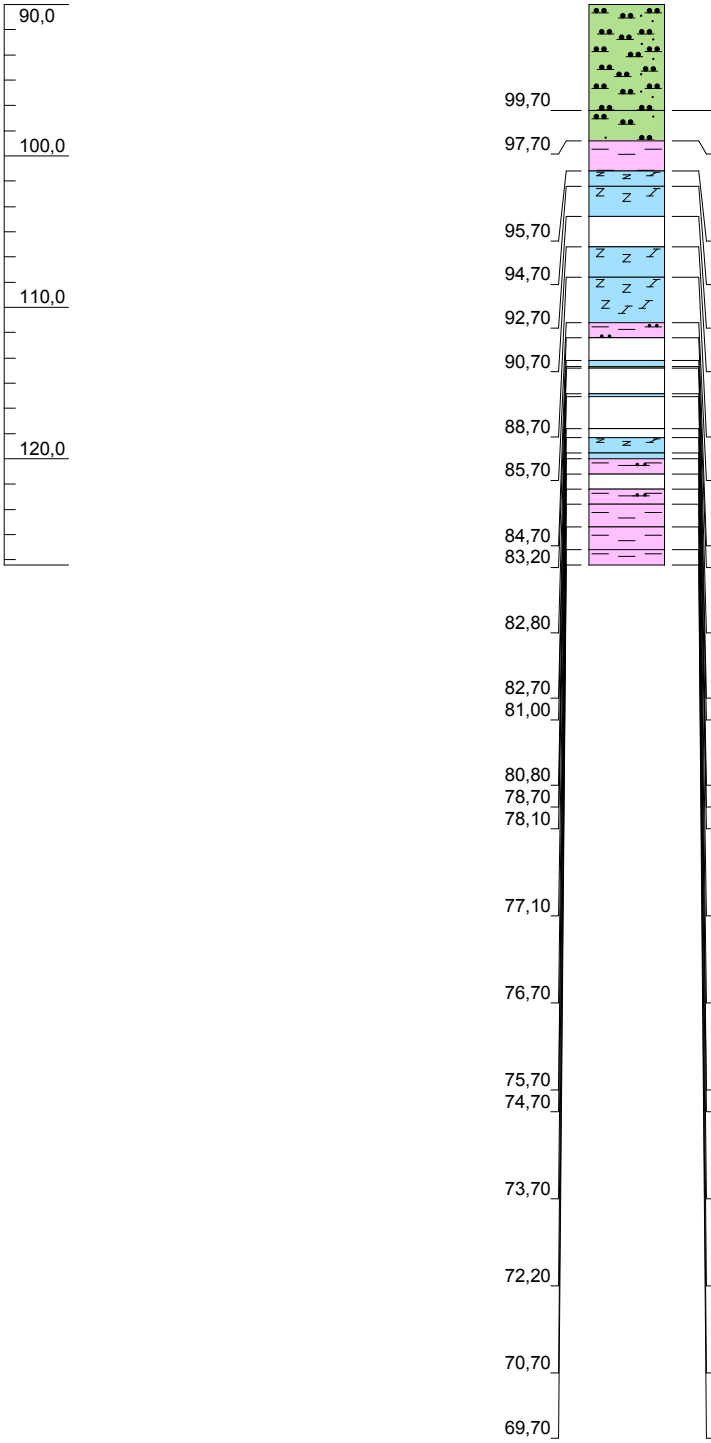
Höhenmaßstab: 1:500

Blatt 1 von 2

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 401**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4504230	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5662616	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 196,70m	
Datum:	17.04.2001	Endtiefe: 127,00m	

UFZ 401

m u. GOK (196,70 m NN)



, Schluff, schwach tonig, stark feinsandig, blaugrau, mit einzelnen hellgrauen Schluffsteinbrocken, Geruch deutlich wahrnehmbar

, Schluff bis Feinsand, blaugrau, an Krone Brocken deutlich sandig, keine durchgehende Verfestigung, stark kalkhaltig

, Ton, weißgrau, hellbraun, vermengt mit blaugrauen Schluff-/Feinsand- und einz. Kalksteinbröckchen, fest, splittrig, einz. schwarze, mürbe Brocken? bis 4cm, stark kalkhaltig, stechender Geruch

, Dolomitstein, porös, hellgrau, schwach kalkhaltig, schwacher Geruch (Spülung geht weg=luftgehoben bei Umrüstung)

, Dolomitstein, porös, hellgrau, mit Kalzitnestern, schwach kalkhaltig, schwacher Geruch - nur 5% Kerngewinn

, Kernverlust, kaum Drehmoment, Spülungsumlauf kann kaum aufrecht erhalten werden

, Dolomitstein, unregelmäßig, porös, selten plattig, hellgrau, sonst wie zuvor, schwach kalkhaltig, kaum Widerstand beim Bohren

, Dolomitstein, wie zuvor, Porenanteil geringer, unrelmäßig zerbrochene Stücke bis 8cm, tonig-schluffige Beläge

, Ton, Schluff, hellgrau, vermengt mit zahlreichen, kleinen Dolomitsteinbröckchen (? vermutl. Einsturzgebirge), bei Teufe 112m wurde wegen der hohen Kernverluste 1m trocken gebohrt

, Kernverlust

, Dolomitstein, grau, in Stücken bis 4cm Größe vorliegend, mit wenigen Löchern bis 2mm Durchmesser, verzögertes Brausen mit HCL, leichter Phenolgeruch

, Schluff, tonig, mit cm-großen Dolomitbrocken, schwach kalkig bis kalkig (aufgemahlen durch Bohrprozess), starker Phenolgeruch

, Kernverlust

, Dolomitstein, dicht, grau, mit Löchern bis 2mm Durchmesser, in Stücken bis 5cm Größe vorliegend, verzögertes Brausen mit HCL, leichter Phenolgeruch

, Kernverlust

, Kernverlust

, Dolomitstein, plattig, geschichtet, dunkelbraungrau, in Kernstücken bis 10cm, senkrecht geklüftet, selten Löcher bis 2mm, keine Kalzitnester, verzögertes Brausen mit HCL, Geruch: Phenol bis Braunkohlenteer

, Dolomitstein, dicht, plattig, dunkelbraungrau, Kernstücke bis 5cm,z.T.stark zerbohrt u. als Schluff mit Dolomitstücken vorliegend , selten geschichtet, senkr. geklüftet, Geruch: Phenol bis Braunkohlenteer

Grauer Salzton, Ton, schluffig, festgelagert, bis 0,5m kalkig, bis Krone kalkfrei, mit Grobschluffnestern u.-linsen, selten Dolomitbrocken bis 1cm (? Nachfall), bis zur Krone deutlicher Phenolgeruch

, Kernverlust

, Ton, schluffig, dunkelgrau, festgelagert, mit weißlichen, meist kalkigen Grobschluffnestern u.-linsen und Dolomitbrocken bis 10cm Größe (? Nachfall), schwach kalkhaltig, noch deutlicher Phenolgeruch wahrnehmbar

Grauer Salzton, Ton, dunkelgrau, festgelagert, mit weißen Grobschluffnestern bis 1cm Größe, kalkig, fest bis mürbe, (Nachfall 0,5m nicht dokumentiert), an der Krone nur schwacher Phenolgeruch

Grauer Salzton, Ton, dunkelgrau, festgelagert, mit weißen Grobschluffnestern, kalkig, fest-mürbe, zur Krone hin mit Feinsandlagen,(Nachfall 0,5m nicht dokument.), kaum wahrnehmbarer Phenolgeruch

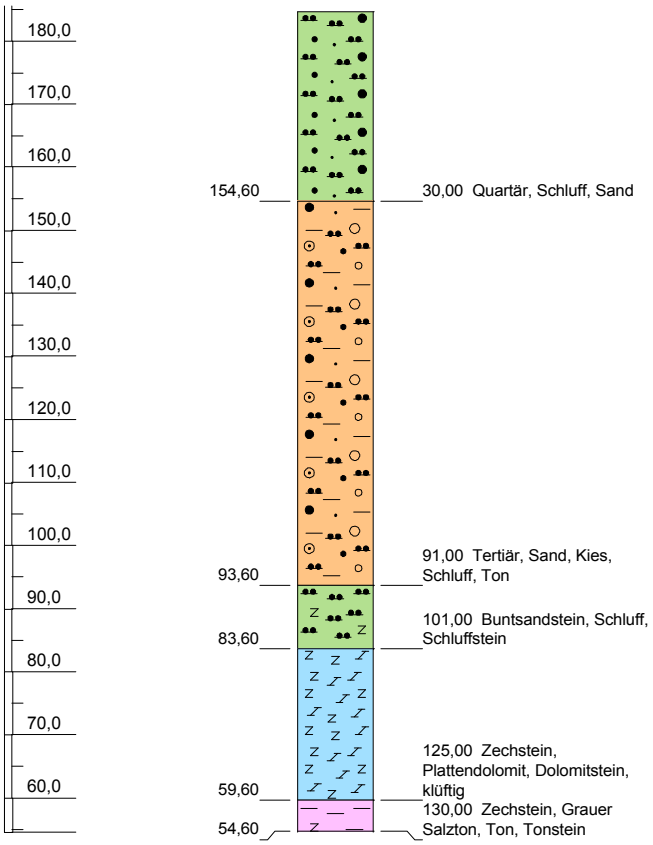
Grauer Salzton, Ton, dunkelgrau, mit Grobschluffnestern, weßlich, kalkig und wenigen bis 5mm mächtigen Feinsandlagen, kein Phenolgeruch wahrnehmbar

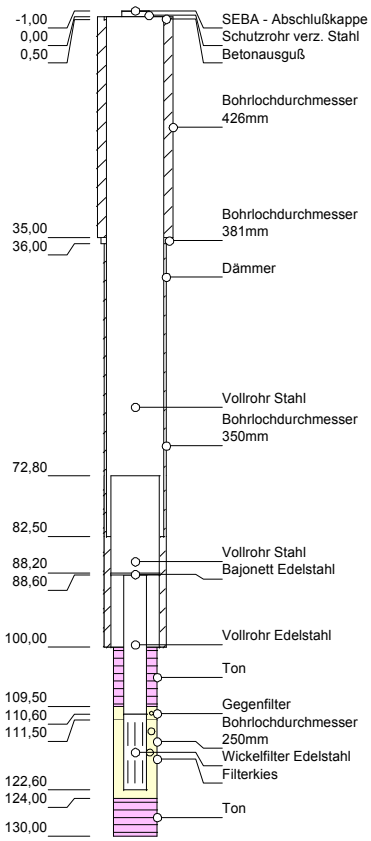
Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 401**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4504230	
Bohrfirma:	H. Anger´s Söhne GmbH	Hochwert: 5662616	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 196,70m	
Datum:	17.04.2001	Endtiefe: 127,00m	

m u. GOK (184,60 m NN)

UFZ 501



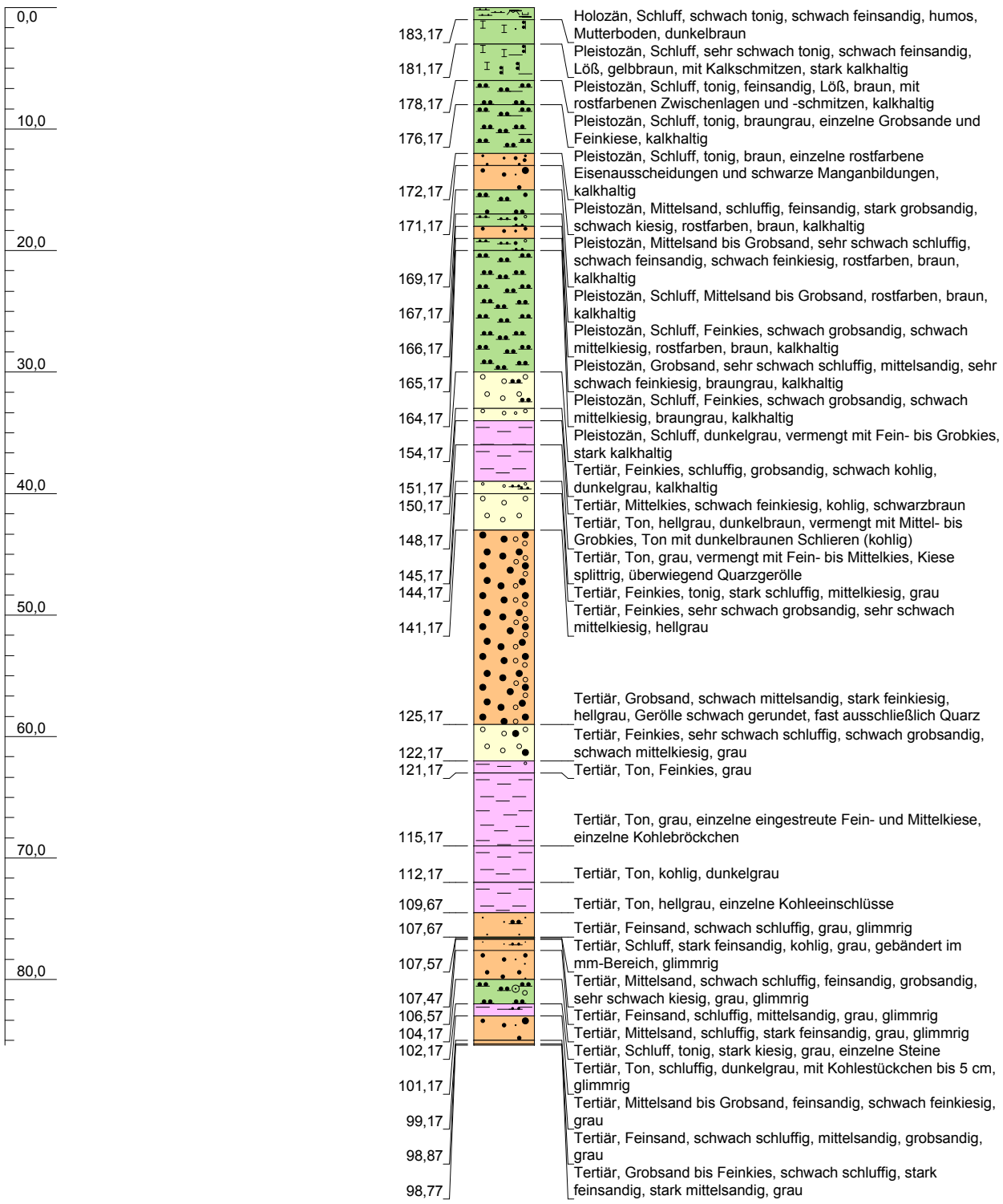


Höhenmaßstab: 1:1200 Horizontalmaßstab: 1:20

Blatt 1 von 1

Projekt:	**Phenolversenkung Profen Deuben**			Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 501**			
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum GmbH	Rechtswert:	4505547	
Bohrfirma:	iboTech GmbH	Hochwert:	5664266	
Fachaufsicht:	Präger, GFE Consult GmbH	Ansatzhöhe:	184,60m	
Datum:	15.01.2002	Endtiefe:	130,00m	

UFZ 501

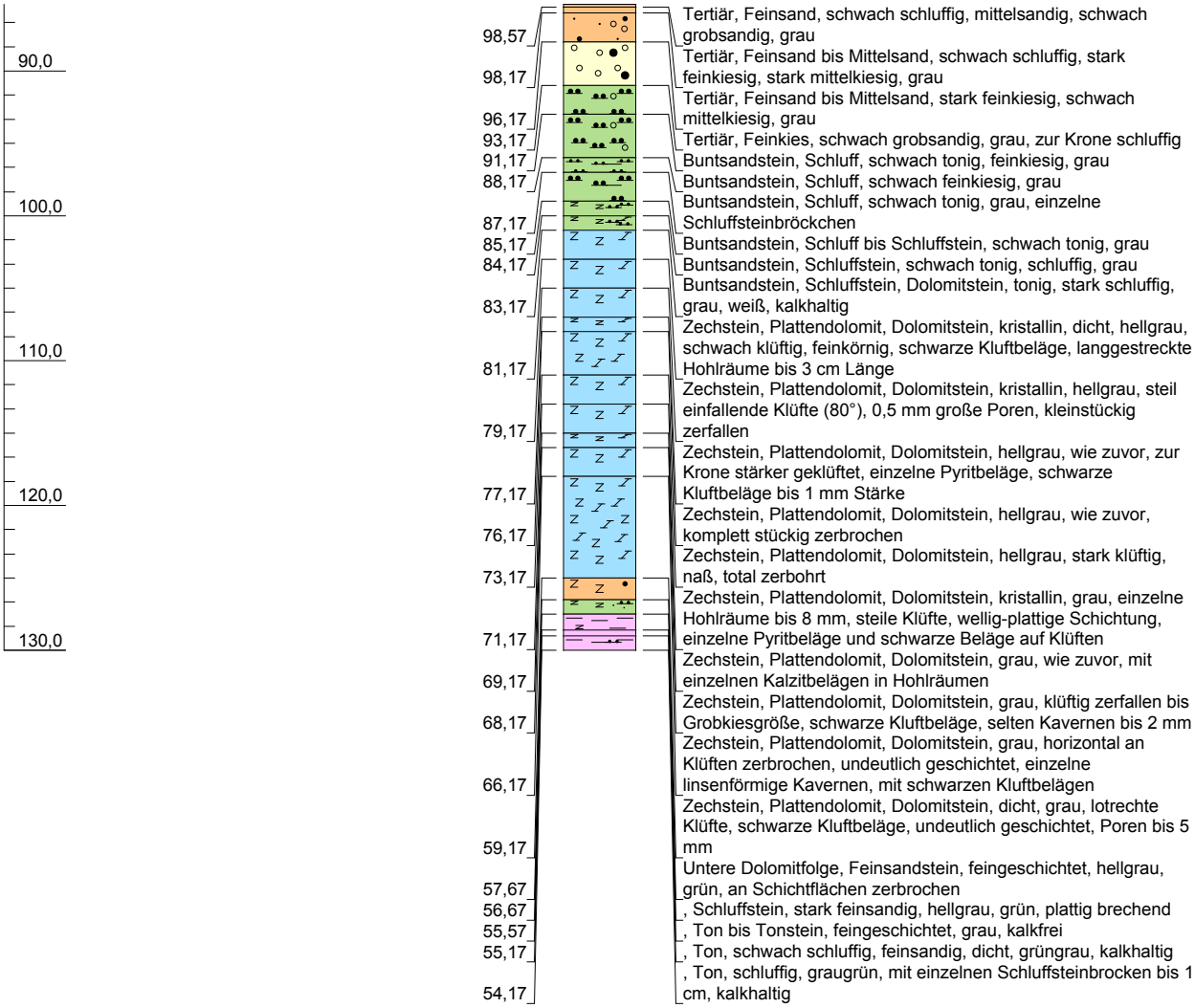


Höhenmaßstab: 1:500

Blatt 1 von 2

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen- Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 501**		
Auftraggeber:	UFZ Leipzig- Halle GmbH	Rechtswert: 4505547	
Bohrfirma:	ibo-Tech GmbH	Hochwert: 5664266	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 184,17m	
Datum:	21.05.2001	Endtiefe: 130,00m	

UFZ 501

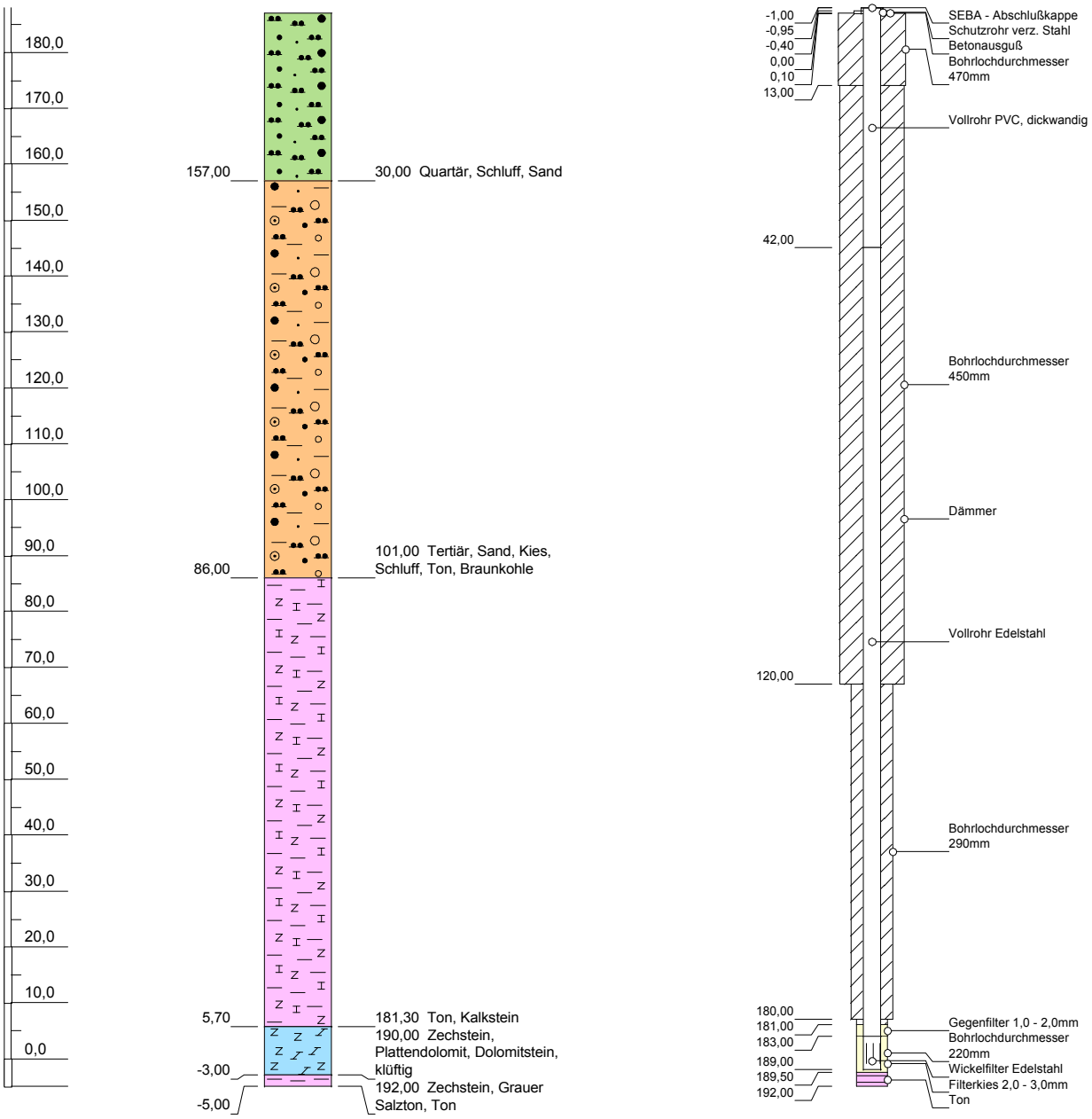


Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen- Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 501**		
Auftraggeber:	UFZ Leipzig- Halle GmbH	Rechtswert: 4505547	
Bohrfirma:	ibo-Tech GmbH	Hochwert: 5664266	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 184,17m	
Datum:	21.05.2001	Endtiefe: 130,00m	

m u. GOK (187,00 m NN)

UFZ 601



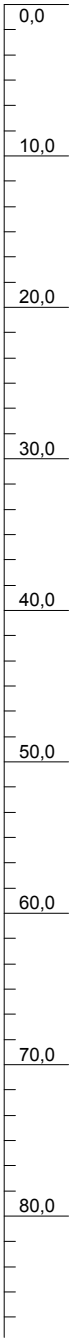
Höhenmaßstab: 1:1200 Horizontalmaßstab: 1:20

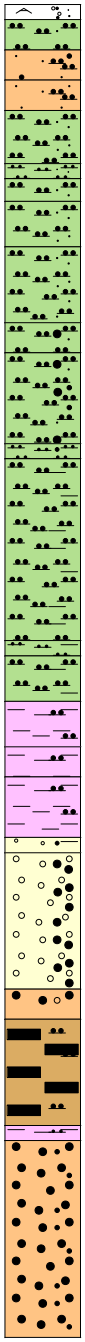
Blatt 1 von 1

Projekt:	**Phenolversenkung Profen Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 601**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum GmbH	Rechtswert:	4506483
Bohrfirma:	iboTech GmbH	Hochwert:	5664959
Fachaufsicht:	Präger, GFE Consult GmbH	Ansatzhöhe:	187,00m
Datum:	15.01.2002	Endtiefe:	192,00m

UFZ 601

m u. GOK (187,00 m NN)





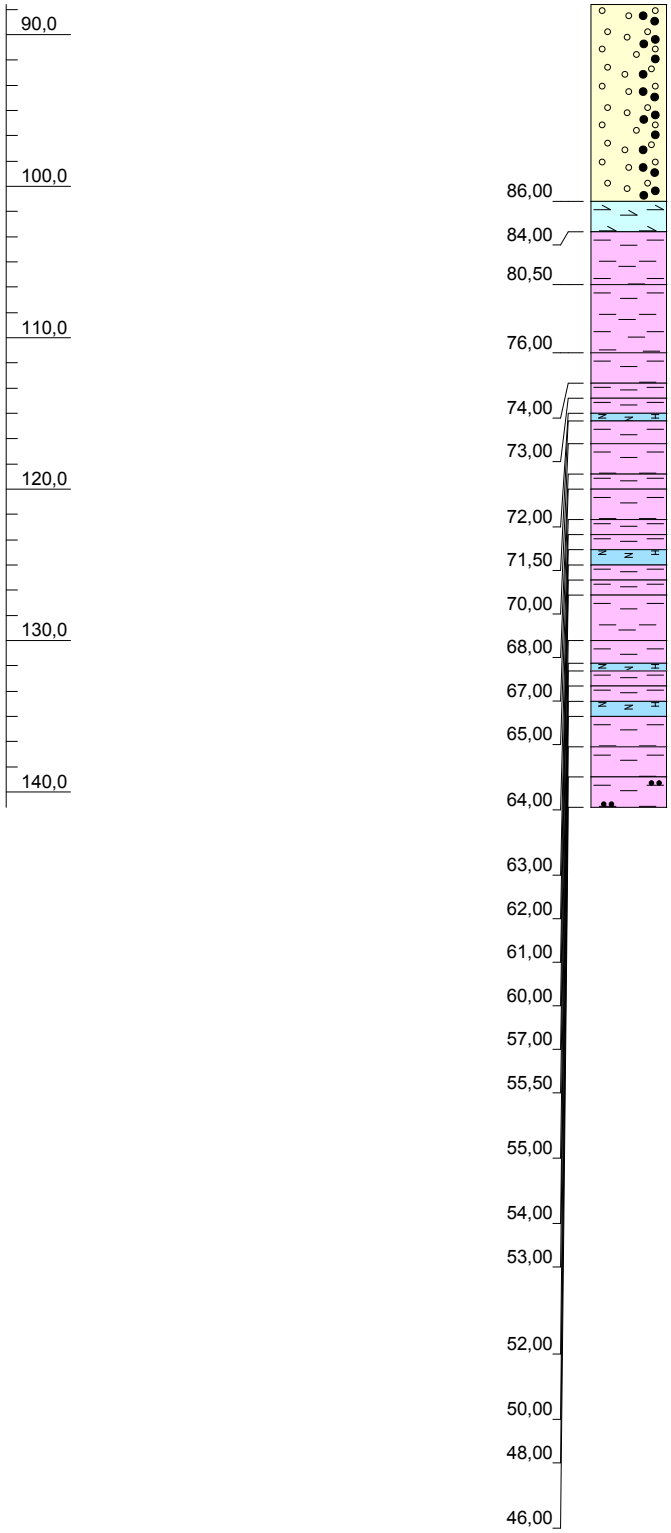
186,00	, Aufschüttung, Feinkies bis Mittelkies, stark sandig, schwach schluffig, braun, Betonreste
184,00	Pleistozän, Schluff, feinsandig, sehr schwach tonig, hellbraun, dunkelgrau, mit Wurzelresten
182,00	, Feinsand bis Mittelsand, stark schluffig, sehr schwach tonig, gelbbraun, rostfarben gefleckt
180,00	, Feinsand, sehr stark schluffig, sehr schwach tonig, gelbbraun, unregelmäßige tonig-schluffige Lagen
176,50	, Schluff, stark feinsandig, mittelsandig, schwach tonig, hellbraun bis grau
175,50	, Schluff, stark feinsandig, schwach mittelsandig, sehr schwach tonig, graubraun, häufig Einlagerungen von Feinsand,gelbbraun, schluffig und seltener Ton, schwarzbraun, schluffig
174,00	, Schluff, tonig, stark feinsandig bis stark mittelsandig, schwach grobsandig, schwach kiesig, gelbbraun, mit weißen Schmitzen
171,00	, Schluff, tonig, stark feinsandig bis stark mittelsandig, schwach grobsandig, schwach kiesig, gelbbraun, mit weißen Schmitzen
166,00	, Schluff, tonig, stark feinsandig bis stark grobsandig, schwach kiesig bis kiesig, gelbbraun
164,00	, Schluff, tonig, stark sandig, kiesig, gelbbraun
158,00	, Schluff, sehr stark sandig, schwach kiesig, gelbbraun, vereinzelt Flint, häufiger Quarz
157,00	, Schluff, sandig, feinkiesig bis mittelkiesig, schwach tonig, gelbbraun
145,00	, Schluff, tonig, schwach feinsandig, schwach kohlig, braungrau, mit Fein- bis Mittelkiesen (? Nachfall)
144,00	, Schluff, Ton, sehr schwach feinsandig, dunkelgraubraun, häufig schwarzbraune Kohleeinschlüsse
141,00	, Schluff, tonig, feinsandig, schwach mittelsandig, braungrau
138,00	, Ton, schluffig, schwach feinsandig, braungrau, mit kohligen Einschlüssen
136,00	, Ton, stark kohlig, schluffig, dunkelgraubraun, mit schwachem Sand- und Kiesanteil (? Nachfall)
132,00	, Ton, schluffig, braungrau, vereinzelte Kohleeinschlüsse, mit braunen Schlieren
131,00	, Feinkies, Ton, grobsandig, schwach feinsandig bis schwach mittelsandig, schwach mittelkiesig, hellgrau
122,00	, Feinkies, stark grobsandig, schwach mittelkiesig, schwach mittelsandig, sehr schwach feinsandig, hellgrau, hellbraun, vorwiegend schwach gerundete Quarze, häufig Schluff- u. Tonbrocken (? Nachfall)
120,00	, Grobsand, feinkiesig, mittelsandig, schwach mittelkiesig, hellgrau, ocker, viel Quarz, mit gelbbraunen Tonbröckchen
113,00	Tertiär, Braunkohle, schluffig, tonig, rotbraun, mit weißbraunen Schmitzen u. Striemen
112,00	Tertiär, Ton, schluffig, kiesig, sandig, weißgrau
99,00	Tertiär, Grobsand, schwach feinkiesig, mittelsandig, schwach feinsandig, grau, häufig treten Tonbrocken auf

Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 601**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4506483	
Bohrfirma:	ibotech GmbH	Hochwert: 5664959	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 187,00m	
Datum:	17.04.2001	Endtiefe: 192,00m	

UFZ 601

m u. GOK (187,00 m NN)



Tertiär, Feinkies, stark grobsandig, mittelsandig, feinsandig, grau, überwiegend Quarz, Tonbrocken treten seltener auf

, Kalk, nur vereinzelte Stückchen bis max. 1mm Größe in Probe erkennbar, (? Einsturzgebirge)

, Ton, grau, in flachen Stückchen vorliegend, (? Einsturzgebirge)

, Ton, grüngrau, plattig brechend, mit Quarzen bis Feinkiesgröße und Pyrit bis 1mm Durchmesser, (? Einsturzgebirge), kalkfrei

, Ton bis Tonstein, rotbraun bis grüngrau, mit Quarzen und Kieselschiefern bis Feinkiesgröße, selten Pyrit bis 1mm Durchmesser, (? Einsturzgebirge), kalkfrei

, Ton bis Tonstein, rotbraun, (? Einsturzgebirge), schwach kalkhaltig

, Ton, grüngrau, plattig brechend, mit rotbraunem Ton, schwach kalkhaltig, Quarze u. Kieselschiefer bis Feinkiesgröße, selten Pyrit, kalkfrei, (? Einsturzgebirge)

, Kalkstein, feinstückig, dunkelgrau, (Rogenstein), (? Einsturzgebirge)

, Ton, rotbraun, mit Quarzen bis Feinkiesgröße (Einsturzgebirge), schwach kalkhaltig

, Ton, rotbraun, mit Quarzen bis 5mm Durchmesser, (? Einsturzgebirge), kalkfrei bis schwach kalkhaltig

, Ton, hellgrau, rotbraun, vereinzelt Quarze bis 5mm Durchmesser, (? Einsturzgebirge), schwer zu bohren

, Ton, hellgrau, grüngrau, rotbraun, mit Quarzen bis 5 mm Durchmesser, (? Einsturzgebirge), kalkfrei

, Ton, hellgrau bis weißgrau, rotbraun, mit Quarzen bis 10mm Durchmesser, (Spülung beginnt zu riechen), (? Einsturzgebirge), kalkfrei

, Ton, hellgrau, vereinzelte Quarze bis 10mm Durchmesser, mit einigen grauen Dolomit- und Rogensteinbruchstücken, kalkfrei bis sehr schwach kalkhaltig, (? Einsturzgebirge)

, Kalkstein, dunkelgrau, oolithisch, daneben Ton, grau, kalkfrei, mit wenigen Quarze bis 10mm Durchmesser, (? Einsturzgebirge)

, Ton, grau, rotbraun, mit Bröckchen von Kalkstein wie zuvor beschrieben, (? Einsturzgebirge), kalkfrei

, Ton, rotbraun, und Kalkstein, dunkelgrau, oolithisch, wenig Quarze bis 10mm Durchmesser, (? Einsturzgebirge), kalkfrei

, Ton, rotbraun, im unteren Meter graugefärbt, vereinzelte weiche Tonsteinstückchen, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig

, Ton, grau, rotbraun, teilweise als weicher Tonstein vorliegend, (? Einsturzgebirge, stark kalkhaltig

, Kalkstein, oolithisch, in Bruchstücken von 10mm Größe vorliegend, daneben tritt Ton, weiß-rotbraun, stark kalkig auf und seltener Quarze, (? Einsturzgebirge)

, Ton, rotbraun, mit mürben Tonstein- und Kalksteinstücken, oolithisch, ab 132,5m mit Sandsteinstücken, fein-bis mittelkörnig, glimmerführend, kalkhaltig, (? Einsturzgebirge)

, Ton, hellgrau, rotbraun, mit stark verwitterten Sandsteinstücken, glimmerhaltig, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig

, Kalkstein, dicht, hellgrau bis grau, teilweise oolithisch, Bruchstücke in Kiesgröße vorliegend, scharfkantig bis schwach gerundet, vereinzelte Tonbröckchen, stark kalkhaltig, (? Einsturzgebirge)

, Ton, hellgrau, braun, vermengt mit verwitterten Sandstein-, Tonsteinstücken, vereinzelt Kalksteinstücken, plattig und Quarze, (? Einsturzgebirge)

, Ton bis Tonstein, rotbraun, vereinzelt graue Kalk- und Tonsteinstücken, sehr selten Quarze und Kieselschiefer

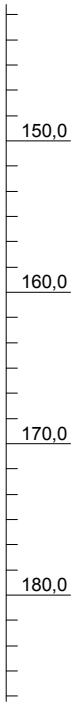
, Ton bis Schluff, rotbraun, blaugrau, vermengt mit Grobsanden und Feinkiesen (Tertiär), (? Einsturzgebirge), schwer zu bohren, stark kalkhaltig

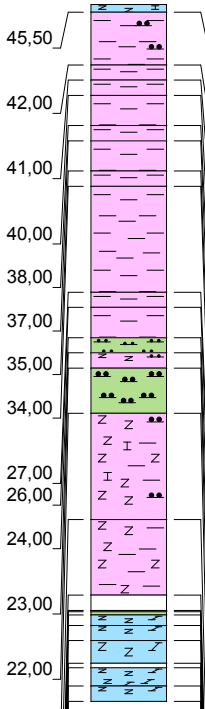
Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 601**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4506483	
Bohrfirma:	ibotech GmbH	Hochwert: 5664959	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 187,00m	
Datum:	17.04.2001	Endtiefe: 192,00m	

m u. GOK (187,00 m NN)

UFZ 601





45,50	, Kalkstein, bankig, grau, mit tonig-schluffigen Beimengungen, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
42,00	, Ton, schluffig, rotbraun, lokal, grau, mit zahlreichen Geröllen von Grobsand bis Feinkiesgröße aus dem Tertiär, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
41,00	, Ton, rotbraun, vermengt mit Grobsanden und Feinkiesen, überwiegend Quarz, häufig Kalksteinstücken,grau, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
40,00	, Ton, rotbraun, wie zuvor, mit Ton- und Kalksteinbröckchen, Pyritkonkretionen bis 1mm Größe, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
38,00	, Ton, rotbraun, wie zuvor, vereinzelt Sandsteinbröckchen, (? Einsturzgebirge), stark kalkhaltig
37,00	, Ton, wie zuvor, jedoch weniger Tonsteinstücken, mit einzelnen Sandsteinstücken bis 8mm Durchmesser, (? Einsturzgebirge)
35,00	, Ton, wie zuvor, Zunahme der Tonsteinstückchen, rotbraun, mit Pyritbröckchen (> 1mm), (? Einsturzgebirge)
34,00	, Ton, wie zuvor, mit grauen Tonsteinstückchen und Pyrit, (? Einsturzgebirge)
27,00	, Ton, rotbraun, vermengt mit Tonsteinstücken, rotbraun u. grau sowie Kalksteinbröckchen, mit Geröllen (überwiegend Quarze), (? Einsturzgebirge)
26,00	, Ton, rotbraun, schmutzigweiß, wie zuvor, (? Einsturzgebirge)
24,00	, Ton, hellgrau bis grau, wie zuvor, jedoch mit Pyritstückchen (>1mm), (? Einsturzgebirge)
23,00	, Schluff, grau, mit Geröllen bis Feinkiesgröße aus grauen u. rotgrauen Ton- u. Kalksteinen sowie Quarzen vermengt, (? Einsturzgebirge)
22,00	, Tonstein, Schluffstein, Kalkstein, hellgrau, rotbraun, als Gesteinsbröckchen vorliegend, einzelne graue Schluffe, (? Einsturzgebirge)
19,00	, Schluff, grau, mit Geröllen bis Feinkiesgröße aus grauen und rotgrauen Ton- u. Kalksteinen sowie Quarzen vermengt, (? Einsturzgebirge)
12,00	, Tonstein, Schluffstein, Kalkstein, hellgrau, rotbraun, als Gesteinsbröckchen vorliegend, anteilig helle Kalksteine (Dolomitsteine?), einzelne graue Schluffbrocken, (? Einsturzgebirge)
7,00	, Tonstein, in Bruchstücken bis Feinkiesgröße, von meist grauer vereinz. rotbrauner Farbe, sowie hellgraue, schwach kalkige Gerölle, (? Einsturzgebirge)
6,00	, Kernverlust
5,90	, Schluff, tonig, braungrau bis fahlbraun, Nachfall ?, kalkfrei bis schwach kalkhaltig
5,70	, Schluff, tonig, hellbraun, mit cm-großen kantigen, dunkelgrauen Dolomitbrocken, (? Einsturzgebirge), kalkfrei
5,00	Zechstein, Plattendolomit, Dolomitstein, grau bis dunkelgrau, in kantigen Stücken bis 6cm Größe vorliegend, auf Ablöseflächen schwarzgrau, Klüftung steil u. eng, kalkfrei bis sehr schwach kalkhaltig
4,00	Plattendolomit, Dolomitstein, grau bis dunkelgrau, graue Partien etwas kalkig, kleinstückig zerbohrt (3-8cm), horizontale u. steilfallende Flächen schwarzgrau, kalkfrei bis schwach kalkhaltig, Phenolgeruch nur beim Anschlagen des Gesteins
2,50	Plattendolomit, Dolomitstein, braungrau bis dunkelgrau, auf einz. Flächen schwarzgrau, mit mm-großen Kalzitnestern, selten Kalzit in Haarrissen, FdS:5-10°, Pyrit selten auf schwarzgrau, kalkfrei bis schwach kalkhaltig, Phenolgeruch nur beim Anschlagen des Gesteins
2,20	, Kernverlust
1,00	Plattendolomit, Dolomitstein, braungrau bis dunkelgrau, mm-dünne weiße Kalzit-Rißfüllungen, FdS: 5-10°, Klüfte (70-80°), kleinstückig (4-8cm) vorliegend, kalkfrei bis schwach kalkhaltig, Phenolgeruch nur beim Anschlagen des Gesteins
0,00	Plattendolomit, Dolomitstein, dicht, braungrau bis dunkelgrau, kleinstückig (3-7cm), selten mm-dünne kalzitgefüllte Risse, FdS: 5-10, Klüfte (70-80°), kalkfrei bis schwach kalkhaltig

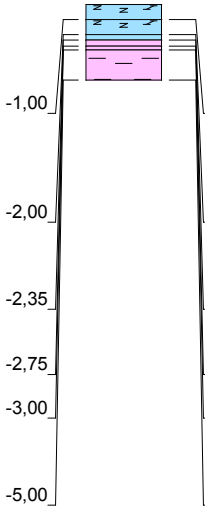
Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 601**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4506483	
Bohrfirma:	ibotech GmbH	Hochwert: 5664959	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 187,00m	
Datum:	17.04.2001	Endtiefe: 192,00m	

UFZ 601

m u. GOK (187,00 m NN)

190,0



Plattendolomit, Dolomitstein, dicht, braungrau, Bruchstücke bis 10 cm Länge, selten mit Kalzit verheilte Risse, FdS: 5-10°, Klüfte 70-80°, selten Pyrit auf Ablöseflächen, kalkfrei bis schwach kalkhaltig, deulicher Phenolgeruch, besonders beim Anschlagen des Gesteines

Plattendolomit, Dolomitstein, dicht, partienweise gebändert, braungrau, Bruchstücken bis 8 cm Länge, selten kalzitgefüllte mm-kleine Drusen und weiße, kalzitische Beläge, FdS: 5-10°, Klüfte 70-80°, kalkfrei bis schwach kalkhaltig, Phenolgeruch beim Anschlagen des Gesteins

Plattendolomit, Dolomitstein, dicht, gebändert, braungrau, Bruchstücke 8-10cm Länge, selten Kalzit auf Kluftflächen, FdS: 45°, Klüftung 70-80°, kalkfrei bis schwach kalkhaltig, nur mäßiger Phenolgeruch, zum liegenden Ton hin zunehmend

, Ton, schluffig, dunkelbraungrau, mit 3-5cm großen, meist plattigen Dolomitbruchstücken, dunkelbraun, dicht, schwach kalkhaltig

, Ton, schluffig, grau bis dunkelgrau, mit 2-3cm großen meist plattigen Dolomitbruchstücken, dunkelgrau, kalkhaltig

, Ton, mit Einlagerungen von Siltstein, geschichtet, kalkfrei und tlw. schwach verfestigten Siltsteinbrocken von 2-4cm Größe, kalkhaltig, bis 190,5 nach Phenol riechend, im unteren Teil kein Phenolgeruch mehr

Höhenmaßstab: 1:500

Projekt:	**Forschungsbohrungen Profen-Deuben**		Anlage 2
Bohrung:	**UFZ 601**		
Auftraggeber:	UFZ Umweltforschungszentrum	Rechtswert: 4506483	
Bohrfirma:	ibotech GmbH	Hochwert: 5664959	
Bearbeiter:	Präger	Ansatzhöhe: 187,00m	
Datum:	17.04.2001	Endtiefe: 192,00m	

Anlage 3: Analysenmethoden und Nachweißgrenzen der untersuchten anorganischen chemischen Parameter sowie DOC

Messgröße	**Analysemethode**	**Nachweißgrenze (mg/l)**
Physikochemische Parameter		
pH	DIN 38404-C5, elektrochemisch mit Einstabmesskette Ag/AgCl WTW Sentix 42	0.1 [-]
Redoxpotenzial (E_H)	elektrochemisch mit Platinelektrode mit Ag/AgCl Referenzelektrode WTW Sentix ORP	50 mV
el. Leitfähigkeit (Lf)	DIN EN 27888, elektrochemisch mit WTWE Tetra Con 325	50 µS/cm
Sauerstoffgehalt	elektrochemisch mit WTW CellOx 325	0.1
Kationen		
Natrium	Flammen-AAS	0.0002
Kalium	ICP-AES	0.004
Magnesium	ICP-AES	0.001
Calcium	ICP-AES	0.001
Eisen (gesamt)	ICP-AES	0.02
Mangan (gesamt)	ICP-AES	0.02
Ammonium	Photometrie	0.01
Silizium	ICP-AES	0.1
Anionen		
Sulfat	IC	0.5
Hydrogencarbonat	Titration pks 4.3	0.5
Chlorid	IC	0.5
Bromid	ICP-AES	0.04
Nitrat	IC	0.1
Fluorid	ICP-AES	0.05
Spurenelemente		
Strontium	Flammen-AAS	0.005
Arsen	Flammen-AAS	0.0003
Bor	ICP-AES	0.04
Barium	ICP-AES	0.01
Rubidium	Flammen-AAS	0.001
Phosphor (gesamt)	ICP-AES	0.08
Aluminium	ICP-AES	0.05
Gelöste Gase		
Sulfid	DIN 38405 – D27	0.04
Organik		
DOC	DIN 38409 H3, Shimadzu TOC 5050	0.1

IC = DX 100, Dionex, Idstein
ICP-AES = Spetroflame, Spectro Analytical Instruments, Kleve

Anlage 4: Chemische/Physikalische Eigenschaften von Phenol und Alkylphenolen (Varhanickova et al. 1995; U.S. EPA (1996a,b); k.A. = keine Angaben in der Literatur verfügbar.

Verbindung	**Molgewicht**	**pKa**	**Löslichkeit g/l bei 25 °C**	**Kow [-]**	**Koc [-]**
Phenol	94.11	9.92	82.8	30.2	17.0
o-Kresol	108.13	10.26	26.8	97.7	57.5
m-Kresol	108.13	10.0	19.6	93.3	57.5
p-Kresol	108.13	10.26	22.0	89.1	57.5
2,3-Dimethylphenol	122.17	10.4	6.48	k.A.	k.A.
2,4-Dimethylphenol	122.17	10.6	8.2	229	195
2,5-Dimethylphenol	122.17	10.3	3.76	k.A.	k.A.
2,6-Dimethylphenol	122.17	10.6	6.15	182	k.A.
3,4-Dimethylphenol	122.17	10.4	7.25	k.A.	k.A.
3,5-Dimethylphenol	122.17	10.2	6.71	k.A.	k.A.
2,3,5-Trimethylphenol	136.1	10.6	0.85	k.A.	k.A.
2,4,6-Trimethylphenol	136.1	10.9	1.42	k.A.	k.A.
3,4,5-Trimethylphenol	136.1	10.5	1.54	k.A.	k.A.
2-Ethylphenol	122.17	10.2	14.04	k.A.	k.A.
3- Ethylphenol	122.17	k.A.	6.2	k.A.	k.A.
4- Ethylphenol	122.17	10.0	7.98	k.A.	k.A.

Anlage 5: Nachweisgrenze (NWG), Erfassungsgrenze (EFG), Bestimmungsgrenze (BSG) des SPEME-GC-MS-Analyseverfahrens von Licha et al. (2001a,b) nach DIN 32645

	Flüssigprobe (µg/l)			Feststoff (µg/kg)		
	NWG	EFG	BSG	NWG	EFG	BSG
Phenol	2.95	5.90	8.85	11.80	23.60	35.40
Kresole	0.21	0.42	0.63	0.84	1.68	2.52
Ethylphenole	0.35	0.70	1.05	1.40	2.80	4.20
Dimethylphenole	0.14	0.28	0.42	0.56	1.12	1.68
Trimethylphenole	0.08	0.16	0.24	0.32	0.64	0.96

Anlage 6: Organischer Kohlenstoff im unbelasteten Plattendolomit aus Thüringen TIC mit Kohlenstoff-Schwefelanalysator CS 500 (Analytik Jena AG)

Probe	**TC (%)**	**TIC (%)**	**Corg (%)**
Ca3-1	12.954	14.008	-1.054
Ca3-2	13.311	13.123	0.188
Ca3-3	12.572	11.809	0.763
Ca3-4	11.421	9.425	1.996
Ca3-5	10.585	9.222	1.363

Anlage 7: Analysenergebnisse Phenole (Gestein) Bohrung UFZ 101

Teufe	**Teufe**	**%H20**	**Phenol**		**o-Kresol**		**p-Kresol**		**m-Kresol**		**2EP**		**4EP**		**3EP**		**2,6DMP**		**2,4DMP**		**2,5DMP**		**2,3DMP**		**3,4DMP**	
(m)	(mNN)		µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±
91.0	60.0	3.0	412.9	7.8	279.0	6.4	247.8	0.5	531.0	18.1	94.2	5.1	215.4	0.3	337.7	2.1	39.4	1.1	155.3	4.2	108.8	4.3	70.3	3.7	75.0	3.2
92.0	59.0	4.1	420.8	10.9	326.3	1.8	269.2	3.1	623.2	16.0	141.9	5.3	229.8	10.6	521.0	1.9	52.7	0.3	192.7	7.2	138.0	6.6	91.4	4.0	96.6	4.4
94.0	57.0	2.0	592.2	10.9	304.0	6.8	214.6	3.2	473.1	24.8	98.3	0.3	186.2	3.2	407.7	4.3	43.4	0.6	160.5	7.6	116.0	5.4	77.1	2.0	83.6	2.3
96.0	55.0	12.2	711.5	30.3	463.2	2.6	285.2	15.6	620.7	12.6	159.7	2.7	267.0	4.9	476.8	16.6	57.3	0.9	268.6	7.3	176.9	3.1	123.0	2.0	133.5	1.9
98.0	53.0	4.2	1568.0	42.3	499.5	1.0	391.4	12.4	920.0	47.1	140.8	7.5	265.1	2.9	491.1	14.0	65.2	1.3	280.6	11.6	173.5	2.6	119.7	6.2	137.0	0.0
102.0	49.0	2.7	321.9	0.6	421.4	0.3	352.5	4.2	814.4	37.2	155.5	5.6	303.3	11.1	601.8	2.2	71.9	2.6	298.8	0.9	199.3	6.7	127.1	5.2	145.6	8.3
104.0	47.0	6.5	2042.9	80.2	649.8	8.4	513.1	6.9	1214.0	29.7	129.9	0.3	297.7	11.3	462.2	21.9	92.3	1.4	400.4	7.1	222.6	3.7	161.1	4.5	144.0	7.0
106.0	45.0	6.2	856.4	14.7	573.3	15.1	274.3	6.8	1271.7	2.9	202.3	7.7	349.8	2.4	827.1	40.5	65.2	2.5	237.3	12.2	173.7	8.9	115.3	4.8	128.8	1.4
108.0	43.0	3.9	463.2	19.7	802.1	35.4	517.7	24.1	1931.8	38.5	231.2	5.0	739.2	7.2	1475.6	48.8	117.8	3.9	402.4	4.9	294.0	14.2	191.8	7.7	150.5	3.4
110.0	41.0	7.2	666.6	14.9	568.3	27.9	274.0	3.0	1221.9	48.3	152.4	5.3	292.9	7.1	665.3	20.9	53.3	1.6	196.2	8.1	133.5	4.4	85.4	2.2	93.0	3.8
111.0	40.0	4.8	602.5	25.6	580.2	0.9	166.0	7.3	865.1	44.7	127.8	3.1	246.2	7.2	654.2	23.7	49.6	1.8	198.0	1.5	128.2	2.9	82.8	3.4	93.3	4.0
112.0	39.0	8.9	2325.9	73.0	868.5	27.6	190.5	6.9	1130.0	9.4	130.0	5.7	267.8	12.2	635.6	10.4	55.4	1.8	176.8	3.7	130.2	2.7	82.2	2.3	88.2	3.6
113.0	38.0	4.7	1960.8	42.6	609.4	12.9	556.0	7.0	985.5	50.7	63.4	0.9	213.5	1.5	319.0	7.4	24.1	0.8	105.3	2.0	73.8	2.6	39.1	1.2	44.5	2.0
114.0	37.0	9.4	0.0	0.0	381.3	18.4	9.3	0.1	465.8	23.8	70.2	3.6	49.9	1.6	310.5	0.6	20.7	0.8	81.7	1.3	57.3	3.1	34.8	0.8	38.3	1.7
115.0	36.0	8.3	2837.7	97.6	1018.2	27.0	816.0	39.6	1593.9	71.1	93.0	0.8	278.4	10.2	502.5	9.0	33.7	0.2	155.7	5.1	107.1	3.7	60.1	0.9	76.1	0.1
117.0	34.0	5.7	673.1	24.7	412.3	18.3	66.3	3.4	561.7	0.5	61.1	2.7	110.7	4.2	284.2	4.9	22.6	1.0	89.9	3.3	64.9	2.9	40.9	1.6	49.9	0.6
118.0	33.0	7.0	333.0	6.1	409.6	0.4	34.1	1.7	503.4	20.3	61.8	3.1	103.8	3.5	297.9	3.7	25.2	0.8	94.0	2.3	64.5	3.2	42.0	1.9	50.2	1.3
119.0	32.0	9.0	2311.5	105.8	518.4	25.8	326.1	4.6	768.5	29.6	70.7	3.0	169.6	4.4	328.7	5.5	27.4	0.7	106.8	2.6	75.3	3.2	47.2	0.5	54.8	2.2
120.0	31.0	9.2	105.4	2.1	422.3	12.7	16.7	0.3	489.3	4.1	75.1	2.5	62.3	0.3	323.7	14.3	27.9	1.0	113.3	4.5	68.5	2.4	45.0	1.6	52.8	0.9
121.0	30.0	9.4	0.0	0.0	542.1	24.0	10.7	0.5	609.0	16.8	81.4	4.2	59.3	1.8	395.3	18.6	33.0	0.8	127.2	2.2	83.1	3.4	52.2	0.9	61.4	2.4
122.0	29.0	6.5	0.0	0.0	315.3	15.5	11.7	0.6	371.0	17.1	48.7	2.4	38.4	0.5	234.9	4.4	19.4	0.4	81.1	1.6	49.6	0.4	31.4	1.5	38.7	2.2
123.0	28.0	9.1	1298.1	43.2	891.4	31.8	323.0	9.6	1102.2	50.8	143.1	0.1	222.2	3.3	617.4	15.1	63.4	2.1	233.7	3.6	150.9	2.5	90.7	4.8	102.1	2.0
124.0	27.0	4.8	62.8	0.6	308.7	7.6	2.2	0.1	349.6	14.2	47.6	0.3	42.2	1.5	203.1	10.7	19.4	0.1	78.6	3.6	48.4	2.4	31.4	1.4	38.0	1.7
125.0	26.0	8.7	230.8	6.0	868.8	12.7	37.7	1.1	934.7	16.4	109.2	2.2	106.3	0.3	557.1	23.5	56.2	1.8	202.0	7.8	127.0	5.1	78.4	2.6	85.9	0.8
126.0	25.0	8.7	90.4	2.7	468.6	16.2	26.2	1.4	534.8	3.9	72.0	3.2	69.1	1.6	366.6	15.4	26.8	0.6	111.0	3.4	73.0	3.9	48.5	2.6	56.7	0.2
127.0	24.0	7.5	1919.3	70.9	451.7	0.5	244.5	2.2	574.1	0.2	67.0	1.3	149.8	1.9	321.8	1.9	26.3	0.8	103.6	2.8	74.3	0.4	47.5	2.6	51.4	0.5
128.0	23.0	7.9	3385.5	101.4	695.3	28.9	563.7	1.2	944.4	25.1	84.6	1.4	233.9	12.2	371.9	7.7	36.7	0.8	141.7	5.5	91.6	3.1	61.4	0.3	56.3	2.9
129.0	22.0	8.0	4167.2	87.0	763.4	6.7	678.1	8.0	1101.0	50.3	92.5	1.3	276.4	7.6	441.8	1.4	35.4	0.5	152.0	3.3	101.5	4.0	70.9	2.0	63.8	3.6
133.0	18.0	8.3	4147.2	136.3	1068.3	19.7	923.0	31.0	1437.6	20.0	154.3	5.0	436.6	22.2	793.7	12.3	66.4	0.7	246.9	6.9	161.8	8.1	106.6	3.5	105.1	3.8
136.0	15.0	8.4	0.0	0.0	449.1	7.3	390.7	19.7	619.3	5.7	54.6	0.7	184.3	2.4	344.6	18.2	25.4	0.1	86.6	0.6	65.0	0.8	42.6	0.6	43.1	0.2
140.0	11.0	8.1	118.0	5.8	12.6	0.3	0.0	0.0	10.3	0.3	6.7	0.3	7.7	0.3	11.2	0.1	24.3	0.2	57.1	1.7	23.1	0.1	19.7	0.7	9.5	0.5
142.0	9.0	4.3	0.0	0.0	129.7	3.2	39.5	1.6	137.7	5.4	18.9	0.0	17.3	0.5	47.2	1.0	14.2	0.6	41.2	1.1	24.1	0.1	16.9	0.5	16.8	0.1
146.0	5.0	8.4	0.0	0.0	9.4	0.4	9.5	0.1	10.5	0.5	3.8	0.1	9.1	0.3	9.1	0.2	7.1	0.3	6.2	0.2	3.7	0.1	2.5	0.1	1.8	0.0
149.0	2.0	4.9	0.0	0.0	7.8	0.4	8.4	0.3	9.8	0.3	1.4	0.0	3.8	0.2	0.0	0.0	3.9	0.1	3.6	0.1	1.9	0.1	1.6	0.0	1.1	0.0
150.0	1.0	5.3	0.0	0.0	34.1	0.4	17.0	0.4	32.1	0.4	5.2	0.2	27.4	0.4	17.6	0.8	5.8	0.3	12.0	0.5	7.8	0.3	3.4	0.1	2.1	0.0
153.0	-2.0	4.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
155.0	-4.0	7.2	0.0	0.0	8.9	0.0	6.6	0.1	10.0	0.2	2.9	0.1	5.1	0.3	6.5	0.3	5.5	0.0	5.4	0.1	2.7	0.1	2.2	0.1	1.8	0.1
156.0	-5.0	6.2	0.0	0.0	20.3	0.2	13.9	0.2	21.1	0.4	3.2	0.1	13.7	0.3	9.1	0.2	5.6	0.1	8.5	0.1	4.6	0.1	2.6	0.0	1.6	0.1

Anlage 7: Analysenergebnisse Phenole (Gestein) Bohrung UFZ 101

Teufe	**Teufe**	**3,5DMP**		**2,4,6 TMP**		**2,3,6TMP**		**2,3,5 TMP**		**3,4,5TMP**		**Summe**	
(m)	(mNN)	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	**µg/kg**	±µg/kg
91.0	60.0	222.4	9.2	21.7	0.4	25.0	0.1	125.5	4.0	18.1	0.7	**2979.7**	71.3
92.0	59.0	277.9	16.0	30.8	0.7	35.1	0.2	180.5	6.1	24.7	1.0	**3652.6**	96.2
94.0	57.0	232.4	10.3	25.6	1.3	30.5	1.5	141.9	6.7	19.6	0.7	**3206.6**	91.8
96.0	55.0	395.8	6.6	34.7	0.9	37.9	0.7	233.9	0.1	33.8	1.0	**4479.6**	109.7
98.0	53.0	406.2	14.0	36.9	0.7	45.1	0.3	245.0	11.8	34.9	2.3	**5820.1**	178.1
102.0	49.0	431.4	22.3	40.4	0.3	53.1	3.5	294.0	1.6	37.0	0.3	**4669.5**	112.7
104.0	47.0	426.8	12.5	49.4	0.9	63.6	1.9	159.3	10.3	43.9	2.9	**7072.9**	211.0
106.0	45.0	374.8	21.1	27.6	1.6	32.1	0.7	242.3	10.2	24.1	1.6	**5776.2**	154.8
108.0	43.0	639.1	4.3	56.6	2.8	70.6	1.3	377.9	21.7	50.6	1.4	**8511.9**	244.3
110.0	41.0	286.1	15.9	32.4	1.5	22.0	0.4	154.1	9.1	165.8	8.2	**5063.3**	182.6
111.0	40.0	277.0	8.5	15.7	0.1	24.2	0.2	186.6	6.6	17.9	0.9	**4315.2**	142.4
112.0	39.0	283.3	10.1	14.5	0.1	18.1	0.5	144.8	8.9	11.2	0.4	**6552.9**	179.4
113.0	38.0	132.0	4.6	6.2	0.3	7.3	0.3	64.2	3.7	5.3	0.3	**5209.7**	140.9
114.0	37.0	125.7	5.2	5.7	0.2	6.4	0.2	63.0	0.4	5.1	0.2	**1725.8**	62.2
115.0	36.0	201.4	7.2	7.9	0.4	9.1	0.6	87.5	0.8	7.4	0.1	**7885.6**	274.3
117.0	34.0	148.0	2.3	6.5	0.1	7.4	0.5	70.8	3.7	5.0	0.2	**2675.2**	74.8
118.0	33.0	148.8	7.1	7.3	0.2	9.4	0.1	81.7	5.1	6.2	0.1	**2273.1**	60.9
119.0	32.0	162.3	3.9	6.4	0.3	9.4	0.2	86.0	0.8	6.9	0.1	**5075.9**	193.3
120.0	31.0	156.4	6.3	9.5	0.2	11.5	0.7	90.9	4.0	6.5	0.2	**2077.2**	58.1
121.0	30.0	183.9	4.8	10.0	0.6	12.2	0.2	101.6	2.3	7.6	0.3	**2370.0**	83.7
122.0	29.0	114.8	4.2	6.6	0.4	7.9	0.2	64.1	0.0	6.2	0.1	**1439.8**	51.6
123.0	28.0	302.8	6.4	18.8	0.3	24.0	1.2	163.3	1.1	14.4	0.1	**5761.6**	178.1
124.0	27.0	112.7	2.6	6.2	0.2	7.0	0.1	60.1	0.4	4.0	0.0	**1422.0**	47.7
125.0	26.0	264.0	5.0	15.3	0.2	19.1	0.3	134.8	1.7	10.5	0.3	**3837.9**	87.8
126.0	25.0	164.9	4.3	6.1	0.1	8.3	0.0	78.9	3.7	7.0	0.2	**2208.9**	63.4
127.0	24.0	150.9	5.8	6.8	0.2	8.1	0.3	74.5	0.9	6.0	0.0	**4277.7**	93.1
128.0	23.0	166.7	2.9	11.8	0.0	12.3	0.7	87.9	1.1	7.3	0.2	**6952.9**	195.3
129.0	22.0	189.2	5.4	9.4	0.6	10.9	0.7	89.8	5.6	7.8	0.5	**8251.0**	188.5
133.0	18.0	311.4	3.8	13.6	0.5	20.6	1.2	160.9	7.0	16.0	0.9	**10170.1**	283.1
136.0	15.0	120.0	6.9	6.7	0.3	7.3	0.1	67.4	3.3	14.7	0.0	**2521.5**	67.1
140.0	11.0	28.2	1.1	6.7	0.3	8.4	0.3	11.2	0.6	3.9	0.2	**358.7**	12.7
142.0	9.0	49.8	2.7	2.8	0.0	4.1	0.1	12.1	0.2	2.4	0.0	**574.8**	17.1
146.0	5.0	5.1	0.0	3.0	0.1	4.7	0.0	4.8	0.2	1.1	0.1	**91.5**	2.6
149.0	2.0	3.3	0.2	1.3	0.0	2.4	0.0	3.0	0.1	0.6	0.0	**53.9**	1.9
150.0	1.0	6.2	0.0	1.3	0.1	2.7	0.1	4.0	0.2	0.8	0.0	**179.6**	4.3
153.0	-2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
155.0	-4.0	5.2	0.0	1.5	0.1	3.1	0.0	4.6	0.1	1.0	0.1	**73.0**	1.6
156.0	-5.0	4.7	0.2	1.6	0.1	2.5	0.1	6.5	0.4	0.5	0.0	**119.9**	2.4

Anlage 7: Analysenergebnisse Phenole (Gestein) Bohrung UFZ 301

Teufe	**Teufe**	**%H20**	**Phenol**		**o-Kresol**		**p-Kresol**		**m-Kresol**		**2EP**		**4EP**		**3EP**		**2,6DMP**		**2,4DMP**		**2,5DMP**		**2,3DMP**	
(m)	(mNN)		µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±
137.0	12.1	6.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	5.3	0.4	1.7	0.0	1.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
138.0	11.1	4.8	0.0	0.0	134.0	3.0	113.2	5.3	14.1	0.4	10.1	0.7	29.3	2.4	28.5	2.0	3.1	0.2	14.2	0.7	12.2	0.7	8.7	0.4
139.0	10.1	7.5	0.0	0.0	42.3	0.0	31.1	0.5	2.2	0.1	2.7	0.1	6.7	0.3	4.1	0.2	0.5	0.0	2.9	0.1	3.1	0.0	2.5	0.2
144.0	5.1	5.9	2302.0	51.4	418.5	0.1	165.0	5.0	320.2	9.4	42.3	1.7	49.8	3.8	161.8	1.4	17.1	0.2	75.5	3.8	46.7	1.6	27.7	0.5
146.0	3.1	2.6	549.7	3.8	100.8	5.4	59.7	1.1	130.4	2.3	14.2	0.3	29.0	0.4	63.2	2.1	1.9	0.1	9.3	0.5	10.4	0.2	6.2	0.3
148.0	1.1	1.6	523.2	10.7	174.2	7.9	115.8	7.6	199.2	3.3	24.1	0.7	54.4	2.3	113.7	4.5	6.9	0.4	28.8	0.8	21.5	0.7	14.0	0.5
150.0	-0.9	2.0	2037.6	18.7	497.2	34.1	172.3	5.3	486.9	20.5	58.1	3.3	76.2	2.2	278.4	12.2	28.6	2.0	103.3	5.8	65.9	1.2	39.5	2.2
152.0	-2.9	3.4	1715.0	47.3	415.0	8.8	103.7	5.1	370.7	25.5	54.8	3.0	39.6	1.1	243.6	6.7	23.7	0.9	84.4	4.5	57.6	0.4	34.3	1.7
153.0	-3.9	6.3	782.5	1.2	237.1	15.1	226.9	1.2	334.7	13.0	3.7	0.3	9.2	0.3	10.9	0.2	0.9	0.0	7.8	0.0	3.6	0.1	4.2	0.3
153.8	-4.7	2.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
157.0	-7.9	10.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
158.0	-8.9	11.5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
160.0	-10.9	9.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
179.0	-29.9	4.0	20750.7	1047.0	2599.1	28.8	2391.1	116.4	3213.0	94.4	26.5	0.8	86.7	6.0	129.7	3.4	11.3	0.2	64.2	1.0	35.5	2.4	54.1	0.5
180.0	-30.9	4.5	2389.2	40.5	30.0	1.0	26.8	0.4	28.0	0.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.3	0.1	1.0	0.1	0.7	0.0
181.0	-31.9	3.9	912.0	4.6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
182.0	-32.9	12.8	21128.3	149.7	2437.4	109.1	2219.9	96.2	3225.6	191.8	77.0	6.2	256.9	18.4	464.6	34.1	29.1	1.4	129.5	6.8	87.1	6.1	85.1	2.0
183.0	-33.9	5.5	2954.1	6.1	585.1	25.7	525.7	34.5	628.7	29.0	13.5	0.7	34.6	2.8	67.4	3.1	4.3	0.2	24.3	0.1	13.4	0.2	16.8	0.2
184.0	-34.9	8.0	16138.1	186.9	2293.7	85.1	2035.5	100.9	2894.8	202.4	170.5	12.6	606.6	6.4	605.1	44.1	88.5	6.5	304.1	4.8	200.1	11.8	136.8	7.7
185.0	-35.9	3.9	8110.2	127.4	1409.4	3.0	1347.5	72.7	1976.5	35.4	95.6	2.2	365.9	27.2	481.1	40.9	46.0	0.7	160.5	11.0	113.0	0.3	88.8	1.0
186.0	-36.9	3.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
187.0	-37.9	3.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
189.0	-39.9	5.5	10124.7	245.5	1244.5	56.5	1162.6	17.4	1644.9	38.4	44.3	2.7	169.1	3.9	224.8	2.6	21.3	1.3	88.4	5.3	55.3	1.9	54.4	2.5
190.0	-40.9	7.8	18087.8	913.8	2615.5	77.6	2358.8	34.2	3428.3	213.4	144.4	5.3	475.0	31.8	618.9	52.8	59.2	1.5	215.1	1.4	150.5	9.4	126.2	5.0
191.0	-41.9	3.9	9409.4	117.8	1183.1	22.7	1056.6	69.3	1747.3	110.2	49.8	1.5	158.7	9.5	296.8	17.9	22.6	0.7	82.9	0.3	55.9	0.0	51.8	2.5
192.0	-42.9	2.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Anlage 7: Analysenergebnisse Phenole (Gestein) Bohrung UFZ 301

Teufe	**Teufe**	**3,4DMP**		**3,5DMP**		**2,4,6 TMP**		**2,3,6TMP**		**2,3,5 TMP**		**3,4,5TMP**		**Summe**	
(m)	(mNN)	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	**µg/kg**	±µg/kg
137.0	12.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	0.1	0.0	1.8	0.0	0.4	0.0	**10.5**	0.5
138.0	11.1	8.8	0.4	31.7	0.4	0.4	0.0	0.4	0.0	6.9	0.5	0.5	0.0	**416.0**	16.8
139.0	10.1	2.8	0.1	12.8	0.5	0.1	0.0	0.1	0.0	1.1	0.0	0.1	0.0	**115.0**	2.0
144.0	5.1	35.0	2.3	110.6	8.3	2.8	0.1	3.3	0.2	46.5	2.4	3.2	0.2	**3828.0**	91.9
146.0	3.1	5.2	0.3	27.5	0.6	0.4	0.0	0.4	0.0	7.3	0.2	0.4	0.0	**1016.1**	17.3
148.0	1.1	14.5	0.6	48.1	1.9	0.9	0.0	1.3	0.1	22.8	1.3	1.5	0.0	**1365.0**	42.9
150.0	-0.9	48.2	2.1	144.6	4.3	5.1	0.0	6.9	0.2	78.0	3.4	5.6	0.1	**4132.5**	115.5
152.0	-2.9	37.5	0.6	131.3	8.2	4.7	0.2	6.1	0.3	74.4	5.6	4.9	0.4	**3401.3**	118.6
153.0	-3.9	6.0	0.2	12.6	0.5	0.0	0.0	0.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1640.7**	32.2
153.8	-4.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
157.0	-7.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
158.0	-8.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
160.0	-10.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
179.0	-29.9	92.7	2.7	89.0	4.7	0.2	0.0	0.2	0.0	2.1	0.1	1.3	0.1	**29547.4**	1307.9
180.0	-30.9	0.0	0.0	3.6	0.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**2481.6**	43.3
181.0	-31.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**912.0**	4.6
182.0	-32.9	115.8	5.0	214.4	8.5	0.3	0.0	0.4	0.0	34.5	0.5	4.1	0.1	**30510.2**	634.0
183.0	-33.9	22.1	0.9	85.3	5.4	0.2	0.0	0.1	0.0	4.1	0.3	0.6	0.0	**4980.5**	109.0
184.0	-34.9	167.3	2.7	300.4	15.7	8.3	0.3	12.2	0.5	167.6	2.6	12.0	0.9	**26141.8**	684.1
185.0	-35.9	112.2	7.4	188.7	3.9	1.5	0.0	2.7	0.2	103.6	3.4	7.0	0.2	**14610.3**	336.0
186.0	-36.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
187.0	-37.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
189.0	-39.9	68.2	0.1	123.1	1.7	0.7	0.0	0.8	0.0	37.6	1.8	3.5	0.1	**15068.3**	379.2
190.0	-40.9	160.2	11.0	271.1	0.6	1.6	0.0	2.6	0.2	101.8	5.0	7.9	0.2	**28825.0**	1358.3
191.0	-41.9	109.4	2.1	122.0	7.7	0.9	0.0	1.3	0.0	51.5	2.5	3.3	0.2	**14403.3**	362.5
192.0	-42.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0

Anlage 7: Analysenergebnisse Phenole (Gestein) Bohrung UFZ 401

Teufe	**Teufe**	**%H20**	**Phenol**		**o-Kresol**		**p-Kresol**		**m-Kresol**		**2EP**		**4EP**		**3EP**		**2,6DMP**		**2,4DMP**		**2,5DMP**	
(m)	(mNN)		µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±
80.0	116.7	10.5	137.0	3.3	37.7	1.6	18.4	0.9	53.9	0.3	6.6	0.2	14.2	0.1	12.3	0.3	1.7	0.0	6.7	0.1	6.0	0.3
83.0	113.7	9.8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
87.0	109.7	10.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
90.0	106.7	11.2	1410.6	57.4	127.0	4.7	144.0	0.2	228.0	4.8	15.7	0.2	56.6	0.9	28.4	0.5	4.0	0.1	22.2	0.6	17.3	0.2
94.0	102.7	8.4	31320.1	598.0	3110.0	38.2	5180.0	22.6	5370.0	21.8	263.0	9.4	1140.0	46.9	509.0	20.7	84.4	2.2	579.0	7.0	348.0	7.8
97.0	99.7	9.2	4520.6	141.0	326.0	0.3	531.0	23.6	548.0	3.8	20.7	0.1	95.2	2.9	38.5	0.9	6.0	0.3	38.7	1.0	25.1	0.9
99.0	97.7	12.1	77075.5	1260.0	8410.0	263.0	14800.0	361.0	15100.0	502.0	888.0	24.2	3540.0	0.0	1800.0	38.1	302.0	3.4	2000.0	65.1	1190.0	38.6
101.0	95.7	14.5	8294.9	186.0	1300.0	61.1	2240.0	2.9	2510.0	51.1	464.0	11.2	2450.0	87.7	1080.0	1.6	140.0	3.2	1141.0	23.9	614.0	30.7
103.0	93.7	4.7	6946.3	315.0	792.0	18.3	1440.0	39.4	1490.0	6.2	149.0	6.6	724.0	6.8	233.0	10.5	40.7	1.1	318.0	23.4	191.0	1.2
110.0	86.7	2.1	8949.5	310.0	988.0	5.3	1700.0	36.4	1800.0	76.8	132.0	5.5	510.0	24.6	270.0	6.5	29.1	0.6	203.0	3.7	153.0	1.8
112.0	84.7	15.2	6821.6	112.0	1020.0	48.5	1820.0	50.4	1900.0	7.0	195.0	5.9	758.0	24.1	419.0	19.8	47.2	0.9	318.0	12.1	239.0	3.4
113.0	83.7	0.4	957.3	21.3	144.0	2.2	200.0	1.8	214.0	0.2	69.4	1.0	149.0	5.5	86.1	1.1	28.6	1.3	98.5	4.5	60.7	2.1
114.0	82.7	11.2	1509.2	65.3	267.0	0.8	400.0	9.6	446.0	4.5	91.3	2.1	213.0	2.7	63.1	1.5	26.5	0.6	127.0	1.5	81.9	3.4
115.0	81.7	3.6	2310.9	68.8	339.0	3.6	579.0	20.7	571.0	10.2	83.8	1.9	252.0	4.9	110.0	3.4	28.9	0.9	150.0	4.8	88.9	2.2
115.9	80.8	8.3	874.0	12.1	147.0	0.7	213.0	2.6	239.0	10.8	63.7	0.3	115.0	5.2	53.3	1.3	19.5	0.1	88.8	3.7	55.3	1.7
119.6	77.1	3.7	1505.8	37.7	507.0	10.0	1420.0	55.4	2210.0	32.7	608.0	29.7	1620.0	68.4	1160.0	24.7	271.0	13.5	958.0	35.5	680.0	22.2
120.0	76.7	8.4	22986.0	294.0	2680.0	116.0	4460.0	175.0	4610.0	221.0	274.0	5.6	911.0	43.7	344.0	3.3	90.6	0.8	467.0	17.2	328.0	8.9
121.0	75.7	10.1	12100.0	487.0	961.0	2.3	1420.0	53.2	1520.0	29.4	66.1	0.2	205.0	7.0	119.0	4.8	22.4	1.0	120.0	3.6	77.6	1.0
122.0	74.7	10.8	51640.0	804.0	6290.0	281.0	10300.0	188.0	10600.0	381.0	731.0	35.1	2500.0	37.5	1310.0	39.8	175.0	2.3	1400.0	43.4	814.0	4.4
123.0	73.7	10.2	32850.0	1400.0	3820.0	68.1	6460.0	54.1	7150.0	160.0	484.0	20.8	1760.0	87.4	864.0	40.1	125.0	3.8	876.0	26.9	548.0	17.8
124.5	72.2	13.5	16000.0	278.0	1370.0	35.5	1920.0	72.3	2060.0	58.2	61.3	0.6	150.0	7.2	106.0	2.2	20.2	0.3	112.0	0.5	74.1	0.1
125.0	71.7	6.8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
126.0	70.7	9.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
127.0	69.7	13.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Anlage 7: Analysenergebnisse Phenole (Gestein) Bohrung UFZ 401

Teufe	**Teufe**	**2,3DMP**		**3,4DMP**		**3,5DMP**		**2,4,6 TMP**		**2,3,6TMP**		**2,3,5 TMP**		**3,4,5TMP**		**Summe**	
(m)	(mNN)	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	**µg/kg**	±µg/kg
80.0	116.7	4.7	0.0	0.0	0.0	9.6	0.3	0.4	0.0	0.6	0.0	1.2	0.0	0.0	0.0	**311.0**	7.5
83.0	113.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
87.0	109.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
90.0	106.7	13.5	0.3	0.0	0.0	29.8	1.1	1.1	0.0	1.5	0.0	3.6	0.1	2.0	0.0	**2105.3**	71.1
94.0	102.7	282.0	12.3	0.0	0.0	595.0	7.0	14.5	0.2	18.4	0.8	45.8	1.6	28.6	0.2	**48887.8**	796.7
97.0	99.7	20.9	0.1	0.0	0.0	41.0	0.8	0.8	0.0	1.1	0.0	2.5	0.1	1.7	0.1	**6217.8**	175.8
99.0	97.7	941.0	11.8	0.0	0.0	2010.0	64.9	84.1	0.9	81.2	0.7	187.0	5.7	120.0	2.7	**128528.8**	2642.0
101.0	95.7	502.0	13.7	0.0	0.0	1540.0	57.8	299.0	8.1	252.0	9.5	564.0	22.4	315.0	0.3	**23705.9**	571.2
103.0	93.7	160.0	2.8	210.0	8.2	306.0	9.8	33.3	1.2	40.9	0.4	90.8	4.3	53.9	2.2	**13218.9**	457.5
110.0	86.7	129.0	4.7	114.0	1.7	204.0	8.2	6.4	0.2	8.8	0.1	28.1	1.0	13.1	0.3	**15238.0**	487.2
112.0	84.7	202.0	5.9	177.0	5.5	348.0	4.0	15.5	0.3	24.5	1.2	71.9	0.1	37.9	1.0	**14414.6**	302.1
113.0	83.7	45.2	2.3	31.5	1.6	102.0	4.4	15.6	0.6	23.8	0.9	30.7	0.1	10.9	0.3	**2267.3**	51.1
114.0	82.7	72.7	2.1	72.8	2.0	156.0	1.5	18.9	0.1	18.0	0.3	43.2	0.7	15.3	0.5	**3621.9**	99.2
115.0	81.7	79.1	3.3	69.3	2.6	140.0	6.4	15.7	0.1	23.0	0.3	37.5	1.6	17.2	0.4	**4895.3**	136.1
115.9	80.8	57.4	0.1	59.1	2.0	105.0	1.8	15.4	0.3	15.5	0.3	34.8	1.5	11.7	0.4	**2167.5**	44.8
119.6	77.1	503.0	16.5	245.0	2.5	972.0	1.4	106.0	4.8	178.0	4.6	234.0	5.2	93.4	3.9	**13271.2**	368.7
120.0	76.7	259.0	12.1	249.0	2.2	393.0	7.2	12.9	0.2	14.1	0.4	37.9	0.6	28.2	0.4	**38144.7**	908.6
121.0	75.7	86.9	0.9	75.0	0.1	107.0	5.1	2.0	0.1	3.5	0.1	6.4	0.0	5.6	0.1	**16897.5**	595.8
122.0	74.7	653.0	4.5	1050.0	34.5	961.0	43.4	34.0	1.4	27.6	0.9	97.0	3.1	73.0	1.3	**88655.6**	1905.0
123.0	73.7	387.0	29.4	348.0	14.7	704.0	5.7	24.7	0.7	27.6	0.9	80.6	2.1	52.0	2.5	**56560.9**	1934.9
124.5	72.2	86.4	1.4	62.4	0.7	95.1	0.7	0.0	0.0	0.0	0.0	2.8	0.1	0.0	0.0	**22120.3**	457.8
125.0	71.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
126.0	70.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0
127.0	69.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0

UFZ 501

Teufe	Teufe	%H20	Phenol		o-Kresol		p-Kresol		m-Kresol		2EP		4EP		3EP		2,6DMP		2,4DMP		2,5DMP	
(m)	(mNN)		µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±
103.0	81.2	0.0	0.0	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.1	0.1	2.2	0.1	1.6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
105.0	79.2	0.0	49.3	1.0	10.2	0.2	8.6	0.2	3.8	0.0	10.6	0.2	12.7	0.2	9.4	0.4	4.8	0.1	15.6	0.6	6.1	0.2
106.0	78.2	0.0	0.0	20.0	2.3	0.1	1.7	0.0	5.9	0.0	0.8	0.0	1.7	0.0	2.4	0.1	4.1	0.2	8.4	0.4	0.0	0.0
106.5	77.7	0.0	0.0	20.0	2.7	0.1	2.0	0.0	3.3	0.1	2.0	0.0	2.1	0.1	2.0	0.0	3.6	0.1	7.6	0.4	1.0	0.0
107.0	77.2	0.0	0.0	20.0	2.6	0.0	2.1	0.0	2.8	0.1	0.3	0.0	1.7	0.0	1.3	0.0	2.1	0.1	5.6	0.1	0.0	0.0
108.0	76.2	0.0	0.0	20.0	2.4	0.1	1.9	0.0	3.0	0.1	0.9	0.0	1.7	0.0	1.9	0.0	3.2	0.1	8.1	0.1	0.0	0.0
110.0	74.2	0.0	311.7	1.7	8.0	0.1	11.6	0.4	14.1	0.6	4.2	0.2	8.0	0.4	5.3	0.2	6.7	0.2	21.1	1.1	2.4	0.0
113.0	71.2	0.0	182.5	6.4	8.4	0.2	7.8	0.0	10.2	0.0	2.4	0.1	6.6	0.2	5.7	0.1	4.5	0.2	10.1	0.5	1.8	0.0
115.0	69.2	0.0	401.4	5.6	3.6	0.0	4.6	0.2	5.0	0.1	1.9	0.0	3.1	0.1	1.4	0.0	2.7	0.1	7.4	0.2	1.4	0.0
116.0	68.2	0.0	219.5	5.9	4.7	0.0	6.1	0.3	7.8	0.1	0.8	0.0	4.5	0.2	5.4	0.2	5.5	0.1	12.4	0.2	1.4	0.0
117.0	67.2	0.0	473.1	14.5	16.1	0.2	15.4	0.0	19.9	0.9	12.8	0.0	13.8	0.1	20.2	1.0	28.3	1.5	51.8	1.0	10.0	0.4
118.0	66.2	0.0	184.4	2.3	5.0	0.1	6.5	0.2	7.7	0.2	2.9	0.1	5.3	0.0	4.8	0.2	3.9	0.0	7.6	0.4	1.7	0.1
119.0	65.2	0.0	140.3	2.1	24.0	0.8	18.2	0.9	26.8	1.3	29.9	1.5	31.0	0.9	52.4	1.4	84.6	3.6	146.9	2.2	24.1	0.4
123.0	61.2	0.0	76.8	3.2	11.6	0.2	10.4	0.1	13.7	0.4	5.2	0.0	5.1	0.1	8.5	0.1	5.5	0.2	21.8	0.3	5.5	0.2
124.0	60.2	0.0	90.2	1.0	21.7	0.0	15.9	0.8	16.7	0.4	8.2	0.0	10.6	0.0	8.8	0.1	6.3	0.0	21.8	0.8	6.0	0.3
125.0	59.2	0.0	65.4	1.9	134.5	4.5	127.4	4.4	169.6	6.9	81.4	2.1	236.1	8.9	155.0	2.9	49.4	1.5	180.4	3.4	83.5	2.4
126.0	58.2	0.1	55091.2	92.1	3838.8	53.2	4313.1	22.1	6307.9	257.8	299.4	8.9	1320.3	42.1	1666.9	67.0	112.6	5.4	574.9	23.9	346.0	1.6
127.0	57.2	0.1	2688.7	61.6	870.6	17.1	1319.5	53.2	2304.0	52.4	157.5	5.5	610.5	13.5	886.9	33.7	62.0	1.8	340.0	9.3	177.8	2.7
127.5	56.7	0.0	324.5	8.9	98.4	1.3	192.7	7.1	333.1	16.3	20.2	0.4	101.7	1.1	148.8	4.4	4.4	0.2	49.3	1.2	25.4	0.8
129.0	55.2	0.1	20202.6	853.4	1301.8	58.6	1379.3	61.7	1813.5	37.9	57.8	1.6	247.6	4.0	136.1	5.2	26.8	0.5	106.6	2.4	81.4	3.4

UFZ 601

Teufe	Teufe	%H20	Phenol		o-Kresol		p-Kresol		m-Kresol		2EP		4EP		3EP		2,6DMP		2,4DMP		2,5DMP	
(m)	(mNN)		µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±
180.0	7.0	2.2	9480.0	117.0	1340.0	60.8	2420.0	45.6	2630.0	98.1	255.0	12.3	963.0	10.3	454.0	17.6	37.2	0.7	345.0	13.3	279.0	7.9
181.0	6.0	1.1	293.0	1.9	59.5	1.8	60.2	1.9	141.0	0.1	51.7	0.7	74.9	0.1	99.8	4.0	13.2	0.6	44.1	1.0	34.0	0.6
183.0	4.0	2.7	398.0	17.6	118.0	0.2	135.0	4.5	269.0	6.9	93.6	1.0	115.0	2.7	176.0	7.3	17.7	0.4	58.4	1.4	61.3	2.1
184.5	2.5	0.1	138.0	5.9	60.4	0.8	49.1	2.3	69.7	1.6	52.1	2.3	49.3	0.6	70.0	3.1	24.9	0.3	80.3	2.3	48.3	1.5
186.0	1.0	1.7	286.0	9.5	163.0	5.7	132.0	5.5	179.0	2.3	100.0	2.0	97.0	0.1	35.5	1.0	50.7	1.3	155.0	6.5	106.0	0.1
187.0	0.0	1.3	318.0	15.8	186.0	7.1	252.0	5.9	401.0	19.1	58.1	2.0	162.0	2.4	193.0	1.0	27.7	0.5	96.1	1.2	65.2	1.7
188.0	-1.0	0.6	185.0	0.7	186.0	4.6	340.0	8.2	753.0	17.3	83.9	1.5	219.0	3.3	399.0	7.8	38.4	0.8	125.0	0.4	89.8	1.1
189.0	-2.0	3.0	761.0	2.2	629.0	29.0	1190.0	44.8	2220.0	77.1	159.0	6.7	567.0	27.4	748.0	4.6	69.0	3.1	250.0	4.2	186.0	3.4
190.0	-3.0	12.9	13100.0	280.0	2330.0	60.6	3550.0	11.6	6080.0	158.0	141.0	5.7	671.0	25.4	779.0	32.2	39.5	0.8	217.0	1.4	186.0	5.9
191.0	-4.0	10.5	7720.0	3.9	827.0	27.3	1289.0	56.2	2190.0	0.3	36.9	0.8	181.0	0.7	141.0	4.1	9.3	0.4	52.4	1.0	48.9	0.5
192.0	-5.0	11.8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

UFZ 501

Teufe	**Teufe**	**2,3DMP**		**3,4DMP**		**3,5DMP**		**2,4,6 TMP**		**2,3,6TMP**		**2,3,5 TMP**		**3,4,5TMP**		**Summe**	
(m)	(mNN)	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	**µg/kg**	±µg/kg
103.0	81.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.1	0.1	1.3	0.1	4.9	0.3	0.7	0.0	**13.8**	0.7
105.0	79.2	3.5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.4	0.1	2.6	0.2	9.0	0.3	0.9	0.1	**149.3**	3.8
106.0	78.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.2	0.1	2.3	0.2	7.7	0.5	1.1	0.0	**40.7**	1.7
106.5	77.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.5	0.0	2.0	0.0	6.7	0.3	1.4	0.1	**38.9**	1.2
107.0	77.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.4	0.1	1.3	0.1	4.0	0.2	0.8	0.0	**25.9**	0.7
108.0	76.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.5	0.1	1.8	0.1	8.1	0.2	1.2	0.1	**35.7**	0.9
110.0	74.2	0.0	0.0	8.0	0.2	19.6	0.2	2.6	0.1	3.9	0.1	17.2	0.3	2.5	0.0	**447.0**	5.8
113.0	71.2	0.0	0.0	4.6	0.0	11.2	0.1	1.7	0.1	2.3	0.2	9.7	0.1	1.4	0.0	**271.0**	8.2
115.0	69.2	0.0	0.0	2.9	0.0	7.2	0.1	1.8	0.1	2.0	0.1	5.5	0.1	1.1	0.0	**453.1**	6.8
116.0	68.2	0.0	0.0	5.6	0.2	13.6	0.0	2.7	0.0	3.6	0.1	10.9	0.8	1.4	0.1	**305.9**	8.2
117.0	67.2	8.4	0.2	28.9	0.4	70.9	0.4	12.4	0.8	19.4	1.2	63.4	1.7	2.8	0.1	**867.6**	24.3
118.0	66.2	1.8	0.0	4.2	0.1	10.4	0.0	2.6	0.1	3.4	0.1	7.1	0.4	1.4	0.1	**260.8**	4.3
119.0	65.2	24.5	0.9	85.2	1.2	208.6	1.7	30.8	1.5	51.8	3.4	160.2	0.2	17.3	1.1	**1156.7**	25.0
123.0	61.2	2.9	0.1	11.4	0.0	28.0	0.2	4.9	0.1	6.0	0.3	25.9	0.6	3.1	0.1	**246.2**	6.1
124.0	60.2	3.2	0.1	5.8	0.2	14.2	0.2	6.5	0.3	4.9	0.3	8.7	0.1	1.4	0.0	**251.3**	4.6
125.0	59.2	56.3	2.4	74.8	0.7	183.0	3.0	22.1	1.1	34.6	2.2	98.9	2.5	15.1	0.5	**1767.4**	51.4
126.0	58.2	285.7	2.3	299.5	2.0	733.2	9.8	15.8	1.2	20.1	0.5	93.4	2.3	32.4	0.5	**75351.3**	592.6
127.0	57.2	130.4	4.4	224.3	1.8	549.2	2.8	13.3	0.3	18.8	0.7	157.3	10.0	26.0	0.3	**10536.8**	271.1
127.5	56.7	19.0	0.1	37.2	0.1	91.1	1.5	1.6	0.1	1.8	0.0	26.2	1.5	3.8	0.0	**1479.0**	45.1
129.0	55.2	65.5	3.3	54.5	2.4	133.4	3.0	1.3	0.0	2.4	0.2	5.6	0.4	4.0	0.0	**25620.4**	1038.0

UFZ 601

Teufe	**Teufe**	**2,3DMP**		**3,4DMP**		**3,5DMP**		**2,4,6 TMP**		**2,3,6TMP**		**2,3,5 TMP**		**3,4,5TMP**		**Summe**	
(m)	(mNN)	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	µg/kg	±	**µg/kg**	±µg/kg
180.0	7.0	238.0	8.8	289.0	2.1	404.0	17.2	8.1	0.1	9.9	0.4	56.8	2.1	25.3	0.2	**19234.3**	414.4
181.0	6.0	26.4	0.4	16.3	0.6	91.8	1.5	1.3	0.0	1.9	0.1	34.6	1.7	0.0	0.0	**1043.7**	16.9
183.0	4.0	42.2	0.5	31.9	0.9	142.0	4.2	1.3	0.1	2.4	0.1	46.9	1.5	0.0	0.0	**1708.7**	51.4
184.5	2.5	29.9	1.1	0.0	0.0	94.0	2.3	5.1	0.2	7.4	0.3	58.5	0.4	0.0	0.0	**837.0**	24.7
186.0	1.0	64.0	2.9	25.3	0.9	198.0	8.6	8.2	0.2	11.3	0.2	113.0	1.2	10.5	0.3	**1734.5**	48.1
187.0	0.0	44.6	1.9	35.3	1.5	116.0	4.4	4.2	0.0	5.6	0.1	58.8	2.9	5.0	0.2	**2028.6**	67.5
188.0	-1.0	78.3	3.4	81.2	0.3	177.0	0.7	6.7	0.0	12.6	0.4	106.0	3.4	7.6	0.1	**2888.5**	53.8
189.0	-2.0	144.0	1.8	128.0	3.4	409.0	3.6	3.2	0.0	5.3	0.0	185.0	5.6	11.7	0.2	**7665.2**	217.0
190.0	-3.0	149.0	1.7	0.0	0.0	641.0	22.8	0.0	0.0	0.0	0.0	152.0	7.5	0.0	0.0	**28035.5**	613.5
191.0	-4.0	41.9	0.2	0.0	0.0	172.0	7.4	0.0	0.0	0.0	0.0	26.4	0.7	0.0	0.0	**12735.8**	103.4
192.0	-5.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	**1.0**	0.0

Anlage 8: Analysenergebnisse Phenole (Grundwasser GWL II)

Probe		**UFZ 101**	**UFZ 301**	**Trebnitz 3/42**	**UFZ 401**	**UFZ 501**	**UFZ 601**
Phenol	µg/l	4248.5	210773.0	2768628.1	3686.8	14.8	575.4
o-Kresol	µg/l	844.2	20877.5	219534.5	302.4	2.1	1092.0
p-Kresol	µg/l	840.6	24012.8	515534.8	191.5	2.9	2561.8
m-Kresol	µg/l	1548.2	27670.9	390624.8	480.3	2.4	5095.8
2EP	µg/l	77.3	1743.0	24468.5	36.4	1.8	232.6
4EP	µg/l	214.1	5041.6	131733.7	132.1	2.0	616.6
3EP	µg/l	482.0	6328.7	58583.4	67.3	2.2	986.7
2,6DMP	µg/l	61.1	1037.3	4830.4	11.8	24.9	119.0
2,4DMP	µg/l	245.8	2539.5	50289.0	43.3	36.2	480.7
2,5DMP	µg/l	150.8	2392.2	26965.5	42.4	1.1	295.5
2,3DMP	µg/l	96.0	2017.9	29225.1	33.6	3.0	203.2
3,4DMP	µg/l	104.9	2049.7	38338.5	0.0	0.0	274.3
3,5DMP	µg/l	274.3	3743.0	32032.3	69.6	0.0	720.1
2,4,6 TMP	µg/l	17.8	65.6	819.1	4.1	8.3	10.7
2,3,6TMP	µg/l	14.2	112.0	1527.2	8.6	10.1	13.8
2,3,5 TMP	µg/l	81.8	1462.6	3785.4	12.7	34.7	176.6
3,4,5TMP	µg/l	13.4	135.6	2490.2	6.2	7.8	20.4
Summe	µg/l	**9315.0**	**312002.9**	**4299410.5**	**5129.1**	**154.3**	**13475.2**
Phenolindex	µg/l	**17500**	**64800**	**n.b.**	**64800**	**480**	**6900**
Summe PAK (EPA)	µg/l	0.3	1.1	n.b.	7.0	0.5	1.6
Summe BTEX	µg/l	84.8	63.6	n.b.	283.0	99.4	8.0

Anlage 9: Analysenergebnisse der untersuchten anorganischen Parameter und Isotope im Grundwasser des GWL II

GWM	Ort	phenol-belastet	pH	Eh	T	Lf	Na	K	Mg	Ca	Mn	Fe	NH4	NO3	SO4	HCO3	Cl	F	Br	P
				V	°C	µS/cm	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l
101	Göbitz	Nein	6.87	-0.037	12.5	2380	30.40	5.10	60.60	514.70	0.13	0.98	n.b.	0.14	1016.40	391.01	48.40	1.20	0.12	<0.2
102	Alt-Tröglitz	Nein	6.87	-0.022	11.9	1750	37.00	18.80	52.50	305.00	0.49	0.74	n.b.	<0.05	586.30	447.13	70.10	0.19	0.11	<0.2
103	Zangenberg	Nein	7.13	0.062	12.1	1275	21.20	5.90	60.60	226.60	0.25	0.98	n.b.	<0.05	355.30	332.45	73.40	0.15	0.11	<0.2
32102	TB Schleenhain	Nein	7.21	0.385	16.0	1198	48.00	7.02	30.53	140.00	0.09	0.04	0.10	<0.94	261.60	304.40	76.10	n.b.	<0.1	0.10
342	Trebnitz, Schluckbrunnen	Nein	7.68	n.b.	8.9	2340	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
3836	TB Schleenhain	Nein	6.9	0.106	17.1	2500	267.00	7.45	44.85	292.70	0.61	0.67	0.33	<0.05	604.00	345.26	353.10	0.30	1.80	<0.2
670	Tgb. Profen	Nein	6.98	-0.008	15.1	2530	30.10	4.60	53.30	731.20	0.06	1.45	0.58	<0.05	1429.10	442.86	35.70	1.00	<0.05	<0.2
92	Tgb. Profen	Nein	6.8	0.125	14.2	2660	23.00	3.75	39.59	610.00	0.06	0.24	0.29	<0.05	1341.40	627.69	22.60	n.b.	<0.05	n.b.
SLH97	TB Schleenhain	Nein	6.8	0.014	17.5	2470	220.90	6.80	45.10	254.40	0.46	0.50	0.26	<0.05	471.30	352.10	360.50	0.43	2.20	n.b.
SLH99	TB Schleenhain	Nein	6.95	0.224	16.7	2390	256.00	7.30	45.02	258.60	0.41	0.40	0.29	<0.05	461.00	372.10	356.20	0.46	2.30	<0.2
970	Tgb. Profen	Nein	6.75	0.108	14.8	2720	26.00	3.83	38.91	624.00	0.05	0.15	0.37	<0.05	1370.20	547.17	30.90	n.b.	0.06	n.b.
870	Tgb. Profen	Nein	6.78	0.094	14.9	2720	26.50	4.96	44.59	614.00	0.05	0.12	0.47	0.47	1378.90	453.84	29.60	n.b.	<0.05	n.b.
770	Tgb. Profen	Nein	7.06	0.017	14.6	2430	27.20	4.50	43.80	715.40	0.05	0.05	1.21	0.18	1348.10	484.34	38.50	1.10	0.07	<0.2
UFZ101	Profen	Ja	7.05	0.044	14.6	2080	78.70	6.90	56.40	287.20	0.20	0.53	54.80	<0.1	799.40	506.90	47.30	n.b.	n.b.	<0.2
UFZ201	Tgb. Profen	Ja	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.
UFZ301	Profen	Ja	6.64	-0.171	15.9	2710	59.20	24.99	58.50	270.20	0.14	0.38	117.10	0.30	433.40	1317.00	46.70	22.20	4.40	0.25
UFZ401	Trebnitz	Ja	7.24	0.007	14.5	1424	29.90	4.18	29.31	101.10	0.25	3.25	98.50	<0.1	136.00	710.65	32.00	4.50	<0.1	<0.2
UFZ501	Deuben	Ja	9.03	0.338	14.0	2860	192.00	23.00	10.40	262.40	<0.02	0.13	63.10	6.00	668.80	103.70	386.30	n.b.	n.b.	0.72
UFZ601	Deuben	Ja	7.17	-0.093	15.9	1821	104.00	29.24	18.62	155.60	0.13	0.22	54.80	0.10	214.50	639.30	167.80	8.50	0.60	n.b.

Anlage 9: Analysenergebnisse der untersuchten anorganischen Parameter und Isotope im Grundwasser des GWL II

GWM	Ort	Al	Ba	As	Rb	Sr	SIO2	B	O2	H2S	S-34	O-18 (SO4)	C-13	DOC
		mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	‰ CDT	‰ SMOW	‰ PDB	mg/l
101	Göbitz	<0.07	<0.04	<0.07	n.b.	4.03	6.55	0.20	0.11	n.b.	10.45	n.b.	-12.10	2.20
102	Alt-Tröglitz	<0.07	0.06	<0.07	n.b.	0.89	4.96	0.05	n.b.	n.b.	2.34	n.b.	-13.86	4.10
103	Zangenberg	<0.07	0.11	<0.07	n.b.	1.80	6.56	0.13	0.50	n.b.	0.29	n.b.	-14.54	1.60
32102	TB Schleenhain	<0.05	0.02	0.001	n.b.	1.92	4.76	0.13	0.52	n.b.	12.88	13.44	n.b.	2.08
342	Trebnitz, Schluckbrunnen	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	2.40	n.b.	-14.38	n.b.
3836	TB Schleenhain	n.b.	<0.04	0.001	0.07	3.47	5.38	0.17	0.31	n.b.	10.44	16.75	-14.38	1.87
670	Tgb. Profen	<0.1	0.16	<0.0005		3.44	6.55	0.16	0.00	n.b.	11.06	13.46	-11.72	2.10
92	Tgb. Profen	<0.1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	7.27	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	15.40
SLH97	TB Schleenhain	0.00	0.03	0.003	0.03	4.00	15.70	1.20	n.b.	n.b.	11.09	n.b.	-13.59	n.b.
SLH99	TB Schleenhain	n.b.	<0.04	0.001	0.08	3.45	5.24	0.18	0.45	0.01	11.13	16.43	-14.28	0.00
970	Tgb. Profen	0.94	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	8.03	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3.50
870	Tgb. Profen	<0.1	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	7.95	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	3.40
770	Tgb. Profen	<0.1	0.11	0.001	n.b.	2.68	6.53	0.11	0.00	n.b.	11.59	12.47	-12.90	3.20
UFZ101	Profen	<0.08	0.07	0.050	n.b.	2.54	8.86	0.14	n.b.	12.60	5.30	7.90	-13.50	n.b.
UFZ201	Tgb. Profen	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.	k.d.
UFZ301	Profen	0.33	0.04	0.000	n.b.	3.47	7.13	0.17	0.07	69.60	25.20	16.80	-0.40	n.b.
UFZ401	Trebnitz	<0.08	0.39	n.b.	n.b.	0.52	6.14	0.17	n.b.	<0.01	6.60	n.b.	-12.60	n.b.
UFZ501	Deuben	<0.08	0.09	0.001	n.b.	2.30	5.40	0.08	n.b.	0.03	1.40	10.60	n.b.	n.b.
UFZ601	Deuben	<0.08	0.49	<0.0003	n.b.	2.41	3.22	0.13	0.92	1.87	12.70	n.b.	-12.84	n.b.

Anlage 10: Isotopengehalte des untersuchten Zechstein-Anhydrits aus Krölpa, Thüringen.

Probe	**$d^{34}S$-SO_4 (‰ CDT)**	**$d^{18}O$-SO_4 (‰ SMOW)**
Tiwa - Krö 1	10.88	16.6
Tiwa - Krö 2	10.45	14.62
Tiwa - Krö 3	10.76	13.59
Tiwa - Krö 4	10.78	13.5
Tiwa - Krö 5	n.b.	13.22
Tiwa - Krö 6	10.22	10.37

Anlage 11: Isotopengehalte des Sulfats aus Eluaten der Aquifersedimente sowie der sedimentären Disulfide.

			Eluat		**Disulfid**
Probe	**GWL**	**Ort**	**$d^{34}S$**	**$d^{18}O$**	**$d^{34}S$**
			‰ CDT	‰ SMOW	‰ CDT
Pro1	5	Profen	7.97	n.b.	n.b.
Pro2	5	Profen	7.86	n.b.	17.5
Pro3	5	Profen	7.6	n.b.	n.b.
Pro4	5	Profen	7.36	-2.87	n.b.
Pro5	6	Profen	-12.42	n.b.	2.15
Pro6	6	Profen	-12.63	n.b.	2.15
Pro7	6	Profen	n.b.	n.b.	5.14
Pro8	6	Profen	n.b.	n.b.	-4.94
Pro9	6	Profen	-12.29	6.37	5.14
Pro10	6	Profen	-13.02	n.b.	-4.94
Pro11	6	Profen	-7.12	n.b.	n.b.
Pro12	6	Profen	-4.74	n.b.	n.b.
SLH1	6	Schleenhain	9	6.2	-46.3
SLH2	6	Schleenhain	2.1	13.6	-51.2
SLH3	6	Schleenhain	7.6	8.9	-49.6
SLH4	5	Schleenhain	n.b.	n.b.	17.1
SLH5	5	Schleenhain	15.15	4.05	15.81
SLH6	5	Schleenhain	19.96	5.09	31.47
SLH7	5	Schleenhain	19.94	-3.56	25.03
SLH8	5	Schleenhain	8.89	2.86	9.7
SLH9	5	Schleenhain	9.95	-0.98	11.9
SLH10	5	Schleenhain	11.73	-0.92	13.1
SLH11	6	Schleenhain	-12.3	2.7	-41.89
SLH12	6	Schleenhain	-7.03	5.56	-38.41
SLH13	6	Schleenhain	-27.03	-1.69	-44.76

Anlage 12: Analysenergebnisse der untersuchten Anorganischen Parameter und Isotope im Grundwasser (GWL 5, GWL 6) sowie im Oberflächenwasser der Weiße Elster

GWM	Datum	GWL	pH	Eh	T	Lf	Na	K	Mg	Ca	Mn	Fe	NH4	NO3	SO4	HCO3	Cl	F	Br	P	As	Rb
				V	°C	µS/cm	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l
199	21.09.1999	5	6.78	-0.140	13.8	2420	115.00	9.53	51.20	342.40	0.16	0.10		<0.05	407.60	938.79	162.60	0.27	0.60	0.22	n.b.	0.04
10992	02.11.1999	5	6.78	-0.112	13.3	2560	229.50	16.30	39.15	309.50	0.20	0.02	29.80	<0.05	458.10	861.93	177.70	0.17	0.47	n.b.	0.00	0.01
11085	20.07.1999	5	6.45	0.192	12.1	1735	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	8.82	<0.95	767.20	475.80	78.90	0.16	<0.25	n.b.	n.b.	n.b.
11792	20.09.1999	5	6.68	0.298	10.5	1329	17.20	3.45	44.95	341.95	0.34	2.79	0.15	<0.05	568.60	375.15	72.10	0.22	0.10	<0.2	n.b.	0.02
11992	20.09.1999	5	6.52	0.211	10.9	1360	25.70	4.24	41.90	274.30	0.33	10.44	0.44	0.07	587.20	343.40	74.50	0.23	0.13	n.b.	n.b.	0.02
12192	21.09.1999	5	6.72	-0.135	12.3	3150	401.20	11.00	39.10	313.40	0.03	0.09	n.b.	n.b.	747.10	1067.50	105.40	0.27	n.b.	0.29	n.b.	0.08
2735	10.07.2000	5	6.44	0.217	14.1	625	8.15	2.16	16.02	90.00	0.39	26.22	0.41	0.49	155.45	183.00	20.35	n.b.	<0.05	n.b.	0.00	n.b.
30049	09.05.2000	5	6.41	0.161	12.5	1168	11.90	1.80	37.51	189.60	0.70	22.00	0.58	<0.25	497.10	229.30	26.10	<0.25	<0.2	<0.25	0.00	<0.005
30297	08.05.2000	5	6.65	n.b.	n.b.	1728	20.70	3.60	43.10	300.10	0.67	32.70	0.86	<0.25	895.00	n.b.	41.90	<0.25	<0.2	<0.25	0.00	0.01
31056	12.07.2000	5	6.08	0.230	12.2	1317	24.10	4.78	35.41	203.20	0.39	3.82	24.70	0.99	552.90	194.60	51.83	n.b.	<0.1		<0.0004	n.b.
3377	08.05.2000	5	6.34	0.230	12.0	1495	19.50	3.10	55.00	269.80	0.50	29.70	0.43	<0.25	788.00	222.00	31.50	<0.25	<0.2	<0.25	<0.0004	0.01
40292	21.09.1999	5	6.57	0.090	13.2	1560	25.90	4.15	46.71	272.40	0.36	0.83	n.b.	n.b.	492.80	402.60	58.90	0.28	n.b.	<0.03	n.b.	0.02
40292	11.10.1999	5	6.52	0.056	13.2	1534	24.70	3.40	48.80	272.00	n.b.	n.b.	1.70	<0.05	499.40	402.60	58.00	0.15	0.13	n.b.	n.b.	n.b.
40492	23.04.1999	5	6.64	0.183	11.1	1411	16.70	5.63	40.95	291.30	0.48	9.31	0.19	<0.95	559.30	431.88	58.96	0.16	<0.25	<0.2	n.b.	0.01
40694	24.06.1999	5	6.39	0.201	10.6	817	14.50	5.63	24.13	138.50	0.34	14.00	0.38	4.63	330.42	206.79	34.08	0.15	<0.25	<0.2	n.b.	0.01
40794	23.06.1999	5	6.49	0.154	12.0	1498	21.60	3.55	41.05	308.60	0.69	27.33	0.20	<0.95	624.43	378.20	75.26	0.16	1.80	<0.2	n.b.	0.01
40894	25.07.2000	5	6.50	-0.193	11.7	1174	24.90	6.19	27.86	210.20	0.46	8.63	0.89	<0.38	383.15	383.69	45.45	0.10	<0.1	<0.2	n.b.	0.01
409094	24.06.1999	5	6.06	0.218	10.9	1580	24.90	5.63	44.20	287.10	0.95	36.02	0.40	<0.95	889.64	213.50	51.48	0.10	<0.25	<0.2	n.b.	0.01
41094	24.06.1999	5	2.48	0.061	12.4	4000	34.10	5.63	55.10	311.10	1.81	348.00	0.01	<1.9	1930.40	0.00	73.15	0.07	<0.05	<0.2	n.b.	0.04
411094	20.09.1999	5	5.96	0.224	11.4	1565	25.75	10.00	50.83	313.20	0.60	89.70	0.58	<0.05	891.80	165.92	58.30	0.28	0.10	<0.2	n.b.	0.03
411094	11.10.1999	5	5.97	0.114	11.4	1804	27.00	10.30	49.90	324.70	n.b.	n.b.	0.78	<0.05	857.50	167.14	53.90	0.21	0.10	<0.2	n.b.	n.b.
412294	01.07.1999	5	5.80	0.264	11.2	1825	24.80	4.24	62.80	583.00	0.63	78.80	0.47	<0.19	1107.20	125.66	31.99	0.13	<0.05	<0.2	n.b.	0.01
413294	30.06.1999	5	6.20	0.216	11.4	1650	25.00	7.14	46.91	288.70	0.74	59.90	n.b.	<0.05	871.50	200.69	20.50	n.b.	<0.05	<0.2	n.b.	0.02
520	05.09.2000	5	6.45	0.442	13.2	1457	12.20	2.37	49.30	231.40	0.86	4.74	0.76	<0.94	702.00	128.10	23.20	n.b.	<0.1	0.12	<0.0005	n.b.
521	03.11.2000	5	6.16	0.233	13.3	1779	18.50	4.52	74.30	336.00	1.16	12.29	0.70	<0.05	955.00	170.20	46.60	0.13	<0.04	<0.08	0.00	n.b.
522	03.11.2000	5	6.11	0.130	13.2	1871	17.00	4.47	85.70	332.70	0.95	7.01	0.76	<0.05	973.80	173.20	47.00	0.13	<0.04	<0.08	0.00	n.b.
10412	23.06.1999	6	7.10	0.132	13.1	663	6.99	1.58	18.67	123.20	0.27	2.06	0.08	<0.19	63.83	453.23	5.73	0.15	<0.05	<0.2	n.b.	<0.005
1097	16.02.2000	6	6.18	0.261	10.8	1609	35.50	22.53	63.30	273.50	0.29	0.09	0.05	1.74	770.00	150.10	60.00	0.12	0.13	<0.2	0.00	<0.005
11641	09.05.2000	6	6.46	0.196	n.b.	898	12.30	2.60	23.70	163.70	0.47	16.90	0.50	<0.25	337.00	185.40	12.80	<0.25	<0.2	<0.25	0.00	<0.005
1185	20.07.1999	6	6.48	0.173	11.8	2240	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	18.15	<0.95	859.40	605.12	101.90	0.17	<0.25	<0.2	n.b.	n.b.
17366	07.06.1999	6	6.59	0.425	11.8	1184	43.30	3.80	35.90	221.20	0.02	0.05	0.03	5.70	456.90	161.04	64.60	0.08	0.60	<0.2	n.b.	n.b.
17385	07.06.1999	6	7.02	0.042	11.6	1418	40.40	12.60	39.80	304.40	0.02	0.05	0.06	5.00	581.90	258.60	61.30	0.08	0.08	<0.2	n.b.	n.b.
17403	08.06.1999	6	6.71	0.187	11.6	1321	65.40	4.00	35.40	270.30	0.46	2.47	2.03	0.75	274.60	464.82	114.90	0.40	0.13	<0.2	n.b.	n.b.
17417	07.06.1999	6	6.66	0.354	11.8	2420	146.20	11.30	78.50	356.30	1.69	0.05	0.92	94.40	997.00	374.54	165.20	0.08	0.18	<0.2	n.b.	n.b.
19193	16.02.2000	6	6.85	0.091	10.9	1167	66.00	5.20	35.68	134.00	0.58	4.95	1.50	<0.05	366.64	206.79	80.86	0.17	0.16	<0.2	0.00	0.01
19195	16.02.2000	6	6.19	0.261	10.1	1105	60.70	8.57	41.55	111.60	0.35	5.41	0.23	<0.05	437.16	96.40	65.50	0.24	0.17	<0.2	0.01	<0.005
19345	01.09.1999	6	6.75	-0.003	13.6	1110	27.60	2.70	40.50	255.30	0.31	15.39	n.b.	<0.05	513.80	281.21	45.90	0.96	0.06	<0.2	n.b.	0.02

Anlage 12: Analysenergebnisse der untersuchten Anorganischen Parameter und Isotope im Grundwasser (GWL 5, GWL 6) sowie im Oberflächenwasser der Weiße Elster

GWM	Datum	GWL	Sr	SIO2	CO2	CH4	O-18	H-2	S-34	O-18 (SO4)	C-13	DOC
			mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	‰	‰	‰ CDT	‰ SMOW	‰ PDB	mg/l
199	21.09.1999	5	1.13	6.17	252.56	0.69	-8.48	-63.00	21.18	13.70	-19.46	12.91
10992	02.11.1999	5	1.11	7.97	233.20	0.75	-8.71	-64.10	23.51	14.98	-18.60	19.42
11085	20.07.1999	5	n.b.	n.b.	289.52	n.b.	-8.80	-64.30	15.74	14.05	-22.92	6.18
11792	20.09.1999	5	1.16	5.02	141.24	0.00	-9.14	-64.10	4.25	14.20	n.b.	2.47
11992	20.09.1999	5	0.79	5.37	185.20	n.b.	-8.94	-64.30	5.06	10.80	-18.48	n.b.
12192	21.09.1999	5	0.85	5.53	333.52	0.20	-8.68	-63.20	25.65	15.00	n.b.	0.51
2735	10.07.2000	5	0.54	4.77	115.70	n.b.	-8.96	-62.40	-6.82	9.30	n.b.	2.50
30049	09.05.2000	5	0.74	5.54	155.30	n.b.	-9.04	-63.10	2.94	4.36	n.b.	2.58
30297	08.05.2000	5	1.14	5.90	n.b.	n.b.	-9.06	-64.30	3.73	4.37	n.b.	1.10
31056	12.07.2000	5	0.97	5.25	281.60	n.b.	-8.66	-60.80	9.55	12.04	n.b.	5.57
3377	08.05.2000	5	1.03	5.96	176.00	n.b.	-8.87	-64.40	3.22	3.08	n.b.	2.41
40292	21.09.1999	5	0.99	6.43	183.04	0.19	-8.93	-63.80	9.44	14.54	-20.09	3.20
40292	11.10.1999	5	n.b.	n.b.	205.04	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-20.09	n.b.
40492	23.04.1999	5	1.17	n.b.	175.12	n.b.	-8.90	-60.80	3.56	15.50	-17.00	2.16
40694	24.06.1999	5	0.50	n.b.	155.76	n.b.	-8.97	-60.20	5.98	15.01	n.b.	n.b.
40794	23.06.1999	5	0.96	n.b.	212.10	n.b.	-8.82	-59.80	9.52	11.80	-20.35	1.39
40894	25.07.2000	5	0.78	n.b.	214.72	n.b.	-8.95	-68.60	4.50	14.98	-20.12	1.93
409094	24.06.1999	5	0.64	n.b.	329.12	n.b.	-8.86	-67.30	4.45	14.18	-21.48	n.b.
41094	24.06.1999	5	0.62	19.93	n.b.	n.b.	-8.92	-60.90	9.02	13.41	n.b.	n.b.
411094	20.09.1999	5	0.69	4.19	319.00	0.01	-8.84	-64.00	5.08	7.41	-21.13	1.40
411094	11.10.1999	5	n.b.	n.b.	311.08	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
412294	01.07.1999	5	0.91	n.b.	347.16	n.b.	-8.97	-64.30	6.33	10.73	n.b.	2.32
413294	30.06.1999	5	0.99	n.b.	220.88	n.b.	-8.85	-64.10	5.06	4.40	n.b.	1.67
520	05.09.2000	5	1.59	5.40	77.00	n.b.	-8.76	-63.40	6.05	7.09	n.b.	2.31
521	03.11.2000	5	2.65	8.54	196.70	n.b.	-8.92	-63.30	1.80	1.70	n.b.	5.29
522	03.11.2000	5	2.72	8.44	224.40	n.b.	-9.02	-64.20	2.10	0.90	n.b.	4.61
10412	23.06.1999	6	0.34	8.84	63.80	n.b.	-8.85	-67.80	-1.59	16.21	n.b.	2.46
1097	16.02.2000	6	0.79	6.67	175.60	n.b.	n.b.	n.b.	0.84	n.b.	n.b.	1.41
11641	09.05.2000	6	0.90	4.01	110.90	n.b.	n.b.	n.b.	9.39	9.99	n.b.	n.b.
1185	20.07.1999	6	n.b.	n.b.	340.12	n.b.	-8.77	-64.50	21.26	16.44	-22.03	11.20
17366	07.06.1999	6	0.78	4.71	73.04	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
17385	07.06.1999	6	1.10	3.75	42.68	n.b.	-8.72	-63.10	3.26	14.13	n.b.	n.b.
17403	08.06.1999	6	0.93	5.64	159.72	n.b.	-8.90	-64.00	15.67	13.89	-23.39	n.b.
17417	07.06.1999	6	1.71	5.10	137.28	n.b.	-7.99	-57.10	8.96	18.25	n.b.	n.b.
19193	16.02.2000	6	0.61	4.80	52.50	n.b.	n.b.	n.b.	5.27	11.61	n.b.	1.30
19195	16.02.2000	6	0.34	5.97	114.40	n.b.	n.b.	n.b.	1.11	4.67	n.b.	1.06
19345	01.09.1999	6	1.45	6.10	85.36	n.b.	n.b.	n.b.	3.24	16.40	n.b.	n.b.

Anlage 12: Analysenergebnisse der untersuchten Anorganischen Parameter und Isotope im Grundwasser (GWL 5, GWL 6) sowie im Oberflächenwasser der Weiße Elster

GWM	Datum	GWL	pH	Eh	T	Lf	Na	K	Mg	Ca	Mn	Fe	NH4	NO3	SO4	HCO3	Cl	F	Br	P	As	Rb
				V	°C	µS/cm	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	mg/l
19345	22.09.1999	6	6.74	0.134	12.7	1267	24.90	2.80	39.55	245.15	0.22	11.29	0.26	<0.05	442.90	288.53	43.00	0.96	<0.05	<0.2	n.b.	0.02
19375	01.09.1999	6	6.05	0.162	12.9	1134	61.60	10.30	60.20	179.70	0.15	1.95	0.11	<0.05	593.80	69.54	77.60	0.09	0.07	<0.2	n.b.	0.01
19375	22.09.1999	6	6.04	0.216	11.6	1308	55.80	9.60	57.05	165.80	0.15	2.01	0.11	<0.05	540.10	71.37	74.80	0.09	0.08	<0.2	n.b.	0.01
2097	28.03.2000	6	7.02	0.521	9.9	1897	53.10	26.78	50.10	311.40	<0.02	<0.05	<0.01	64.95	743.39	281.80	86.64	0.16	<0.16	<0.2	0.00	<0.005
2197	28.03.2000	6	7.14	0.501	10.8	1863	64.20	16.28	47.94	298.60	0.02	<0.05	<0.01	50.62	688.46	322.10	80.00	0.19	<0.04	<0.2	0.00	<0.005
23097	28.03.2000	6	6.92	0.571	10.1	1183	59.70	6.13	32.87	156.60	<0.02	<0.05	<0.01	16.49	434.77	182.40	77.06	0.19	<0.04	<0.2	0.00	<0.005
2397	15.02.2000	6	6.81	0.310	10.6	1220	48.50	8.11	33.69	176.90	<0.02	<0.05	<0.01	12.36	472.75	215.90	69.86	0.20	<0.04	<0.2	0.01	<0.005
30049	09.05.2000	6	6.41	0.171	12.5	1137	10.90	1.50	37.00	181.00	0.50	31.00	0.64	<0.25	504.90	229.30	22.60	<0.25	<0.2	<0.25	0.00	<0.005
31636	12.07.2000	6	6.04	0.238	12.2	2080	30.00	5.89	58.50	468.00	1.24	13.00	1.31	0.90	1131.00	124.40	55.00	n.b.	<0.1	n.b.	<0.0004	n.b.
32597	12.07.2000	6	6.55	0.225	13.3	885	16.60	9.02	25.90	147.00	0.39	3.62	0.37	4.23	396.00	122.00	33.10	n.b.	<0.1	n.b.	0.00	n.b.
3679	08.05.2000	6	6.10	0.256	11.5	1737	24.20	3.70	49.40	288.00	1.60	43.10	0.80	<0.25	939.60	172.00	49.80	<0.25	<0.2	<0.25	<0.0004	0.01
40994	24.06.1999	6	6.32	0.199	12.0	1424	64.60	5.63	37.33	229.90	0.69	23.56	0.33	<0.95	594.84	312.32	62.79	0.15	<0.25	<0.2	n.b.	0.01
41194	20.09.1999	6	6.24	0.229	11.4	1195	21.80	3.70	41.69	290.15	0.34	14.02	0.38	0.13	592.10	247.66	42.80	0.18	0.13	<0.2	n.b.	0.02
412194	30.06.1999	6	6.20	0.023	13.7	1288	26.70	3.70	36.98	236.90	0.55	18.02	n.b.	<0.05	562.90	261.08	32.00	n.b.	0.08	<0.2	n.b.	0.01
413194	30.06.1999	6	5.98	0.246	12.1	1133	23.80	8.00	31.80	180.10	0.42	36.95	n.b.	<0.05	502.70	128.71	25.00	n.b.	<0.05	<0.2	n.b.	0.01
50108	15.02.2000	6	6.45	0.222	11.6	1722	84.40	8.58	51.40	247.00	1.66	1.26	1.74	<0.05	778.44	237.90	98.11	0.20	0.27	<0.2	0.00	0.01
5681	13.10.1999	6	6.56	0.328	15.1	1613	77.50	5.39	51.70	220.00	0.49	0.05	0.27	<0.05	540.50	183.00	129.00	0.16	0.73	<0.2	0.00	0.05
5801	10.07.2000	6	5.30	0.271	14.4	724	5.88	2.03	11.28	52.90	0.47	93.50	0.70	1.02	309.02	42.10	9.63	n.b.	<0.01	n.b.	0.00	n.b.
5807	23.05.2000	6	6.24	0.190	13.2	890	8.75	2.40	24.90	158.70	0.84	22.26	0.49	0.23	323.00	167.10	20.65	0.23	0.12	<0.25	<0.0004	0.02
596	15.02.2000	6	6.68	0.295	10.5	1855	45.00	13.96	57.50	329.00	<0.02	<0.05	<0.01	28.80	803.00	370.90	82.84	0.16	0.09	<0.2	0.00	0.01
611	03.10.2000	6	6.55	0.316	16.3	412	8.07	2.32	16.07	57.20	0.13	0.11	0.28	<0.05	60.10	198.80	13.30	0.13	<0.04	<0.08	<0.0003	n.b.
620	05.09.2000	6	7.13	0.352	15.1	1147	38.60	5.83	37.70	141.00	0.06	<0.02	0.41	<0.94	237.00	380.00	70.40	n.b.	<0.1	0.14	<0.0005	n.b.
6941	23.05.2000	6	6.40	0.217	13.2	1097	25.50	4.20	27.70	185.10	0.54	8.27	0.72	0.44	367.00	152.50	47.60	<0.1	0.24	<0.25	0.00	0.02
6942	23.05.2000	6	6.17	0.223	13.3	1338	17.40	3.47	34.36	225.00	0.75	33.10	0.68	0.43	557.00	183.00	32.30	<0.1	0.22	<0.25	0.00	0.02
7070	10.07.2000	6	6.54	0.243	13.0	712	12.60	2.60	19.40	114.00	0.30	5.45	0.37	<0.9	206.00	191.50	28.72	n.b.	<0.1	n.b.	0.00	n.b.
9486	12.07.2000	6	6.39	0.170	13.8	1006	15.10	3.47	23.57	177.10	0.48	9.28	0.48	0.95	310.10	368.40	20.76	n.b.	<0.1	n.b.	<0.0004	n.b.
UFZ 301-62	03.05.2001	6	6.85	-0.091	14.0	1990	24.70	3.80	60.20	410.70	0.07	0.15	3.10	<0.1	987.80	425.20	28.10	n.b.	0.80	0.07	<0.001	n.b.
UFZ 101-62	08.03.2001	6	7.12	n.b.	n.b.	1232	29.80	3.10	34.50	189.10	0.14	0.26	7.60	0.10	319.70	350.00	61.80	1.00	0.30	0.06	0.00	n.b.
2024	02.02.2000	W.Elster	7.76	0.376	4.5	530	34.20	5.15	15.28	44.79	0.07	0.07	0.36	47.82	127.06	60.39	56.29	<0.1	<0.22	<0.2	0.00	0.01
2025	02.02.2000	W.Elster	7.78	0.396	4.5	532	34.30	5.21	15.31	44.61	0.07	0.06	0.34	47.63	126.60	61.61	56.76	<0.1	<0.22	<0.2	0.00	0.01
2026	02.02.2000	W.Elster	7.85	0.429	4.6	545	35.40	5.17	15.37	45.62	0.07	0.06	0.33	47.94	131.62	63.44	58.76	<0.1	<0.22	<0.2	0.00	<0.005
Elster-1	18.03.1999	W.Elster	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	37.30	5.50	22.10	67.40	n.b.	n.b.	0.33	34.70	141.20	n.b.	48.00	0.19	<0.05	n.b.	<0.0005	n.b.

Anlage 12: Analysenergebnisse der untersuchten Anorganischen Parameter und Isotope im Grundwasser (GWL 5, GWL 6) sowie im Oberflächenwasser der Weiße Elster

GWM	Datum	GWL	Sr	SIO2	CO2	CH4	O-18	H-2	S-34	O-18 (SO4)	C-13	DOC
			mg/l	mg/l	mg/l	mg/l	‰	‰	‰ CDT	‰ SMOW	‰ PDB	mg/l
19345	22.09.1999	6	1.68	5.96	90.64	0.01	-9.12	-63.80	4.88	13.80	-13.77	1.29
19375	01.09.1999	6	0.45	7.50	107.36	n.b.	n.b.	n.b.	-0.19	12.70	-18.92	1.32
19375	22.09.1999	6	0.41	7.64	114.84	0.00	-8.99	-63.80	-0.28	12.80	-18.88	1.58
2097	28.03.2000	6	1.00	5.33	48.40	n.b.	n.b.	n.b.	5.50	11.40	n.b.	1.63
2197	28.03.2000	6	0.78	4.36	40.90	n.b.	n.b.	n.b.	6.31	14.70	n.b.	1.70
23097	28.03.2000	6	0.24	4.91	40.04	n.b.	n.b.	n.b.	4.41	15.40	n.b.	1.14
2397	15.02.2000	6	0.49	4.88	60.30	n.b.	n.b.	n.b.	3.97	8.09	n.b.	1.21
30049	09.05.2000	6	0.69	5.26	155.70	n.b.	-8.86	-63.80	2.72	3.62	-20.08	2.16
31636	12.07.2000	6	2.25	8.92	191.80	n.b.	-8.93	-62.00	9.04	5.02	n.b.	2.53
32597	12.07.2000	6	0.64	5.09	59.80	n.b.	-8.66	-63.70	6.79	7.99	n.b.	2.41
3679	08.05.2000	6	0.91	7.56	237.20	n.b.	8.08	-58.50	1.29	8.60	-18.62	2.47
40994	24.06.1999	6	0.79	n.b.	260.04	n.b.	-8.82	-63.80	12.86	12.95	-20.27	2.83
41194	20.09.1999	6	0.68	5.17	253.88	0.00	-8.92	-64.10	9.44	10.14	-17.77	2.13
412194	30.06.1999	6	0.74	n.b.	278.52	n.b.	-9.04	-64.60	4.67	10.60	n.b.	2.11
413194	30.06.1999	6	0.59	n.b.	237.16	n.b.	-9.13	-65.40	4.79	5.00	n.b.	1.74
50108	15.02.2000	6	0.85	4.77	146.50	n.b.	n.b.	n.b.	5.15	4.94	n.b.	n.b.
5681	13.10.1999	6	2.23	6.07	81.84	0.05	-8.98	-65.50	6.15	13.22	-16.31	1.68
5801	10.07.2000	6	0.59	12.46	360.30	n.b.	-9.13	-62.10	10.01	10.95	n.b.	4.25
5807	23.05.2000	6	0.99	6.48	115.70	n.b.	-8.49	-59.90	9.39	2.10	n.b.	2.57
596	15.02.2000	6	0.93	5.37	136.80	n.b.	n.b.	n.b.	4.65	14.76	n.b.	1.58
611	03.10.2000	6	0.52	3.95	95.04	n.b.	-9.17	-64.50	10.10	0.90	n.b.	2.83
620	05.09.2000	6	1.76	5.27	46.60	n.b.	-9.60	-64.50	11.34	13.04	n.b.	2.40
6941	23.05.2000	6	1.11	5.30	104.70	n.b.	-8.91	-64.90	-2.66	5.90	n.b.	1.93
6942	23.05.2000	6	1.25	7.17	210.32	n.b.	-8.82	-63.30	0.70	1.90	n.b.	2.57
7070	10.07.2000	6	0.75	4.99	97.70	n.b.	-9.00	-63.70	-0.09	14.06	n.b.	2.84
9486	12.07.2000	6	1.53	3.28	256.50	n.b.	-9.14	-64.80	8.27	16.12	n.b.	3.30
UFZ 301-62	03.05.2001	6	n.b.	n.b.	98.12	n.b.	n.b.	n.b.	12.60	12.60	n.b.	n.b.
UFZ 101-62	08.03.2001	6	1.24	6.88		n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
2024	02.02.2000	W.Elster	0.20	3.87	2.20	n.b.	-8.95	-62.00	4.97	15.10	n.b.	3.43
2025	02.02.2000	W.Elster	0.20	3.60	2.20	n.b.	-8.80	-62.30	5.05	16.00	n.b.	3.70
2026	02.02.2000	W.Elster	0.21	3.66	1.76	n.b.	-8.96	-60.90	5.07	15.20	n.b.	3.62
Elster-1	18.03.1999	W.Elster	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	5.04	13.45	n.b.	2.60