

Grundwasserchemie

Praxisorientierter Leitfaden zur numerischen Modellierung von Beschaffenheit, Kontamination und Sanierung aquatischer Systeme

Bearbeitet von
Broder J. Merkel, Britta Planer-Friedrich

Neuauflage 2008. Buch. xi, 242 S.

ISBN 978 3 540 87468 3

Format (B x L): 15,5 x 23,5 cm

Weitere Fachgebiete > Geologie, Geographie, Klima, Umwelt > Umweltpolitik,
Umwelttechnik > Umwelttechnik

Zu Leseprobe

schnell und portofrei erhältlich bei

The logo for beck-shop.de features the text 'beck-shop.de' in a bold, red, sans-serif font. Above the 'i' in 'shop' are three red dots of increasing size. Below the main text, the words 'DIE FACHBUCHHANDLUNG' are written in a smaller, red, all-caps, sans-serif font.

beck-shop.de
DIE FACHBUCHHANDLUNG

Die Online-Fachbuchhandlung beck-shop.de ist spezialisiert auf Fachbücher, insbesondere Recht, Steuern und Wirtschaft. Im Sortiment finden Sie alle Medien (Bücher, Zeitschriften, CDs, eBooks, etc.) aller Verlage. Ergänzt wird das Programm durch Services wie Neuerscheinungsdienst oder Zusammenstellungen von Büchern zu Sonderpreisen. Der Shop führt mehr als 8 Millionen Produkte.

Inhaltsverzeichnis

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

1.2.1.2 Kinetik der Minerallösung	54
1.2.2 Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit	55
1.2.2.1 Folgereaktionen	57
1.2.2.2 Parallelreaktionen	57
1.2.3 Einflüsse auf die Reaktionsgeschwindigkeit	57
1.2.4 Empirische Lösungsansätze für kinetisch kontrollierte Reaktionen	59
1.3 Reaktiver Stofftransport	62
1.3.1 Einführung	62
1.3.2 Strömungsmodelle	62
1.3.3 Transportmodelle	63
1.3.3.1 Begriffsdefinition	63
1.3.3.2 Idealisierte Transportverhältnisse	64
1.3.3.3 Reale Transportverhältnisse	66
1.3.3.3.1. Austausch in Aquiferen mit doppelter Porosität	67
1.3.3.4 Numerische Methoden der Transportmodellierung	69
1.3.3.4.1. Finite Differenzen/ Finite Elemente Methode	69
1.3.3.4.2. Gekoppelte Verfahren	71
2 Hydrogeochemische Modellierungsprogramme	75
2.1 Allgemeines	75
2.1.1 Lösungscores der Programme	75
2.1.2 Programme auf Basis Freie-Bildungsenthalpien-Verfahren	78
2.1.3 Programme auf Basis Gleichgewichtskonstanten-Verfahren	78
2.1.3.1 PHREEQC	79
2.1.3.2 EQ 3/6	80
2.1.4 Thermodynamische Datensätze	82
2.1.4.1 Allgemeines	82
2.1.4.2 Aufbau thermodynamischer Datensätze	85
2.1.5 Probleme und Fehlerquellen von Modellierungen	87
2.2 Anwendung von PHREEQC	92
2.2.1 Struktur von PHREEQC mit graphischer Benutzeroberfläche	92
2.2.1.1 Input	94
2.2.1.2 Database	103
2.2.1.3 Output	104
2.2.1.4 Grid	105
2.2.1.5 Chart	105
2.2.2 Einführungsbeispiele für PHREEQC-Modellierungen	105
2.2.2.1 Gleichgewichtsreaktionen	105
2.2.2.1.1. Beispiel 1a: Standard-Output - Meerwasseranalyse	106
2.2.2.1.2. Beispiel 1b: Gleichgewichtsreaktion - Gipslösung	108
2.2.2.1.3. Beispiel 1c: Gleichgewichtsreaktion – Calcitlösung mit CO ₂	110
2.2.2.1.4. Beispiel 1d: Unsicherheiten in der Modellierung – LJUNGSKILE	112

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

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

4.1.4 Herkunft des Grundwassers	201
4.1.4.1 Förderung fossilen Grundwassers in ariden Gebieten	201
4.1.4.2 Salzwasser-/Süßwasser-Interface	202
4.1.5 Anthropogene Nutzung von Grundwasser	203
4.1.5.1 Probenahme: Ca-Titration mit EDTA	203
4.1.5.2 Kohlensäure-Aggressivität	204
4.1.5.3 Wasseraufbereitung durch Belüftung - Brunnenwasser	204
4.1.5.4 Wasseraufbereitung durch Belüftung - Schwefelquelle	204
4.1.5.5 Verschneiden von Wässern	206
4.1.6 Sanierung von Grundwasser	207
4.1.6.1 Nitratreduktion mit Methanol	207
4.1.6.2 Fe^0 -Wände	208
4.1.6.3 pH-Anhebung mit Kalk	209
4.2 Reaktionskinetik	210
4.2.1 Pyritverwitterung	210
4.2.2 Quarz-Feldspat-Lösung	212
4.2.3 Abbau organischer Substanz im Grundwasserleiter unter Reduktion redoxsensitiver Elemente (Fe, As, U, Cu, Mn, S)	214
4.2.4 Tritium-Abbau in der ungesättigten Zone	217
4.3 Reaktiver Stofftransport	218
4.3.1 Lysimeter	218
4.3.2 Quellaustritt Karstquelle	219
4.3.3 Verkarstung (Korrosion einer Kluft)	220
4.3.4 pH-Anhebung eines sauren Grubenwassers	221
4.3.5 In-situ leaching	223
4.3.6 3D Stofftransport – Uran und Arsen Kontaminationsfahne	225
 Literatur	 227
 Index.....	 233