

Nagra

Nationale
Genossenschaft
für die Lagerung
radioaktiver Abfälle

Cédra

Société coopérative
nationale
pour l'entreposage
de déchets radioactifs

Cisra

Società cooperativa
nazionale
per l'immagazzinamento
di scorie radioattive

TECHNISCHER BERICHT 88-07

HYDROCHEMISCHE SYNTHESE NORDSCHWEIZ:

TERTIÄR- UND MALM-AQUIFERE

H. SCHMASSMANN¹⁾

MAI 1990

Mit Beiträgen von M. Kullin¹⁾ und P. Wexsteen²⁾

¹⁾Geologisches Institut Dr. Schmassmann AG, Liestal

²⁾Geologisches Institut der Universität Bern

Der vorliegende Bericht wurde im Auftrag der Nagra erstellt. Die Autoren haben ihre eigenen Ansichten und Schlussfolgerungen dargestellt. Diese müssen nicht unbedingt mit denjenigen der Nagra übereinstimmen.

"Copyright (c) 1990 by NAGRA, Baden (Schweiz). / Alle Rechte vorbehalten.

Das Werk einschliesslich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung ausserhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung der Nagra unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Uebersetzungen, Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen und Programmen, für Mikroverfilmungen, Vervielfältigungen usw."

ZUSAMMENFASSUNG

Mit dieser Tertiär-Malm-Synthese wurde der erste Teil einer hydrochemischen Synthese der Tiefengrundwässer der Nordschweiz und angrenzender Gebiete fertiggestellt. Auswertungen über die Aquifer-Gruppen im Liegenden (Dogger, Lias, Keuper; Muschelkalk; Buntsandstein-Perm-Kristallin) sind noch in Bearbeitung. Das dieser Untersuchung zugrunde liegende Datenmaterial stammt aus NAGRA-Tiefbohrungen, aus dem NAGRA-Regionalprogramm sowie aus fremden Analysen (Bohrungen für andere Zwecke, Literatur).

Der erste Teil des Berichtes NTB 88-07 gibt einen hydrogeologischen Ueberblick mit einer kurzen Beschreibung der Aquifergesteine. Zusätzlich werden die bis anhin bekannten Potentialdaten dieser Aquifergruppe zusammengestellt und die Potentialverteilung in der Nordschweiz, im Bodenseegebiet und in der westlichen Schwäbischen Alb diskutiert.

Die hydrochemischen Analysen und die Isotopen-Untersuchungen ermöglichten das Ausscheiden von drei Hauptwassertypen, nämlich den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-, den Natrium-Hydrogenkarbonat- und den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern, die in den Tertiär- und Malm-Aquifern des Molassebeckens übereinanderliegen und generell ein mit der Tiefe zunehmendes Alter aufweisen. Die hydro- und isotopengeochemischen Eigenschaften der drei Wassertypen werden im Detail präsentiert und diskutiert.

Einzig bei den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Wässern kommen Wässer mit beträchtlichen Tritium-Aktivitäten vor, die auf eine junge unterirdische Verweilzeit von weniger als 35 Jahren schliessen lassen. Diese als "Oberflächennahe Grundwässer" bezeichneten Wässer kommen bis in Tiefen vor, die lokal nur etwa 25 m, an anderen Orten höchstens wenig mehr als 100 m betragen. Während die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer unter Bedingungen infiltrierten, die mit dem heutigen Klima vergleichbar sind, lassen Isotopen- und Edelgas-Daten bei den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern auf eine kaltzeitliche, pleistozäne Infiltration schliessen. Bei den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern handelt es sich um mit infiltrierten Wässern verdünnte Formationswässer marinen oder brackischen Ursprungs.

Der letzte Teil dieses Berichtes behandelt die räumliche Verteilung der Wassertypen und diskutiert verschiedene Modelle von säkularen Fliessystemen in der Tertiär- und Malm-Aquifergruppe.

SUMMARY

This Tertiary-Malm synthesis represents the first part of an overall hydrochemical synthesis of deep groundwaters in Northern Switzerland and adjacent areas. The interpretation of data from the underlying aquifer groups (Dogger, Lias, Keuper; Muschelkalk; Buntsandstein-Permian-Crystalline) is still in progress. This investigation is mainly based on data from Nagra deep boreholes, from Nagra regional programme as well as from external sources ("Fremde Analysen"; boreholes for other purposes, literature).

The first part of this report NTB 88-07 provides a hydrogeological overview including a short description of the aquifer rocks. Additionally, a compilation of all existing hydraulic potential data is given and the distribution of hydraulic potentials is discussed for the regions of Northern Switzerland, the Bodensee area and the western Swabian Alb.

In the Molasse Basin, hydrochemical and isotope analyses allowed a distinction of three main water types which are positioned one upon another: calcium-magnesium-bicarbonate groundwaters, sodium-bicarbonate and sodium-chloride deep groundwaters. Older waters are generally situated at greater depth. Hydrochemical and isotopegeochemical details of these three water types comprise the major part of this report.

Unlike the other two water types, the calcium-magnesium-bicarbonate groundwaters also include shallow waters with considerable tritium activities, indicating a mean residence time of less than 35 years. These shallow groundwaters were locally found only to depth of about 25 m, but at other localities they can also slightly exceed a depth of about 100 m. The calcium-magnesium-bicarbonate groundwaters infiltrated during similar climatic conditions as today. In contrast, most of the sodium-bicarbonate groundwaters represent recharge during an earlier, colder climatic period, as during glaciation. The sodium-chloride groundwaters are probably of marine or brackish origin, now diluted with infiltrated waters.

Finally, the spacial distribution of these three water types are demonstrated and different secular flow models in the Tertiary-Malm aquifer group are discussed.

RESUME

Avec cette synthèse des aquifères du Tertiaire et du Malm, on a terminé la première partie d'une synthèse hydrochimique des eaux souterraines profondes dans le nord de la Suisse et dans les régions voisines. L'interprétation des données des groupes d'aquifères au mur (Dogger, Lias, Keuper; Muschelkalk; Buntsandstein-Permien-Crystalline) est en cours. Les données de base pour cette étude proviennent des forages profonds et du programme régional de la CEDRA, ainsi que des sources externes ("Fremde Analysen"; forages à autres intentions, littérature).

La première partie de ce rapport NTB 88-07 fournit une vue d'ensemble avec une brève description des roches d'aquifères. En plus, les données des potentiels hydrauliques de ce groupe d'aquifères sont compilées et la distribution des potentiels hydrauliques est discutée pour le nord de la Suisse, la région du lac de Constance et l'Alb de Souabe occidentale.

Les analyses hydrochimiques et isotopiques ont permis de distinguer trois types d'eaux principaux, c'est à dire un type hydrocarbonaté calcique et magnésien, un type hydrocarbonaté sodique et un type chloruré sodique. Dans le bassin molassique, ces trois types d'eaux sont disposés l'un sur l'autre; en général, l'âge de ces eaux augmente avec leur profondeur. Les propriétés hydrochimiques et isotopiques de ces différents types d'eaux sont présentés et discutés en détail.

Uniquement les eaux du type hydrocarbonaté calcique et magnésien incluent des eaux contenant des activités considérables de tritium indiquant un temps de résidence moyen inférieur à 35 ans. Ces eaux, appelées eaux peu profondes ou superficielles, se trouvent localement jusqu'à une profondeur de 25 m, mais elles peuvent par endroits dépasser de peu une profondeur de 100 m. Alors que les eaux souterraines profondes du type hydrocarbonaté calcique et magnésien ont été infiltrées à des conditions similaires au climat actuel, les analyses des isotopes stables ainsi que des gaz nobles de la plupart des eaux hydrocarbonatées sodiques, révèlent une infiltration lors d'un climat d'une glaciation. Les eaux souterraines profondes du type chloruré sodique sont considérées comme étant des eaux de sédimentation d'une provenance marine ou saumâtre, diluées avec des eaux infiltrées.

La dernière partie du rapport met en évidence la distribution dans l'espace des différents types d'eaux et discute plusieurs modèles de systèmes de circulation séculiers dans ce groupe d'aquifères du Tertiaire et du Malm.

HYDROCHEMISCHE SYNTHESE NORDSCHWEIZ

TERTIÄR-MALM-AQUIFERE

INHALTSVERZEICHNISSeite

ZUSAMMENFASSUNG	I
SUMMARY	II
RESUME	III
INHALTSVERZEICHNIS	IV
FIGURENVERZEICHNIS	X
TABELLENVERZEICHNIS UND FIGURENANHANG	XV
1. <u>EINLEITUNG</u>	1
1.1 Mitarbeiter	1
1.2 Allgemeines	1
1.3 Zielsetzung	1
1.4 Voraussetzungen	2
1.5 Publizierte Daten	3
2. <u>REGIONALER HYDROGEOLOGISCHER RAHMEN</u>	4
2.1 Stratigraphischer Bereich	4
2.2 Grenzen des Untersuchungsgebietes	4
2.2.1 Molassebecken (mit angrenzenden Gebieten)	4
2.2.2 Vorkommen von nicht mit dem Molassebecken zusammenhängenden Tertiär-Malm-Aquiferen	6
2.3 Geologie der hydrogeologisch relevanten Formationen	8
2.3.1 Molasse (Uebersicht)	8

2.3.2	Obere Süsswassermolasse	10
2.3.3	Obere Meeresmolasse	13
2.3.4	Untere Süsswassermolasse	14
2.3.5	Bohnerzformation	15
2.3.6	Unterlage des Tertiärs	16
2.3.7	Malm-Karst (allgemein)	16
2.3.8	Malm des Bodenseegebietes	19
2.3.9	Malm westlich des Bodenseegebietes	21
2.4	Porosität (Hohlraumvolumen) und Durchlässigkeit	24
2.4.1	Obere Süsswassermolasse	24
2.4.2	Obere Meeresmolasse	25
2.4.3	Untere Süsswassermolasse	26
2.4.4	Gesamte Molasse (Zusammenfassung)	28
2.4.5	Malmkalke	29
2.5	Hydraulische Potentiale und Fliesssysteme	34
2.5.1	Potentialverteilung in der westlichen Schwäbischen Alb und im Bodenseegebiet	34
2.5.2	Potentialverteilung längs des Hochrheins	36
2.5.3	Potentiale im Molassebecken südwestlich vom Bodensee und Hochrhein	39
3.	<u>HYDROCHEMISCHE DATEN</u>	41
3.1	Herkunft der Wasseranalysen	41
3.1.1	Hydrochemisches Regionalprogramm der Nagra	41
3.1.2	Tiefbohrprogramm der Nagra	43
3.1.3	Erdölbohrungen	43
3.1.4	Süddeutsches Molassebecken	44
3.1.5	Fremde Analysen	44
3.1.6	Qualität der Analysen	45

3.2	Stratigraphische und räumliche Verteilung der Wasserproben	46
3.2.1	Molassebecken (mit angrenzenden Gebieten)	46
3.2.2	Probenentnahmestellen ausserhalb des Molassebeckens	46
4.	<u>RÄUMLICHE VERTEILUNG VON AUSGEWÄHLTEN WASSER- INHALTSSTOFFEN UND -EIGENSCHAFTEN UND DEREN GEGENSEITIGE BEZIEHUNGEN</u>	47
4.1	Dissoziierte Hauptbestandteile (Typisierende Bestandteile)	48
4.1.1	Wassertypen	48
4.1.2	Faktorenanalyse	51
4.1.3	Natrium und Chlorid	56
4.1.4	Summe von Calcium und Magnesium und deren Verhältnis zum Chlorid	63
4.1.5	Magnesium-Calcium-Verhältnis	66
4.1.6	Sulfat	69
4.1.7	Hydrogenkarbonat und Karbonat	72
4.2	Physikalisch-chemische Parameter	76
4.2.1	pH-Wert	76
4.2.2	Redox-Spannung	79
4.3	Dissoziierte Nebenbestandteile: Kationen	81
4.3.1	Lithium	81
4.3.2	Kalium	84
4.3.3	Rubidium und Cäsium	88
4.3.4	Ammonium	89
4.3.5	Strontium	90
4.3.6	Barium	97
4.3.7	Mangan	99
4.3.8	Eisen	101

4.3.9	Nickel, Kupfer, Zink und Blei	105
4.3.10	Nicht oder nur ausnahmsweise nachgewiesene Spurenelemente	109
4.4	Dissoziierte Nebenbestandteile: Anionen	110
4.4.1	Fluorid	110
4.4.2	Bromid und Iodid	113
4.4.3	Selen	118
4.4.4	Nitrite und Nitrate	119
4.4.5	Phosphor	121
4.4.6	Arsen	122
4.4.7	Aluminium	123
4.5	Undissoziierte Nebenbestandteile	125
4.5.1	Kieselsäure	125
4.5.2	Borsäure	130
4.5.3	Gelöster organischer Kohlenstoff (DOC)	133
4.6	Gase	134
4.6.1	Sauerstoff	134
4.6.2	Stickstoff	135
4.6.3	Kohlendioxid	137
4.6.4	Wasserstoff	138
4.6.5	Helium	138
4.6.6	Argon	141
4.6.7	Neon, Argon, Krypton und Xenon	145
4.6.8	Schwefelwasserstoff und Sulfide	147
4.6.9	Methan und Ethan	148
4.7	Modellierung des Karbonatssystems und Sättigungsindizes	149
4.7.1	Einleitung und Methodik	149
4.7.2	Rechenmodell	151

4.7.3	Resultate	152
4.8	Uran und Radioaktivität	157
4.8.1	Uran	157
4.8.2	$^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnis	160
4.8.3	Alpha-Aktivität des Urans und des Thoriums	164
4.8.4	Radon-222-Aktivität	167
4.8.5	Radium-226	168
4.8.6	Beta-Aktivität	169
4.9	Isotope	169
4.9.1	Tritium	169
4.9.2	Sauerstoff-18 und Deuterium	171
4.9.3	Kohlenstoff-13	175
4.9.4	Kohlenstoff-14	177
4.9.5	Krypton-85, Argon-39 und Chlor-36	180
4.9.6	Schwefel-34 und Sauerstoff-18 in Sulfaten	181
5.	<u>ZUSAMMENFASSUNG DER AUSWERTUNG DER HYDRO- CHEMISCHEN UND ISOTOPENHYDROLOGISCHEN DATEN</u>	183
5.1	Zusammenfassung nach einzelnen Wasserinhalts- stoffen und -eigenschaften	183
5.2	Zusammenfassung nach Wassertypen gegliedert	199
5.3	Zusammenfassung der Unterschiede zwischen Tertiär- und Malm-Wässern	203
6.	<u>HYDROGEOLOGISCHE INTERPRETATION DER HYDRO- CHEMIE DES MOLASSEBECKENS</u>	205
6.1	Vertikale Abfolge der Wassertypen	205
6.1.1	Bereiche der Erdalkali-Hydrogenkarbonat- Grundwässer	205
6.1.2	Bereiche der Natrium-Hydrogenkarbonat- Tiefengrundwässer	207

6.1.3	Lage der Grenze zwischen Hydrogenkarbonat- Wässern und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern .	208
6.1.4	Untere Begrenzung der Natrium-Chlorid-Tiefen- grundwässer im süddeutschen Molassebecken	214
6.1.5	Nördliche Grenze des Verbreitungsgebietes der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer im Bodenseeraum	214
6.1.6	Bereich der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer bis zur Untergrenze der Tertiär-Malm-Aquifer- gruppe des nordschweizerischen Molassebeckens ..	216
6.2	Modelle der säkularen Fliessysteme in den Tertiär- und Malm-Aquiferen	217
6.2.1	Modelle von K. LEMCKE	217
6.2.2	Modelle von P. UDLUFT	219
6.2.3	Regionales Strömungsmodell	221
6.2.4	Ursprung der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer .	223
LITERATURVERZEICHNIS		228
ANHANG		244

FIGURENVERZEICHNIS

Fig. 1: Verbreitung der Malm- und Tertiär-Aquifere in der Nordschweiz	5
Fig. 2: Profil Nordschweiz-Helvetikum 1:500'000 (aus MÜLLER et al. 1984, Beil. 5 verkürzt und modifiziert)	7
Fig. 3: Verbreitung der Tertiärgruppen an der Quartärbasis oder an der Oberfläche	9
Fig. 4: Stratigraphische Uebersicht der mittel- ländischen Molasse in der Nordschweiz und in angrenzenden Gebieten Süddeutschlands	11
Fig. 5: Geologisches Profil durch den Gubrist als Beispiel eines Profils durch die Obere Süss- wassermolasse (aus NAGRA 1988, Beil. 7.16)	12
Fig. 6: Karstzonen (APEL & VILLINGER 1979, S.224)	17
Fig. 7: Uebersicht der Malm-Stratigraphie im Untergrund des nordschweizerischen Molassebeckens (nicht massstäblich)	19
Fig. 8: Geologisches Profil Donau-Aachquelle-Beuren mit vermutlichen Wegen des Karstwassers (SCHREINER 1978, Beilage 3)	35
Fig. 9: Gemessene Potentialverteilung im Malm (modifiziert nach BERTLEFF et al. 1988, Abb. 9)	37
Fig. 10: Lage der Probenentnahmestellen mit Legende (Oberflächennahe, Misch- und Tiefengrundwässer)	42
Fig. 11: Schlüssel zur Gruppeneinteilung für chemi- sche Wassertypen nach Hauptbestandteilen (aus SCHMASSMANN et al., 1984, 80)	50

Fig. 12: Projektionen der Variablen und Proben auf verschiedene Faktorenebenen	54
Fig. 13: Beziehung zwischen Natrium- und Chlorid- Konzentration	57
Fig. 14: Beziehung zwischen der Summe von Calcium- und Magnesium-Konzentration und Chlorid- Konzentration	64
Fig. 15: Beziehung zwischen Magnesium- und Calcium-Konzentration	67
Fig. 16: Beziehung zwischen Sulfat- und Chlorid- Konzentration	70
Fig. 17: Beziehung zwischen pH-Wert und Calcium- Konzentration	77
Fig. 18: Beziehung zwischen Lithium- und Chlorid- Konzentration	81
Fig. 19: Beziehung zwischen Kalium- und Natrium- Konzentration	85
Fig. 20: Beziehung zwischen Kalium- und Chlorid- Konzentration	87
Fig. 21: Beziehung zwischen Strontium- und Calcium- Konzentration	92
Fig. 22: Beziehung zwischen Strontium- und Chlorid- Konzentration	93
Fig. 23: Beziehung zwischen Strontium- und Fluorid- Konzentration	96
Fig. 24: Beziehung zwischen Barium- und Sulfat- Konzentration	97
Fig. 25: Beziehung zwischen Mangan-Konzentration und pH-Wert	100

Fig. 26: Beziehung zwischen Eisen-Total-Konzentration und pH-Wert (in Klammern: Messwerte der Redox-Spannungen; Linien gleicher Redox-Spannungen nach Daten von HEM 1985, 81: Fig. 15, für die von ihm angegebenen Bedingungen)	102
Fig. 27: Beziehung zwischen Fluorid- und Chlorid-Konzentration	111
Fig. 28: Beziehung zwischen Bromid- und Chlorid-Konzentration	114
Fig. 29: Beziehung zwischen Iodid- und Chlorid-Konzentration	115
Fig. 30: Beziehung zwischen Iodid-Konzentration und dem molaren N ₂ /Ar-Verhältnis	117
Fig. 31: Beziehung zwischen Kieselsäure-Konzentration (ungefiltert) und Temperatur	127
Fig. 32: Beziehung zwischen Bor- und Chlorid-Konzentration	132
Fig. 33: Beziehung zwischen Argon- und Stickstoff-Konzentration	136
Fig. 34: Beziehung zwischen Helium- und Chlorid-Konzentration	139
Fig. 35: Beziehung zwischen Helium- und Stickstoff-Konzentration	140
Fig. 36: Beziehung zwischen $\delta^2\text{H}$ - und Argon-Konzentration sowie jeweilige Temperaturbeziehungen	144
Fig. 37: Beziehung zwischen gemessenem und berechnetem pH-Wert bei Calcitsättigung	152
Fig. 38: Sättigungsindizes von Calcit und Dolomit	153
Fig. 39: Sättigungsindizes von Quarz und Chalcedon	154

Fig. 40: Sättigungsindizes von Chalcedon	155
Fig. 41: Sättigungsindizes von Baryt	156
Fig. 42: Beziehung zwischen Uran-Konzentration und Redox-Spannung	158
Fig. 43: Beziehung zwischen $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitäts- verhältnis und Uran-Konzentration	161
Fig. 44: Beziehung zwischen α -Aktivität von Thorium und α -Aktivität von Uran	165
Fig. 45: Beziehung zwischen α -Aktivität von Uran und $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnis	166
Fig. 46: Beziehung zwischen $\delta^2\text{H}$ und $\delta^{18}\text{O}$	171
Fig. 47: Beziehung zwischen $\delta^{13}\text{C}$ und $\delta^{14}\text{C}$	176
Fig. 48: Beziehungen zwischen $\delta^{14}\text{C}$ und $\delta^{18}\text{O}$ resp. $\delta^2\text{H}$..	178
Fig. 49: Beziehungen zwischen $\delta^{34}\text{S}$ und $\delta^{18}\text{O}$ resp. Sulfat. Bereiche der Evaporitmineralien nach BALDERER et al. (in. Vorb., Tab. 7.7.1, Fig. 7.1.2 und 7.1.3)	182
Fig. 50: Verbreitung der Wassertypen im schweize- rischen Molassebecken (Kantone Zürich und Aargau)	206
Fig. 51: Approximative Lage der Obergrenze der Natrium- Chlorid-Tiefengrundwässer im nordschweizeri- schen und angrenzenden süddeutschen Molasse- becken (Koten m ü.M.)	209
Fig. 52: Salinitätsprofile von Erdölbohrungen	210
Fig. 53: Verbreitung der Wassertypen im schwei- zerischen Molassebecken erklärt mit dem LEMCKE-MODELL (schematisch). Absinken eines OMM-Formationswassers	218

- Fig. 54: Verbreitung der Wassertypen im schweizerischen Molassebecken erklärt mit dem UDLUFT-MODELL (schematisch). Absinken des bis im Oberpliozän entstandenen Molasse-Mischwassers . 219
- Fig. 55: Verbreitung der Wassertypen im schweizerischen Molassebecken erklärt mit regionalem Strömungsmodell (z.B. EGGER 1981, schematisch), interpretiert. Ergebnis: Regionales Grundwasser-Fliessystem mit Ueberschichtung von
- Holozänen Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Wässern
 - Pleistozänen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern
 - Molasse-Formationsmischwässern (Oberpliozäner Mischzustand) 221
- Fig. 56: Beziehung zwischen $\delta^2\text{H}$ und Chlorid-Konzentration. Mischungsgeraden (Kurven im einfachlogarithmischen Diagramm) von Meerwasser und meteorischen Wässern mit variablen $\delta^2\text{H}$ -Werten 225

TABELLENVERZEICHNIS UND FIGURENANHANG

Tab 1:	Dissoziierte Hauptbestandteile
Tab 2:	Physikalisch-chemische Parameter und Ionensummen
Tab 3:	Dissoziierte Nebenbestandteile (Kationen)
Tab 4:	Dissoziierte (Anionen) und undissoziierte Nebenbestandteile
Tab 5:	Gelöste Gase
Tab 6:	Uran und Radioaktivität
Tab 7:	Isotope
Tab 8:	Erdölbohrungen - Dissoziierte Hauptbestandteile
Tab 9:	Erdölbohrungen - Physikalisch-chemische Parameter und Ionensummen
Tab 10:	Erdölbohrungen - Dissoziierte und undissoziierte Nebenbestandteile
Tab 11:	Faktorenanalyse
Tab 12:	NAGRA-Programm - Modellierung des Karbonatsystems
Tab 13:	NAGRA-Programm - Sättigungsindizes
Tab 14:	Erdölbohrungen USM - Modellierung des Karbonatsystems
Tab 15:	Erdölbohrungen USM - Sättigungsindizes
Schoellerdiagramme: Nagra-Programm und Erdölbohrungen	

1. EINLEITUNG

1.1 Mitarbeiter

Im Geologischen Institut Dr. Schmassmann AG war Dr. Marcel Kullin wesentlich an der Bearbeitung und Redaktion des vorliegenden Berichtes beteiligt. Die Reinzeichnung der Figuren besorgten Hans Erny und Roland Steinle, die Textverarbeitung Beatrice Wildi und Ursula Stücheli.

Dr. Pierre Wexsteen (Geologisches Institut der Universität Bern) und Dr. Marcel Kullin trugen mit den Kapiteln "Faktorenanalyse" und "Modellierung des Karbonatsystems und Sättigungsindizes" zur Vervollständigung des Berichtes bei.

Für die Durchsicht einzelner Kapitel des Berichtes und wichtigen Ergänzungs- und Aenderungsvorschlägen ist der Autor Dr. W. Balderer (ETH Zürich), Dr. A. Gautschi (Nagra), Dr. P. Hufschmied (Nagra), W. Klemenz (Colenco), Dr. B. Lehmann (Physikalisches Institut der Universität Bern), Prof. Dr. H.H. Loosli (Physikalisches Institut der Universität Bern), Prof. Dr. A. Matter (Geologisches Institut der Universität Bern), Dr. F.J. Pearson, Jr. (Houston), Prof. Dr. Tj. Peters (Mineralogisch-Petrographisches Institut der Universität Bern) und Dr. A. Scholtis (Nagra) zu Dank verpflichtet.

1.2 Allgemeines

Diese Studie ist der erste, in sich abgeschlossene Teil einer umfassenden hydrochemischen Synthese der Nordschweiz. Im ersten Teil wurden die verschiedenen Aquifer-Gruppen des Tertiärs und des Malms sowie deren Beziehungen zueinander untersucht. Die Berichte über die älteren Aquifer-Gruppen sind in Vorbereitung und erfolgen in separaten Ausgaben.

1.3 Zielsetzung

Das Ziel dieser Studie ist, mit Hilfe von hydrochemischen und Isotopen-Untersuchungen Beweise oder Hinweise für die Genese der verschiedenen Grundwässer zu finden, sowie hydraulische Verbindungen zwischen verschiedenen Aquiferen oder das Fehlen solcher aufzuzeigen. Daraus können dann

räumliche und zeitliche Daten der Grundwasserzirkulation abgeschätzt werden, die man zur Validierung von hydrodynamischen Modellen benutzt. Solche hydrodynamische Modelle dienen als Grundlage für die Sicherheitsanalyse für die Lagerung radioaktiver Abfälle.

1.4 Voraussetzungen

Bereits als die Nagra im Jahre 1980 in der Nordschweiz die Planung der Untersuchungsprogramme in Angriff nahm, mass sie dem Verständnis der Tiefengrundwässer eine vorrangige Bedeutung bei. So wurde im Rahmen des hydrologischen Untersuchungsprogramms ab 1981 in der Nordschweiz und in angrenzenden deutschen und französischen Gebieten ein umfangreiches regionales hydrochemisches Programm durchgeführt.

Von den insgesamt 140 Probenentnahmestellen bilden deren 38 die Grundlage für die vorliegende Arbeit der Tertiär- und Malm-Aquifere inklusive zweier Proben aus Dogger-Aquiferen (siehe Tabellen im Anhang). Dabei liegen 15 Tiefengrundwässer ($^3\text{H} < 20$) und 8 oberflächennahe Grundwässer ($^3\text{H} > 20$) mit vollständigen Analysen aus dem Regionalprogramm der Nagra vor. Zwei weitere Probenentnahmestellen mit vollständigen Datensätzen stammen aus dem Tiefbohrprogramm der Nagra. Zusätzlich standen noch 13 fremde Analysen mit umfangreichen Datensätzen zur Verfügung, die zumeist aus dem an die Nordschweiz angrenzenden süddeutschen Molassebecken stammen. Weitere fremde Analysen, unter anderem Analysen von 8 Erdölbohrungen aus dem schweizerischen Molassebecken, wurden zur Ergänzung und zum Vergleich herangezogen (vgl. Kapitel 3.1).

Der vollständigste Analysentyp der Nagra-Programme umfasste im wesentlichen:

- Physikalische und physikalisch-chemische Parameter: Temperatur, Dichte, elektrische Leitfähigkeit, pH-Wert, Redox-Spannung, Radioaktivität (^{222}Rn , Alpha-Aktivität von U und Th, Verhältnis $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$, Beta-Aktivität)
- Summenparameter: Trockenrückstände, Glührückstand, Gesamteisen, DOC, Alkalinität
- Gelöste mineralische Bestandteile: 10-15 Kationen, 12-13 Anionen, Kieselsäure, Bor und Uran

- Gelöste Gase mit üblichen chemischen Bestimmungsmethoden: O_2 , CO_2 , H_2S (mit HS^- und S^{2-})
- Gelöste Gase mit Massenspektrometrie: O_2 , N_2 , CO_2 , H_2 , He, Ar, H_2S , CH_4 , C_2H_6 , ferner Summe der CO_2 -Spezies
- Isotope: ^3H , ^2H , ^{18}O
- Bakteriologische Untersuchungen

An ausgewählten Proben wurden sodann häufig untersucht:

- Isotope: ^{13}C , ^{14}C , ^{39}Ar , ^{85}Kr
- Isotopenverhältnisse von U, Th, Ra, Ar, He
- Edelgase, Edelgas-Verhältnisse und N_2/Ar -Verhältnis
- Isotope von Sulfaten: ^{18}O , ^{34}S

1.5 Publizierte Daten

Ausgewählte Daten und erste Auswertungsergebnisse sind in folgenden Publikationen der Nagra enthalten: SCHMASSMANN et al., 1984; NAGRA 1985a, Kap. 8; PEARSON 1985; BALDERER 1985; WITTWER 1986; NAGRA 1985b, Kap. 3.3.5; SCHMASSMANN 1987; PEARSON et al. 1989, 39-40, 60-61; NAGRA 1989, Beilage 9.1.

Sämtliche Daten der im Auftrag der Nagra ausgeführten Analysen und der für die hydrochemische Synthese wichtigen fremden Untersuchungen sind in einer Datenbank gespeichert.

Untersuchungen an Gesteinen:

In allen Nagra-Tiefbohrungen der Nordschweiz wurden neben den sehr detaillierten routinemässigen geologisch-petrographischen Untersuchungen an Bohrkernen auch Isotopenanalysen durchgeführt, die Aussagen über die Evolution der Grundwässer und die Interaktion zwischen Gestein und Grundwasser erlauben. Es wurden folgende Isotope untersucht: ^{13}C und ^{18}O an Calcit, ^{34}S und ^{18}O an Sulfaten und Sulfiden, Sr-Isotope an Mineralien und Gesteinen, ^{36}Cl an Gesteinen (dies allerdings nicht an Tertiär- und Malmgesteinen) sowie einzelne Isotope der natürlichen Uran- und Thorium-Zerfallsreihen an Mineralien und Gesteinen. Die

geologisch-petrographischen Beschreibungen sind in den Geologie-Berichten der Bohrungen enthalten (PETERS et al., 1986, 1988, 1989; MATTER et al., 1987, 1988a, 1988b). Ein Synthesebericht über die Isotopenuntersuchungen an Grundwässern und Gesteinen ist in Vorbereitung (PEARSON et al., in Vorb.).

2. REGIONALER HYDROGEOLOGISCHER RAHMEN (Fig. 1)

2.1 Stratigraphischer Bereich

Die Untersuchungen der Tertiär- und Malm-Aquifere erstrecken sich im wesentlichen auf das Molassebecken, in welchem während des Tertiärs bis zu mehrere tausend Meter mächtige Sedimente abgelagert worden sind. In ihrem Verbreitungsgebiet bilden die Molassegesteine die Erdoberfläche oder die Unterlage quartärer Ablagerungen. Namentlich Moränen, fluvioglaziale Schotter und Seeablagerungen des Pleistozäns bedecken den Molassefels weiträumig.

Die Unterlage der tertiären Sedimente wird im Untersuchungsgebiet von den Schichten des Tithoniens (Portlandien), Kimmeridgiens und Oberen Oxfordiens gebildet, die vorwiegend aus Kalken bestehen. Aus den Ergebnissen der hydrochemischen Untersuchungen und Isotopenmessungen (Kapitel 4) geht hervor, dass der Aquifer dieser Malm-Kalke regional gesehen mit den tertiären Aquiferen in hydraulischer Verbindung steht. Deshalb werden die Tiefengrundwässer der Molasse- und Malm-Aquifere zusammen besprochen. Die Untergrenze dieser Aquifergruppe findet sich über der hauptsächlich aus Tonen und Mergeln bestehenden und deshalb eine Aquiclude bildenden Schichtenfolge des Mittleren und Unteren Oxfordiens.

2.2 Grenzen des Untersuchungsgebietes

2.2.1 Molassebecken (mit angrenzenden Gebieten)

Gegen Westen ist das Gebiet der hydrochemischen Synthese der Tiefengrundwässer des Molassebecken ungefähr durch die Emme begrenzt (Fig. 1). Die übrigen Grenzen der Synthese sind hydrogeologisch begründet.

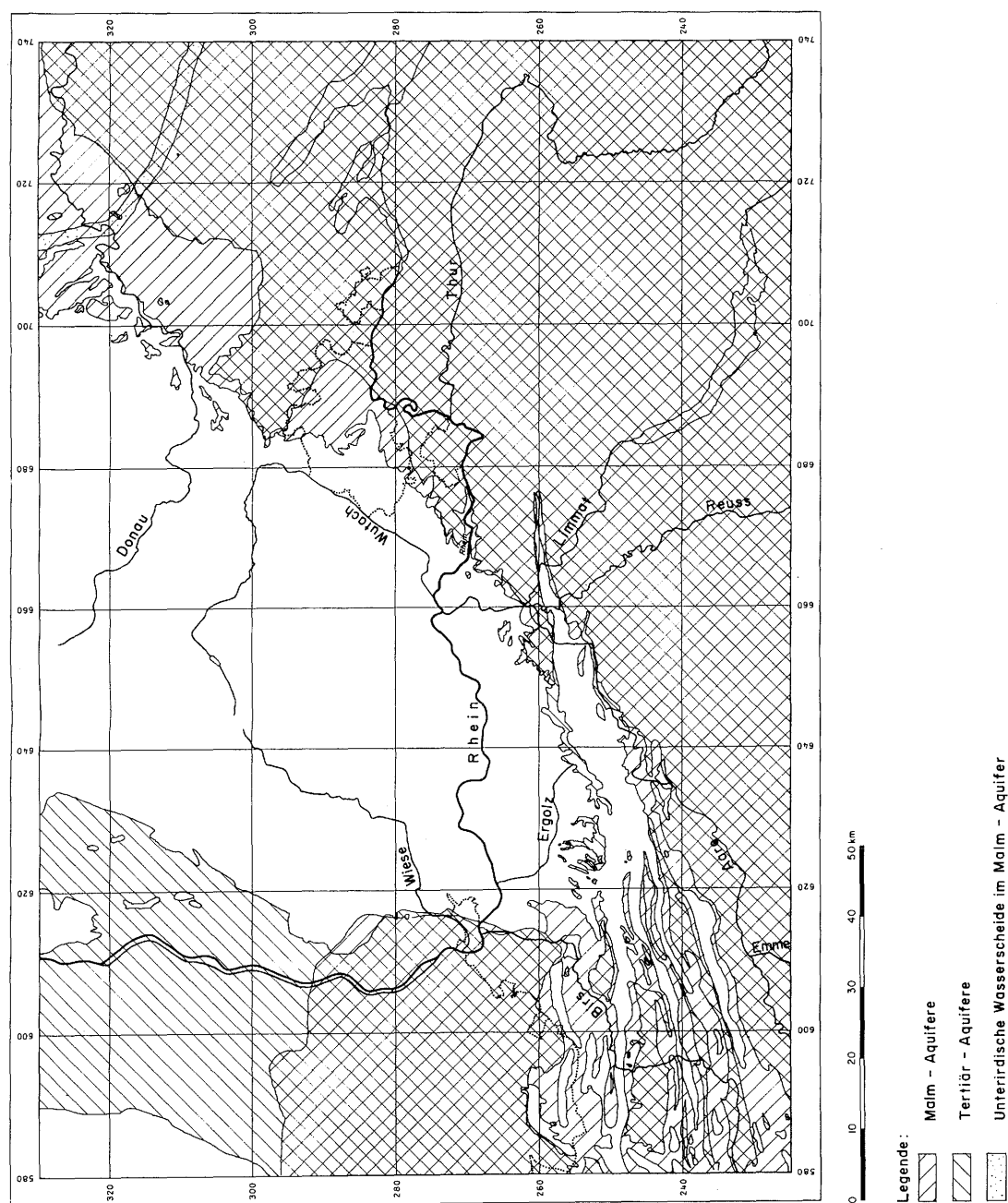


Fig. 1: Verbreitung der Malm- und Tertiär-Aquifere in der Nordschweiz

Im Nordwesten wird das zusammenhängende Verbreitungsgebiet der Tertiär- und Malm-Aquifere bis zur Lägeren durch die ausstreichende Untergrenze der vom Faltenjura zum Molassebecken einfallenden Malm-Kalke gebildet. Oestlich der Lägeren erstreckt es sich nach Nordwesten bis dorthin, wo die Malmkalk-Basis vom Molassebecken zum Klettgau, zum Randen und zur Schwäbischen Alb ansteigt. Zu ihm gehört auch noch die Molassebucht nördlich der Lägeren und die aus ihrem Untergrund ansteigenden Malmkalke des östlichen Aargauer Tafeljuras.

Die Nordgrenze verläuft nördlich des Bodensees vom Versickerungsgebiet der Donau unterhalb Tuttlingen bis zum Alpenrand ähnlich wie die oberirdische Europäische Wasserscheide. Dort findet sich nämlich in dem von den Molasse-sedimenten bedeckten Malm-Aquifer eine ausgeprägte Druckwasserscheide zwischen Rhein und Donau (LEMCKE 1979a, 240). Ihr Verlauf ist aus den Daten von Bohrungen gut bekannt (Fig. 1) und in mehreren Publikationen dargestellt worden (LEMCKE 1976, 11; VILLINGER 1977, Tafel 1; WERNER 1978, Abb. 10; LEMCKE 1979a, 242; LEMCKE 1979b, 313; ANDRES & FRISCH 1981, Beilage 1; VILLINGER 1982, Abb. 5; STRAYLE et al. 1982, 99; BERTLEFF 1984, 1986, 53; BERTLEFF et al. 1985, 119; KIMMEIER et al. 1985, annexe 3-3; BERTLEFF 1988, Abb. 9, Abb. 18; LEMCKE 1988, Abb. 58).

Die Südwestgrenze des in dieser Synthese betrachteten Gebietes verläuft längs des Alpenrandes. Dort sind die im Vorland gegen Süden einfallenden Schichten der Mittelländischen Molasse (Vorlandmolasse) zur Gefalteten Molasse aufgerichtet und am Südrand des Beckens als Aufgeschobene Molasse verschuppt, nach Norden verfrachtet und von den alpinen Decken überfahren (Fig. 2, vergleiche auch: SPICHER 1980b, Profile; SPICHER 1972, 1980c; TRÜMPY 1980, 297, MÜLLER et al. 1984, Beil. V). Ungewiss ist, ob hydraulische Verbindungen von den mit basalen Flysch-Komplexen überschobenen Helvetischen Randketten zur subalpinen Molasse oder, unter der Molasse, vom Sedimentmantel des Aarmassivs zum Malm-Aquifer im Untergrund des Molassebeckens bestehen.

2.2.2 Vorkommen von nicht mit dem Molassebecken zusammenhängenden Tertiär-Malm-Aquiferen

Ausserhalb des zusammenhängenden Verbreitungsgebietes im

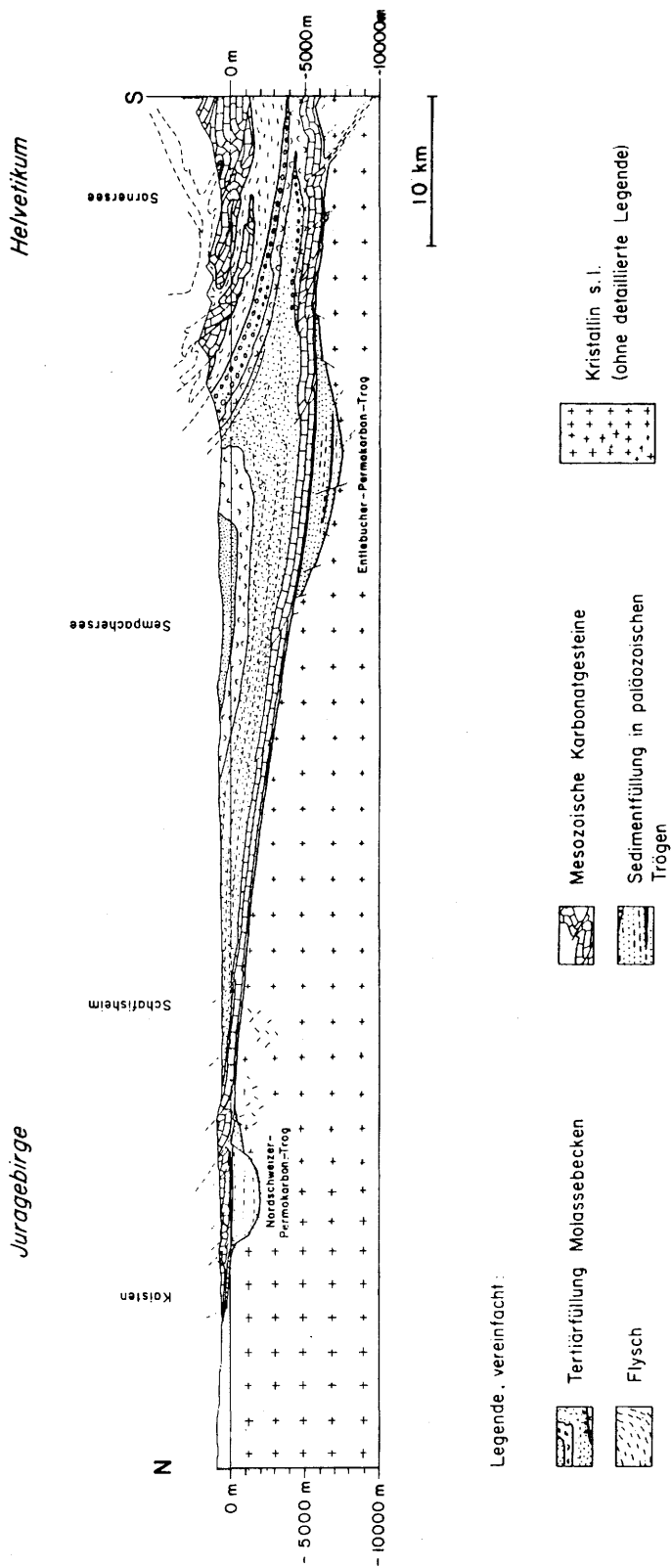


Fig. 2: Profil Nordschweiz-Helvetikum 1:500'000
(aus MÜLLER et al. 1984, Beil. 5 verkürzt
und modifiziert)

Molassebecken und der angrenzenden Vorkommen im Tafeljura gibt es noch isolierte Vorkommen von Tertiär- und Malm-aquiferen. Sie finden sich hauptsächlich im Faltenjura der Nordschweiz im Zusammenhang mit Synklinalstrukturen (Fig. 1). Dabei handelt es sich fast ausschliesslich um lokale Fliesssysteme, deren Wässer nach den Tritium-Messungen in den Malm-Aquiferen mittlere Verweilzeiten von weniger als 3 Dezenien, öfters weniger als 1-2 Jahre haben (SCHOTTERER 1980, SCHMASSMANN et al. 1984, 142-143: Malleray). Nur ausnahmsweise kommen längere Fliesszeiten vor, die nach unserer konventionellen Annahme einem "Tiefengrundwasser" zuzuordnen sind, wie zum Beispiel in dem von Tertiär bedeckten Malmkalk-Aquifer des Laufen-Beckens (SCHOTTERER 1981, 144: Bohrung SM 2 Wahlen). Im regionalen hydrochemischen Untersuchungsprogramm der Nagra sind nur zwei Grundwässer aus Malm-Aquiferen des Faltenjuras eingehender untersucht worden (SCHMASSMANN et al. 1984, 142: Malleray u. Durlinsdorf), die sich als Vergleich zu den Tiefengrundwässern des Molassebeckens beiziehen lassen. In der hydrochemischen Synthese der Nordschweiz wird aber auf die mit dem Molassebecken nicht zusammenhängenden Tertiär- und Malm-aquifere des Juras nicht näher eingegangen.

Zu einem besonderen hydrogeologischen System gehören schliesslich die Tertiär- und Malm-Aquifere des Oberrheingrabens. Die geologische Herkunft der wenigen im Regionalprogramm der Nagra berücksichtigten Grundwässer ist sehr unterschiedlich (SCHMASSMANN et al. 1984, 112). Deshalb können sie in der Synthese ebenfalls nur im Vergleich mit den Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere des Molassebeckens betrachtet werden.

2.3 Geologie der hydrogeologisch relevanten Formationen

2.3.1 Molasse (Uebersicht) (Fig. 3, 4)

Die Molasse des nördlichen Alpenvorlandes wird in vier lithostratigraphische Einheiten unterteilt (Chronostratigraphie nach TRÜMPY 1980, 25-28):

Obere Süsswassermolasse	OSM	(Mittel- und frühes Obermiozän)
Obere Meeresmolasse	OMM	(Spätes Untermiozän)

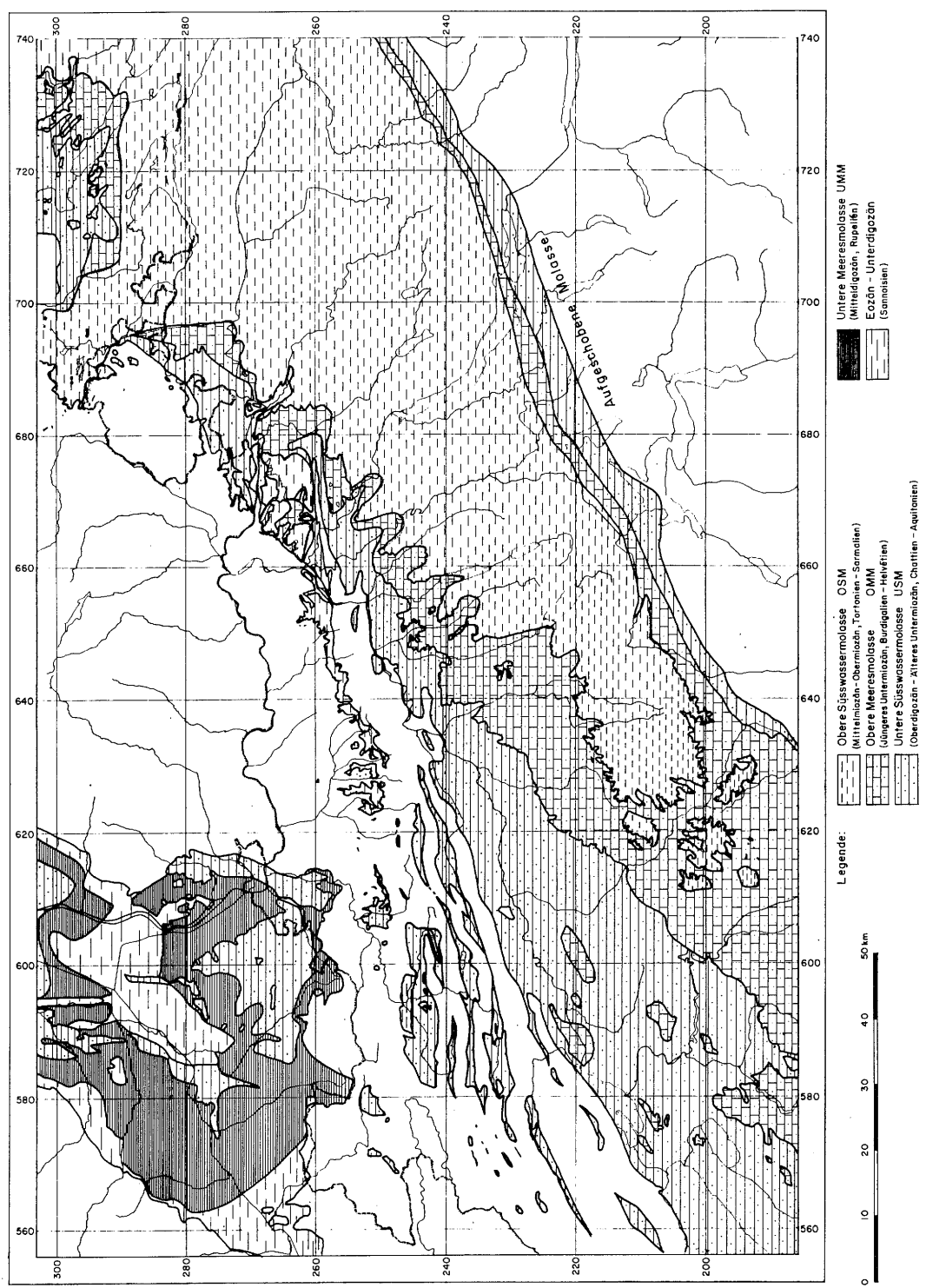


Fig. 3: Verbreitung der Tertiärgruppen an der Quartärbasis oder an der Oberfläche

Untere Süsswassermolasse	USM	(Oberoligozän und frühes Untermiozän)
Untere Meeresmolasse	UMM	(±Mitteloligozän)

Die kretazische bis eozäne Bohnerzformation bildet den Uebergang zum liegenden Malm. Die UMM ist im östlichen Teil des schweizerischen Molassebeckens nur in der Nähe des Alpenrandes, in der Mittelländischen Molasse nur aus dem südlichen Bodenseegebiet bekannt. Im Untersuchungsgebiet setzt deshalb die Molassesedimentation über der Bohnerzformation oder dem Malm vorwiegend erst mit der USM ein.

Im südlichen Oberrheingraben dagegen begann die Sedimentation über der untereozänen Bohnerzformation bereits im Mitteleozän, setzte sich mit den Stein- und Kalisalze enthaltenden brackisch-lagunären Formationen im Obereozän und Unteroligozän, dann im Mitteloligozän (UMM) fort und endete bereits im Oberoligozän (frühe USM).

Im Bereich der Mittelländischen Molasse östlich der Reuss bedeckt die OSM die tieferen Molasseeinheiten fast auf der ganzen Breite des Beckens. Erst westlich der Reuss wird das Verbreitungsgebiet der OSM schmaler, so dass zwischen diesem und dem Faltenjura die OMM und nördlich davon die USM grossräumig zutage treten (Fig. 3, vergleiche auch: SPICHER 1980a; PASQUIER 1978, 69: Fig. 1).

Entsprechend der generellen Strömungsrichtung infiltrierter Wässer werden die einzelnen Formationsgruppen im folgenden vom Hangenden zum Liegenden besprochen.

2.3.2 Obere Süsswassermolasse (Fig. 5)

Während der OSM bestanden im südlichen Beckenbereich drei grosse Schüttungszentren, deren Einfluss sich vom Alpenrand aus weit nach Norden ausdehnte, im Westen die Napfschüttung, im Osten die Hörnlichüttung und die Bodenseeschüttung (BÜCHI & SCHLANKE 1977, Abb. 8; TRÜMPY 1980, 28). Charakteristisch und hydrogeologisch bedeutsam für solche Schuttfächer sind Ablagerungsformen, wie sie BALDERER (1979, 1983a) aus dem Gebiet des Aubachs vom Hörnli-Schuttfächer beschrieben hat. In der Vertikalen handelt es sich um eine Wechsellagerung von grobkörnigen, durchlässi-

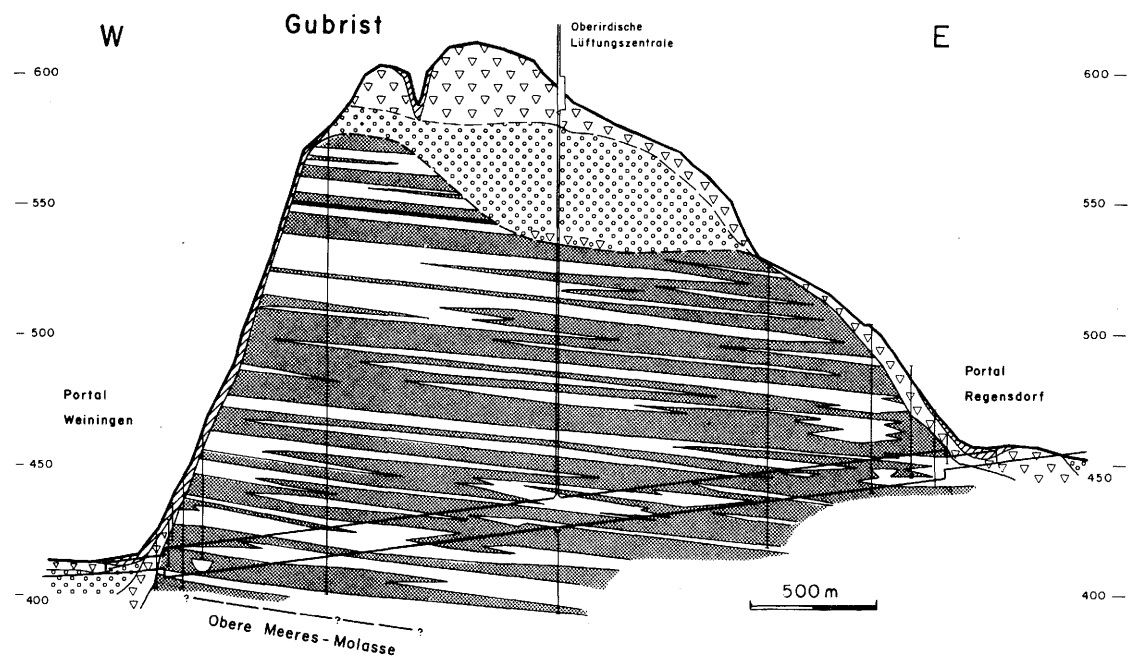
gen Schichten (Konglomerate und Sandsteine) mit feinkörnigen, schlecht durchlässigen Schichten (Mergel und Süßwasserkalke). Diese Schichten haben jedoch infolge lateraler Fazieswechsel eine beschränkte horizontale Ausdehnung. So werden Nagelfluhbänke seitlich durch Sandsteine und Mergel ersetzt, Süßwasserkalke gehen in Sandsteinbänke über. Dadurch kann Wasser, das in einer porösen, durchlässigen Schicht zirkuliert, lokal an den schlechter durchlässigen, liegenden Schichten gestaut werden und an der Oberfläche als Quelle austreten oder dort wo die stauende Schicht auskeilt, in eine tiefere durchlässige Schicht gelangen. Wegen der seitlichen Fazieswechsel stehen die durchlässigen Schichten trotz ihrer Wechsellagerung mit stauenden Horizonten miteinander in Verbindung, so dass von einem "einheitlichen, zusammenhängenden Grundwasserkomplex oder System" gesprochen werden darf (BALDERER 1979, 30), das BALDERER ein "Hydrogeologisches Gesamtsystem" nennt. Das Grundwasser zirkuliert vorwiegend im Porenraum der Sedimente, untergeordnet auch auf Klüften.

SCHUTTFÄCHER LÄNGS ALPENRAND	ZENTRALES SCHWEIZERI- SCHES MITTELLAND	NORDOST- SCHWEIZ	BODENSEE - HEGAU		FORMATIONS- GRUPPE	ALTER Ma (IUGS89)
			PHONOLIT-UND BASALT-LAVEN		POST- MOLASSISCH	11
NAPF-, HÖRNLI- UND	OBERE SÜSSWASSERMOLASSE (Ablagerungen der Schwemmebenen) siltige Mergel mit fluviatilen Sandstein - interkalationen, limnische Kalke, geringmächtige Kohlenflöze)		GLIMMER- SAND (Ablagerungen der Hauptent- wässerungs - rinne)	HEGAU- VULKANITE	JURA - NAGELFLUH (Hegauschutt- fächer)	OSM
BODENSEE - SCHUTT - FÄCHER	KIRCHBERGER SCHICHTEN GRAUPENSAND		ALBSTEIN HELICIDENMERGEL		OMM	16
(SCHUTTFÄCHER MIT NAGELFLUHEN IN AUFGESCHO- BENER UND GEFALTETER MOLASSE)	OBERAQUITANE MERGELZONE		UNTERE SÜSSWASSERMOLASSE = GRANITISCHE MOLASSE = BUNTE MOLASSE		USM	19
	UNTERE SÜSSWASSER- MOLASSE = BUNTE MOLASSE	OBERE BUNTE MOLASSE KALKSANDSTEIN-SERIE UNTERE BUNTE MOLASSE AARWÄNGER MOLASSE (BLÄTTERMOLASSE) WINAUER SÜSSWASSERKALK				23
						27

Fig. 4: Stratigraphische Uebersicht der mittelländischen Molasse in der Nordschweiz und in angrenzenden Gebieten Süddeutschlands

In den ehemaligen Schwemmebenen vor und zwischen den Schuttfächern der OSM entstanden Schichtenfolgen, die vorwiegend aus siltigen Mergeln mit fluviatilen Sandsteininterkalationen (Rinnenkomplexe) aufgebaut sind (z.B. Fig. 5,

ferner die Bohrungen Kreuzlingen und Lindau in BÜCHI et al. 1965a, Tafel 1). Limnische Kalke und geringmächtige Kohlenflöze (z.B. bei Mineralquelle Schwarzenberg) sind hier ebenfalls verbreitet. Die Sandsteine sind als Aquifere bedeutsam.



Bearbeitung: Geologisches Büro Dr. von Moos AG, 8037 Zürich



Fig. 5: Geologisches Profil durch den Gubrist als Beispiel eines Profils durch die Obere Süsswassermolasse (aus NAGRA 1988, Beil. 7.16)

Die Hauptentwässerung verlief zur Zeit der OSM längs des Beckennordrandes. Dort wurden die von Osten zugeführten, aus Feinsanden mit reichlich Muskovit bestehenden "Glimmersande" abgelagert (NAEF et al. 1985, 56: Fig. 8, Beil. 4). Sie sind gegen Süden mit der Tieflandfazies der alpinen Schüttungen verzahnt (z.B. Bohrung Berlingen in BÜCHI et al. 1965a, Tafel 1). Diese Sandsteine sind mässig wasser-durchlässig (SCHREINER 1973, 78), und beidseits des Unter-sees und des Hochrheins treten aus ihnen Quellen aus (JÄCKLI & KEMPF 1980, 21).

Nördlich der Glimmersandrinne schütteten lokale Flusssysteme Juramaterial in das Molassebecken hinein. Diese als Juranagelfluh bezeichneten Ablagerungen des Hegauschuttfächers bestehen vorwiegend aus Mergeln und enthalten in den Konglomeratlagen ein tonig-siltiges Bindemittel (SCHREINER 1974, 76-82; HÖTZL 1973, 61). Sie gehören noch zum zusammenhängenden Verbreitungsgebiet der Tertiär- und Malm-Aquifere des Molassebeckens.

Im Hegau nordöstlich von Schaffhausen bestand zur Zeit der OSM eine bemerkenswerte vulkanische Aktivität. In die OSM eingelagerte vulkanische Aschen (Tuffe) sind im Hegau selbst und im Unterseegebiet verbreitet (HOFMANN & HÜBSCHER 1977, 69-74). In der Thermalwasserbohrung Singen sind vulkanische Tuffe angetroffen worden, die als eine in die Untere Süsswassermolasse (USM) eingedrungene Gangfüllung gedeutet werden (SCHREINER 1968, 199). Die nach Westen bis gegen die Reuss nachgewiesenen Bentonit-Horizonte sind ebenfalls auf vulkanische Ascheneruptionen zurückzuführen (MÜLLER et al. 1984, 133). Nach dem Ende der Molassezeit sind im Hegau schliesslich Phonolit- und Basalt-Laven in Schloten aufgestiegen und erstarrt.

2.3.3 Obere Meeresmolasse

Während der OMM war das Mittelland mit einem Flachmeer überflutet. Schon zu dieser Zeit bestanden die alpinen Schuttfächer der Napfschüttung, der Hörnlischüttung und der Bodenseeschüttung mit ihren konglomeratischen Ablagerungen.

Im Becken sind jedoch grobgebankte Sandsteine, die Feldspäte und oft Glaukonit führen und vereinzelte Geröllagen enthalten, die vorherrschenden Gesteine. Mergellagen kommen seltener vor als in den Beckenfazies-Ablagerungen der OSM und der USM (Typische Profile in MATTER 1980, 185-188). Die Mergel sind in der Regel in höheren Teilen der OMM häufiger als in tieferen (RYBACH et al. 1981, 35; TRÜMPY 1980, 27). Dünne Kohleflöze kommen wie in der OSM auch in der OMM gelegentlich vor.

Der Fossilinhalt spricht für eine normale Meeressalinität während der Sedimentation der OMM (BÜCHI & SCHLANKE 1977, 66).

Gegen Ende der OMM-Zeit hob sich der Meeresboden im nördlichen Bodenseegebiet, worauf dort über brackisch-limnischen Mergeln der sogenannte Albstein als Kalkkruste von meist nur wenigen Dezimetern Mächtigkeit entstand (HOFMANN 1976, 5-7; HOFMANN & HÜBSCHER 1977, 64). Ein Fluss, der aus der Gegend von Ulm mit einer Trichtermündung zum Molassemeer im schweizerischen Mittelland verlief, räumte zur Zeit der beginnenden Verlandung nordwestlich der Albsteinschwelle in den bereits abgelagerten Molasse- und zum Teil auch in den Juraschichten ein breites Tal aus. In dieser Rinne und vor allem in der Trichtermündung lagerte er dann grobe Quarzsande ab. Mit diesen sogenannten Graupensanden wechseln Sande mit einzelnen alpinen Geröllhorizonten der Napf-Schüttung, die sogenannten Kirchberger Schichten, die aus der Gegenrichtung zugeführt wurden. Südlich der Graupensandrinne greifen sie auch auf die höheren Teile der OMM über (HOFMANN 1976, 7; HOFMANN & HÜBSCHER 1977, 65-66; MÜLLER et al. 1984, 128-129).

2.3.4 Untere Süßwassermolasse

Zur Zeit der USM waren längs des Alpenrandes grosse Schuttfächer mit mächtigen Abfolgen von Konglomeraten (Nagelfluhen) entstanden, die anders als die jüngeren Molasse-Schuttfächer, bei der alpinen Orogenese ganz in die Aufgeschobene und in die Gefaltete Molasse einbezogen wurden (z.B. Rigi; NAGRA 1988, 203: Fig. 5.30). Die USM hat im Süden eine maximale Gesamtmächtigkeit von 3500 Metern und keilt gegen Norden aus (NAGRA 1988, 206).

Im Bereich der ehemaligen Schwemmebene besteht die USM aus einer Wechselfolge von Mergeln, Siltsteinen und Sandsteinbänken (BÜCHI et al. 1965a, Tafel 1), die im Westen des Untersuchungsgebietes als "Bunte Molasse", weiter östlich wegen des granitischen Habitus der Gesteine als "Granitische Molasse" bezeichnet wird (typische Profile in MATTER 1980, 285-288). An der Basis kommen lokal Süßwasserkalke vor (Wynauer Süßwasserkalk mit Aarwanger Molasse = Blättermolasse im Hangenden). In der Bohrung Pfaffnau-Süd 1 wurden zwischen der Bohnerzformation und der typischen USM 2,6 m Krustenkalk beobachtet (BÜCHI et al. 1965a, 90; LEMCKE et al. 1968, 22). Die "Bunte Molasse" lässt sich zuweilen durch die "Kalkstein-Serie" (mit Kalksandsteinen) in eine "Untere" und eine "Obere Bunte Molasse" unterteilen. Oest-

lich der Reuss geht der obere Teil der "Granitischen Molasse" in die "Oberaquitane Mergelzone" über. Sie enthält keine oder nur wenige Sandsteine und ist in der Bohrung Küsnacht rund 120 m mächtig (BÜCHI et al. 1965a, Tafel 1; MÜLLER et al. 1984, 121-123).

In der Westschweiz lassen das Auftreten von Gips und die Ostrakodenfaunen auf brackische Einflüsse im obersten Oligozän schliessen. Sogar marine Nannofossilien sind dort häufig (TRÜMPY 1980, 27). Das Nannoplankton in Gesteinsproben spricht auch in der Ostschweiz für die Möglichkeit brackischer Einflüsse im obersten Oligozän (BÜCHI & SCHLANKE 1977, 62). Aus dem süddeutschen Molassebecken sind Brackwasserablagerungen der USM nach Westen bis zur Iller bekannt (LEMCKE 1973, 25). Eine zeitweise Verbindung der im obersten Oligozän von Süden durch das Rhonetal in die Westschweiz und von Osten aus dem Raum München gegen das Bodenseegebiet in die alpine Vorlandsenke eindringenden Meere ist deshalb nicht auszuschliessen (BÜCHI & SCHLANKE 1977, 63; SCHMASSMANN et al. 1984, 132).

2.3.5 Bohnerzformation

Zwischen den Molasseablagerungen und der mesozoischen Unterlage des Tertiärs sind Ablagerungen von Verwitterungsrückständen der Bohnerzformation örtlich als Sedimentdecke erhalten geblieben. An anderen Orten füllen Bildungen der Bohnerzformation nur Karstspalten und -taschen unter der direkt von Molasseablagerungen bedeckten Malm-Oberfläche, wodurch örtlich die hydraulische Verbindung zwischen Tertiär- und Malm-Aquifer unterbrochen sein kann. Als Decke zwischen USM und Malm sind in Dingelsdorf 26 m "Bolusbildungen" (LEMCKE & WAGNER 1961, 10), in Pfullendorf 5 m "Boluston" (VOLLMAYR 1971, 3), in Eglisau 7 m "feinsandiger Mergel" (CADISCH 1959, Fig. 1), in Weiach 9 m Ton mit Bohnerz und Malmkalk-Komponenten (MATTER et al. 1988a, 22-24), in Schafisheim 10 m Tonsteine mit Bohnerz (MATTER et al. 1988b, 32-33) und in Pfaffnau-Süd (1) 3 m "Boluston" unter einem 2,6 m dicken Krustenkalk (LEMCKE et al. 1968, 19; BÜCHI et al. 1965a, 90) erbohrt worden. Bildungen der Bohnerzformation in Spalten und Taschen kommen in Berlingen bis rund 200 m unter der Malmoberfläche vor (BÜCHI et al. 1965b, 14).

2.3.6 Unterlage des Tertiärs

Im Molassebecken besteht die Unterlage des Tertiärs vom Bodenseeraum bis ungefähr zur Glatt aus Schichten des unteren Tithoniens (Portlandien), weiter westlich bis zur Grenze des Untersuchungsgebiets überwiegend aus Schichten des Kimmeridgiens. Nordwestlich einer Linie, die zwischen Olten und Brugg längs des Faltenjura-Südfusses und dann durch den östlichen Aargauer und Klettgauer Tafeljura verläuft, ist auch das Kimmeridgien durch die prätertiäre Erosion abgetragen worden, so dass der aus dem Molassebecken aufsteigende Malm nur aus Oxfordien besteht.

Auf Karten der Tertiär-Unterlage ist zudem ein Gebiet mit Oxfordien rund um den Zürichsee ausgeschieden (BÜCHI et al. 1965b, 35; BÜCHI & SCHLANKE 1977, 58, TRÜMPY 1980, 18; RYBACH et al. 1981, Beil. 17). Diese Darstellung stützt sich aber ausschliesslich auf Befunde der Bohrung Küsnacht, die nicht zweifelsfrei belegt sind. Der Malm wurde hier auf 42,5 m durchfahren, davon die obersten 20 m zusammen mit Bohnerzformation. Für die dichten Kalke im oberen Teil und die Mergel und mergeligen Kalke im unteren Teil des erbohrten Profils zog TRÜMPY (1961) drei verschiedene stratigraphische Möglichkeiten in Betracht und hielt es für die wahrscheinlichste, dass es sich um die Wangener Schichten (Ober-Oxfordien) und um Geissberg- oder oberste Effinger Schichten handle (TRÜMPY 1961, 11-12; BÜCHI et al. 1965b, 33; BÜCHI et al. 1965a, 89 vermuten unter der Bohnerzformation die Effinger Schichten). Zumindest ist nicht sicher auszuschliessen, dass auch in der Umgebung der Bohrung Küsnacht das Kimmeridgien die Unterlage des Tertiärs bildet.

2.3.7 Malm-Karst (allgemein) (Fig. 6)

In seinen Arbeiten aus der Schwäbischen Alb unterschied VILLINGER verschiedene Karstzonen:

Die Zone des Seichten Karstes umfasst das Gebiet, das zu Schichtquellen (Karstquellen) entwässert, die an der austreichenden Basis des Aquifers entspringen, im Falle der Schwäbischen Alb über den Oxford-Mergeln. Die Karstwassersohle liegt hier im Niveau der Vorfluttäler oder höher.

In der Zone des Tiefen Karstes bleiben dagegen die Karstwassersohle bildenden Schichten auch in den Tälern unter der Erdoberfläche, so dass die Entwässerung allein auf das Niveau des Vorfluters ausgerichtet ist. Die Grenzen zwischen Seichtem und Tiefem Karst bilden stets eine unterirdische Wasserscheide.

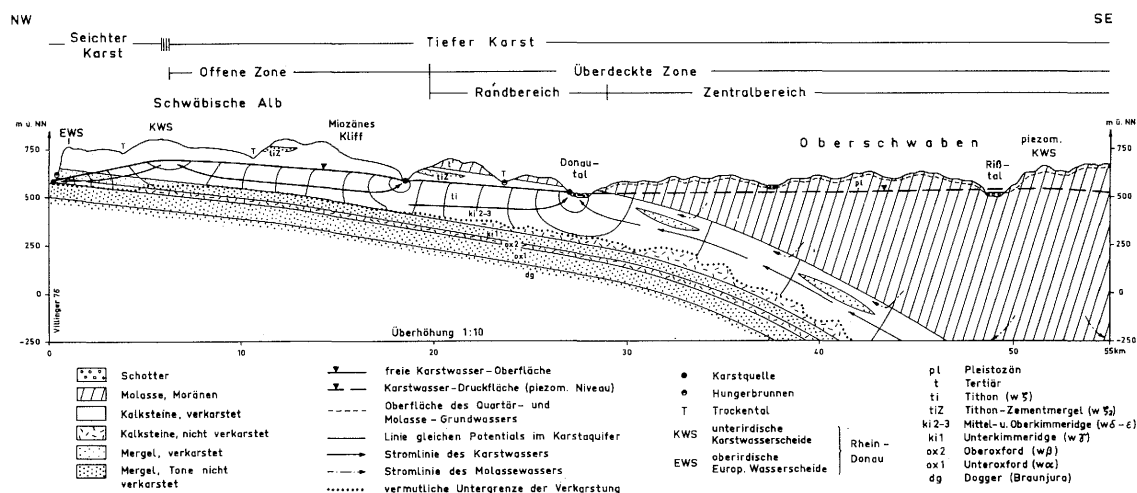


Fig. 6: Karstzonen (APEL & VILLINGER 1979, S.224)

Innerhalb des Tiefen Karstes ist in einer Offenen Zone eine rasche Einsickerung des Niederschlagswassers nicht durch eine gering durchlässige Sedimentdecke behindert.

In der Ueberdeckten Zone wirken sich die Niederschläge dagegen nur abgeschwächt und verzögert auf das Karstwasser aus, weil gering durchlässige Sedimente über den verkarsteten Gesteinsserien liegen, in unserem Falle das Tertiär über dem Malm.

Innerhalb der Ueberdeckten Zone des Tiefen Karsts verläuft am Nordrand des Molassebeckens die Grenze zwischen der freien und der gespannten Karstwasseroberfläche. Dadurch ist die Ueberdeckte Zone in zwei Teileinheiten gegliedert: den Ranbereich mit freier Karstwasseroberfläche im Norden und den grossen, bis zu den Alpen reichenden Zentralbereich mit gespannter Karstoberfläche im Süden (VILLINGER 1972, 158-167; VILLINGER 1977, 7-8; APEL & VILLINGER 1979, 231-232).

Im Malm-Karst sind Klüfte und Schichtfugen korrosiv zu Millimeter bis Dekameter grossen Hohlräumen erweitert. Im Kleinen sind Klüftung und Verkarstung sehr unregelmässig. Manche Horizonte oder Partien der Malm-Kalke sind nicht oder nur wenig verkarstet, während in anderen eine intensive Korrosion stattgefunden hat. In Störungszonen mit erhöhter Klüftung ist die Verkarstung gewöhnlich stärker und tiefergreifend als in tektonisch weniger beanspruchten Bereichen (APEL & VILLINGER 1979, 233; BURGER 1983, 535; BERTLEFF 1984, 1986, 40-45; VILLINGER 1988, 50).

Nach dem Schema der "Doppelten Permeabilität" (BURGER 1979, 116) entstehen auf Kluftsystemen Zonen stark erhöhter Permeabilität, während dazwischen Blöcke mit einer nur kleinmassstäbigen Verkarstung an kleinen Klüften und Schichtfugen und daher mit einer viel geringeren Permeabilität verbleiben.

Trotz aller Inhomogenitäten und Anisotropien im einzelnen bilden in den Malmkalkserien die zahlreichen Hohlräume unterschiedlicher Grösse im ganzen ein zusammenhängendes System, so dass als grossräumiges Modell unter einer einheitlichen Karstwasseroberfläche ein homogener und isotroper, zusammenhängend von Grundwasser erfüllter Aquifer angenommen werden kann (VILLINGER 1977, 13-14).

Zahlreiche Hinweise auf Spülungsverluste in Tiefbohrungen bestätigen ausser den Fördertests auch die im Zentralbereich der überdeckten Zone des Tiefen Karst bestehende Verkarstung der Malmkalke (BERTLEFF 1984, 1986, 41; VILLINGER 1988). In der Nagra-Bohrung Weiach waren Spülungsverluste bei ca. 200 m im oberen Massenkalk aufgetreten, rund 15 m unter der Tertiärbasis (WITTWER 1986, 38). Bei der Nagra-Bohrung Schafisheim traten dagegen im Malm keine Spülungsverluste auf (1. Vierteljahresbericht, Beil. 4.2), doch sind hier die Kimmeridge-Kalke wenig mächtig (vgl. 2.3.9) und ihre Karstspalten und -taschen mit alttertiären Tonen plombiert. In Oberschwaben sind die Karsthohlräume in höheren Partien der Malmkalk-Serien häufig ebenfalls nicht mehr offen, sondern mit Verwitterungstonen verfüllt (BERTLEFF 1984, 1986, 45; VILLINGER 1988, 50).

2.3.8 Malm des Bodenseegebietes (Fig. 7)

2.3.8.1 Tithon- und Kimmeridge-Kalke

Im Bodenseegebiet liegt unter dem Tertiär eine etwa 250 bis 450 m mächtige Serie von klüftigen und verkarsteten, teils

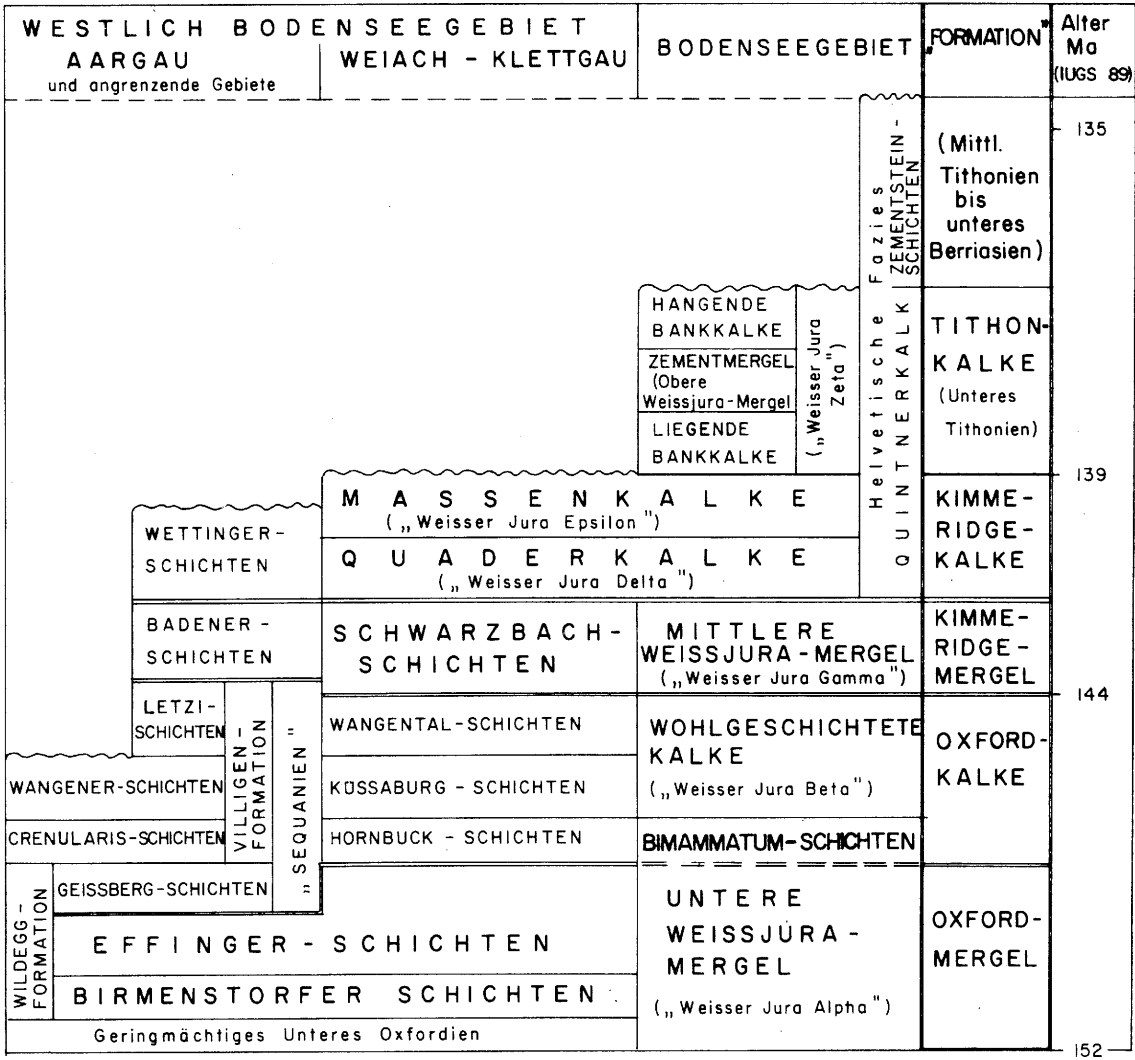


Fig. 7: Uebersicht der Malm-Stratigraphie im Untergrund des nordschweizerischen Molassebeckens (nicht massstäblich)

gebankten, teils massigen Kalken und untergeordnet Dolomiten des unteren Tithoniens (Hangende und Liegende Bankkalke, früher Weisser Jura Zeta) und des Kimmeridgiens (Kimmeridge-Kalke: Massenkalk und Quaderkalk, früher

Weisser Jura Epsilon und Delta). Im Tithonien kommen zwischen Hangenden und Liegenden Bankkalken die mergelig-kalkigen Schichten der Zementmergel (Obere Weissjuramergel) nicht durchgehend, sondern nur als schüsselförmige Einlagerungen vor (VILLINGER 1977, 8 und Schnitt 3 auf Tafel 2; APEL & VILLINGER 1979, 230). In der Bohrung Berlingen dürften die rund 12 m Mergel 170-182 m unter der Tertiärbasis (BÜCHI et al. 1965b, 30: Fig. 13) zu ihnen gehören. Die Gesamtmächtigkeit der Kalk-Serie beträgt in der Bohrung Berlingen 266 m, in der Bohrung Kreuzlingen 311 m (BÜCHI et al. 1965b, 14-15, 30: Fig. 13), in der Bohrung Dingelsdorf 294 m, (LEMCKE & WAGNER 1961, 10-11), in Pfullendorf 281 m (VOLLMAYR 1971, 3) und in der Bohrung Markdorf 369 m, wo bereits Einflüsse der helvetischen Fazies vorliegen (LEMCKE & WAGNER 1961, 11, 13).

Weiter südöstlich, in der Bohrung Opfenbach, dominiert in der 467 m mächtigen Serie wie schon in der Bohrung Tettnang die helvetische Fazies, von welcher die obersten rund 180 m zu den im schwäbischen Faziesbereich fehlenden Zementsteinschichten (Mittleres Tithonien bis Unteres Berriasien) gehören; die tieferen Schichten werden dem Quintnerkalk zugezählt (LEMCKE & WAGNER 1961; VILLINGER 1982, Abb. 5; GEYER & GWINNER 1986, 160). Die Transmissivität des Malms ist in der helvetischen Fazies trotz der grösseren Mächtigkeiten vermutlich wesentlich geringer als in der schwäbischen (VILLINGER 1982, 24; VILLINGER 1988, 50).

2.8.3.2 Kimmeridge-Mergel

Im Liegenden der Kalk-Serie findet sich ein zusammenhängender Mergel-Horizont, die Kimmeridge-Mergel (Mittlere Weissjuramergel, früher Weisser Jura Gamma). Im Seichten Karst, gebietsweise auch in der Offenen Zone des Tiefen Karsts, sind die Kimmeridge-Mergel nach VILLINGER wie die hangende Kalk-Serie verkarstet und verursachen daher keine grossräumige Unterteilung des Karstwasserleiters in zwei Stockwerke (Fig. 6). Im grösseren Teil des Tiefen Karstes sind dagegen die Kimmeridge-Mergel nicht oder kaum verkarstet, und die liegenden Oxford-Kalke werden ebenfalls nicht mehr von der Verkarstung erreicht (Fig. 6). In dem von Molasse überdeckten Bereich des Tiefen Karsts sind wahrscheinlich auch die untersten Kimmeridge-Kalke nicht oder

nur wenig verkarstet und gering klüftig (Fig. 6; VILLINGER 1977, 8; APEL & VILLINGER 1979, 230). Die Mächtigkeit der Kimmeridge-Mergel beträgt in der Bohrung Berlingen 40 m (inkl. ca. 18 m unterster "Malm Delta"), in der Bohrung Kreuzlingen 16 m (BÜCHI et al. 1965b, 14-14, 30: Fig. 13), in der Bohrung Dingelsdorf 28 m, in der Bohrung Pfullendorf 39 m und in der Bohrung Markdorf 27 m (LEMCKE & WAGNER 1961, 10-13; VOLLMAYR 1971, 3).

2.3.8.3 Oxford-Kalke

Darunter folgt nochmals eine Kalk-Serie, die Oxford-Kalke (Wohlgeschichtete Kalke, früher Weisser Jura Beta), die in Berlingen 31 m, in Dingelsdorf 45 m, in Pfullendorf 20 m und in Markdorf 35 m mächtig erbohrt worden sind.

2.3.8.4 Oxford-Mergel

Das Liegende der gesamten Serie mit verkarstungsfähigen Kalken und damit im Seichten Karst die Sohlenschicht des Aquifer-Komplexes wird von den Oxford-Mergeln (Untere Weissjuramergel, früher Weisser Jura Alpha, Mittleres und unteres Oxfordien) gebildet. Die erbohrte Mächtigkeit dieser Aquiclude beträgt in Berlingen 32 m, in Dingelsdorf 61 m, in Pfullendorf 70 m und in Markdorf 38 m. In der schwäbischen Alb gehören örtlich die Kalksteine und Mergelkalke der Bimammatum-Schichten im obersten Teil der Oxford-Mergel noch zum Karstwasserleiter (VILLINGER 1977, 8).

2.3.9 Malm westlich des Bodenseegebietes (Fig. 7)

Westlich des Bodensees trennt weiterhin eine zusammenhängende Serie vorwiegend mergeliger Schichten des unteren Kimmeridgiens eine obere Kalkserie des Oberen Kimmeridgiens (bei Lindau auch noch des Tithoniens) von einer unteren Kalkserie des Oberen Oxfordiens, und ebenso bilden in dem hier verbreiteten argovischen Faziesbereich Mergel des Mittleren Oxfordiens das Liegende der gesamten Serie verkarstungsfähiger Kalke.

2.3.9.1 Tithon- und Kimmeridge-Kalke

In der Erdölbohrung Lindau haben die Kalke des Tithoniens und des Kimmeridgiens noch eine Mächtigkeit von etwa 183 m (BÜCHI et al. 1965b, 13-14, 30); in der Mineralwasserbohrung Eglisau 2 wurden unter der Tertiär-Basis 139 m (CADISCH 1959, Fig. 1), in der Nagra-Tiefbohrung Weiach 110 m und in der Erdölbohrung Pfaffnau 124 m (BÜCHI et al. 1965b, 13, 30) Kimmeridge-Kalke erbohrt, die im Aargau und angrenzenden Gebieten zur Formation der Wettinger-Schichten zusammengefasst sind. In der Bohrung Weiach werden massige Mikrite mit tongefüllten Karstspalten und mit Glaukonit-sandstein-Lagen an der Basis dem "Massenkalk", darunter die Mikrite mit Mergelzwischenlagen dem "Quaderkalk" zugeordnet (MÜLLER et al. 1984, Beil. 1; SPRECHER & MÜLLER 1986, Beil. 32, MATTER et al. 1988a, 26, 31, 32; NAGRA 1989, 24-26: Beil. 5.1a).

2.3.9.2 Kimmeridge-Mergel

Die Kimmeridge-Mergel, welche im Klettgauer Tafeljura als Schwarzbach-Schichten, im Aargau und angrenzenden Gebieten als Badener-Schichten bezeichnet werden, sind in der Bohrung Lindau (ZH) 30 m (inkl. 12 m Mergel an der Basis des Weissjura Epsilon; BÜCHI et al. 1965b, 13-14, 30: Fig. 13), in der Bohrung Eglisau 22 m (CADISCH 1959, Fig. 1), in der Bohrung Weiach 20 m (NAGRA 1988, 190: Fig. 5.21; MATTER et al. 1988a, 32-34; NAGRA 1989, 26-27: Beil. 5.1a) und in der Bohrung Pfaffnau 12 m (BÜCHI et al. 1965b, 30: Fig. 13) mächtig. In der Bohrung Weiach handelt es sich um eine Folge von vorherrschenden Mergeln mit Lagen mikritischer Kalke, die hier als Schwarzbach-Schichten bezeichnet wird.

2.3.9.3 Oxford-Kalke

Die Oxford-Kalke im Liegenden der Kimmeridge-Mergel werden im Klettgauer Tafeljura in Wangental-, Küssaburg- und Hornbuck-Schichten gegliedert (MÜLLER et al. 1984, 94: Abb. 43; NAGRA 1988, 190: Fig. 5.21; MATTER et al. 1988a, 34-39; NAGRA 1989, 27-29). Im Aargau und angrenzenden Gebieten handelt es sich um die früher als "Sequanien" bezeichnete Formation, die von oben nach unten aus der in Letzi-, Wangener und Crenularis-Schichten gegliederten

Villigen-Formation (oberes Oxfordien) und den Geissberg-Schichten (oberster Teil der Wildeg-Formation, mittleres Oxfordien, dazu auch die "Bimammatum-Schichten" in Bohrprofilen von BÜCHI et al. 1965b) besteht.

In Lindau (ZH) sind es zusammen 57 m, in Pfaffnau 46 m, in Altishofen ca. 65 m Kalksteine und Mergelkalksteine ("Bimammatum-Schichten") (BÜCHI et al. 1965b, 13-14, 30; FISCHER & LUTERBACHER 1963, Taf. 1). Im Profil von Weiach zeigt die zusammen 75 m mächtige Oxfordkalk-Serie oben Mikrite (Wangental-Schichten), tiefer mit Mergeln wechsel-lagernde Mikrite (Küssaburg-Schichten) und zuunterst Mergelkalke mit Tonmergeln (Hornbuck-Schichten), alles ohne Anzeichen von Verkarstung (MATTER et al. 1988a, 34-39). In der Bohrung Schafisheim beträgt die Mächtigkeit der hier als Oxford-Kalke zusammengefassten und direkt unter der Bohnerzformation folgenden Formation 34 m, die in 9,6 m Wangener-Schichten, 3,7 m Crenularis-Schichten und 20,7 m Geissberg-Schichten gegliedert werden. Es handelt sich um Mikrite, die oben (Wangener-Schichten) mit Tonen gefüllte Karstspalten und -taschen aufweisen und deren Tongehalt im tieferen Member (Geissberg-Schichten) gegen unten zunimmt (MATTER et al. 1988b, 34-39: Beil. 6.12).

2.3.9.4 Oxford-Mergel

Die Serie der Oxford-Mergel ist in Lindau (ZH) mit 30 m noch ähnlich mächtig wie im Bodenseegebiet (BÜCHI et al. 1965b, 13-14, 30). Im Aargau und in angrenzenden Gebieten handelt es sich um die früher als "Argovien" bezeichnete, in Effinger Schichten und Birmenstorfer Schichten gegliederte und zum Mittleren Oxfordien gehörende Schichtenfolge, die zusammen mit der hangenden Geissberg-Schicht die Wildeg-Formation bildet (das untere Oxfordien findet sich in diesem Gebiet nur als geringmächtiger Kondensationshorizont). In Weiach ist der unter den Oxford-Kalken (zuunterst Hornbuck-Schichten) liegende Malm 88 m mächtig und, abgesehen von den untersten 0,7 m, fast ganz den Effinger Schichten zuzuordnen, die aus Tonmergeln mit untergeordneten Mergelkalkbänken bestehen (NAGRA 1988, 192: Fig. 5.23; MATTER et al. 1988a, 39-43; NAGRA 1989, 28-29: Beil. 5.12). Gegen Westen nimmt das Mittlere Oxfordien an Mächtigkeit stark zu. In Schafisheim sind 230 m, in Pfaffnau 212 m und in

Altishofen 215 m erbohrt worden. Die Effinger Schichten, welche in Schafisheim allein 217 m erreichen, sind tonige bis kalkige Mergel mit Kalk- und Mergelkalkeinschaltungen (MATTER et al. 1988b, 39-43).

2.4 Porosität (Hohlraumvolumen) und Durchlässigkeit

2.4.1 Obere Süsswassermolasse

BALDERER (1982, 1983a) entwickelte Berechnungsverfahren, mit denen er in Anwendung der Theorie von Dupuit aus den Quellabflüssen die Durchlässigkeiten der lithologischen Einheiten der Oberen Süsswassermolasse bei vorwiegend interstitieller Porosität und praktisch horizontaler Schichtlagerung schätzen konnte. Die Berechnungen ergaben im Hörnlichschuttfächer (Aubachgebiet, Kanton Thurgau) folgende mittlere Durchlässigkeiten:

Sandsteine: $K = 1,1 \times 10^{-4} \pm 0,42 \times 10^{-4} \text{ m/s}$

Nagelfluhen: $K = 3,25 \times 10^{-5} \pm 0,92 \times 10^{-5} \text{ m/s}$

Ferner ergaben sich schätzungsweise für

Süsswasserkalke: $K = 6,2 \times 10^{-6} \text{ m/s}$

Mergel (feucht): $K = 1,7 \times 10^{-6} \text{ m/s}$

Die nutzbare Porosität der Speichergesteine (Sandsteine, Nagelfluhen) schätzte BALDERER (1983a, 50) aufgrund von Feldbeobachtungen auf 5-10 %.

Oberhalb der Talsohlen bewirkt das in der OSM zirkulierende Grundwasser eine Auflösung der karbonatischen Matrix, wodurch die interstitielle Porosität vergrössert wird. Dabei können insbesondere in den konglomeratischen Ablagerungen lokal sogar Hohlräume entstehen (BALDERER 1989, 70-72).

Aehnliche Durchlässigkeitswerte wie von BALDERER aus dem Hörnlichschuttfächer werden von ULBRICH (1973, Zitat nach VILLINGER 1977, 80) aus dem Jungtertiär des bayerischen Alpenvorlands angegeben, nämlich $K = 10^{-5}$ bis 10^{-6} m/s , örtlich sogar 10^{-3} bis 10^{-5} m/s . VILLINGER (1977, 80) rechnet dagegen für die Molasse nördlich des Bodensees mit einem pauschalen Wert von $K = 10^{-8}$ bis 10^{-9} m/s , bemerkt aller-

dings, dass dies zuwenig sein könnte. Im Lokalmmodell USM 1988 der NAGRA wird für die OSM mit einer horizontalen Durchlässigkeit von $K = 10^{-8}$ m/s im Norden und $K = 10^{-9}$ m/s im Süden sowie mit einer vertikalen Durchlässigkeit von $K = 10^{-10}$ m/s im Norden und $K = 10^{-11}$ m/s im Süden gerechnet (NAGRA, 1988, 90).

2.4.2 Obere Meeresmolasse

Für die OMM östlich der Reuss rechnen RYBACH et al. (1981, 33-34) damit, dass die "Transmissivitäten" in der Gegend von Schaffhausen mehr als 5000 mdarcy x m betragen und gegen den Alpenrand auf 500 mdarcy x m abnehmen. Unter Berücksichtigung der gegen den Alpenrand zunehmenden Mächtigkeiten der OMM (RYBACH et al. 1981, Beil. 10) ergibt dies mittlere spezifische Permeabilitäten von mehr als $k = 100$ mdarcy bis $k = 1$ mdarcy oder ungefähr Durchlässigkeiten von mehr als $K = 10^{-6}$ m/s bis $K = 10^{-8}$ m/s. RYBACH et al. (1981) geben nicht an, wie die angenommen Permeabilitäten ermittelt wurden. Da sie wahrscheinlich auf Untersuchungen an Kernmaterial beruhen, also der Einfluss von Klüften nicht berücksichtigt ist, dürften die angegebenen "Transmissivitätswerte" eher zu klein sein.

Wie die Permeabilitäten nehmen nach RYBACH et al. die Porositäten gegen den Alpenrand ab. 20 % Porosität werden 150 mdarcy (Gegend von Schaffhausen), 15 % Porosität 20 mdarcy, 10 % Porosität 2 mdarcy und 5 % Porosität weniger als 1 mdarcy zugeordnet (RYBACH et al. 1981, Beil. 11).

Für ein schematisches Profil der OMM-Abfolge im Raum Zürich geben RYBACH et al. (1981, 33-35) Wechsel der Permeabilitäten von nahezu $k = 100$ mdarcy (ca. $K = 10^{-6}$ m/s) bis hinunter auf $k = 5$ mdarcy (ca. $K = 5 \times 10^{-8}$ m/s) und Wechsel der Porositäten von nahezu 20 % bis hinunter auf 5 % an. Eine an der OMM-Basis vorhandene mächtige Sandsteinzone mit spezifischen Permeabilitäten von gegen 100 mdarcy und Porositäten von gegen 20 % besitzt eine beachtliche laterale Ausdehnung und wurde sogar in der Tiefbohrung Konstanz durchfahren (RYBACH et al. 1981, 33).

Für das Lokalmmodell USM 1988 der NAGRA wurden im Norden des schweizerischen Molassebeckens mit $K = 10^{-7}$ m/s, im Zentrum mit $K = 5 \times 10^{-9}$ m/s und im Süden mit $K = 10^{-10}$ m/s gerech-

net (NAGRA 1988, 90). Mit den im Modell berücksichtigten Mächtigkeiten ergäbe dies grössenordnungsmässig Transmissivitäten von $T = 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ im Norden, $T = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ im Zentrum und $T = 5 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ im Süden. Aus Pumpversuchen im süddeutschen Molassebecken berechnete STÖBER (1988, 66-67) maximale Transmissivitäten von $T \geq 3 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, so auch in der im nördlichen Bereich des NAGRA-Modells gelegenen und im Hydrochemieprogramm der NAGRA enthaltenen Bohrung Konstanz. Im Süden werden aus Bohrungen bei Kisslegg aus einzelnen Members der OMM Transmissivitäten von $T = 6 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ (Baltringer-Schichten) und $T = 2 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ (Basissandstein) angegeben. Dazu nimmt die Durchlässigkeit der OMM zum Beckeninnern, d.h. nach Südosten ab (STÖBER 1988, 67).

2.4.3 Untere Süsswassermolasse

2.4.3.1 Porositäten

In einem oberen Bereich der USM der Bohrungen Boswil, Pfaffnau 1, Pfaffnau-Süd 1 und 4 liegen die Mittelwerte der aus Kernmaterial und Schlumberger-Messungen ermittelten Porositäten zwischen 14 % und 19 % (Pfaffnau Süd 2 = 11 %); in den beiden südlichen Bohrungen Küsnacht und Hünenberg betragen sie rund 9 % und 7 %. In den untersten 200 m der USM werden von Berlingen, Lindau (ZH) und Boswil Porositätsmittelwerte zwischen rund 5 % und 8 %, weiter westlich dagegen von Pfaffnau-Süd 1, 2 und 4, Ruppoldsried und Tschugg solche zwischen 13 % und 19 % angegeben (RYBACH et al. 1981, Beil. 15).

In den Bohrungen Pfaffnau-Süd 1, Boswil und Hünenberg konnten LEMCKE et al. (1968) die USM nach den Schwermineralien in eine obere Epidot-Schüttung und in eine tiefere Zirkon-Schüttung gliedern. Sandsteinanteile und -porositäten wurden aus den elektrischen Bohrlochmessungen bestimmt. Innerhalb der Epidot-Schüttung liegen die Sandsteinanteile gleichmässig zwischen 18 und 19 %; die durchschnittlichen Sandsteinporositäten gehen mit abnehmendem Abstand vom Alpenrand von 24,5 % in Pfaffnau-Süd 1 über 17,5 % in Boswil auf 5-10 % in Hünenberg zurück. In der Zirkon-Schüttung sind die Sandsteinanteile erheblich höher und unterschiedlicher, nämlich 46,5 % in Pfaffnau-Süd 1, 25,7 % in Boswil

und 20 % in Hünenberg. Die durchschnittlichen Porositäten sind dagegen geringer als in der Epidot-Schüttung, nämlich ca. 14,5 %, ca. 13 % und unter 5 % (LEMCKE et al. 1968, 30).

Die nutzbaren Porositäten dürften wesentlich kleiner als die Werte der Erdölindustrie sein. In Gesteinsproben aus der USM der Nagra-Bohrungen Weiach und Schafisheim wurden folgende verschiedene Porositäten gemessen (MATTER et al. 1988a, 215-222: Beil. 6.24; MATTER et al. 1988b, 135-140: Beil. 6.8a):

- Absolute (totale) Porosität, die sich aus den nicht-kommunizierenden und den kommunizierenden oder offenen Poren zusammensetzt.
- Offene Porosität, die für die Speicher- und Fließeigenschaften allein von Bedeutung ist:

Makroporosität = Volumen aller Poren mit einem Radius grösser als 7,5 μm

Mikroporosität = Volumen aller Poren mit einem Radius kleiner als 7,5 μm und grösser als 0,004 μm .

Aus den publizierten Daten ergeben sich folgende Mittelwerte und Standardabweichungen:

%	Weiach	Schafisheim
Absolute Porosität	19,6 $\pm$ 9,5	12,5 $\pm$ 6,8
Offene Porosität:		
- Makro	1,9 $\pm$ 1,3	1,1 $\pm$ 0,9
- Mikro	8,4 $\pm$ 5,8	7,8 $\pm$ 1,5
- Total	10,3 $\pm$ 5,3	8,9 $\pm$ 1,4

2.4.3.2 Durchlässigkeiten

Die Mittelwerte der aus Kernmaterial und Schlumberger-Messungen ermittelten Permeabilitäten liegen im oberen Teil der USM von Pfaffnau 1, Pfaffnau-Süd 1 und 4 zwischen rund 50 und 120 mdarcy, haben also die Grössenordnung $K = 10^{-6}$ m/s (Pfaffnau Süd 2: $k = 16$ mdarcy $\approx 10^{-7}$ m/s). In den

beiden südlichen Bohrungen Küsnacht und Hünenberg betragen sie 10 und 0,2 mdarcy; das heisst, dass sie grössenordnungsmässig zwischen $K = 10^{-7}$ und 10^{-9} m/s liegen. In den untersten 200 m der USM werden von Berlingen 1,7 mdarcy und von Lindau (ZH) und Boswil je 0,1 mdarcy angegeben, grössenordnungsmässig also zwischen $K = 10^{-8}$ und 10^{-9} m/s, von den westlichen Bohrungen Pfaffnau-Süd 1 und 4, Ruppoldsried und Tschugg dagegen Mittel zwischen 20 und 84 mdarcy, grössenordnungsmässig also zwischen $K = 10^{-7}$ und 10^{-6} m/s (RYBACH et al. 1981, Beil. 15). In der Nagra-Bohrung Schafisheim wurde an der Basis der USM eine Durchlässigkeit von ungefähr $K = 5 \times 10^{-7}$ m/s ermittelt (KÜPFER et al. 1989, 20).

Generell kann gesagt werden, dass die USM im ganzen Becken schwach durchlässige Silt- und Tongesteine (Mergel) enthält, im Nordteil des Beckens aber auch porösere und permeablere Sandsteine vorkommen (RYBACH et al. 1981, 37), deren Permeabilität in einzelnen Horizonten maximal 300-400 mdarcy ($K = 3-4 \times 10^{-6}$ m/s) erreichen kann (RYBACH et al. 1981, Beil. 15).

Im Datensatz des Lokallmodells USM 1988 der NAGRA nehmen die horizontalen Durchlässigkeiten von Norden nach Süden von $K = 10^{-8}$ m/s auf 10^{-11} m/s ab, die vertikalen von $K = 10^{-10}$ auf 10^{-11} m/s. Einer "Oberaquitane Mergelzone" im Dach der USM wird generell $K = 10^{-11}$ m/s zugeordnet (NAGRA 1988, 90).

2.4.4 Gesamte Molasse (Zusammenfassung)

Mit den verfügbaren Daten sind die Durchlässigkeits-Verhältnisse in der mittelländischen Molasse zusammenfassend wie folgt abzuschätzen:

In den OSM-Schuttfächern haben Sandsteine und Nagelfluhen über den Talsohlen verhältnismässig hohe Durchlässigkeiten (hydraulische Leitfähigkeiten) von grössenordnungsmässig $K = 10^{-4}$ bis 10^{-5} m/s. Für die in der Beckenfazies der OSM vorherrschenden Mergel wird die Durchlässigkeit jedoch nur in der Grössenordnung von $K = 10^{-6}$ m/s geschätzt. Dieselbe Grössenordnung der mittleren Durchlässigkeit gilt im wesentlichen auch für die OMM und den oberen Bereich der USM in den nördlichen Teilen des Untersuchungsgebietes.

Gegen die tieferen Bereiche der USM besteht schon in nördlichen Teilen des Untersuchungsgebietes ein Trend zu abnehmenden Durchlässigkeiten, im Westen gegen $K = 10^{-7}$ m/s, im Osten auf rund $K = 10^{-8}$ m/s oder weniger. Vor dem Alpenrand nehmen die mittleren Durchlässigkeiten von OMM und USM generell auf $K = 10^{-8}$ m/s und weniger ab.

In Oberschwaben schätzte VILLINGER (1977, 84) die mittlere Durchlässigkeit für die gesamte Molasse auf $K = 10^{-8}$ m/s, eventuell auf $K = 10^{-9}$ m/s.

KIMMEIER et al. (1985, Tab. 4-1 und 4-2) nahmen im mathematischen Modell der unterirdischen Fließsysteme zwischen Alpen und Schwarzwald für einen oberen Teil der mittelländischen Molasse $K = 10^{-6}$ m/s und für einen tieferen Teil $K = 10^{-7}$ m/s an. Im Regionalmodell 1987 der Nagra wurden geringere Durchlässigkeiten angenommen, nämlich horizontal $K = 10^{-8}$ m/s und vertikal $K = 10^{-10}$ m/s, im Lokalmodell USM 1988 der Nagra solche zwischen $K = 10^{-7}$ m/s (horizontal) bzw. $K = 10^{-10}$ m/s (vertikal) und $K = 10^{-11}$ m/s (NAGRA 1988, 90).

2.4.5 Malmkalke

Die meisten karbonatischen Gesteine des Malms (und der Kreide) besitzen kaum eine wesentliche primäre Matrix-Porosität. Die Speicherkapazitäten stammen praktisch ausschliesslich aus Karst- und Kluftsystemen (RYBACH et al. 1981, 39).

2.4.5.1 Schwäbische Alb und Molassebecken

Im Seichten Karst, in der Offenen Zone und im Randbereich der Ueberdeckten Zone des Tiefen Karstes der Schwäbischen Alb beträgt die mittlere Permeabilität (Gebirgsdurchlässigkeit) des Malm-Aquifers nach VILLINGER ungefähr $K = 10^{-4}$ m/s bis $< 10^{-3}$ m/s und das nutzbare Hohlraumvolumen durchschnittlich 1,5-2 %. Im Zentralbereich der Ueberdeckten Zone des Tiefen Karsts geht die Aquiferdurchlässigkeit nach VILLINGER auf ungefähr $K = 10^{-4}$ m/s bis 10^{-6} m/s und das nutzbare Hohlraumvolumen auf weniger als 1 % zurück (VILLINGER 1977, 82-83; Tab. 11; APEL & VILLINGER 1979, 232; VILLINGER 1982, 23).

Pumpversuche aus Tiefbohrungen im oberschwäbischen Molassebecken ergaben Transmissivitäten des Malmkarsts zwischen rund $T = 10 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ und $T = 0,1 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ (STRAYLE et al. 1982, 101; BERTLEFF et al. 1987, 414-415; BERTLEFF et al. 1988, 68). Die Transmissivitäten werden anscheinend beckeneinwärts von Bad Buchau und Saulgau über Jordanbad (Biberach) zu Aulendorf (Laimbach) mit der von 500-550 m auf rund 1050 m zunehmenden Deckschichtenmächtigkeit kleiner. Bei noch grösseren Deckschichtenmächtigkeiten als in Aulendorf war in der Bohrung Bad Waldsee und in der bereits den helvetischen Malm erschliessenden Bohrung Ravensburg kein Grundwasser förderbar, so dass dort noch kleinere Transmissivitäten vorkommen. STRAYLE et al. (1982) halten Werte für die Permeabilität nicht für sinnvoll, da die Grundwassermächtigkeit eine höchst problematische Grösse sei, weil nicht gesichert ist, wo geohydraulisch die oberen und die unteren Grenzen des Karstaquifers liegen und wie mächtig die von den Pumpversuchen erfassten Teile des Aquifers sind. Bezogen auf die Gesamtmächtigkeit der Malmkalk-Serie (inkl. Mergellagen) ergäben sich vergleichsweise mittlere Permeabilitäten zwischen rund $K = 2 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ und $K = 3 \times 10^{-7} \text{ m/s}$.

Messungen in der Nagra-Bohrung Weiach ergaben Durchlässigkeiten des Oberen Malms von $K = 6 \times 10^{-8} \text{ m/s}$ und $3 \times 10^{-7} \text{ m/s}$ (Nagra 1989, 152: Beil. 8.2). Aus den Porositäts-Daten der Nagra-Bohrungen Weiach und Schafisheim (MATTER et al. 1988a, Beil 6.24 und MATTER et al. 1988b, Beil. 6.8a) ergaben sich für die Gesteinsproben der Malm-Kalke folgende Mittelwerte und Standardabweichungen:

%	Weiach (12 Proben)	Schafisheim (1 Probe)
Absolute Porosität	$1,60 \pm 0,81$	$1,65 \pm 0,78$
Offene Porosität:		
- Makro ($> 7,5 \mu\text{m}$)	$0,12 \pm 0,05$	0,1
- Mikro ($0,004-7,5 \mu\text{m}$)	$1,36 \pm 0,81$	0,8
- Total	$1,48 \pm 0,83$	0,9

Die offenen Porositäten der Malmkalkproben, insbesondere auch die Makroporosität sind erheblich geringer als die der Sand- und Kiessteine der USM. Das nutzbare Hohlraumvolumen

der Malmkalke ist im Gegensatz zur Molasse im wesentlichen auf die Klüfte und die Verkarstung zurückzuführen.

Aus Amplituden und Phasenwerten der im Malmgrundwasser der Bohrungen Saulgau und Aulendorf beobachteten Erdgezeiten berechnete HAMMER Porositäten von 1.5 bis 4.5 % (BERTLEFF et al. 1988, 71). Aus einem Markierungsversuch in Saulgau wurde eine durchflusswirksame Porosität von 2.7 % abgeleitet (BERTLEFF et al. 1988, 72).

2.4.5.2 Oberrhein graben

Im Oberrhein graben wurden mit in der Erdölwirtschaft üblichen Tests Permeabilitätswerte berechnet, die bei der Bohrung Bréchaumont im Oberen Oxfordien ("Séquanien") 0,3 mdarcy und im Unteren Oxfordien ("Rauracien") 17 mdarcy betragen, bei der Bohrung Michelbach im Unteren Oxfordien 6 mdarcy. Dies sind Größenordnungen von $K = 10^{-9}$ bis 10^{-7} m/s. Dazu wird bemerkt, dass es sich um "nahe" Permeabilitäten handle, die im allgemeinen zu niedrige Schätzwerte ergäben. An Bohrkernen von Heimersdorf wurden Permeabilitäten von 0-2 mdarcy (max. $\approx 10^{-8}$ m/s) und Porositäten von 0-3 % gemessen, an Bohrkernen von Schweighouse 2 Porositäten von 2-9 % (WALGENWITZ et al. 1979, 21-22).

2.4.5.3 Faltenjura

Mit Pumpversuchen aus Bohrungen im Faltenjura der Kantone Neuenburg, Bern und Jura sind in Malm-Aquiferen Durchlässigkeiten von $K = 10^{-5}$ bis 10^{-7} m/s ermittelt worden (TRIPET 1973, 93; BURGER 1983, 537). Im Malm des Laufener Beckens ermittelte TRIPET (1984, 54; Motor Columbus 1981, 83) aus den in drei Bohrungen ausgeführten Pumpversuchen Durchlässigkeiten zwischen $K = 5 \times 10^{-9}$ m/s und $K = 1,6 \times 10^{-7}$ m/s. Die nutzbare Porosität wird für den Neuenburger Jura zu 0,2-0,4 % (Vallée de la Brévine; BURGER & PASQUIER 1984, 145), für das Laufener Becken zu 0,45 % angegeben (Motor Columbus 1981, 89).

Im Neuenburger Jura ergaben Injektionsversuche, dass die Durchlässigkeit der Malmkalke mit der Tiefe abnimmt, (MATHEY & SIMEONI 1971; TRIPET 1973, 93), wobei statistisch bis zu einer gewissen Tiefe die Abnahme nach einer Exponentialfunktion zu beobachten ist (SIMEONI 1976, 12-15;

BURGER 1983, 538; BURGER & PASQUIER 1984, 145-149). Die nach der Exponentialfunktion für die Tiefe Null extrapolierten Werte betragen für die Bohrung Martel Dernier (Vallée de la Sagne) $K = 5,7 \times 10^{-6}$ m/s, für die Bohrung Les Eplatures (Vallée du Locle) $K = 3,9 \times 10^{-6}$ m/s und für die Bohrung Vallée de la Brévine (Mittel 3 Bohrungen) $K = 2,6 \times 10^{-6}$ m/s. Für die tieferen Partien, wo wegen der Streuungen kein Trend mehr zu erkennen ist, wird ein Mittelwert angegeben. Er beträgt in Martel Dernier ungefähr $K = 0,7 \times 10^{-6}$ m/s (ab ca. 125 m bis > 300 m), in Les Eplatures ungefähr $K = 0,29 \times 10^{-6}$ m/s (ab ca. 145 m bis > 300 m) und für die Vallée de la Brévine $K = 1,4 \times 10^{-6}$ m/s (ab ca. 290 m bis > 400 m).

Pumpversuche und Injektionsversuche geben in der Regel Permeabilitätswerte der wenig durchlässigen Blöcke, welche nach dem Schema der "Doppelten Porosität" durch hoch durchlässige Kluft- und Karstsysteme getrennt und entwässert werden. TRIPET, der aus Pumpversuchen Durchlässigkeiten von $K = 0,8$ bis $5,3 \times 10^{-7}$ m/s ermittelt hatte (TRIPET 1973, 93), musste eine Durchlässigkeit in der Grössenordnung $K = 10^{-3}$ m/s annehmen, um das Fließsystem im Einzugsgebiet der Areuse-Quelle mit einem elektrischen Analogiemodell korrekt modellieren zu können (TRIPET 1973, 142). Gebirgsdurchlässigkeiten von $K = 10^{-3}$ bis 10^{-4} m/s müssen im Malm des ganzen Neuenburger Juras angenommen werden (KIRALY 1973, 5).

Aus dem Wasserzufluss in einem Stollen am Nordrand des Delsberger Beckens wurde die Gebirgsdurchlässigkeit der Malm-Kalke zu $K = 1-6 \times 10^{-4}$ m/s geschätzt, wobei angenommen wird, dass dies für die Ost-West-Richtung gilt und infolge Anisotropie ein Maximum von vermutlich $K = 10^{-3}$ m/s in der Nord-Süd-Richtung auftritt (FLURY et al. 1983, 518, 521).

Im Malm des Laufener Beckens wird der "Durchlässigkeit des Gesteinskörpers ausserhalb des unterirdischen Hauptdrainagenetzes" von $K = 0,1-2 \times 10^{-7}$ m/s eine sich aus Markierungsversuchen ergebende "Durchlässigkeit des Hauptdrainagenetzes (gut entwickeltes Karstsystem!) von $K = 0,01-1$ m/s gegenübergestellt und die "scheinbare Durchlässigkeit im km-Bereich (z.B. im Bereich eines Einzugsgebietes)" zu $K = 2 \times 10^{-6}$ bis 1×10^{-3} m/s geschätzt (Motor Columbus 1981, 89).

Der Vergleich der in Bohrungen ermittelten punktuellen und lokalen Permeabilitäten mit den sich aus regionalen Studien zwingend ergebenden Gebirgsdurchlässigkeiten zeigt, dass die mittlere Durchlässigkeit mit dem Volumen des betrachteten Gesteinskörpers zunimmt. Dieser Massstabs-effekt im Karst (KIRALY 1973, 6-9; KIRALY 1975, 59; KIRALY 1978; BURGER 1983, 537-538) ist auf das wenig dichte und nur ein relativ kleines Volumen aufweisende, aber hoch durchlässige, zusammenhängende Netz von Karsthohlräumen zurückzuführen, welches die ein viel grösseres Volumen einnehmenden, sich über Hektometer und Kilometer ausdehnenden Blöcke voneinander trennt und entwässert.

2.4.5.4 Zusammenfassende Betrachtung

Zusammenfassend haben die Gebirgsdurchlässigkeiten der Malmkalkserien im Jura und im Seichten Karst der Schwäbischen Alb sowie in angrenzenden Zonen des Tiefen Karstes die gleichen Grössenordnungen, in der Regel $K = 10^{-3}$ bis 10^{-4} m/s. Im Zentralbereich des Tiefen Karstes, unter dem Molassebecken, nimmt die Gebirgsdurchlässigkeit auf Grössenordnung von $K = 10^{-5}$ bis 10^{-7} m/s ab.

In südlichen Teilen des Molassebeckens, vor allem im Bereich des helvetischen Malms, wird die Durchlässigkeit noch geringer.

KIMMEIER et al. (1985, Tab. 4-1 u. 4-2) nahmen im mathematischen Modell der unterirdischen Fliessysteme zwischen Alpen und Schwarzwald für die Malmkalkserien eine Permeabilität von $K = 10^{-5}$ m/s an. Die gleiche Annahme ist im Regionalmodell 1987 der Nagra getroffen worden (NAGRA 1988, 90). Für die liegenden Malm-Mergel nahmen KIMMEIER et al. (1985) aber Varianten zwischen $K = 10^{-8}$ und $K = 10^{-10}$ m/s an. Im Lokalmodell USM 1988 der Nagra wurde im "schwäbischen" Faziesbereich (verkarstete Kalke) eine Durchlässigkeit von $K = 10^{-5}$ m/s angenommen, im "helvetischen" Faziesbereich eine solche von $K = 10^{-8}$ m/s (NAGRA 1988, 299). Die Annahme eines besondern "Oxford"-Bereichs in der Umgebung der Bohrung Küsnacht mit $K = 10^{-10}$ m/s beruht wohl auf einer irrtümlichen Interpretation, da es sich auch dort um Kalke handelt und nur die stratigraphische Interpretation diskutabel ist (vgl. Kapitel 2.3.6; TRÜMPY 1961, 11-12).

2.5 Hydraulische Potentiale und Fliessysteme

2.5.1 Potentialverteilung in der westlichen Schwäbischen Alb und im Bodenseegebiet

Für das Gebiet der Schwäbischen Alb und des süddeutschen Alpenvorlandes haben K. LEMCKE und E. VILLINGER mit Hilfe der Wasserstände in Bohrungen und der Austrittshöhen von Karstquellen Karten der Linien gleichen Potentials des Malmkarstgrundwassers gezeichnet und wiederholt aufgrund neuer Erkenntnisse revidiert (LEMCKE 1976, 11; VILLINGER 1977, Tafel 1; LEMCKE 1979a, 242; LEMCKE 1979b, 313; VILLINGER 1982, Abb. 5; BERTLEFF et al. 1985, Abb. 2; BERTLEFF 1984, 1986, Abb. 13; VILLINGER 1986, 348: Abb. 9; LEMCKE 1987, 43: Abb. 5; LEMCKE 1988, Abb. 58 und BERTLEFF et al. 1988, Abb. 9).

Im Norden wird der Verlauf der Potentiallinien dadurch bestimmt, dass die Donau von oberhalb Immendingen bis unterhalb Fridingen in den Malmkarst versickert. Die Linien verlaufen im wesentlichen parallel zum Donautal, und das Gefälle weist von der Donau weg gegen Süden. Der Hauptaustritt des durch die Donauversickerung gespeisten Karstwassers erfolgt über die Aachquelle (Aachtopf) im Hegau. Anderes Wasser entspringt in kleineren Quellen oder tritt im Hegau in quartäre Schotter über, durch die es lokal unter Druck zur Oberfläche aufstösst, zum Beispiel in der Bleichequelle von Welschingen. In deren Nähe erschloss der Brunnen Welschingen ein artesisches Grundwasser, dass im Nagra-Regionalprogramm untersucht worden ist.

Ebenfalls ein aus dem Karst-Aquifer stammendes, aber hier durch eine wenig mächtige und wahrscheinlich tektonisch gestörte Decke von Unterer Süsswassermolasse aufsteigendes Wasser ist östlich Singen bei Beuren an der Aach in quartären Schottern erschlossen worden (Fig. 8) und ist im Nagra-Regionalprogramm enthalten (SCHMASSMANN et al. 1984, 142-146). Nach den Karten der Potentialverteilung fliesst jedoch ein Teil des Karstwassers unter dem Aachtopf und den Tälern des Hegaus hindurch und dem Potentialgefälle folgend in die Schweiz ab (VILLINGER 1977, 46-47). In dieses regionale Fliessystem ist die Thermalwasserbohrung Singen niedergebracht worden (Nagra-Regionalprogramm: SCHMASSMANN et al. 1984, 117). Von der Donau unterhalb der Ver-

sickerungsstellen bei Fridingen (HÖTZL 1973, 57: Fig. 20) aus verläuft die unterirdische Wasserscheide (Karstwasserscheide) Donau/Rhein in östlicher Richtung durch das Molassebecken zum Alpenrand, nach neueren Erkenntnissen (BERTLEFF 1984, 1986, 53: Abb. 13; BERTLEFF et al. 1988, 57: Abb. 9; Fig. 7) südlicher als früher angenommen. Südlich der Karstwasserscheide besteht ein Potentialgefälle in Richtung Bodensee. Die frühere Annahme von VILLINGER (1977, 44), dass sich die Druckhöhe des gespannten Karstwassers an den Seespiegel von im Mittel 395 m.ü.M. anschliessen lässt, ist inzwischen durch die Revision von Druckspiegeldaten von Erdölbohrungen widerlegt (VILLINGER 1988, 57: Abb. 9; NAGRA 1988, 242: Fig. 6.5). In der heute verlandeten nordwestlichen Verlängerung des Ueberlinger Sees bei der Mündung der Stockacher Aach ist nämlich von Bohrungen bekannt, dass die pleistozäne Erosion rund 150 m unter dem heutigen Seespiegel wahrscheinlich die Malmkalke erreicht hatte. In einer Bohrung sind zwischen dem Malm und den quartären sandig-tonigen Seesedimenten nur 2 m USM-Süsswasserkalk angetroffen worden (SCHREINER 1969; VILLINGER 1977, 44-45). Weiter südöstlich kann aber keine hydraulische Verbindung zwischen Karstaquifer und Bodensee bestehen, da die Malmoberfläche stark abfällt; bei Dingelsdorf liegt sie bereits mehr als 900 m unter dem Niveau des Seespiegels.

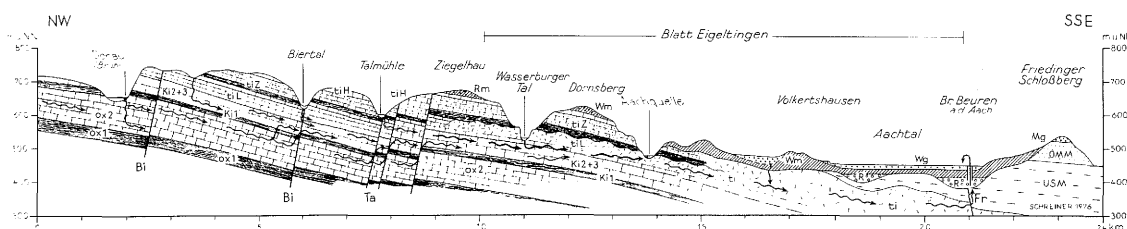


Fig. 8: Geologisches Profil Donau-Aachquelle-Beuren mit vermutlichen Wegen des Karstwassers (SCHREINER 1978, Beilage 3)

Die freien Grundwasseroberflächen der Quartär- und Molasse-Aquifere liegen nördlich des Bodensees zumeist weit über der Druckfläche des Karstwassers. Lediglich gebietsweise ist die Geländeoberfläche tiefer als das potentiometrische Karstwasserniveau (VILLINGER 1977, 79), so dass, wie im Hegau (Welschingen, Beuren, Singen), Wasser artesisch aus Bohrungen über das Geländeniveau aufstösst. Artesisch ist

auch das auf der Insel Mainau aus der 237-446 m tief erbohrten OMM, auf 400 m ü.M., rund 5 m über dem Niveau des Bodenseespiegels, ausfliessende Tiefengrundwasser. Ueber die Potentialverteilung in den tiefen Molasseaquifern geben die Karten von VILLINGER (In: BERTLEFF et al. 1988, 51: Abb. 6) und der NAGRA (1988, Beilage 4.5, Fig. A und B) Auskunft. Nach den Karten von VILLINGER sind die vermuteten Potentiallinien nördlich des Bodensees in der oberen Meeresmolasse zumeist höher als die des Malmaquifers, und die unterirdische Wasserscheide liegt in der oberen Meeresmolasse weiter nördlich als im Malmaquifer. Im westlichen Bodenseegebiet und südlich des Bodensees fallen dagegen die Potentiale in den Molasseschichten unter die des Malmaquifers.

2.5.2 Potentialverteilung längs des Hochrheins

Die Potentialverteilung im Karstaquifer des Hegau-Bodensee-Gebietes weist darauf hin, dass Hochrhein und Aare die Vorfluter dieses Karstwassers bilden (Fig. 9). LEMCKE und VILLINGER nehmen an, dass die Entwässerung dorthin erfolgt, wo die Flüsse die Malmkalke durchqueren, nämlich ins Hochrheintal zwischen Hohentengen und Mellikon (VILLINGER 1977, 55; LEMCKE 1979a, 240) und nur untergeordnet ins Rheinfallbecken (LEMCKE 1979a) sowie ins Aaretal unterhalb Brugg (VILLINGER 1977, 56).

Der Wasserspiegel des Rheins liegt auf der Malmkalkstrecke vom Rheinfall bis Dachsen um 359 m ü.M. (Staustufe Rheinau), auf der Strecke Hohentengen-Mellikon um 332 m ü.M. (Staustufe Rekingen). Auf der dazwischenliegenden Strecke Dachsen-Hohentengen besteht die Rheinsohle oder die Sohle der pleistozänen Ablagerungen des Rheintals aus USM.

In der rechtsufrig etwa 800 m vom Rhein entfernt niedergebrachten Thermalwasserbohrung Lottstetten-Nack, wo sich die Malm-USM-Grenze 92 m unter Rheinspiegel findet, liegt die Druckhöhe des gespannten Malm-Tiefengrundwassers auf 410 m ü.M. oder 66 m über dem Rheinspiegel (344 m ü.M.). Hier zeichnet sich ein Potentialgefälle von Norden oder Nordwesten aus Richtung des Klettgauer Tafeljuras ab. In der nahe dem rechten Rheinufer abgeteufte Bohrung Eglisau 1 hatte man bis 225 m USM, tiefer Bohnerzformation und dann bis 241 m Malmkalk angetroffen. Aus der Bohrung floss über

dem Niveau des damals noch ungestauten Rheins (um 336 m ü.M.) ein Tiefengrundwasser artesisch aus. Der Druckspiegel des Tiefengrundwassers liegt vermutlich auf etwa 342 m ü.M. (MEYER VON KNONAU 1844, 158; CADISCH 1937, 52; SCHMASSMANN et al. 1984, 126). In der linksufrig niedergebrachten und beim Abteufen der USM- und Malm-Tiefengrundwasser erschliessenden Bohrung Eglisau 2 liegt die Malm-Obergrenze in 236 m Tiefe oder rund 200 m unter dem Niveau des gestauten Rheins (345,5 m ü.M.). Bei Schöpfversuchen im Malm aus 260-415 m Tiefe stieg das Wasser stets wieder auf das Niveau von etwa 341 m ü.M. an (CADISCH 1959, 6; SCHMASSMANN et al. 1984, 126). Die Bohrungen Eglisau 4 und Eglisau 3 erschlossen nur die USM. Die höchsten Wasserstände liegen auf ca. 343-344 m ü.M. (SCHMASSMANN et al. 1984, 126). In der USM stellt sich das hydraulische Potential somit ungefähr auf das Niveau des benachbarten Rheins (Staustufe Eglisau) ein. In den liegenden Malmkalken ist es mit 342-341 m ü.M. wahrscheinlich wenig tiefer (Bohrungen Eglisau 1 und 2).

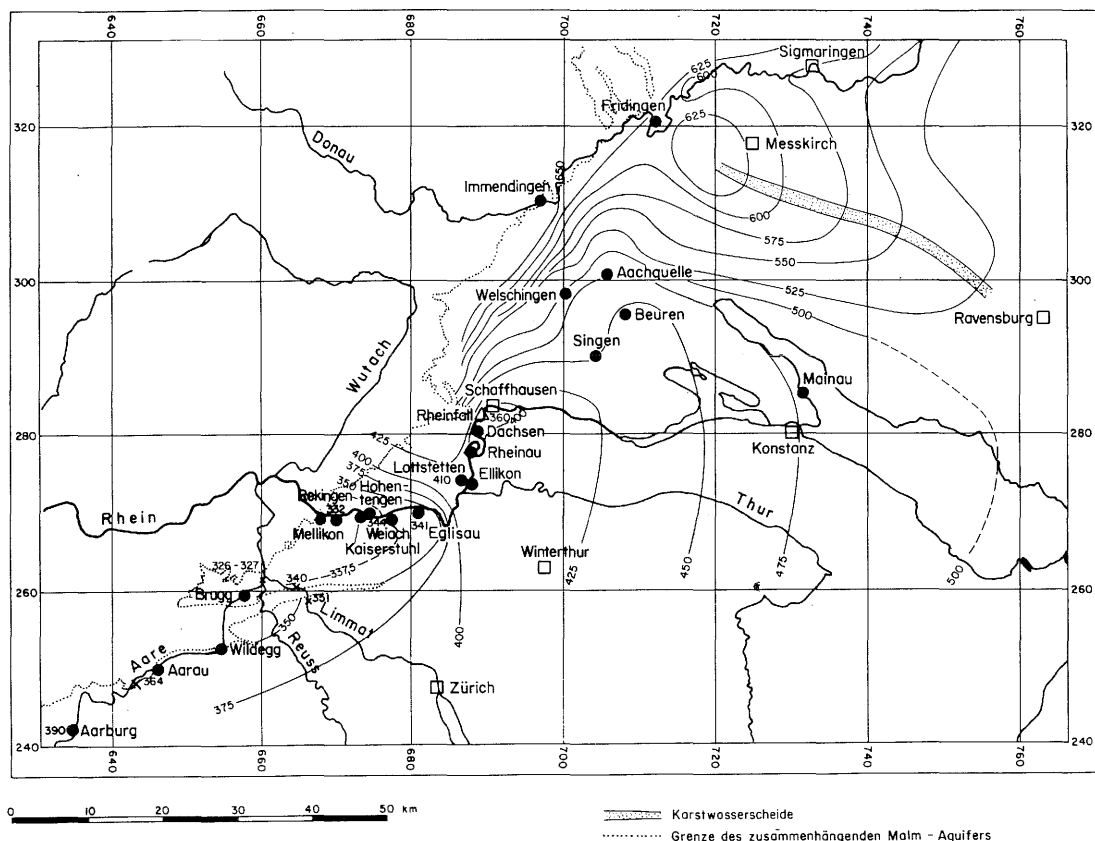


Fig. 9: Gemessene Potentialverteilung im Malm (modifiziert nach BERTLEFF et al. 1988, Abb. 9)

Rund 4 km rheintalabwärts wurde in den Malmkalken der Bohrung Weiach aber noch ein Potential von 344 m gemessen (NAGRA 1985b, Fig. 3-13). Weitere 1,5 km rheintalabwärts beginnt der rund 7 km lange Abschnitt, auf welchem die Rheinsohle oder die Quartärbasis aus den Malmkalken besteht und der gestaute Wasserspiegel des Rheins (Staustufe Rekingen) auf ungefähr 332 m ü.M. liegt. Im Vergleich zu Lottstetten haben sich die Potentiale von Eglisau und Weiach diesem Niveau angenähert. Die Linien gleicher Potentiale scheinen aber zwischen Eglisau und Weiach ungefähr rheinparallel zu verlaufen, ohne ein geradewegs gegen den Malmkalk-Abschnitt des Rheintals gerichtetes Potential-Gefälle (Fig. 9).

Das Unterwasser der Staustufe Rekingen auf etwa 323 m ü.M. liegt bereits unterhalb des Malmkalk-Ausbisses in der liegenden Aquiclude der Effinger Schichten. Etwa 18,5 km westsüdwestlich Weiach ist aber das Aaretal zwischen der Reussmündung und etwas unterhalb der Limmatmündung mit seiner pleistozänen Rinne in die Malmkalke eingeschnitten (HALDIMANN et al. 1984, Beil. 1), wobei der Aarewasserspiegel Koten um 326-327 m ü.M. einnimmt, so dass hier für das aus dem Untergrund des Bodensee- und Hochrheingebietes abfliessende Karstwasser ein anderer Vorfluter möglich ist. Die bisherigen Daten der Potentialverteilung sprechen dafür, dass die Aare am ehesten die regionale Karstwasservorflut sein könnte. Das Rheinfallbecken würde in der vor dem Umbiegen zur Aare längs Untersee und Hochrhein generell gegen Süden abfallenden Druckfläche des Karstwassers kaum mehr als eine kleine Depression erzeugen.

Eine neue Darstellung der Potentialverteilung im Malm, aus welcher die Depressionen des Rheinfallbeckens und des Aarelaufes unterhalb von Weiach hervorgehen, findet sich in NAGRA 1988 (Fig. 6.5; Beilage 4.5 C). Südlich des Rheintales ist die dargestellte Potentialverteilung durch die Annahme stark beeinflusst, dass die sogenannte Würenlos- (richtig Würenlingen-) Quelle, die effektiv zu einem oberflächennahen Karstsystem gehört mit den Tiefengrundwässern hydraulisch zusammenhängt. Ferner besteht in der gleichen Darstellung zwischen den Malmaquiferen nördlich und südlich der Lägeren-Antiklinale zwar eine unterirdische Wasserscheide, aber auch eine hydraulische Verbindung, die wegen des undurchlässigen Kerns der Lägeren-Antiklinale

nicht der Realität entsprechen kann. Nach unserer Auffassung verlaufen die Aequipotentiallinien im Prinzip wie in Figur 9 gezeichnet.

Auf der Hochrheinstrecke Rheinfall-Rekingen liess die Nagra eine Pilotstudie über die Nachweisbarkeit von subaquatischen Tiefenwasseraustritten aus den Tertiär- und Malm-Aquiferen mittels Chlorid-Bestimmungen ausführen. Dazu war das Flusswasser 13 mal in 8 Rheinquerprofilen beprobt worden. Unterhalb des Rheinfalls liessen sich dabei zwischen Dachsen-Nohl und dem Kraftwerk Rheinau keine Zuflüsse chloridreicher Tiefengrundwässer nachweisen. Dagegen nehmen die Chlorid-Konzentrationen zwischen dem Kraftwerk Rheinau und Ellikon signifikant zu. Die Grösse dieser Zunahme kann weder mit anthropogenen Einflüssen noch mit Austritten oberflächennaher Schottergrundwässer erklärt werden. Dies lässt darauf schliessen, dass chloridreiches Tiefengrundwasser entweder aus Molasseaquiferen ausströmt oder aus dem gespannten Malm-Aquifer durch die Molasse hindurch aufstösst. Erklärbar ist die Zunahme der Chlorid-Fracht um 12 t/d, wenn grössenordnungsmässig etwa 50 l/s Tiefengrundwasser des Typs Weiach-Eglisau oder eventuell 1-2 m³/s Tiefengrundwasser des Typs Lottstetten-Singen subaquatisch in den Rhein austreten. Unterhalb Ellikon manifestieren sich die mit den Nebenflüssen eingetragenen anthropogenen Chlorid-Frachten im Rhein zu stark, um mit den bisherigen Untersuchungen allfällige Zuflüsse chloridreicher Tiefengrundwässer sicher nachweisen oder sicher ausschliessen zu können. Die Resultate weisen aber darauf hin, dass so grosse Zuflüsse chloridreicher Tiefengrundwässer wie zwischen Rheinau und Ellikon eher unwahrscheinlich sind, insbesondere auf der den Malmkalk-Abchnitt enthaltenden Strecke Kaiserstuhl-Rekingen.

2.5.3 Potentiale im Molassebecken südwestlich vom Bodensee und Hochrhein

Aus dem Molassebecken südwestlich vom Bodensee und Hochrhein liegen sichere Potential-Daten der Tiefengrundwässer nur von den Molasse-Aquiferen vor. Die Potentialverteilung im Malm ist unbekannt. Vorfluter des Malm-Aquifers dürften die Reuss, möglicherweise auch die höher liegende Limmat, beim Durchbruch des Malm-Südschenkels der Lägern-Antiklinale, das zwischen Aarau und Wildegg bis in Malmkalke

eingeschnittene Aaretal und die Aare beim Durchbruch des Malm-Südschenkels der Born-Antiklinale sein. Aber die unter dem eigentlichen Karstaquifer in 118 m Tiefe erbohrte Jodquelle von Wildegg ist das einzige bekannte Indiz für einen Aufstieg von Tiefengrundwässern in dem aus dem Molassebecken zur Südflanke des Faltenjuras aufsteigenden Malm.

Die in Tiefbohrungen bisher gemessenen Potentiale von Molasse-Aquiferen liegen durchwegs unter Gelände. Das heisst, dass es unter den südwestlich von Untersee und Hochrhein erbohrten Tiefengrundwässern der Molasse keine Arteser gibt.

In den beiden in Zürich den Aquifer der OMM erschliessenden Bohrungen Aqui und Tiefenbrunnen liegt das Druckniveau auf 397 m und damit 9 m tiefer als der Zürichsee (SCHMASSMANN et al. 1984, 127). Die Limmat unterhalb Zürich dürfte den Vorfluter dieses Vorkommens bilden.

In der USM von Schafisheim ist in der Bohrung (Packertest) ein Potential von 370 m ü.M. gemessen worden (NAGRA 1985b, Fig. 3.13). Die Bohrung liegt praktisch auf der Verbindungslinie zwischen dem Unterwasser des Kraftwerks Bremgarten in der Reuss und dem Unterwasser des Wehres Wöschnau in der Aare oberhalb Aarau, welche beide ebenfalls ungefähr das Niveau 370 m einnehmen. Die näheren kleinen Gewässer liegen höher. In der USM wird das Potential somit durch die regionalen Vorfluter Reuss und Aare bestimmt. Das Potentialgefälle ist gegen die Aare bei Wildegg, das heisst gegen den Nordrand des Molassebeckens gerichtet.

Im Gebiet Pfaffnau-Süd finden sich die höchsten gemessenen Potentiale auf 511 m (Pfaffnau Süd 4) und 507 m (Pfaffnau Süd 2). Hier schliessen die Potentiale an die Wasserstände der nahen lokalen Gewässer, der Wigger und der Luthern im Ostsüdosten und der Rot im Westen an. Gegen Norden erfolgt eine Annäherung an den regionalen Vorfluter Aare. Das höchste in der Bohrung Pfaffnau 1 gemessene Potential von 423 m liegt bereits um Dekameterbeträge tiefer als die Wigger im Osten und die Rot im Westen. Auch ergibt sich in den tiefen USM-Aquiferen ein generell gegen den Nordrand des Molassebeckens gerichtetes Potentialgefälle.

3. HYDROCHEMISCHE DATEN

3.1 Herkunft der Wasseranalysen (Fig. 10)

3.1.1 Hydrochemisches Regionalprogramm der Nagra

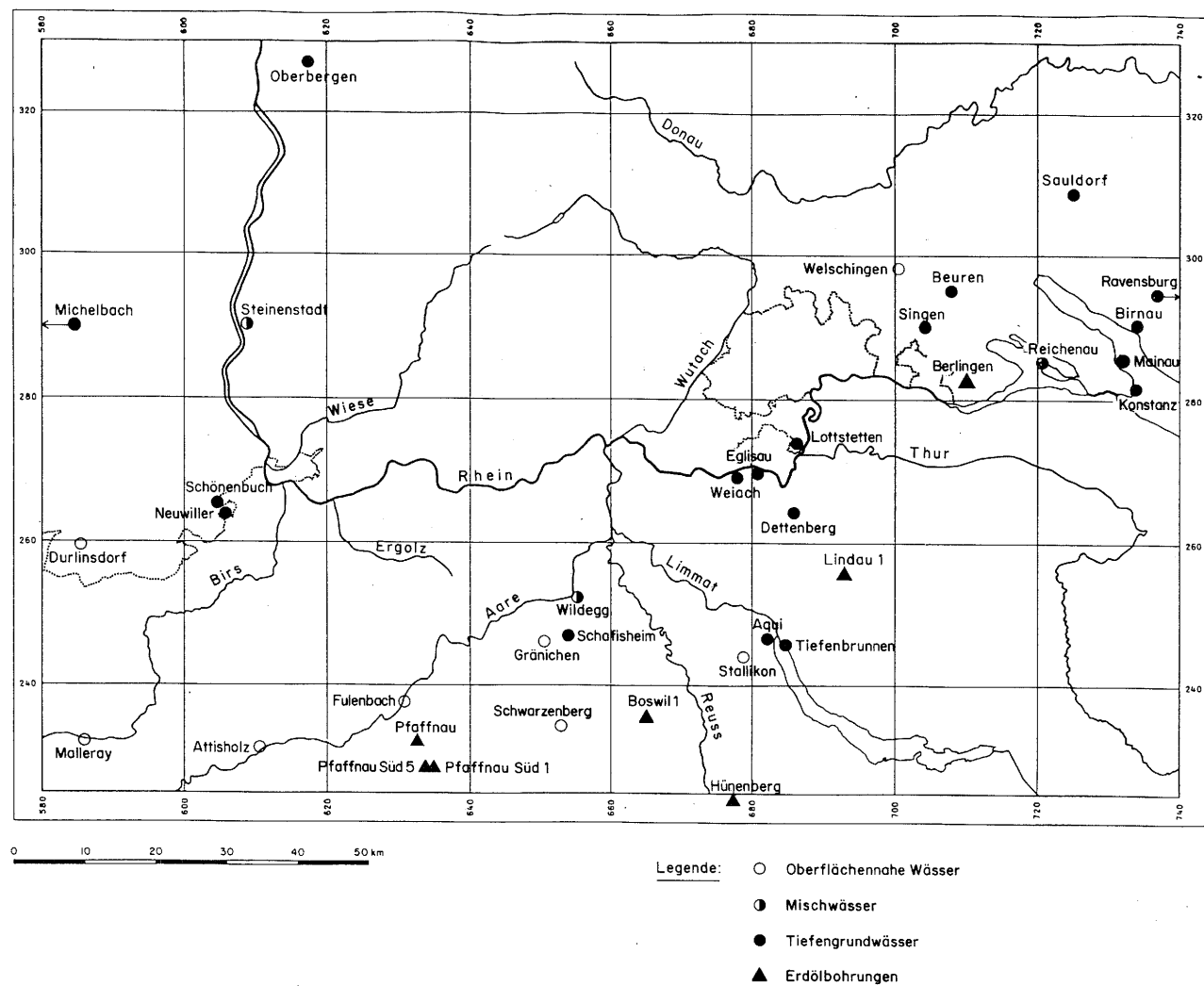
3.1.1.1 Tiefengrundwässer

Im Rahmen des hydrochemischen Regionalprogramms (SCHMASS-MANN et al. 1984) untersuchte die Nagra mit ausführlichen Analysen (Typen D und C inklusive Isotope ^2H , ^{18}O , ^3H) insgesamt 15 Tiefengrundwässer ($^3\text{H} < 20$ TU) aus Tertiär- und Malm-Aquiferen (inkl. 1 Dogger-Aquifer): Konstanz, Mainau, Beuren, Singen, Lottstetten, Eglisau 1-4, Dettenbergtunnel, Zürich-Aqui, Zürich-Tiefenbrunnen, Schönenbuch, Neuwiller (Dogger-Aquifer, vgl. Kap. 3.2.2.2), Oberbergen. An diesen Stellen, mit Ausnahme von Eglisau 2-4 und Dettenbergtunnel, sind auch ^{13}C und ^{14}C bestimmt worden (in Beuren im Wasser aus einem anderen Brunnen), ausserdem ^{39}Ar bei Zürich-Aqui und Zürich-Tiefenbrunnen, Edelgase ebenfalls in Zürich-Aqui und Zürich-Tiefenbrunnen sowie in Oberbergen, ^{34}S und zum Teil auch ^{18}O in Sulfaten in Lottstetten, Eglisau 2-4 und Zürich-Aqui. Bei vier Stellen wurden im Rahmen des Ueberwachungsprogramms bedeutender Mineralquellen und Thermen von 1981 bis 1986 periodisch Proben zur chemischen Analyse erhoben: Lottstetten, Eglisau 2-4.

3.1.1.2 Oberflächennahe Grundwässer

Zum hydrochemischen Regionalprogramm mit ausführlichen Analysen (Typ D mit Isotopen ^2H , ^{18}O , ^3H) gehören sodann 8 oberflächennahe Grundwässer ($^3\text{H} > 20$ TU) aus Tertiär- und Malm-Aquiferen. Allerdings handelt es sich dabei nicht um gewöhnliche Grundwässer oder Quellen: denn die Auswahl dieser Wässer erfolgte nach Besonderheiten der Wasserbeschaffenheit oder des Vorkommens: Wegen erhöhten Temperaturen wurden die Wässer von Attisholz ($14,6^\circ\text{C}$), von Durlinsdorf ($16,2^\circ\text{C}$) und, zugleich wegen erhöhter Mineralisation ($1,6$ g/l), von Steinenstadt (Markgräfler Mineralquelle, $15,0^\circ\text{C}$) ausgewählt. Die Mineralquelle von Schwarzenberg (40 Bq/l) weist im Zusammenhang mit Molasse-

Fig. 10: Lage der Probenentnahmestellen mit Legende
(Oberflächennahe, Misch- und Tiefengrundwässer)



kohlen, die Quelle von Fülenbach (47 Bq/l) im Zusammenhang mit Oelsanden erhöhte Radon-Aktivitäten (> 30 Bq/l) auf. Solche waren auch von einer nicht mehr zugänglichen Quelle in Gränichen bekannt, konnten dann aber in der benachbarten beprobten Quelle nicht nachgewiesen werden. In Welschingen und in Malleray sind artesische Grundwässer des Tiefen Karsts entnommen worden.

Zu den oberflächennahen Grundwässern, obwohl eine geringe Beimischung von Tiefengrundwasser enthaltend, sind auch die aus dem Schacht der ehemaligen Jodquelle Wildegg entnommenen Proben zu zählen, weil es nämlich nicht gelungen war, hier das früher genutzte Jodwasser wieder zu fördern.

Teiluntersuchungen sind schliesslich an zwei in der Nähe von Kohlevorkommen entspringenden Molasse-Quellen in Stalikon ausgeführt worden, weil von einer Quelle eine verhältnismässig hohe Uran-Konzentration (71,8 ppb : $301 \mu\text{mol/m}^3$) bekannt war.

Abgesehen von den bei allen ausführlichen chemischen Untersuchungen bestimmten drei Isotopen beschränken sich die Isotopen-Untersuchungen in oberflächennahen Grundwässern auf ^{34}S -und zum Teil ^{18}O -Bestimmungen von Sulfaten in Schwarzenberg, Durlinsdorf und Wildegg.

3.1.2 Tiefbohrprogramm der Nagra

In der Bohrung Weiach sind 5 Proben (301/5-9) im Malm-Aquifer bei 242.9-267.0 m, in der Bohrung Schafisheim 2 Proben (304/1-2) im USM-Aquifer bei 553.0-563.0 m erhoben worden (WITTWER 1986). Für beide Tiefengrundwässer sind "Consistent Data Sets" durch Intera erstellt worden (PEARSON et al. 1989, 39-40, 60-61).

3.1.3 Erdölbohrungen

Aus Erdölbohrungen liegen chemische Untersuchungen von USM-Wässern mit einem ungefähr dem Nagra-Analysentyp B entsprechenden Umfang von verschiedenen Tiefen der Bohrungen Berlingen 1 (3 Proben aus 2 Tiefen), Boswil 1 (5 Proben aus 5 Tiefen), Hünenberg 1 (1 Probe), Lindau 1 (1 Probe), Pfaffnau 1 (3 Proben aus 1 Tiefe), Pfaffnau Süd 1 (6 Proben aus 6 Tiefen), Pfaffnau Süd 4 (1 Probe) und Pfaffnau Süd 5

(8 Proben aus 8 Tiefen) vor, ferner die Untersuchung eines Malm-Wassers der Bohrung Berlingen 1. Natriumchlorid-Daten dieser Bohrungen sind bereits früher veröffentlicht worden (LEMCKE et al. 1968, 32: Fig. 8; RYBACH et al. 1981, 38: Beil. 22).

3.1.4 Süddeutsches Molassebecken

Umfangreiche Datensätze über Grundwässer aus Tertiär- und Malm-Aquiferen des West-Teils des süddeutschen Molassebeckens sind von BERTLEFF (1984, 1986) veröffentlicht worden. Die chemischen Analysen umfassen ausser Wassertemperatur, pH und Trockenrückstand ("Feststoffinhalt") nur die Hauptbestandteile (Ionen) und freies Kohlendioxid. Viele Daten liegen über die Isotope ^{18}O , ^2H , ^3H , ^{13}C und ^{14}C sowie über Edelgase vor. Drei Probeentnahmestellen des Regionalprogramms der Nagra sind auch in BERTLEFF's Datensätzen enthalten: Konstanz, Mainau, Singen. In unserem durch die Karstwasserscheide Rhein/Donau begrenzten Untersuchungsgebiet liegen ferner die Probeentnahmestellen von drei OMM-Grundwässern in Sauldorf, in Birnau (Uhldingen) und in Ravensburg sowie eines in Quartär-Ablagerungen gefassten Mischwassers auf der Insel Reichenau. Die Daten der drei im Nagra-Programm enthaltenen und die vier erwähnten zusätzlichen Probeentnahmestellen BERTLEFF's sind in den Tabellen 1-7 berücksichtigt und mit "B" bezeichnet. Für die allgemeinen Erkenntnisse sind indessen auch die Daten aus dem übrigen Untersuchungsgebiet BERTLEFF's von Bedeutung.

Im süddeutschen Molassebecken und dabei auch an den südlich der unterirdischen Wasserscheide Rhein/Donau von der Nagra und von BERTLEFF beprobten Stellen (ausser Sauldorf) wurden weitere isotopenhydrologische Untersuchungen im Rahmen eines geothermischen Forschungsprojektes ausgeführt (STICHLER et al. 1987; WEISE et al. 1989). Diese Daten sind im folgenden nicht mehr berücksichtigt.

3.1.5 Fremde Analysen

Von 13 Probeentnahmestellen des Nagra-Regionalprogramms gibt es auch fremde, zumeist frühere Analysen (ohne BERTLEFF), die vergleichsweise herangezogen werden können, nämlich von den Tiefengrundwässern Konstanz (1978), Beuren

(Isotope 1969), Singen (1966-1969), Lottstetten (1968-1983), Eglisau 1 (1918-1968), Eglisau 2 (1970), Zürich-Aqui (1973-1985), Zürich-Tiefenbrunnen (1980-1981), Schönenbuch (1972-1973), Neuwiller (1969-1979) und Oberbergen (1966) sowie von den oberflächennahen Grundwässern Schwarzenberg (1867-1983) und Attisholz (1916).

Beim Abteufen der Mineralwasserbohrung Eglisau 2 waren 1956 fünf Proben aus verschiedenen Tiefen erhoben und analysiert worden (GÜBELI 1959), wohingegen das im Ueberwachungsprogramm der Nagra untersuchte Wasser aus der ganzen erschlossenen und offen belassenen Strecke stammt.

Von der ehemaligen Jodquelle Wildegg sind nur frühere Analysen (1867-1869) verfügbar, weil bei den neueren Probeentnahmen mit den vorhandenen Einrichtungen nur ein oberflächennahes Grundwasser, wahrscheinlich mit geringen Tiefengrundwasserbeimischungen, genommen werden konnte (letzte Analyse von Löwig 1869 in HARTMANN, 1925, 38-39).

Ausschliesslich durch fremde Analysen sind sodann die Tiefengrundwässer aus dem Malm und aus dem Dogger der Bohrung Michelbach im Oberrheingraben (Analysen des Laboratoire d'Hydrologie Strasbourg nach Mitteilung des BRGM Strasbourg) und das Wasser belegt, das nahe der im Nagra-Regionalprogramm enthaltenen Badquelle Oberbergen aus den mit einer Tiefbohrung erschlossenen tertiären Vulkaniten des Kaiserstuhls gefördert worden war (Geologisches Landesamt Baden-Württemberg 1970 in GROSCHOPF et al. 1977, 274-275). Ferner liegen Analysen (Institut Bachema) von zwei Probeentnahmestellen aus der Oberen Süsswassermolasse des Milchbucktunnels in Zürich vor. Die fremden Analysen dieser fünf Wässer, die nicht im Nagra Regionalprogramm enthalten sind, wurden in den Tabellen 1-7 ebenfalls berücksichtigt.

3.1.6 Qualität der Analysen

Der Vergleich der Kationen- und Anionensummen (Tab. 2 und 9) ergibt bezüglich der Ionen eine Qualitätskontrolle. Der Vergleich zeigt bei den Analysen der Nagra-Programme und den Erdölbohrungen im allgemeinen eine gute Uebereinstimmung, was nicht bei allen Fremden Analysen der Fall ist.

3.2 Stratigraphische und räumliche Verteilung der Wasserproben

3.2.1 Molassebecken (mit angrenzenden Gebieten)

Die überwiegende Zahl von Probeentnahmestellen liegt im Molassebecken und in den mit ihm zusammenhängenden Malm-Vorkommen (Fig. 10).

Die Obere Süßwassermolasse (OSM) ist nur durch die oberflächennahen Grundwässer von Schwarzenberg und, mit Teilanalysen ohne Isotope, von Stallikon vertreten, ferner durch zwei Tiefengrundwässer aus dem Milchbucktunnel.

Aus der Oberen Meeresmolasse (OMM) stammen die Tiefengrundwässer von Konstanz, Mainau, Dettenbergtunnel, Aquil und Tiefenbrunnen. Durch fremde Analysen (BERTLEFF 1984, 1986) sind in unserem Untersuchungsgebiet ferner Wässer in Sauldorf, Uhldingen (Birnu) und Ravensburg belegt.

Der Unteren Süßwassermolasse (USM) des Molassebeckens entspringen die Quellen mit oberflächennahen Grundwässern in Gränichen (Grenzbereich gegen OMM), Füllenbach und Attisholz. Proben von Tiefengrundwässern der USM sind von der Nagra aus den Bohrungen Eglisau 1-4 (in Eglisau 1 und 2 mit Malm) und Schafisheim, von der Erdölindustrie aus den Bohrungen Berlingen 1, Boswil 1, Hünenberg 1, Lindau 1, Pfaffnu 1 und Pfaffnu Süd 1, 4 und 5 untersucht worden.

Aus Malm-Aquiferen des Molassebeckens und der an ihn direkt angrenzenden Gebiete stammen in den Nagra-Programmen das oberflächennahe Grundwasser von Welschingen und die Tiefengrundwässer von Beuren, Singen, Lottstetten und Weiach. In den Wässern Eglisau 1 und 2 stammt wahrscheinlich zumindest ein Teil des geförderten Wassers aus dem Malm-Aquifer. An Analysen der Erdölindustrie liegt aus dem Malm nur von der Bohrung Berlingen 1 die Untersuchung eines noch deutlich mit Spülung vermischten und im folgenden nicht mehr in Betracht gezogenen Wassers vor.

3.2.2 Probenentnahmestellen ausserhalb des Molassebeckens

Aus Malm-Aquiferen des Faltenjuras stammen im Nagra-Regionalprogramm die oberflächennahen Grundwässer ($^3\text{H} > 20 \text{ TU}$)

von Malleray und von Durlinsdorf.

Aus dem Oberrhein graben stammen die im Nagra-Regionalprogramm enthaltene Badquelle Oberbergen und das mit einer benachbarten Bohrung erschlossene, durch eine fremde Analyse belegte Tiefengrundwasser aus den Vulkaniten des Kaiserstuhls.

In der Unteren Süsswassermolasse (USM) des Oberrhein grabens ist das im Nagra-Regionalprogramm untersuchte Tiefengrundwasser von Schönenbuch erbohrt.

Ueberraschenderweise war ein in Steinenstadt (Markgräfler Mineralquelle) in eozenen Melanienkalken des Oberrhein grabens mit einer 200 m tiefen Bohrung erschlossenes und ins Nagra-Regionalprogramm aufgenommenes Grundwasser nach seinem Tritium-Gehalt als oberflächennah zu klassieren.

Aus einem in 742-840 m Tiefe durchfahrenen Malm-Aquifer ("Rauracien") des Oberrhein grabens stammt eines der zwei mit fremden Analysen vertretenen Tiefengrundwässer von Michelbach (ein anderes wurde im Hauptrogenstein angetroffen). Schliesslich wird das in eine Störungszone im Hauptrogenstein (Dogger) des Oberrhein grabens angetroffene und im Nagra-Regionalprogramm untersuchte Tiefengrundwasser von Neuwiller zusammen mit den Wässern der Tertiär- und Malm-Aquifere betrachtet, weil seine chemische und isotopische Beschaffenheit eine analoge Geschichte wie die eines der Tiefengrundwasser-Typen von Tertiär- und Malm-aquifere des Molassebeckens wahrscheinlich macht. Zum Vergleich wird eine fremde Analyse eines mit der Bohrung Michelbach ebenfalls im Hauptrogenstein des Oberrhein grabens erbohrten Tiefengrundwassers beigezogen.

4. RÄUMLICHE VERTEILUNG VON AUSGEWÄHLTEN WASSER- INHALTSSTOFFEN UND -EIGENSCHAFTEN UND DEREN GEGEN- SEITIGE BEZIEHUNGEN

Tiefengrundwässer und oberflächennahe Grundwässer

Bei der Besprechung der untersuchten Wässer wird zwischen Tiefengrundwässern und oberflächennahen Grundwässern unterschieden. Das massgebende Unterscheidungsmerkmal ist die

unterirdische Verweilzeit, für welche die Tritium-Aktivität als Anhaltspunkt dient, wie dies auch ZÖTL (1978, zit. GOLDBRUNNER 1988) und GOLDBRUNNER (1988, 7-9) postuliert haben. Der in Tiefengrundwässern fehlende Sauerstoff ist nach ZÖTL und nach GOLDBRUNNER ein weiteres Beurteilungskriterium. Da Tiefengrundwässer aufsteigen und an der Erdoberfläche als Quellen austreten können, ist dagegen die Tiefe der Probenentnahme kein Unterscheidungsmerkmal.

Während ZÖTL und GOLDBRUNNER nur Wässer mit einer Tritium-Aktivität von weniger als 1 TU den Tiefengrundwässern zuzuordnen, wird bei der Besprechung der Wässer in der vorliegenden Synthese ein oberer Grenzwert von 20 TU angenommen. Damit werden Mischungen erheblicher Anteile von tritiumfreien Wässern mit zumeist untergeordneten Anteilen von jungen, tritiumhaltigen Wässern zusammen mit den betreffenden Tiefengrundwässern betrachtet, was vor allem bei der hydrochemischen Synthese anderer Aquifere zweckmässig sein wird (z.B. Thermen von Baden). Im Falle der Grundwässer aus Tertiär- und Malm-Aquiferen handelt es sich nur um die Proben von Beuren, Sauldorf und Oberbergen. Alle anderen als Tiefengrundwässer besprochenen Wässer haben, soweit gemessen, Tritium-Aktivitäten von höchstens 1 TU.

4.1 Dissoziierte Hauptbestandteile (Typisierende Bestandteile)

4.1.1 Wassertypen (Fig. 11)

4.1.1.1 Oberflächennahe Grundwässer

Die im Nagra-Regionalprogramm 1981/82 untersuchten Wässer mit $^3\text{H} > 20$ TU werden den oberflächennahen Grundwässern zugeordnet (vgl. 4.8.1). Solche Grundwässer aus Tertiär- und Malm-Aquiferen gehören nach ihrem Gehalt an dissoziierten Hauptbestandteilen (≥ 20 Äquivalent-%) in der Regel zum Typ der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Wässer mit je mehr als 50 Äquivalent-% Calcium und Hydrogenkarbonat und unterschiedlichen Magnesium-Anteilen (Ca-HCO₃-Wässer und Ca-Mg-HCO₃-Wässer = Typengruppe I nach SCHMASSMANN et al. 1984, 81).

Sonderfälle oberflächennaher Grundwässer aus Tertiär- und Malm-Aquifere sind die Wässer von Steinenstadt (Markgräfler Mineralquelle) und Wildegg. Das Wasser von Steinenstadt wird vermutlich durch eine lokale Lösung von eozänen Evaporiten des Oberrheingrabens zu einem Na-Ca-(Mg)-SO₄-HCO₃-Cl-Wasser (Typengruppe VI), das Wasser von Wildegg durch eine geringe Beimischung eines Tiefengrundwassers, des ursprünglich genutzten "Jodwassers", zu einem Ca-Na-(Mg)-HCO₃-(Cl)-(SO₄)-Wasser (Typengruppe II).

Vorwiegend durch Zufluss aus dem Tertiär-Aquifer entsteht das im Quartär-Aquifer der Insel Reichenau gefasste Na-Mg-HCO₃-SO₄- bis Na-Ca-HCO₃-SO₄-Wasser (Daten nach BERTLEFF 1984, 1986).

4.1.1.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Wie die meisten oberflächennahen Grundwässer gehören unter den Tiefengrundwässern (³H ≤ 20 TU) die OMM-Wässer von Sauldorf und des Dettenbergtunnels im Molassebecken, das USM-Wasser von Schönenbuch im Oberrheingraben, die Vulkanit-Wässer der Badquelle und der Tiefbohrung von Oberbergen im Kaiserstuhl sowie das Malm-Wasser von Beuren zu den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Wässern (Typengruppe I), wobei das Wasser von Schönenbuch mehr als 50 Äquivalent-% Magnesium enthält (Mg-Ca-HCO₃-Wasser), während in den anderen vier Wässern Calcium vorherrscht (Ca-Mg-HCO₃-Wasser).

4.1.1.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Für eine zweite Gruppe von Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere (inklusive Dogger-Aquifere des Oberrheingrabens) ist bezeichnend, dass sie mindestens 50 Äquivalent-% Natrium (ausser dem Wasser des Dogger-Aquifers von Michelbach mit effektiv mindestens 80 %) und mindestens 20 Äquivalent-% Hydrogenkarbonat (effektiv mindestens 30 %) enthalten. Sie werden in den folgenden Kapiteln kurz als Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer zusammengefasst, obwohl einige von ihnen auch Sulfat und/oder Chlorid mit namengebenden Anteilen von mindestens 20 % enthalten.

In den OSM-Wässern des Milchbucktunnels, in den OMM-Wässern von Konstanz, Birnau und Ravensburg sowie im Malm-Wasser von Lottstetten kommt kein anderes Anion als Hydrogenkarbonat mit mehr als mindestens 20 Äquivalent-% vor (Na-HCO₃-Wasser = Typengruppe IV).

Im OMM-Wasser von Mainau und in den Dogger-Wässern des Oberrheingrabens überwiegt Hydrogenkarbonat ebenfalls (> 50 %), doch kommen in Mainau und in Michelbach (Dogger) mehr als 20 % Sulfat hinzu (Na-HCO₃-SO₄-Wasser = Typengruppe IV), in Neuwiller mehr als 20 % Chlorid (Na-HCO₃-Cl-Wasser = Typengruppe IV).

Bei gleichen absoluten Konzentrationen der Hydrogenkarbonat- und Karbonat-Ionen wie in anderen Wässern sinkt der Anteil dieser Ionen unter 50 %, wenn andere Anionen verstärkt in Lösung gegangen sind. Dies ist beim OMM-Wasser Aquis (Na-HCO₃-Cl-SO₄-Wasser = Typengruppe VI) und beim Malm-Wasser Singen (Na-SO₄-HCO₃-Wasser = Typengruppe VI) der Fall.

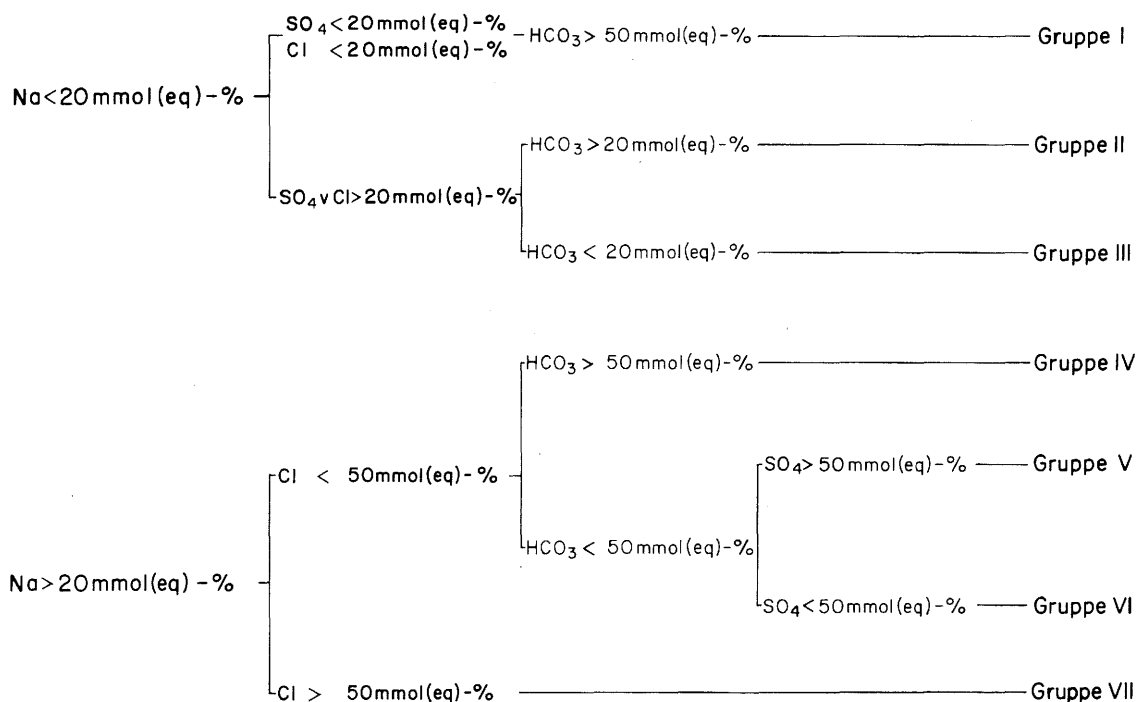


Fig. 11: Schlüssel zur Gruppeneinteilung für chemische Wassertypen nach Hauptbestandteilen (aus SCHMASSMANN et al., 1984, 80)

4.1.1.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Eine dritte Gruppe von Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere umfasst solche, die mindestens 50 Äquivalent-% Natrium und Chlorid enthalten und somit zur Typengruppe VII (nach SCHMASSMANN et al. 1984) zählen. Sie werden in den folgenden Kapiteln kurz als Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer bezeichnet, obwohl unter ihnen das OMM-Wasser Tiefenbrunnen und das USM (-?Malm)-Wasser Eglisau 1 auch Sulfat mit namengebenden Anteilen von mindestens 20 % enthalten (Na-Cl-SO₄-Wässer). In den USM-Wässern Eglisau 2-4 und Schafisheim sowie im Malm-Wasser Weiach kommen dagegen keine anderen Anionen als Chlorid mit mindestens 20 Äquivalent-%, effektiv sogar keine anderen mit mindestens 10 %, vor (Na-Cl-Wässer).

Wässer mit mindestens je 50 % Natrium und Chlorid überwiegen auch in den USM-Aquifern der Erdölbohrungen. Dabei gibt es alle Uebergänge von Na-Cl-Wässern zu Na-Cl-SO₄- und Na-Cl-HCO₃-Wässern. Aus den Bohrungen Pfaffnau Süd 1 und Pfaffnau Süd 2 gibt es jedoch auch Wässer mit weniger als 50 % Chlorid (Na-Cl-SO₄-HCO₃- und Na-Cl-SO₄-Wässer der Typengruppe VI) und sogar solche, in denen Chlorid gegenüber mehr als 50 % Sulfat zurücktritt (Na-SO₄-Cl-Wässer der Typengruppe V).

Zu den durch fremde Analysen belegten Wässern mit überwiegendem Natrium und mit mehr Sulfat als Chlorid gehört ferner das Wasser des Malm-Aquifers von Michelbach im Ober-rheingraben (Na-SO₄-Cl-Wasser der Typengruppe VI).

4.1.2 Faktorenanalyse (Fig. 12)

P. Wexsteen und M. Kullin

4.1.2.1 Einleitung

Um eine umfassende Analyse der umfangreichen hydrochemischen Daten zu erhalten, wurde ein multivariates statistischen Verfahren eingesetzt, nämlich die Faktorenanalyse. Dieses Verfahren erlaubt durch die simultane Berücksichtigung aller Variablen sowie ihrer gegenseitigen zufälligen

Abhängigkeiten eine optimale Ausschöpfung der im Zahlenmaterial enthaltenen Informationen. Sie ermöglicht durch die mehrdimensionale Betrachtungsweise Gruppierungen herauszuarbeiten und deren genetische Zusammenhänge zu erfassen. Gerade in diesem Punkt ist sie der ebenfalls häufig verwendeten Clusteranalyse überlegen. Diese statistische Methode wurde bereits mit Erfolg in der Hydrochemie angewandt (z.B. HÖTZL, H. 1975; MUDRY et al., 1979; WEXSTEEN 1986).

4.1.2.2 Methode und Daten

Auf eine ausführliche Darstellung des komplexen Rechenganges wird hier verzichtet, da die Faktorenanalyse in der Geo- und Hydrochemie bereits hinlänglich bekannt ist. Es muss aber betont werden, dass die Faktorenanalyse eine statistische Methode ist, die Hypothesen hervorbringen kann. Der Sinn dieser Aussagen muss jedoch in jedem einzelnen Fall abgeklärt werden. Der Ausgangspunkt der Faktorenanalyse ist die Korrelationsmatrix, welche die Abhängigkeiten der einzelnen Variablen untereinander aufzeigt. Dar- aus werden mit Hilfe eines Computerprogrammes sogenannte Hauptkomponenten oder Faktoren mit abnehmender Gewichtung berechnet, d.h. die Vielzahl von Daten wird auf gemeinsame Abhängigkeitskomplexe reduziert. Jeder so berechnete Faktor ist eine lineare Kombination der gemessenen Variablen. Dadurch wird deutlich, durch welche Variablen ein Faktor hauptsächlich bestimmt ist. Eine graphische Darstellung aller Variablen und Beobachtungen erhält man durch die Projektion der Punkte in eine Ebene, wobei die Ebenen jeweils durch zwei Faktoren (X- und Y-Achse) bestimmt sind.

Für die Faktorenanalyse dieser Studie wurden insgesamt 57 Analysen berücksichtigt, nämlich 36 aus den Nagraprogrammen und der Publikation von BERTLEFF (1984, 1986) (Tab. 1-7) und 21 von Erdölbohrungen (Tab. 8-10). Zu jeder Analyse gehören die folgenden acht Parameter: Na, K, Mg, Ca, Cl, SO_4 , m (totale Alkalinität) und pH. Die Kalkulationen wurden mit Hilfe des PC-SAS Programms am Geologischen Institut der Universität Bern durchgeführt.

Die Faktorenanalyse wurde erst in einem fortgeschrittenen Stadium der hydrogeochemischen Auswertungen eingesetzt, als die Einteilung der Wässer in die oben erwähnten Wassertypengruppen bereits feststand. Diese Einteilung konnte mit

der Faktorenanalyse der Hauptelemente nun auch mathematisch bestätigt werden und wird deshalb im folgenden Kapitel kurz diskutiert.

Neben der oben erwähnten Variante der Faktorenanalyse wurden noch weitere Varianten durchgerechnet, die neben den Hauptbestandteilen auch noch die Nebenbestandteile sowie die gelösten Gase mitberücksichtigten. Leider führten diese "aufgestockten" Varianten der Faktorenanalyse zu keiner weiteren Unterteilung der Wassertypengruppen, weshalb sie hier nicht näher diskutiert werden.

4.1.2.3 Resultate und Interpretationen

Die gegenseitige Abhängigkeit der Variablen wird durch die Korrelationsmatrix dargestellt (Tabelle 11a). Aus dieser Korrelationsmatrix wurden insgesamt sechs Faktoren berechnet, deren abnehmende Varianzen aus der Tabelle 11b ersichtlich sind. Aus dieser Tabelle sieht man, dass die ersten drei Faktoren 82 % der gesamten Varianz ausmachen. Für alle weiteren Betrachtungen wurden deshalb nur noch die ersten drei Faktoren berücksichtigt. Die Tabelle 11c gibt über die Faktorenladung Auskunft, d.h. über die Beziehung zwischen den Faktoren und den Variablen. Zum Beispiel wird der Faktor 1 hauptsächlich durch die Variablen Na, Cl und K bestimmt, in etwas untergeordnetem Masse auch durch die Variablen Ca und SO_4 . Der pH-Wert, das Mg und die Alkalinität m haben kaum einen Einfluss auf diesen Faktor (Tab. 11d). Sowohl hohe positive (0,5-1) wie auch stark negative (-0,5 bis -1) Faktorenladungen haben einen bestimmenden Einfluss auf den jeweiligen Faktor. Die in der Tabelle 11d präsentierte Klassifikation der Faktorenladungen ist allerdings subjektiv und soll nicht wörtlich genommen werden.

Die graphischen Projektionen der Variablen und der Beobachtungen (Proben) auf verschiedene Faktorenebenen sind in Figur 12 dargestellt. Figur 12a zeigt die Faktorenebene, die durch den Faktor 1 (F1) und 2 (F2) bestimmt ist, die Ebene in Figur 11b ist durch F1 und F3 und die Ebene in Figur 11c ist durch F2 und F3 bestimmt. In der auf der linken Seite dargestellten Ebene sieht man jeweils die Projektionen der Variablen, in der auf der rechten Seite dargestellten Ebene die Projektion der Beobachtungen auf die entsprechenden Faktorenebenen.

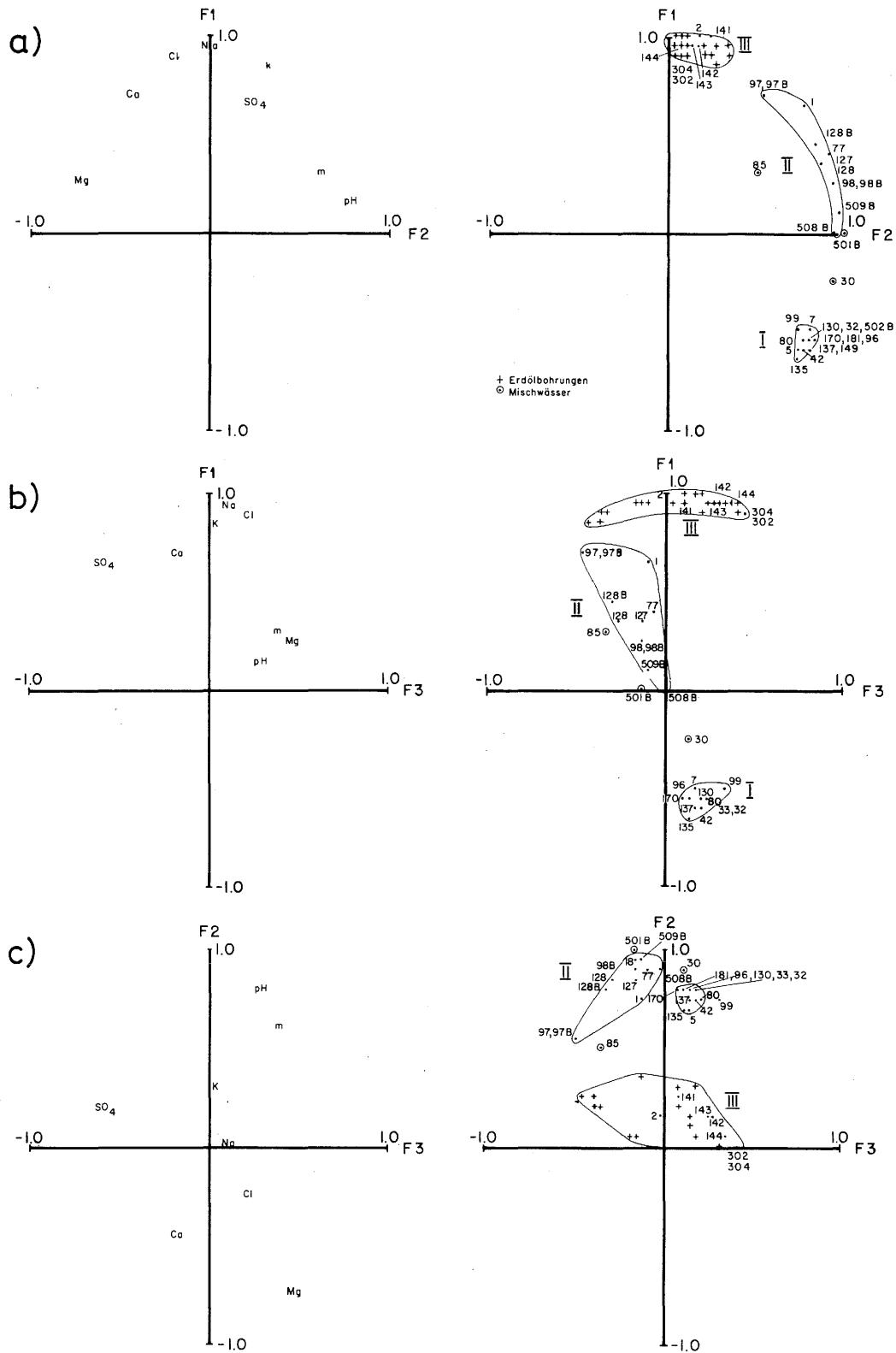


Fig. 12: Projektionen der Variablen und Proben auf verschiedene Faktorenebenen

Von den drei in Figur 12 dargestellten Ebenen hat die Faktorenebene (F1, F2) die grösste Signifikanz. Dies ist auch dadurch ersichtlich, dass alle Variablen- resp. Beobachtungspunkte stark peripher angeordnet sind.

In der Figur 12a sieht man, dass der Faktor 1 durch die Kombination der Elemente Na, Cl, K, Ca, und SO_4 bestimmt ist. Der Faktor 2 ist positiv durch den pH und durch die Alkalinität m und negativ durch das Mg bestimmt. Aufgrund der von den Variablen abhängigen Faktorenachsen können drei Hauptgruppen bei den Proben erkannt werden:

- Gruppe I: zeichnet sich durch den Einfluss beider Faktoren aus, wobei der Faktor 1 mit einer negativen Faktorenladung zu Buche schlägt, d.h. durch die geringe Konzentration der den Faktor 1 positiv bestimmenden Ionen (Na, Cl, K). Im Gegensatz zur Gruppe II ist jedoch der Einfluss der beiden Faktoren bei allen Proben etwa der gleiche, was in der eng begrenzten Punktwolke zum Ausdruck kommt.
- Gruppe II: zeichnet sich ebenfalls durch den Einfluss beider Faktoren aus, wobei deren Einfluss bei den einzelnen Proben unterschiedlich verteilt ist. Dies führt zu der in die Länge gezogenen Punktwolke.
- Gruppe III: wird deutlich durch den Faktor 1 bestimmt, der sich hauptsächlich durch positive Faktorenladungen von Na, Cl und K auszeichnet.

Die drei Gruppen sind auch in den anderen Faktorenebenen deutlich abgegrenzt. Die durch die Faktorenanalyse ermittelten drei hydrochemischen Gruppen entsprechen den Wassertypengruppen, wie sie im vorangegangenen Kapitel beschrieben wurden, mit der Ausnahme, dass die oberflächennahen Grundwässer mit den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern zusammenfallen. Da aber die oberflächennahen Grundwässer chemisch mit der Gruppe der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer identisch sind, entsprechen die durch die Faktorenanalyse ermittelten Gruppen den Wassertypengruppen. Die beiden obgenannten Wassertypengruppen (Tab. 1-7) wurden nur aufgrund ihrer isotopischen Zusammensetzung und nicht aufgrund ihrer chemischen Beschaffenheit getrennt. Die Gruppe II umfasst die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer und die Gruppe III die

Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer, zu denen auch ausnahmslos die Wässer der Erdölbohrungen gehören. Die beiden Proben Wildegg (30) und Steinenstadt (85) gehören zu keiner der mit der Faktorenanalyse ermittelten Gruppen und bestätigen damit den bereits bei der Wassertypisierung erkannten Mischwassercharakter dieser Proben. Die in den Tabellen ebenfalls als Mischwasser aufgeführte Probe Reichenau (501B) liegt am Rande der Punktwolke der Gruppe II, was mit der vermuteten Beimischung von Wasser der Gruppe I in Einklang steht.

Zusammenfassend könnte man sagen, dass die Projektion der Proben in die verschiedenen Faktorenebenen drei Gruppen erkennen lässt, die infolge hydrochemischer Evolution und Mischungsvorgänge ineinander übergehen dürften.

4.1.3 Natrium und Chlorid (Fig. 13)

4.1.3.1 Oberflächennahe Grundwässer

Oberflächennahe Grundwässer, die höchstens geringen anthropogenen Einflüssen unterworfen sind, enthalten weniger als $0,2 \text{ mol(eq)Na}^+/\text{m}^3$ und ebenfalls weniger als $0,2 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$. Aus Tertiär- und Malm-Aquiferen gehören dazu die im Nagra-Regionalprogramm untersuchten Wässer von Schwarzenberg, Stallikon (Q), Fulenbach, Malleray und Durlinsdorf. Höhere Konzentrationen sind wie folgt zu erklären:

- in Gränichen, Attisholz und vermutlich auch in Welschingen (vgl. SCHMASSMANN et al. 1984, 143) durch stärkere anthropogene Einflüsse oder,
- in den Wässern von Wildegg und Reichenau durch die Beimischung von Tiefengrundwässern oder,
- im Wasser des Eozän-Aquifers von Steinenstadt (Markgräfler Mineralquelle) durch eine lokale Lösung von Evaporiten (SCHMASSMANN et al. 1984, 112). Im Liegenden der in Steinenstadt den Aquifer bildenden Melanienkalke finden sich die Grünen Mergel, aus welchen in dieser Gegend neben Gips auch Steinsalz pseudomorphosen bekannt sind (SCHAD et al. 1955, 326, 327, 336).

Die molare Relation Na/Cl ist in den untersuchten Malm-Wässern generell < 1 , in den untersuchten Molasse-Wässern dagegen generell > 1 , was in diesen auf den Einfluss von Tonmineralien bei Verwitterungs- und Ionenaustausch-Reaktionen hinweist.

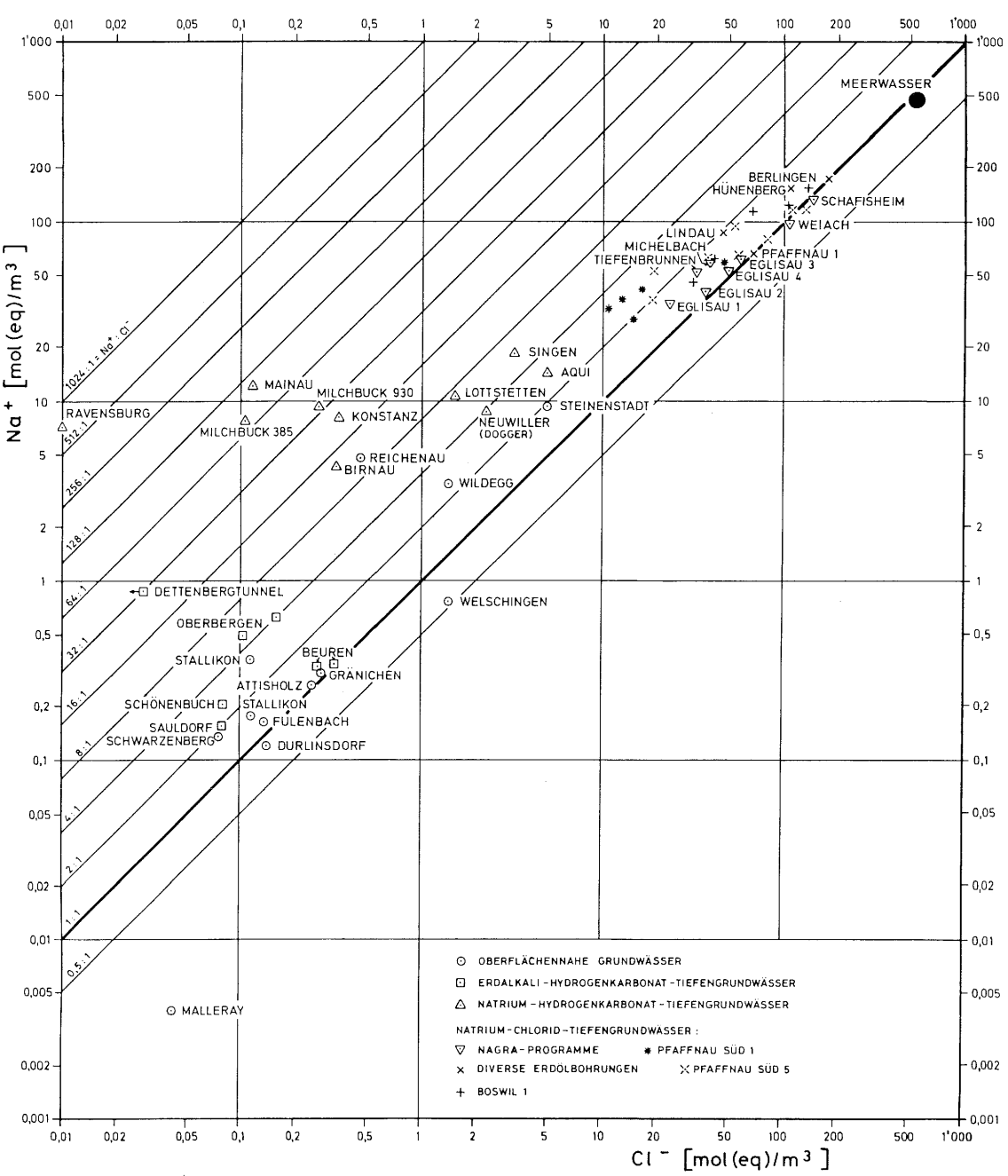


Fig. 13: Beziehung zwischen Natrium- und Chlorid-Konzentration

4.1.3.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer im Molassebecken

Unter den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere enthalten die von Sauldorf und Schönenbuch nur $0,1-0,2 \text{ mol(eq)Na}^+/\text{m}^3$ und weniger als $0,1 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$. Das heisst, dass sie keinen anthropogenen Einflüssen unterworfen sind und ein Kationen-Austausch mit Natrium-Beteiligung nur in geringem Masse stattfand.

Im Malm-Wasser von Beuren weisen die auf $0,34 \text{ mol(eq)Na}^+/\text{m}^3$ und $0,27 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ erhöhten Konzentrationen entweder auf anthropogene Einflüsse oder auf eine geringe Beimischung eines Natrium-Chlorid-Tiefengrundwassers hin.

Im Vulkanit-Grundwasser von Oberbergen verursachen Verwitterungs- oder Ionenaustausch-Reaktionen eine Erhöhung der Natrium-Konzentration auf rund $0,5-0,6 \text{ mol(eq)Na}^+/\text{m}^3$. Für diese chemische Evolution sind die niedrigen Chlorid-Konzentrationen von rund $0,1-0,2 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ und das molare Na/Cl-Verhältnis von 4-5 bezeichnend.

Im Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser des OMM-Aquifers des Dettenbergtunnels lässt die auf rund $0,9 \text{ mol(eq)Na}^+/\text{m}^3$ erhöhte Natrium-Konzentration bei einem molaren Na/Cl-Verhältnis von über 30 auf einen bereits beginnenden Ionenaustausch oder auf eine Beimischung von Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser des Typs Konstanz schliessen.

4.1.3.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer im Molassetrog

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der OMM des Bodenseeraums (Konstanz, Mainau, Birnau, Ravensburg) enthalten bei nur $0,1-0,4 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ Natrium-Konzentrationen von $4,3-12,3 \text{ mol(eq)Na}^+/\text{m}^3$, so dass hohe molare Verhältnisse $\text{Na/Cl} = 13-710$ vorkommen. Es handelt sich um die für einen Kationenaustausch typischen Wässer. Zu diesen gehören auch die OSM-Wässer des Milchbucktunnels mit nur $0,1-0,3 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ und $7,1-9,1 \text{ mol(eq)Na}^+/\text{m}^3$ und molaren Verhältnissen von $\text{Na/Cl} = 34-76$.

Die beiden Malm-Wässer des weiteren Bodenseeraums (Lottstetten, Singen) haben höhere Chlorid-Konzentrationen von $1,6 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ und $3,2 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ und damit niedrigere molare Verhältnisse von $\text{Na/Cl} = 5-7$, welche wie die Chlorid-Konzentration von $4,5 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ und das molare Verhältnis $\text{Na/Cl} = 3$ im OMM-Wasser Zürich-Aqui auf eine Beimischung von Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser hinweisen.

Die Hauptrogenstein(Dogger)-Tiefengrundwässer des Oberrheingrabens haben ebenfalls erhöhte Chlorid-Konzentrationen von $2,2-2,3 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ und verhältnismässig niedrigere molare Verhältnisse $\text{Na/Cl} = 4$.

4.1.3.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer im Molassebecken

Die in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere enthalten:

$$34-132 \text{ mol(eq)Na}^+/\text{m}^3 \text{ und } 23-147 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$$

In Analysen von USM-Wässern aus Erdölbohrungen beträgt der Variationsbereich:

$$28-174 \text{ mol(eq)Na}^+/\text{m}^3 \text{ und } 10-174 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$$

Ausschliesslich mit Chlorid-Bestimmungen sind in der tiefsten USM von Pfaffnau Süd 1 Konzentrationen bis $313 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ belegt (vgl. Diagramm in LEMCKE et al. 1968, 32: Fig. 8).

Die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere enthalten in der Regel mehr Natrium als Chlorid. Bei Konzentrationen $< 20 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ (4 Proben Pfaffnau Süd 1 und 2 Proben Pfaffnau Süd 5) kommen molare Verhältnisse $\text{Na/Cl} = 2-3$ vor, die auf eine erhebliche Beimischung von Austauschwässern (Na-HCO_3 bis Na-SO_4) oder erhebliche Kationenaustausch-Reaktionen im Aquifer hinweisen. In den meisten Natrium-Chlorid-Wässern ist $\text{Na/Cl} = 1-2$. Bei Chlorid-Konzentrationen $> 100 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$ kommen jedoch auch molare Verhältnisse $\text{Na/Cl} < 1$ vor:

	mol(eq)/Cl ⁻ /m ³	Na/Cl
Malm-Wasser Weiach	107	0,92
USM-Wasser Pfaffnau Süd 5 (905,0-906,75 m)	131	0,91
USM-Wasser Schafisheim	147	0,90
Malm-Wasser Wildegg (Analyse 1869)	207	0,80

4.1.3.5 Vertikale Verteilung der Natrium-Chlorid-Tiefen- grundwässer im Molassebecken

Von den Erdölbohrungen Pfaffnau Süd 2 und 4 ist bekannt, dass innerhalb der USM die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer bis in Tiefen von 600-700 m oder bis 250-300 m unter die OMM-Basis von chloridarmen Grundwässern überlagert werden (LEMCKE et al., 1968, 32: Fig. 8; RYBACH et al., 1981, Beil. 22). Wahrscheinlich handelt es sich bei diesen "Süßwässern" (LEMCKE) um Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer, was aber durch keine Analyse belegt ist.

In den Bohrungen Pfaffnau Süd 1, 2 und 4 kommen noch bis in Tiefen zwischen 700 und 800 m oder etwa 300-400 m unter die OMM-Basis Wässer mit weniger als 35 mol(eq)Cl⁻/m³ entsprechend etwa 2,0 g NaCl/l vor. In Tiefen von 690-726 m gibt es auch in der Bohrung Pfaffnau Süd 5 Wässer mit nur 18-20 mol(eq)Cl⁻/m³, hier allerdings zwischen chloridreichen Wässern im Hangenden und im Liegenden. Eingehendere Analysen der Wässer aus 598 m bis etwa 670 m der Bohrung Pfaffnau Süd 1 und von zwei Proben aus 690-726 m der Bohrung Pfaffnau Süd 5 zeigen, dass die Natrium-Konzentration zwei bis dreimal grösser ist als die Chlorid-Konzentration, und dass es sich in diesen Tiefen um Wässer handelt, in denen zwar Natrium überwiegt, die aber weniger als 50 % Chlorid, dagegen durchwegs mehr als 20 %, zum Teil mehr als 50 % Sulfat und mehr als 10 % Hydrogenkarbonat und Karbonat enthalten (Na-Cl-SO₄-HCO₃⁻ bis Na-SO₄-Cl-Wässer).

Erst ab etwa 670 m Tiefe in Bohrung Pfaffnau Süd 1 und ab etwa 760 m Tiefe in Bohrung Pfaffnau Süd 5 kommen nur noch Wässer mit Chlorid als überwiegendem Anion vor. In den

tiefsten Proben schliesslich gibt es kein anderes Anion als Chlorid mit einem mehr als 10 %-igen Anteil und erst in diesen Wässern wird die rund 70-130 mol(eq)/m³ erreichende Chlorid-Konzentration gleich gross oder sogar grösser als die Natrium-Konzentration. Dies ist der gleiche Typ, der in der Bohrung Pfaffnau 1 schon in 446-453 m Tiefe und in der Nagra-Bohrung Schafisheim schon in 553-563 m Tiefe wie im Gebiet von Pfaffnau Süd in stratigraphisch tiefen Schichten der USM angetroffen wurde. Ferner wurde der gleiche Wassertyp auch in der noch geringeren Tiefe von 243-267 m und sogar 66-90 m unter der USM-Basis im Malm der Nagra-Bohrung Weiach festgestellt. Zu diesen Wässern gehört auch das ursprüngliche Jod-Wasser von Wildegg, das bei 118 m Tiefe aus dem Malm in das Bohrloch eintrat und rund 167 mol(eq)Na⁺/m³ und 207 mol(eq)Cl⁻/m³ enthielt.

In den stratigraphisch tiefsten Lagen der USM, 118-123 m über der Basis, aber mit 1350-1355 m in einer grösseren Tiefe als im Gebiet Pfaffnau Süd 1 fand sich auch in der Bohrung Berlingen ein stark konzentriertes Natrium-Chlorid-Wasser mit je etwa 174 mol(eq)/m³ Natrium und Chlorid. Wie bereits erwähnt kann die Natrium-Chlorid-Konzentration in den tiefsten Schichten der USM noch höher, nämlich bis auf 313 mol/m³ ansteigen, was nicht mit vollständigen Analysen, aber doch durch Chloridbestimmungen aus der Bohrung Pfaffnau Süd 1 in Tiefen von 1129-1170 m oder 28-69 m über der USM-Basis belegt ist. (Zum Vergleich Ozean-Wasser mit 470 mol Na⁺/t und 537 mol Cl⁻/t aus Massen-Konzentrationen nach TUREKIAN 1969, 310).

Zusammenfassend sind die Wässer, die wie das Meerwasser mehr Chlorid als Natrium enthalten oder mindestens ungefähr gleich viel Chlorid- wie Natrium-Aequivalente aufweisen, auf die untersten 60 % der USM und auf den Malm beschränkt. In diesem Bereich kommen allerdings auch Wässer mit deutlich mehr Natrium- als Chlorid-Aequivalenten vor, so in der Regel immer, wenn die Konzentration < 106 mol(eq)Cl⁻/m³ ist.

Die Maxima der Natrium- und Chlorid-Konzentrationen innerhalb der USM kommen nicht überall an deren Basis vor. In der Bohrung Boswil nehmen die Konzentrationen zu, um dann wieder auf niedere Werte zu fallen:

Tiefe	Lage unter OMM-Basis	Lage über USM-Basis	mol(eq) Na ⁺ /m ³	mol(eq) Cl ⁻ /m ³
835- 837	26- 28	986-988	63	41
947- 949	138-140	872-874	126	104
1096-1098	287-289	725-727	161	135
1262-1264	453-455	557-559	116	69
1721-1723	912-914	100-102	48	31

Bei Annahme eines säkularen Absinkens der Natrium-Chlorid-Wässer könnte dies bedeuten, dass die Front der Maximal-Konzentration erst bis zu einer Tiefe um 1100-1200 m vorgestossen ist. In Bohrung Pfaffnau Süd 1 fällt die Chlorid-Konzentration über der USM-Basis wie folgt:

Tiefe	Lage über USM-Basis	mol(eq) Cl ⁻ /m ³
1129-1139	70-60	313
1168-1170	30-28	238

Die gemessenen Chlorid-Maxima liegen in Pfaffnau Süd 1 und in Boswil in verschiedenen stratigraphischen Niveaus, aber ungefähr in gleicher Tiefe und auf gleicher absoluter Höhe, worauf schon LEMCKE et al. (1968, 32) hingewiesen haben. Sie finden sich in Pfaffnau Süd (313 mol(eq)Cl⁻/m³) 1129-1139 m tief auf einer mittleren Kote von -518 m und in Boswil (135 mol(eq)Cl⁻/m³) 1096-1098 m tief auf einer mittleren Kote von -549 m.

4.1.3.6 Tiefengrundwässer im Oberrheingraben

Im Oberrheingraben ist im Nagra-Regionalprogramm das Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser des Hauptrogenstein(Dogger)-Aquifers von Neuwiller näher untersucht worden. Im Hauptrogenstein von Michelbach ergeben die Hauptbestandteils-Analysen eine ähnliche Wasserbeschaffenheit. Durch eine Aquiclude vom Hauptrogenstein-Aquifer getrennt kommt dort im höheren Stockwerk des Malm-Aquifers

ein viel stärker mineralisiertes Tiefengrundwasser vor, das eine 8,5 mal grössere Natrium- und eine 18 mal grössere Chlorid-Konzentration als das Hauptrogenstein-Wasser aufweist. Nach anderen Parametern, z.B. dem höheren Wert des Verhältnisses $\text{Ca}+\text{Mg}/\text{Cl}$, unterscheidet sich dieses Wasser aber von allen Natrium-Chlorid-Wässern der Tertiär- und Malm-Aquifere des Molassebeckens. Im südlichen Oberrheingraben hat das Natrium-Chlorid-Wasser des Malm-Aquifers jedenfalls eine andere Genese als im Molassebecken, wobei in erster Linie an einen Einfluss des brackisch-lagunären Paläogens zu denken ist.

4.1.4 Summe von Calcium und Magnesium und deren Verhältnis zum Chlorid (Fig. 14)

4.1.4.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den untersuchten oberflächennahen Grundwässern der nord-schweizerischen Tertiär- und Malm-Aquifere beträgt der Schwankungsbereich der Calcium- und Magnesiumsumme, mit einer Ausnahme, $3,0-8,25 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$. Nur das im Oberrheingraben durch Evaporite beeinflusste Wasser von Steinenstadt hat eine höhere Konzentration. Die Konzentrationen der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer liegen im Schwankungsbereich der oberflächennahen Grundwässer.

4.1.4.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der OMM-Aquifere von Konstanz, Mainau, Birnau, Ravensburg und Zürich-Aqui finden wir als Folge des Kationenaustausches extrem niedere Calcium- und Magnesium-Aequivalente, nämlich nur $0,1-0,5 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$. In diesen Wässern ist der $\text{pH} \geq 8,5$. Das durch Zuflüsse solcher Wässer gespeiste, aber in Quartär-Ablagerungen gefasste Wasser der Insel Reichenau hat mit einem tieferen pH (7,9) auch eine höhere Summe der beiden Erdalkali-Aequivalente ($2,7 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$). Niedere Calcium- und Magnesium-Aequivalente von zusammen $0,4-0,6 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$, aber einen pH -Wert um 8,2 zeigen die OSM-Wässer des Milchbucktunnels.

Mehr Calcium- und Magnesium-Aequivalente ($1,3-1,6 \text{ mol(eq)/m}^3$) und niedrigere pH-Werte ($\leq 8,2$) als in den Molasse-Aquiferen haben die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer in den Malm-Aquiferen von Singen und Lottstetten sowie im Dogger-Aquifer von Neuwiller (In Singen nach einer Analyse in BERTLEFF 1984, 1986, sogar bis $2,0 \text{ mol(eq)/m}^3$). Im Natrium-Hydrogenkarbonat-Grundwasser des Dogger-Aquifers von Michelbach steigt die Summe der beiden Erdalkali-Aequivalente bis auf $3,3 \text{ mol(eq)/m}^3$ an.

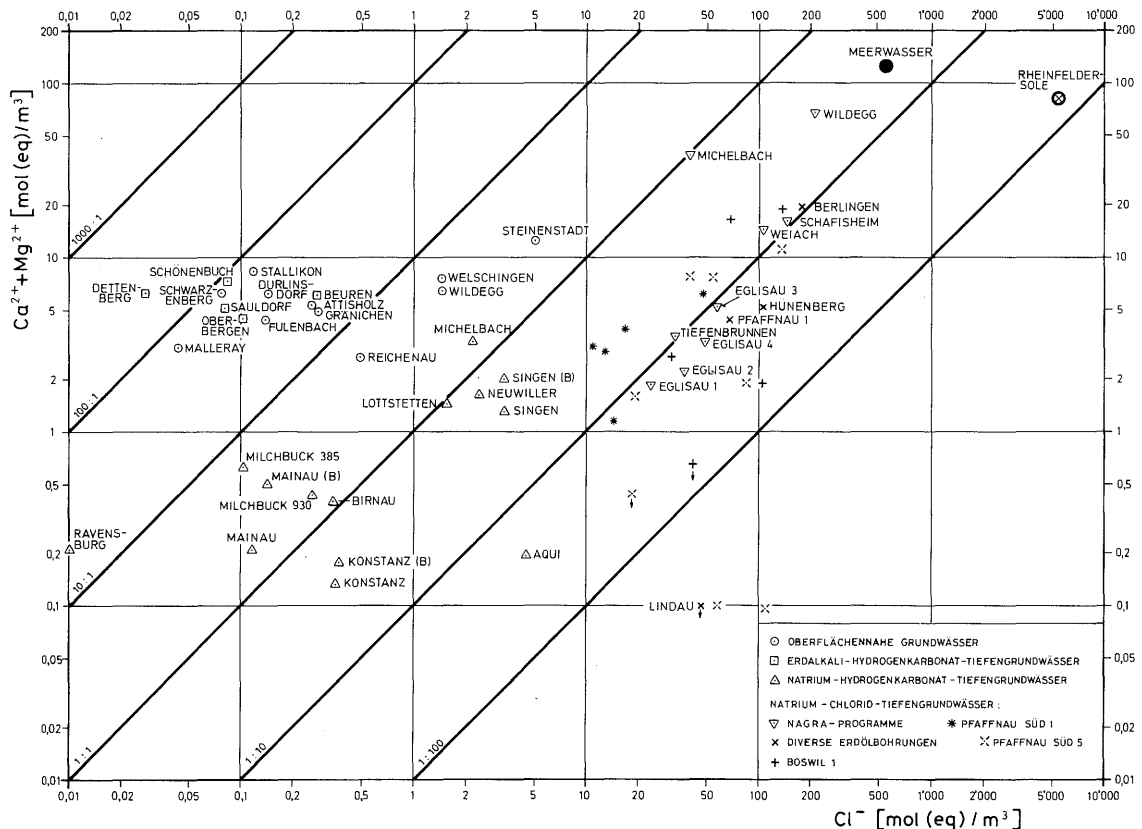


Fig. 14: Beziehung zwischen der Summe von Calcium- und Magnesium-Konzentration und Chlorid-Konzentration

4.1.4.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer der Tertiär-Aquifere von Eglisau, Schafisheim und Zürich-Tiefenbrunnen sowie des Malm-Aquifers von Weiach haben durchwegs höhere Konzentrationen von Calcium- und Magnesium-Aequivalenten als die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der beiden Aquifere,

nämlich die Eglisauer Wässer $1,9-4,1 \text{ mol(eq)/m}^3$ (Mittel), in diesem Bereich auch Tiefenbrunnen, sodann Weiach $14-15 \text{ mol(eq)/m}^3$ und Schafisheim 16 mol(eq)/m^3 . Wie bei den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern ist ein Trend von mit zunehmenden Calcium- und Magnesium-Konzentrationssummen abnehmenden pH-Werten zu erkennen.

Die Reihe zunehmender pH-Werte und abnehmender Calcium- und Magnesium-Konzentrationssummen von Weiach mit $\text{pH} = 7,2-7,3$ und rund 15 mol(eq)/m^3 über Eglisau 3, Eglisau 4 und Eglisau 2 zu Eglisau 1 mit pH um $8,5$ und $1,9 \text{ mol(eq)/m}^3$ setzt sich mit der Gruppe der noch höhere pH-Werte und noch niederere Calcium- und Magnesium-Konzentrationen aufweisenden Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Tertiär-Aquifere (Konstanz, Mainau, Birnau, Ravensburg, Zürich-Aqui) fort.

In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Nagra-Programme ist auch ein Zusammenhang der Summe der Calcium- und Magnesium-Aequivalentkonzentrationen mit der Chlorid-Konzentration zu erkennen. Mit zunehmenden Chlorid-Konzentrationen besteht ein Trend zu zunehmender Calcium- und Magnesium-Aequivalentsumme, was ein Hinweis dafür ist, dass beide die gleiche Herkunft haben. Die Verhältnisse Ca+Mg/Cl variieren in den Wässern der Nagra-Programme nur zwischen $0,06$ (Mittel Eglisau 2) und $0,14$ (Weiach). Sie unterscheiden sich damit deutlich von denen der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer, die mit Ausnahme von Zürich-Aqui ($\text{Ca+Mg/Cl} = 0,04$) zwischen $0,4$ (Konstanz) und $1,9$ (Mainau) variieren.

In den USM-Wässern aus Erdölbohrungen wird die aus den Datensätzen der Nagra-Programme bekannte obere Grenze des Variationsbereichs der Summe von Calcium- und Magnesium-Aequivalenten 16 mol(eq)/m^3 nicht erheblich (bis rund 19 mol(eq)/m^3) überschritten und dies nur in drei Proben aus den Bohrungen Berlingen und Boswil mit verhältnismässig niederem $\text{pH} = 7,4-7,6$. Die aus den Datensätzen der Nagra-Programme bekannte untere Grenze des Streubereichs von $1,9 \text{ Ca}^{2+}+\text{Mg}^{2+} \text{ mol(eq)/m}^3$ wird dagegen in einigen Wasserproben aus Erdölbohrungen deutlich unterschritten, wobei mit $0,1 \text{ mol(eq)/m}^3$ so tiefe Werte wie in Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern erreicht werden. Zumeist handelt es sich um Proben mit hohen pH-Werten $> 9,0$, in einem

Fall (Pfaffnau Süd 1, 598,5-605,5 m) mit $1,1 \text{ mol(eq)/m}^3$ um eines der Wässer mit verhältnismässig niedriger Chlorid-Konzentration ($14,6 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$) und verhältnismässig hohem Verhältnis $\text{Na/Cl} = 2,0$. Aber nur in Proben mit $\text{pH} > 9,0$ kommen Verhältnisse $\text{Ca+Mg/Cl} < 0,035$ vor (und nur zwei Proben mit $\text{pH} > 9,0$ haben höhere Werte dieses Verhältnisses). Bei den anderen Natrium-Chlorid-Wässern aus Erdölbohrungen (zumeist mit $\text{pH} < 8,0$) ist die Streuung des Verhältnisses Ca+Mg/Cl mit $0,035-0,29$ zwar etwas breiter als in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Nagra-Programme, aber doch ähnlich und von den typischen Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern verschieden. In diesem Streuungsbereich liegt mit $\text{Ca+Ma/Cl} = 0,23$ auch das Meerwasser. In der alten Analyse des Jodwassers von Wildegq ist das Verhältnis mit $0,33$ etwas höher.

4.1.5 Magnesium-Calcium-Verhältnis (Fig. 15)

4.1.5.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den meisten oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere kommen molare Mg/Ca -Verhältnisse zwischen $0,14$ (Attisholz) und $0,50$ (Stallikon) vor. Nur im Malm-Wasser von Durlinsdorf liegt $\text{Mg/Ca} = 0,06$ unter diesem Schwankungsbereich.

Verhältnisse von $\text{Mg/Ca} > 0,50$ finden wir in den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern des UMM-Aquifers von Sauldorf ($0,51$ nach Daten in BERTLEFF 1984, 1986) und des Dettenbergtunnels ($0,67$), also bei längerer unterirdischer Verweilzeit des Wassers als im Falle der oberflächennahen Molassegrundwässer. Allerdings kommen auch in den oberflächennahen Grundwässern zuzuordnenden OSM-Quellen des Aubachgebietes Mg/Ca -Verhältnisse von $0,48-0,74$ vor (BALDERER 1989, 56).

Im Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser des USM-Aquifers von Schönenbuch im Oberrheingraben kommt mit $\text{Mg/Ca} = 1,19$ (Mittel) sogar mehr Magnesium als Calcium vor, was sehr ungewöhnlich ist. Die geochemische Ursache dafür ist nicht bekannt. Auch die absolute Magnesium-Konzentration von $4,0 \text{ mol(eq)/m}^3$ (Mittel) des Wassers von Schönenbuch

wird in keinem anderen Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefen-
grundwasser und in keinem oberflächennahen Grundwasser
übertroffen. Nur einige wenige Natrium-Chlorid-Tiefengrund-
wässer haben noch höhere absolute Magnesium-Konzentra-
tionen.

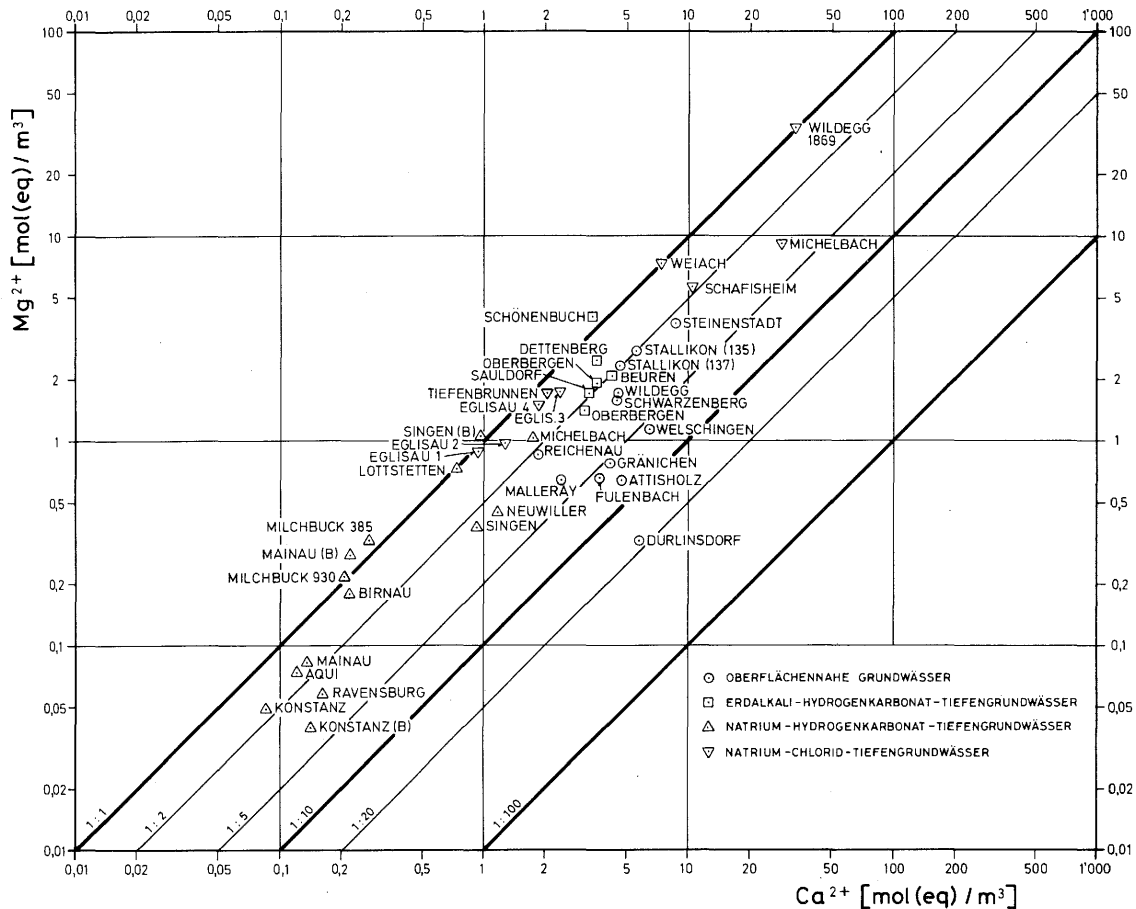


Fig. 15: Beziehung zwischen Magnesium- und Calcium-
Konzentration

4.1.5.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In allen untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefen-
grundwässern mit Ausnahme des Doggerwassers von Michelbach
ist die Calcium und Magnesium-Summe wegen der Austausch-
Reaktionen kleiner als 2 mol(eq)/m^3 und damit kleiner als
in allen untersuchten oberflächennahen Grundwässern und
Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär-
und Malm-Aquifere (vgl. 4.1.4). In diesen Wässern kommen so
niedere Mg/Ca-Verhältnisse wie in einigen oberflächennahen
Grundwässern nicht vor.

In den Analysen der Nagra-Programme sind in den Wässern von Neuwiller (Dogger) und Singen (Malm) die kleinsten Verhältnisse $(\text{Mg}/\text{Ca}) = 0,39-0,41$. Nur im OMM-Wasser von Ravensburg (BERTLEFF 1984, 1986) ist das Verhältnis mit $\text{Mg}/\text{Ca} = 0,36$ noch kleiner. Höhere Mg/Ca -Verhältnisse ($> 0,80$) als in oberflächennahen Grundwässern kommen im OMM-Wasser von Birnau (BERTLEFF 1984, 1986) mit $\text{Mg}/\text{Ca} = 0,90$, im Natrium-Hydrogenkarbonat-Sulfat-Tiefengrundwasser des Dogger-Aquifers von Michelbach mit $\text{Mg}/\text{Ca} = 0,95$ und im Malm-Wasser von Lottstetten mit $\text{Mg}/\text{Ca} = 0,96$ (Mittel) vor. *)

Tendenziell haben somit die Austauschwässer des Natrium-Hydrogenkarbonat-Typs eher höhere Mg/Ca -Verhältnisse als die noch keinen oder erst geringen Austauschreaktionen unterlegenen oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer. Die Annahme, dass austauschfähige Minerale das Magnesium geringfügig fester als das Calcium sorbieren (HEM 1970, 143; MATTHESS 1973, 188) wird also in den hydrochemischen Datensätzen aus Tertiär- und Malm-Aquiferen der Nordschweiz und angrenzenden Gebieten nicht bestätigt.

4.1.5.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die Analysen der Nagra-Programme ergeben in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malmaquifere molare Mg/Ca -Verhältnisse zwischen 0,54 (Schafisheim, Mittel) und 1,01 (Weiach, Mittel). In den Wässern von Eglisau (Mittel) kommen Verhältnisse zwischen 0,77 und 0,97 vor; in diesem Streuungsbereich liegt mit 0,84 auch Zürich-Tiefenbrunnen. Ein Verhältnis von $\text{Mg}/\text{Ca} = 1,00$ ergibt sich aus der alten Analyse des Jodwassers von Wildegg. Dieser Variationsbereich der Mg/Ca -Verhältnisse in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern ist ähnlich wie bei niederen Konzentrationen in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Grund-

*) Für das OMM-Wasser Mainau ist ein Verhältnis $\text{Mg}/\text{Ca} = 1,27$, wie es sich aus der Analyse in BERTLEFF 1984, 1986 ergäbe, durch die Analyse des Nagra-Regionalprogramms mit $\text{Mg}/\text{Ca} = 0,61$ nicht bestätigt worden. Die Zuverlässigkeit des sich aus den fremden Analysen des Milchbucktunnels ergebenden Verhältnissen von $\text{Mg}/\text{Ca} = 1,08-1,25$ ist unsicher.

wässern und damit tendenziell höher als in oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern. Gegenüber dem Verhältnis $Mg/Ca = 5,2$ im Meerwasser ist dieses aber in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern stark erniedrigt. Auf Chlorid bezogen zeigt sich, dass die Verhältnisse $Ca/Cl = 0,03-0,08$ ähnlich wie in Meerwasser (0,037) oder grösser, die Verhältnisse $(Mg/Cl = 0,02-0,08)$ dagegen erheblich kleiner als in Meerwasser (0,194) sind (Analysen-Mittel der Nagra-Programme). Die Abnahme der Magnesium-Konzentration ist eine der ersten Veränderungen, welche das in den Sedimenten eingeschlossene Meerwasser erfährt, und ist als weit verbreiteter Vorgang bekannt. Das Magnesium wird im Laufe der Diagenese vor allem durch Bildung von Chloriten und von Dolomit den Porenlösungen entzogen (ENGELHARDT 1973, 249-250, 334; USDOWSKI 1970, 12-H-1).

In den Analysen der aus Erdölbohrungen erhobenen Proben sind die Mg/Ca -Verhältnisse zumeist niedriger als die untere Grenze des Variationsbereichs der Natrium-Chlorid-Wässer (0,54) nach den Analysen der Nagra-Programme, zum Teil sogar niedriger als die untere Grenze des Variationsbereichs der meisten oberflächennahen Grundwässer (0,14). Vermutlich handelt es sich um einen systematischen Unterschied der Analytik, weshalb wir auf diese Werte nicht näher eingehen.

Das Natrium-Sulfat-Chlorid-Tiefengrundwasser aus dem Malm-Aquifer von Michelbach im Oberrhein Graben hat bei Konzentrationen von $28,8 \text{ mol}(\text{eq})\text{Ca}^{2+}/\text{m}^3$ und $9,1 \text{ mol}^{2+}(\text{eq})/\text{m}^3$, die erheblich über denen der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere des Molassebeckens liegen, ein Verhältnis $Mg/Ca = 0,32$. Es ist tiefer als im Molassebecken nach den Daten der Nagra-Programme ($> 0,54$). Dies zeigt erneut, dass es sich um ein Wasser handelt, dessen Inhaltsstoffe eine andere Herkunft haben (vgl. Kap. 4.1.3).

4.1.6 Sulfat (Fig. 16)

4.1.6.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-

Aquifere sind verhältnismässig arm an Sulfaten. Die Konzentrationen variieren in den meisten Wässern zwischen $0,06 \text{ mol(eq)SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ (Malleray) und $1,0 \text{ mol(eq)SO}_4^{2-}/\text{m}^3$. Konzentrationen von über $1,0 \text{ mol(eq)SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ haben ausser den durch Natrium-Hydrogenkarbonat- oder Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer oder durch Evaporite beeinflussten Wässer von Reichenau, Wildeggen und Steinenstadt nur eine der beiden OMM-Quellen von Stallikon ($1,65 \text{ mol(eq)/m}^3$) und das zum Vergleich mit der Badquelle Oberbergen beigezogene Vulkanit-Wasser aus der Bohrung Oberbergen ($1,06 \text{ mol(eq)/m}^3$).

In den untersuchten Wässern der Tertiär-Aquifere des Molassebeckens ist das molare Verhältnis SO_4/Cl $\geq 1,9$ und steigt bis auf $\text{SO}_4/\text{Cl} > 30$ an (Dettenbergtunnel). In den untersuchten Wässern der Malm-Aquifere ist dagegen $\text{SO}_4/\text{Cl} \leq 1,5$. Der Unterschied weist auf die bessere Verfügbarkeit von Schwefelverbindungen in den Molassesedimenten hin.

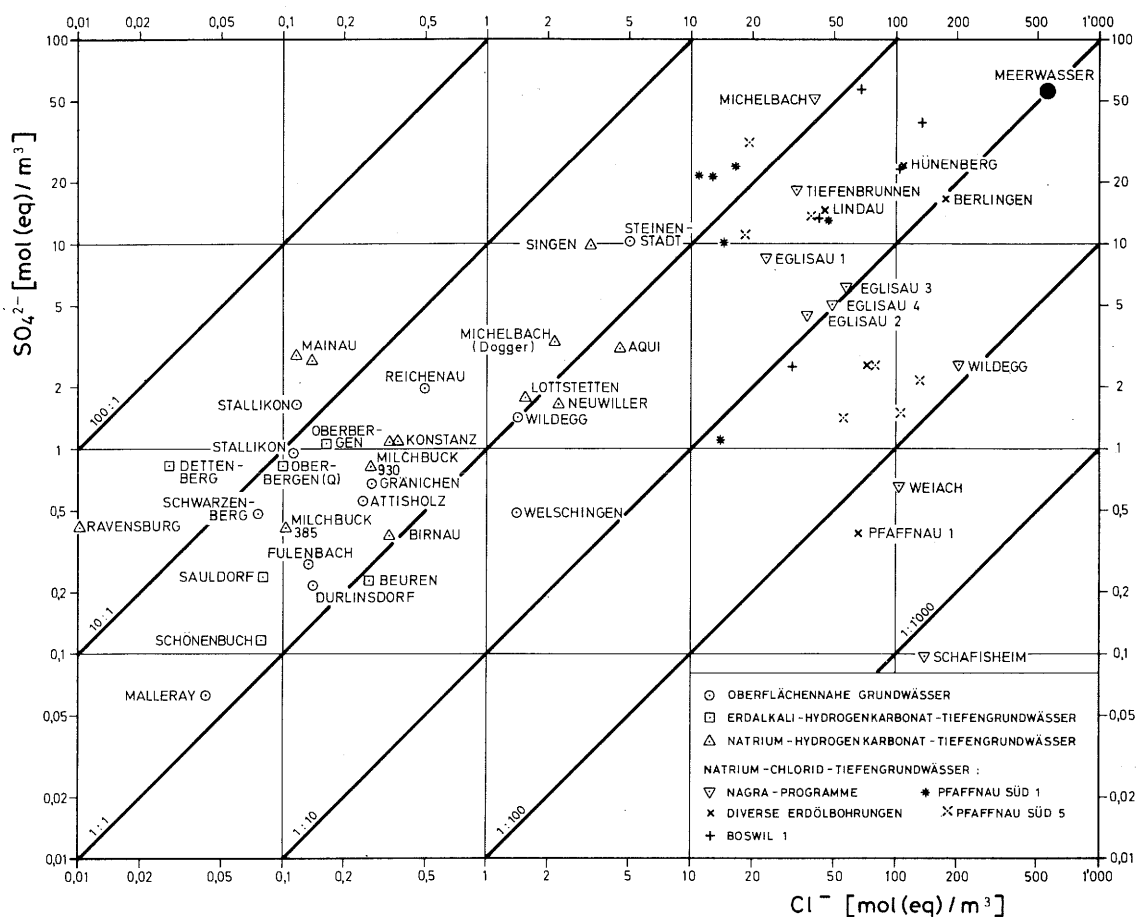


Fig. 16: Beziehung zwischen Sulfat- und Chlorid-Konzentration

Erhöhte SO_4/Cl -Verhältnisse um 7-8 hat ausserdem das Vulkanit-Tiefengrundwasser von Oberbergen, tiefe SO_4/Cl -Verhältnisse um 1,4 dagegen das Molasse-Wasser des Oberrheingrabens in Schönenbuch. In den Malm-Wässern Beuren, Durlinsdorf und Malleray sowie im Tertiär-Wasser Schönenbuch kommen neben tiefen SO_4/Cl -Verhältnissen auch die absolut tiefsten Sulfat-Konzentrationen von $< 0,23 \text{ mol}(\text{eq}) \text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ vor.

4.1.6.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben in der Regel höhere Sulfat-Konzentrationen als die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer. Nur in den fremden Analysen der OMM-Wässer von Birnau und Ravensburg (nach BERTLEFF 1984, 1986) sowie der OSM-Wässer des Milchbucktunnels sind die Sulfatkonzentrationen kleiner als $1,0 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$. Die maximale Konzentration in einem Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser steigt gegen $10 \text{ mol}(\text{eq})\text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ (Singen).

Die molaren Verhältnisse SO_4/Cl sind in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern sehr unterschiedlich. Allerdings nehmen mit zunehmenden Chloridkonzentrationen tendenziell auch die Sulfatkonzentrationen zu. Molasse-Aquifere und Malm- und Dogger-Aquifere lassen sich in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern nicht mit den Sulfat-Konzentrationen oder den SO_4/Cl -Verhältnissen unterscheiden.

4.1.6.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Nagra-Programme steigt die Sulfat-Konzentration bis auf $18,6 \text{ mol}(\text{eq}) \text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ an (Zürich-Tiefenbrunnen). In Wässern aus Erdölbohrungen gibt es sogar Konzentrationen bis zu $59 \text{ mol}(\text{eq}) \text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ (Boswil 1262,0-1263,75 m) und damit bis in den Meerwasserbereich von $56,4 \text{ mol}(\text{eq})\text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ (Fig. 15).

Das molare Verhältnis SO_4/Cl des Meerwassers wird in vielen Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern übertroffen:

	SO ₄ /Cl
Meerwasser	0,103
Eglisau 2-4 (Mittelwerte)	0,11-0,12
Erdölbohrungen	≤ 0,37
Eglisau 1	0,37
Zürich-Tiefenbrunnen	0,57
Erdölbohrung Pfaffnau Süd 1, 636-650 m	2,0

Dabei überschneidet sich der obere Teil des Variationsbereichs des SO₄/Cl-Verhältnisses in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern mit dem Variationsbereich dieses Verhältnisses bei niederen absoluten Konzentrationen in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern.

In manchen anderen Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern ist das Verhältnis SO₄/Cl < 0,1. Im Malm-Wasser von Weiach fällt es auf SO₄/Cl = 0,006 und im USM-Wasser von Schafisheim auf SO₄/Cl < 0,001. Die absoluten Konzentrationen betragen in Weiach nur 0,67 mol(eq)SO₄²⁻/m³ und in Schafisheim nur 0,10 mol(eq)SO₄²⁻/m³. Diese niederen Konzentrationen in chloridreichen Wässern sind als Folge einer Reduktion der Sulfate zu erklären, die bei der Diagenese des Formationswassers unter dem Einfluss hoher Konzentrationen von organischen Kohlenstoffverbindungen stattfand (ENGELHARDT 1973, 247).

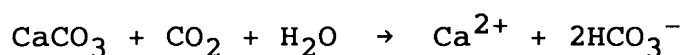
4.1.7 Hydrogenkarbonat und Karbonat

4.1.7.1 Oberflächennahe Grundwässer

In den untersuchten oberflächennahen Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere variiert die Hydrogenkarbonat-Konzentration zwischen 2,88 mol(eq)HCO₃⁻/m³ (Malleray) und 6,46 mol(eq)HCO₃⁻/m³ (Stallikon Q), wenn wir die speziellen Grundwässer von Wildeggen und Steinenstadt ausser Betracht lassen.

In einem idealisierten geschlossenen System stammt je eine Hälfte der Hydrogenkarbonat-Ionen stammt aus dem die Karbo-

natlösung bewirkenden Kohlendioxid und aus den Gesteinskarbonaten:



Zusammen mit dem noch gelösten Kohlendioxid-Gas ergeben sich daraus für das vor der Karbonatlösung gelöste, nicht aus dem Karbonatgestein stammende Kohlendioxid in den beiden Extremfällen 1,76 mol CO_2/m^3 (Malleray) und 3,80 mol CO_2/m^3 (Stallikon Q). Wenn die Löslichkeit bei einem CO_2 -Druck von 101,325 kPa den Wert von 53,7 mol/ m^3 hat ($\log K_H = -1,27$ bei 10°C und Ionenstärke = 0 nach STUMM & MORGAN 1981, 204) bedeutete dies einen ursprünglichen Kohlendioxid-Partialdruck von 0,03-0,07 (3-7 %). In der freien Atmosphäre beträgt der Kohlendioxid-Partialdruck nur 0,0003 bis 0,0004. In den Grundwässern treten die hohen Kohlen-säure-Konzentrationen deshalb auf, weil die Versickerung der Niederschlagswässer durch Bodenschichten stattfindet, die infolge der biologischen Aktivität kohlen-säurereich sind, und weil auch auf dem weiteren Weg des Wassers durch andere biochemische Prozesse Kohlendioxid freigesetzt werden kann (SCHMASSMANN 1980, 51, 56; SCHMASSMANN et al. 1984, 74). In der Bodenluft kommen unter unseren aktuellen Klimabedingungen Kohlendioxid-Partialdrucke zwischen 0,001 und 0,10 (0,1-10 %) vor (SCHOELLER 1969, 2; BÖGLI 1978, 20). In den untersuchten oberflächennahen Grundwässern der OSM (Schwarzenberg, Stallikon) mit den verhältnismässig hohen Hydrogenkarbonat-Konzentrationen sind die Molassekohlen zusätzliche Kohlenstoffquellen.

4.1.7.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Hydrogenkarbonat-Konzentrationen der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer liegen mit Ausnahme des Wassers von Schönenbuch im Variationsbereich der oberflächennahen Grundwässer.

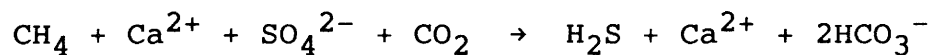
In Schönenbuch ist die Konzentration mit 7,36 mol(eq) $\text{HCO}_3^-/\text{m}^3$ deutlich höher. Zusammen mit 1,05 mol $\text{CO}_2(\text{eq})/\text{m}^3$ ergibt die halbe Hydrogenkarbonat-Konzentration eine initiale Kohlendioxid-Konzentration von 4,73 mol CO_2/m^3 , was bei 10°C einem Partialdruck von 0,09 (9 %) entspricht. Es muss noch offen bleiben, ob hier im Oberrheingraben fossile organische Substanzen an der Entstehung des hohen Gesamt-

kohlendioxidgehalts beteiligt sind, oder aber magmatisches Kohlendioxidgas, das an Störungen aufsteigt. Das niedere Massenverhältnis $N_2/Ar = 29$ spricht eher gegen, der unter allen untersuchten Wässern der Tertiär- und Malm-Aquifere tiefste Wert von $\delta^{13}C = -14,2 \text{ ‰}$ eher für einen organischen Ursprung.

4.1.7.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den Proben von Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Nagra-Programme variiert die Hydrogenkarbonat-Konzentration zwischen $6,85 \text{ mol(eq)HCO}_3^-/\text{m}^3$ (Singen) und $9,20 \text{ mol(eq)HCO}_3^-/\text{m}^3$ (Mainau).*) Der Schwankungsbereich in den Proben der Nagra-Programme liegt über dem der oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer, welche (mit Ausnahme der speziellen Wässer Wildeg, Steinenstadt und Schönenbuch) maximal $6,46 \text{ mol(eq)HCO}_3^-/\text{m}^3$ enthalten.

Da andere Parameter in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern für kaltzeitliche Infiltration sprechen, können die hohen Hydrogenkarbonat-Konzentrationen nicht auf eine verstärkte biologische Aktivität in den obersten durchsickerten Bodenschichten zurückgeführt werden. Als Kohlenstoff-Quellen kommen vielmehr das ausser in Konstanz in allen Wässern nachgewiesene Methan und höhere Kohlenwasserstoffe in Frage. Diese ermöglichen auch den sulfatreduzierenden Bakterien den Stoffumsatz, bei welchen Schwefelwasserstoff und Sulfide entstehen und gleichzeitig die organischen Kohlenstoffverbindungen zu Kohlendioxid-Spezies oxidiert werden (ENGELHARDT 1973, 247, 326, 339; SCHMASS-MANN 1977, 276-277):



*) In den von BERTLEFF (1984, 1986) mitgeteilten Analysen sind Werte an gleichen Stellen tiefer und bei allen hier berücksichtigten Stellen, mit Ausnahme von Ravensburg ($7,13 \text{ mol(eq)/m}^3$), kleiner als $5,7 \text{ mol(eq)HCO}_3^-/\text{m}^3$; es scheint sich um einen systematischen Analysenunterschied zu handeln.

Bei einer solchen Herkunft der Hydrogenkarbonat-Ionen sind die bei einer Oxidation von Methan oder höheren Kohlenwasserstoffen zu erwartenden niederen $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ -Isotopenverhältnisse wahrscheinlich wegen des Isotopenaustausches mit der Aquifermatrix (vgl. 4.9.3.2) nicht mehr feststellbar.

4.1.7.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere haben mit $2,21 \text{ mol}(\text{eq})\text{HCO}_3^-/\text{m}^3$ (Schafisheim, Mittel) bis $4,88 \text{ mol}(\text{eq})\text{HCO}_3^-/\text{m}^3$ (Zürich-Tiefenbrunnen, Mittel) tiefere Hydrogenkarbonat-Konzentrationen als in den gleichen Programmen untersuchten und mindestens $6,85 \text{ mol}(\text{eq})\text{HCO}_3^-/\text{m}^3$ aufweisenden Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer, obwohl auch sie Methan und zum Teil Schwefelwasserstoff und Sulfide enthalten. Der kleinste Wert von $2,21 \text{ mol}(\text{eq})\text{HCO}_3^-/\text{m}^3$ (Mittel) in Schafisheim fällt mit einer extrem hohen Methan-Konzentration ($448,3 \text{ g}/\text{m}^3 = 28 \text{ mol}/\text{m}^3$), mit der tiefsten gemessenen Redox-Spannung von -150 mV und mit der extrem niederen Sulfat-Konzentration von $0,1 \text{ mol}(\text{eq})\text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ zusammen. Als Minimumfaktor hemmt diese niedere Sulfat-konzentration die Aktivität der sulfatreduzierenden und dabei organische Kohlenstoffverbindungen zur Kohlendioxid-Spezies oxidierenden Bakterien.

Eine viel höhere Hydrogenkarbonat-Konzentration von $7,64 \text{ mol}(\text{eq})\text{HCO}_3^-/\text{m}^3$ (Mittel), wozu noch $1,8 \text{ molCO}_2(\text{eq})/\text{m}^3$ kommen, hat das Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser des Malm-Aquifers von Weiach, das ebenfalls eine hohe Methan-Konzentration ($68,4 \text{ g}/\text{m}^3 = 4,3 \text{ mol}/\text{m}^3$) hat, das aber noch mehr Sulfat enthält ($0,67 \text{ mol}(\text{eq})\text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$) und in dem sich eine Aktivität sulfatreduzierender Mikroorganismen in einer Schwefelwasserstoff-Konzentration von $4,1 \text{ mmol H}_2\text{S}/\text{m}^3$ ($0,13 \text{ mg/l}$ inkl. Sulfide) manifestiert.

In den Proben aus Erdölbohrungen variieren die meisten Hydrogenkarbonat- und Karbonat-Konzentrationen zwischen den Werten von Schafisheim ($2,15 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$) und Weiach ($7,64 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$). Doch kommen auch höhere Werte vor. In der untersten Probe von Boswil (1721,0-1722,75 m) mit $16,9 \text{ mol}(\text{eq})\text{HCO}_3^-/\text{m}^3$ bei $\text{pH} = 7,2$ und in der Probe von Hünenberg (2357-2392 m) mit $27,7 \text{ mol}(\text{eq})\text{HCO}_3^-/\text{m}^3$ bei $\text{pH} = 7,7$ zeichnet sich ein besonderer Wassertyp ab. Andere hohe

Hydrogenkarbonat- und Karbonat (und Hydroxid)-Konzentrationen von mehr als 8 mol(eq)/m^3 , die mit Werten von $\text{pH} > 9$ verknüpft sind, sind fragwürdiger, da Zementeinflüsse in Betracht gezogen werden müssen.

4.2 Physikalisch-chemische Parameter

4.2.1 pH-Wert (Fig. 17)

4.2.1.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die neun oberflächennahen Grundwässer des Nagra-Regionalprogramms haben mit Ausnahme von Wildegg pH-Werte zwischen rund 7,0 und 7,5. Im Malm-Wasser von Wildegg, dem eine Tiefenwasserkomponente beigemischt ist, wurde $\text{pH} = 6,67$ gemessen.

Im Streuungsbereich der oberflächennahen Grundwässer liegen auch die pH-Werte in den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern Beuren, Schönenbuch, Oberbergen und Sauldorf. Das Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser des Dettenbergtunnels ($\text{pH} = 7,80$) tendiert entsprechend der erhöhten Natrium-Konzentration gegen die höheren Werte von Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Molasse-Aquifere.

4.2.1.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In OMM-Aquiferen haben Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer durchwegs sehr hohe Werte von $\text{pH} > 8,5$:

- Auri	= 8,76
- Konstanz	= 8,88 (BERTLEFF: 8,82)
- Mainau	= 8,95 (BERTLEFF: 8,50)
- Birnau	= 8,87
- Ravensburg	= 9,26 (BERTLEFF 1984, 1986, Tab. 3)

Das Mischwasser im Quartär der Insel Reichenau hat noch $\text{pH} = 8,00$, die OSM-Wässer des Milchbucktunnels um $\text{pH} = 8,2$. In den Malm- und Dogger-Aquiferen haben die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer dagegen $\text{pH} < 8,0$:

- Singen = 7,13 (nach BERTLEFF 8,11 und 8,40)
- Lottstetten = 7,53-7,97 (Mittel 7,79)
- Neuwiller = 7,20

Der Unterschied ist mit der Calcium-Konzentration zu erklären, durch deren Erhöhung unter Gleichgewichtsbedingungen der pH-Wert fällt. Bei Konzentrationen $< 0,25 \text{ mol Ca}^{2+}/\text{m}^3$ ist $\text{pH} \geq 8,5$, bei Konzentrationen $> 0,7 \text{ mol Ca}^{2+}/\text{m}^3$ ist $\text{pH} < 8,0$ (Malm- und Dogger-Aquifere).

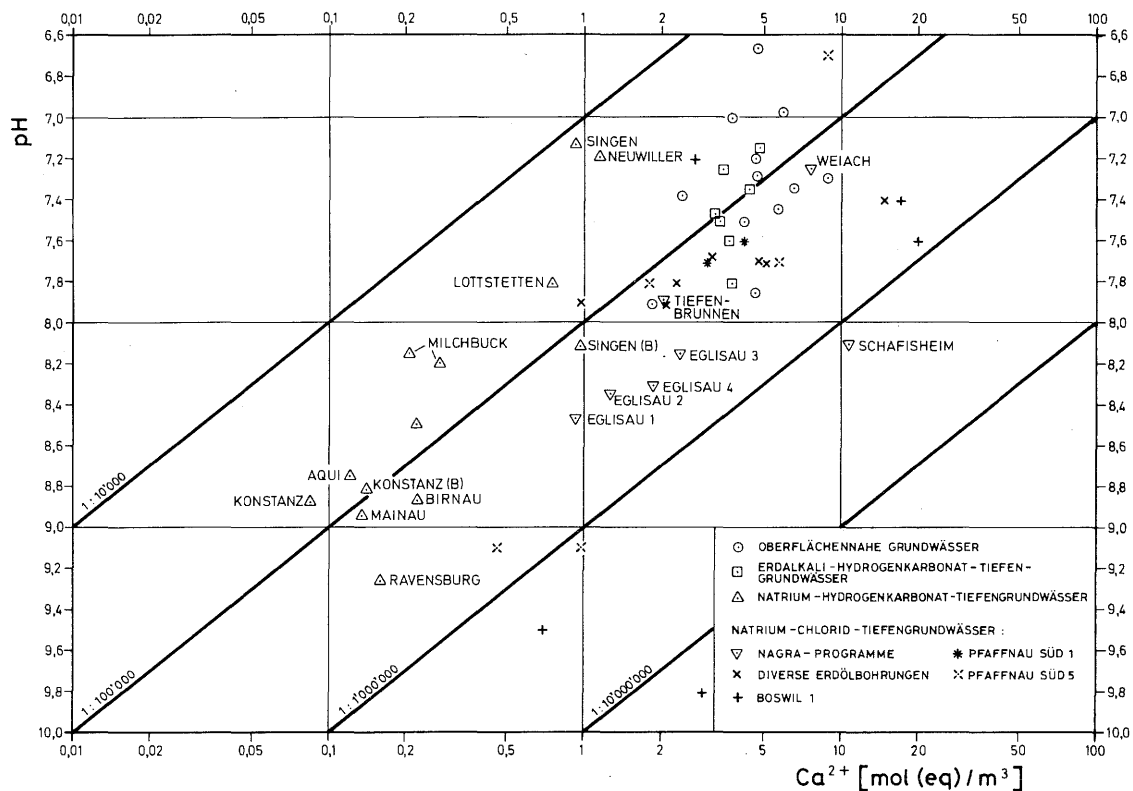


Fig. 17: Beziehung zwischen pH-Wert und Calcium-Konzentration

Unter den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Nagra-Untersuchungsprogramme haben ebenfalls die aus den Molasse-Aquiferen stammenden Wässer verhältnismässig hohe pH-Werte:

- Schafisheim = 7,80 (GTC-Behälter, Auslauf 8,38)
- Eglisau 1 = 8,47 (?Malm-Aquifer)
- Eglisau 2 = 8,18-8,50 (Mittel 8,35)
- Eglisau 4 = 8,13-8,76 (Mittel 8,31)
- Eglisau 3 = 7,94-8,30 (Mittel 8,15)
- Tiefenbrunnen = 7,84-7,93 (Mittel 7,89)

Auch unter den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern hat das aus dem Malm-Aquifer stammende Wasser von Weiach den tiefsten pH-Wert, nämlich 7,22 (GTC-Behälter).

Generell sind aber die pH-Werte aller Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer niedriger als die der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer aus Molasse-Aquiferen, was mit den höheren Calcium-Konzentrationen ($\text{Ca} \geq 1,0 \text{ mol(eq) Ca}^{2+}/\text{m}^3$) in Einklang steht. Das Äquivalent-Verhältnis $\text{H}^+/\text{Ca}^{2+} = 8,2 \times 10^{-6}$ in Weiach ist ein ähnliches wie $\text{H}^+/\text{Ca}^{2+} = 6,4 \times 10^{-6}$ bei höherem pH und niedriger Calcium-Konzentration in Zürich-Tiefenbrunnen (Mittel). In Eglisau variiert das Verhältnis $\text{H}^+/\text{Ca}^{2+}$ zwischen $2,6 \times 10^{-6}$ und $3,5 \times 10^{-6}$ (Mittel Eglisau 4 und 2): in Schafisheim (pH in GTC-Probe) hat es mit $1,5 \times 10^{-6}$ eine ähnliche Grösse (Fig. 16).

Die pH-Werte, die 1956 in den beim Abteufen der Bohrung Eglisau 2 in verschiedenen Tiefen erhobenen Proben gemessen wurden (GÜBELI 1959), sind deutlich niedriger als die 1981-1986 gemessenen pH-Werte des aus der gleichen Bohrung gepumpten Wassers. Vermutlich sind sie aus messtechnischen Gründen nicht vergleichbar. Bemerkenswert ist jedoch, dass die dem Bohrloch aus der USM zufließenden Wässer auch hier höhere pH-Werte (Messwerte: 7,15-7,30) haben als das aus den obersten Malmkalken zufließende Wasser (Messwert: 6,80).

Von Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der USM liegen pH-Daten auch aus Erdölbohrungen vor. Da die Probenentnahmebedingungen nicht in allen Einzelheiten bekannt sind, ist die Interpretation allerdings nicht vorbehaltlos möglich. Werte von $\text{pH} < 8,0$, wie wir sie aus den Nagraprogrammen von Tiefenbrunnen (OMM), Schafisheim (USM) und Weiach (Malm) kennen, kommen in folgenden Erdölbohrungen vor:

Bohrung	Tiefe	pH-Wert
Pfaffnau 1	446- 453	7,7
Pfaffnau Süd 1	598,5- 702,25	7,9-7,6
Pfaffnau Süd 5	760,0- 906,75	7,8-6,7
Boswil	1096,0-1722,75	7,6-7,2
Berlingen	1350,5-1354,5	7,4
Hünenberg	2357-2392	7,7

In den meisten dieser Proben sind die Variationsbereiche des $\text{pH} = 7,2\text{--}7,9$ und des Äquivalentverhältnisses $\text{H}^+/\text{Ca}^{2+} = 1,3\text{--}8,0 \times 10^{-6}$ ähnlich wie in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Nagra-Programme ($\text{pH} = 7,2\text{--}8,5$, $\text{H}^+/\text{Ca}^{2+} = 1,5\text{--}8,2 \times 10^{-6}$). Deutlich höhere $\text{H}^+/\text{Ca}^{2+}$ -Äquivalentverhältnisse haben je die tiefsten Proben von Boswil (1721,0–1722,75 m mit $\text{pH} = 7,2$ und $\text{H}^+/\text{Ca}^{2+} = 24 \times 10^{-6}$) und Pfaffnau Süd 5 (905,0–906,75 m mit $\text{pH} = 6,7$ und $\text{H}^+/\text{Ca}^{2+} = 24 \times 10^{-6}$). In den aus stark unterschiedlichen Tiefen der Bohrungen Pfaffnau Süd 1 und 5 und Boswil stammenden Proben besteht mit zunehmender Tiefe ein Trend zu abnehmenden pH-Werten, in Pfaffnau Süd 1 und 5 von 7,6–7,8 auf 6,7, in Boswil von 7,6 auf 7,2.

In den Bohrungen Pfaffnau Süd 5 und Boswil finden wir über den erwähnten Tiefenabschnitten (Wässer mit $\text{pH} < 8$) Proben, in denen sehr hohe Werte mit $\text{pH} > 9$ oder sogar zum Teil mit $\text{pH} > 10$ gemessen wurden, ebenso aus der Einzelprobe der Bohrung Lindau. Diese pH-Werte sind wesentlich höher als die sonst in den Natrium-Chlorid-Wässern der Tertiär- und Molasse-Aquifere bekannten (Maximum Eglisau 4 = 8,76). In der Bohrung Boswil sind die Proben aus allen Tiefen durch Casing Tests mit Süßwasser als Bohrlochfüllung und mit ähnlichen Zuflussraten entnommen worden. Auch in der Bohrung Pfaffnau Süd 5 handelt es sich in allen Tiefen um Casing Tests mit ähnlichen Zuflussraten. Versuchstechnische Gründe für die generell in oberen Abschnitten höchsten und mit der Tiefe abnehmenden pH-Werte sind nicht ersichtlich. Eine Ueberlagerung der Wässer mit $\text{pH} < 8$ durch alkalischere Wässer erscheint möglich, obwohl insbesondere für die extremsten Werte auch ein Zement-Einfluss in Betracht gezogen werden muss (vgl. Kap. 4.1.6).

4.2.2 Redox-Spannung

4.2.2.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den neun oberflächennahen Grundwässern des Nagra-Regionalprogramms kommen Redox-Spannungen (bezogen auf Standardwasserstoffelektrode, nach Verfahren DIN 38 404-C6) zwischen +250 mV und +520 mV vor (vgl. Fig. 42).

In diesem Variationsbereich liegen auch die Redox-Spannungen der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer:

Beuren	+330 mV, +410 mV
Schönenbuch	+230 mV, +340 mV
Oberbergen	+350 mV, +390 mV
Dettenbergtunnel	+360 mV

4.2.2.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die hohe pH-Werte aufweisenden Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere haben ebenfalls verhältnismässig hohe Redox-Spannungen:

Aqui	+320 mV
Konstanz	+290 mV
Mainau	+250 mV.

In den untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Malm- und Dogger-Aquifere treten dagegen zusammen mit tieferen pH-Werten auch tiefere Redox-Spannungen auf:

Singen	+50 mV
Lottstetten	-13 ± 41 mV
Neuwiller	-60 mV

Ebenfalls verhältnismässig tiefe Redox-Spannungen haben die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer:

Schafisheim		
(Auslauf)	-150	mV
Weiach (DST)	+90	mV
Eglisau 1	-80	mV
Eglisau 2	+92 ± 40	mV
Eglisau 4	+50 ± 60	mV
Eglisau 3	+47 ± 38	mV
Tiefenbrunnen	-15 ± 163	mV

4.3 Dissoziierte Nebenbestandteile: Kationen

4.3.1 Lithium (Fig. 18)

4.3.1.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die untersuchten oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere enthalten in der Regel kein Lithium in nachweisbaren Konzentrationen ($< 1,4 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3 = > 0,1 \text{ mg/l}$).

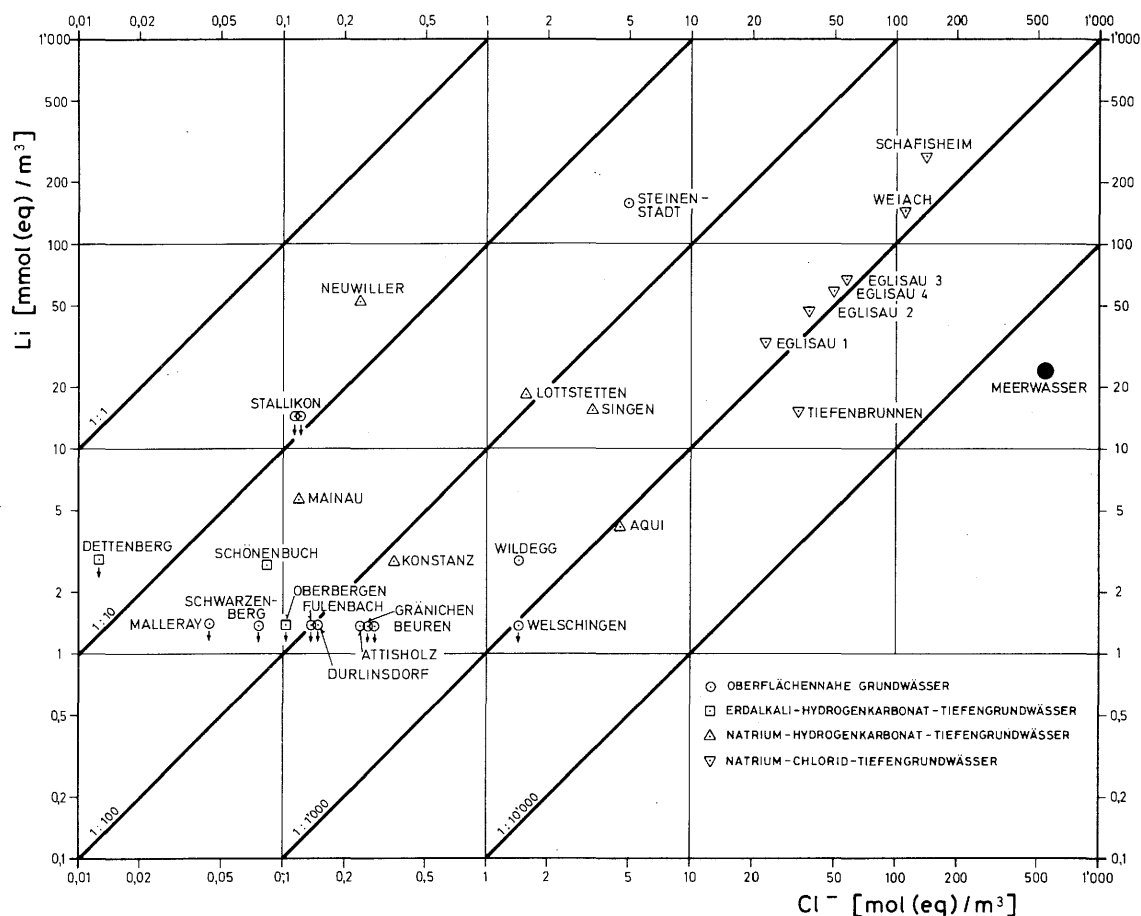


Fig. 18: Beziehung zwischen Lithium- und Chlorid-Konzentration

Die schwach erhöhte Konzentration von $3 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ im oberflächennahen Grundwasser von Wildegq hängt mit der Beimischung von Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser zusammen.

Die Li/Na- und Li/Cl-Verhältnisse haben in diesem Wasser ähnliche Grössenordnungen wie in den Tiefengrundwässern von Eglisau, Weiach und Schafisheim (Fig. 18). Das molare Lithium-Chlorid-Verhältnis beträgt zum Beispiel in der untersuchten Probe von Wildeggen $\text{Li/Cl} = 2,1 \times 10^{-3}$ und im USM-Wasser aus der nahen Bohrung Schafisheim bei einer rund 100 mal höheren absoluten Lithium-Konzentration $\text{Li/Cl} = 1,9 \times 10^{-3}$.

Die im Eozän-Wasser von Steinenstadt stark erhöhte Lithium-Konzentration von $159 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ mit einem molaren Verhältnis von $\text{Li/Cl} = 32 \times 10^{-3}$ hängt möglicherweise mit einer Lithium-Anreicherung in den die Evaporite begleitenden Tonen oder in Einschlüssen von Restlösungen zusammen. Bei der viel niederen Lithium-Konzentration von $2,5 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ (Mittel) hat ebenfalls im Oberrheingraben das Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Wasser von Schönenbuch ein ähnlich hohes Verhältnis von $\text{Li/Cl} = 31 \times 10^{-3}$. Ferner kommt in Wässern mit mehr als $2,5 \text{ mmol}(\text{eq}) \text{ Li}/\text{m}^3$ ein molares Verhältnis von $\text{Li/Na} > 2,5 \times 10^{-3}$ bei allen drei Stellen des Oberrheingrabens und nur bei diesen vor:

	Li/Na
Neuwiller	6×10^{-3}
Schönenbuch (Mittel)	13×10^{-3}
Steinenstadt	17×10^{-3}

4.3.1.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In den Tertiär- und Malm-Aquiferen des Molassebeckens enthalten:

- alle untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer mehr als $2,5 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Li}/\text{m}^3$, aber weniger als $20 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Li}/\text{m}^3$,
- alle untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer, mit Ausnahme von Zürich-Tiefenbrunnen, dagegen mehr als $20 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Li}/\text{m}^3$.

Das molare Verhältnis Li/Cl zeigt in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern keine Korrelation der beiden Ionen.

Dagegen hat dieses Verhältnis in allen Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern eine ähnliche Grössenordnung. Doch besteht in ihnen ein Trend eines mit zunehmenden Konzentrationen grösser werdenden Verhältnisses: Mit $\text{Li/Cl} = 0,5 \times 10^{-3}$ ist das Verhältnis in dem die niedrigste absolute Lithium-Konzentration aufweisenden Wasser von Zürich-Tiefenbrunnen am kleinsten, mit $\text{Li/Cl} = 1,9 \times 10^{-3}$ in dem am stärksten konzentrierten Wasser von Schafisheim am grössten. In der Reihe Eglisau 1-2-4-3-Weiach variiert das Verhältnis Li/Cl (Mittelwerte) nur zwischen $1,2 \times 10^{-3}$ und $1,4 \times 10^{-3}$, in der engeren Reihe Eglisau 2-4-3 sogar nur zwischen 1,17 und 1,19 (Mittelwerte). Die Mischreihe kommt darin deutlich zum Ausdruck.

Ein ähnliches Li/Cl -Verhältnis wie die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer haben das oberflächennahe Grundwasser von Wildegg ($2,1 \times 10^{-3}$) und das die höchste Chloridkonzentration aufweisende Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser von Zürich Aquä ($1,0 \times 10^{-3}$). Dies weist auf Beimischungen von Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern hin. Unter einem verhältnismässig starken Einfluss von Natrium-Chlorid-Grundwässern steht auch noch das Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser Singen mit $\text{Li/Cl} = 4,9 \times 10^{-3}$. Die anderen untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben ein Verhältnis $\text{Li/Cl} > 8 \times 10^{-3}$.

Generell kann folgendes gesagt werden:

- Wässer mit hohen Anteilen mariner oder brackischer Herkunft haben niedrigere Li/Cl -Verhältnisse ($< 2 \times 10^{-3}$).
- Hohe Verhältnisse ($> 8 \times 10^{-3}$) kommen dagegen in Wässern vor, in denen meteorische Wässer oder fluviatil-limnische Formationswässer überwiegen.
- Im Oberrheingraben weisen die drei Proben auf vermutlich regional hohe Li/Cl -Verhältnisse hin.

Das Verhältnis Li/Cl ist allerdings auch in den Wässern mit hohen marinen oder brackischen Anteilen mindestens eine Zehnerpotenz grösser als im Meerwasser, wo es nur $\text{Li/Cl} = 0,045 \times 10^{-3}$ beträgt (TUREKIAN 1969, 309-310: $170 \mu\text{g Li/l}$ auf $1,94 \times 10^7 \mu\text{g Cl/l}$). Die absolute Konzentration von $24,5 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Li/m}^3$ im Meerwasser wird, mit Ausnahme von Zürich-Tiefenbrunnen $15,1 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{l}$, in den Natrium-

Chlorid-Tiefengrundwässern des Molassebeckens ebenfalls überschritten. So hat das USM-Wasser von Schafisheim eine mehr als 10 mal grössere Lithium-Konzentration als das Meerwasser, obwohl die Chlorid-Konzentration auf eine 3,7-fache Verdünnung hinweist. Demnach fand in den Aquiferen eine Anreicherung mit Lithium statt. Diese ist damit zu erklären, dass beim Ionenaustausch die Bindungskraft des Lithiums schwach ist und es daher unter allen Kationen bevorzugt in Lösung geht und bleibt (HEIER & BILLINGS 1970, 3-H-1; MATTHESS 1973, 206; HEM 1985, 133-134). Wahrscheinlich ist Lithium durch Ionenaustausch vorzugsweise gegen Magnesium in Lösung gegangen, mit dem es einen fast identischen Ionenradius hat (MASON & MOORE 1985, 130). Eine ähnliche Zunahme des Li/Ca-Verhältnisses gegenüber Meerwasser wie in den nordschweizerischen Molassegrundwässern wurde in untiefen Grund-, Hot-Dry-Rock-Zirkulations- und Minenwässern eines Granits in Cornwall festgestellt, wobei eine Wasser-Gesteins-Reaktion mit Biotit als wahrscheinlichste Quelle des Lithiums vermutet wird (SMEDLEY 1989, 647-650).

4.3.2 Kalium (Fig. 19, 20)

4.3.2.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern mit $\text{Na} < 1 \text{ mol(eq)/m}^3$ (d.h. ohne Wildegg, Steinenstadt und Reichenau) variiert die Kalium-Konzentration zwischen 10 mmol(eq)/m^3 (Malleray) und 130 mmol(eq)/m^3 (Oberbergen Bohrung). Das K/Na-Verhältnis variiert zwischen 0,05 (Attisholz) und 0,24 (Durlinsdorf). Die höhere Konzentration von 265 mmol/m^3 und das Verhältnis $\text{K/Na} = 0,85$ in Gränichen dürften anthropogene Ursachen haben. Das noch höhere Verhältnis von $\text{K/Na} = 2,4$ in Malleray muss wegen der sehr kleinen absoluten Konzentrationswerte als unsicher betrachtet werden.

4.3.2.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die absoluten Kalium-Konzentrationen variieren in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der OMM-Aquifere im engen Bereich zwischen 28 und 44 mmol(eq)/m^3 , dies

mit Ausnahme von Ravensburg (nach Daten BERTLEFF 1984, 1986), dessen Kalium-Konzentration im Variationsbereich der Malm- und Dogger-Tiefengrundwässer liegt. Auch das im Quartär der Reichenau gefasste, aber aus dem Molasseaquifer gespeiste Grundwasser hat eine im Variationsbereich der Molasse-Wässer liegende Kalium-Konzentration. In den OSM-Wässern des Milchbucktunnels beträgt diese 32-60 mmol(eq)/m³.

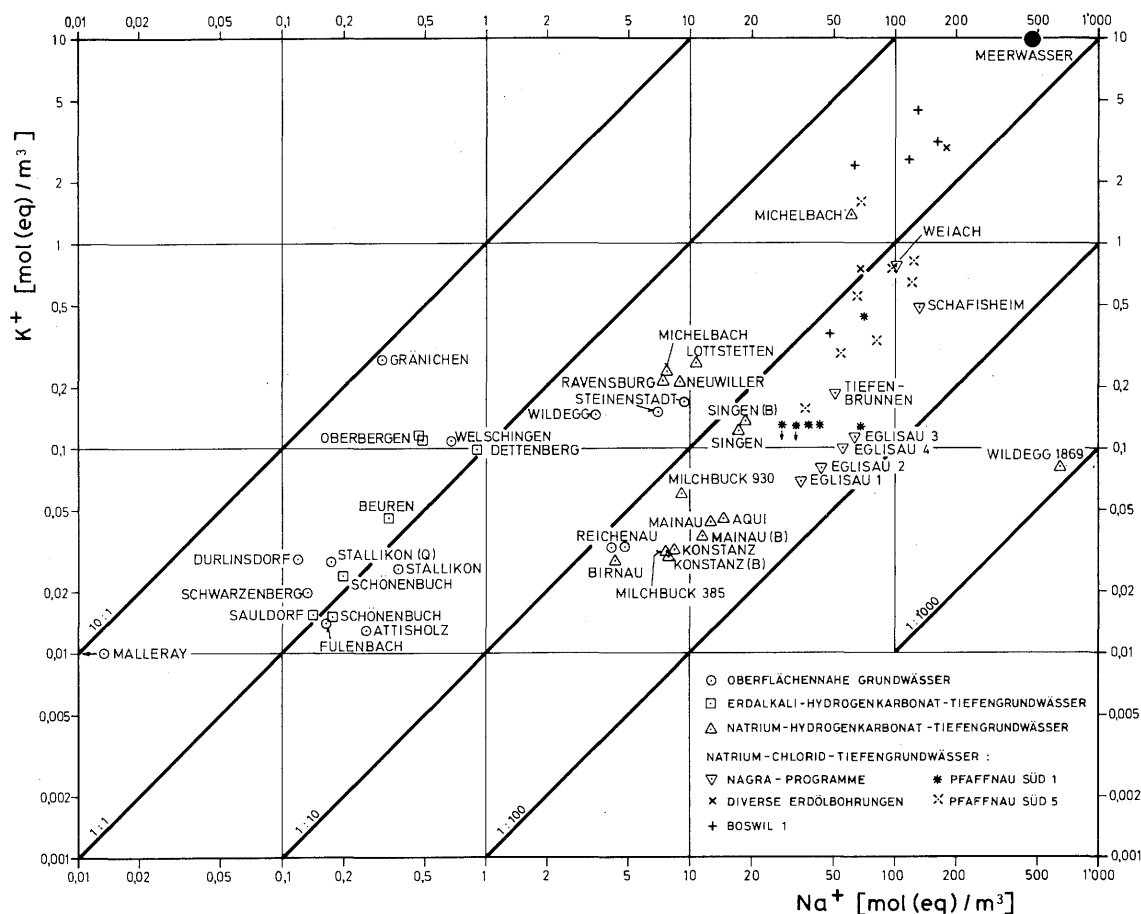


Fig. 19: Beziehung zwischen Kalium- und Natrium-Konzentration

In den Malm-Aquifern des Molassebeckens und den Dogger-Aquifern des Oberrheingrabens haben die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer Kalium-Konzentrationen zwischen 123 mmol(eq)/m³ (Singen nach BERTLEFF) und 254 mmol(eq)/m³, also in einem stark von den Wässern der Molasse-Aquifere (ohne Ravensburg) abweichenden Variationsbereich. Eine Abhängigkeit der Kalium-Konzentration von der Tiefe (Aquifer-Temperatur) ist nicht erkennbar.

Werte des molaren Verhältnisses $K/Na \geq 0,05$, welche für alle typischen oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer (ohne Wildegg, Steinstadt, Reichenau) bezeichnend sind, kommen in keinem Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser und auch in keinem Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser vor (Fig. 19). In den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Molassee-Aquifere variiert das molare Verhältnis K/Na zwischen 0,003 (Aqui) und 0,007 (Milchbuck), in denen der Malm- und Dogger-Aquifere zwischen 0,007 (Singen) und 0,027 (Michelbach-Dogger) (Im OMM-Wasser Ravensburg ist $K/Na = 0,029$).

4.3.2.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Der tiefere Teil des Variationsbereichs der absoluten Kalium-Konzentration in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern überschneidet sich mit dem höheren Teil des Variationsbereichs dieser Konzentrationen in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Malm- und Dogger-Aquifere. Der bei $69 \text{ mmol}(\text{eq})K^+/\text{m}^3$ (Eglisau 1) beginnende gesamte Variationsbereich der Kalium-Konzentrationen in Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern geht aber viel höher hinauf als in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern, nämlich in Proben der Nagra-Programme bis $748 \text{ mmol}(\text{eq})K^+/\text{m}^3$ (Weiach), in Proben aus Erdölbohrungen bis $4245 \text{ mmol}(\text{eq})K^+/\text{m}^3$ (Boswil 247,09-248,75 m).

Das K/Na -Verhältnis hat in den Eglisauer Wässern seine kleinsten Werte und beträgt in diesen $K/Na = 0,002$. Die anderen Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer einschliesslich Proben aus Erdölbohrungen variieren zwischen $K/Na = 0,003$ und $K/Na = 0,034$, haben also eine ähnliche Variationsbreite wie in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern (0,003-0,027). Im obersten Teil dieses Variationsbereichs liegt mit $K/Na = 0,021$ auch das Meerwasser. Dieses Verhältnis wird nur in fünf Proben aus Erdölbohrungen überschritten, bis maximal $K/Na = 0,037$ (Fig. 19).

Das Verhältnis K/Cl = 0,0183 des Meerwassers wird in allen oberflächennahen Grundwässern, in allen Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern und, mit Ausnahme von Zürich-Aqui (das heisst des chloridreichsten), in allen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern, aber unter den Natrium-Chlorid-

wässern nur in 6 Proben aus Erdölbohrungen (davon 5 die gleichen wie beim K/Na-Verhältnis) und im Malm-Wasser des Oberrheingrabens in Michelbach überschritten (Fig. 20).

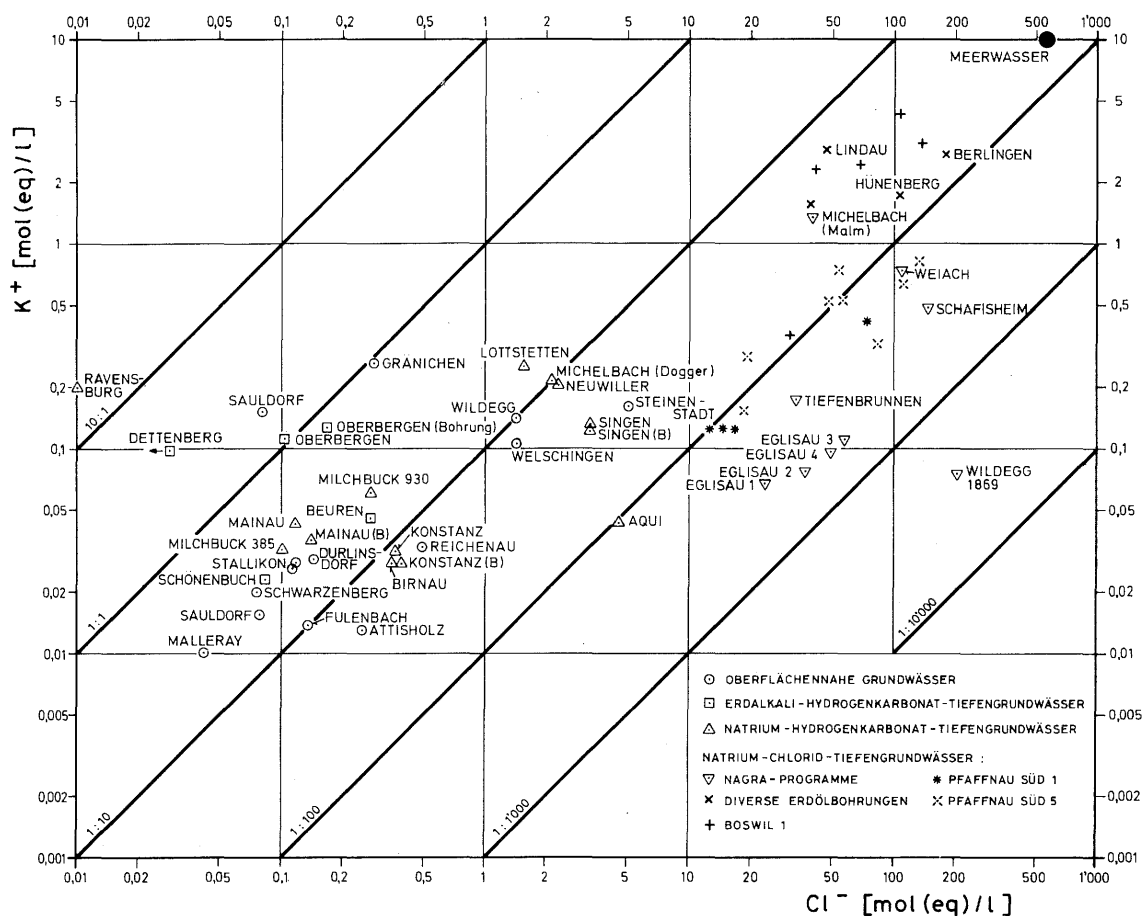


Fig. 20: Beziehung zwischen Kalium- und Chlorid-Konzentration

Wenn wir die Natrium-Chlorid-Wässer aus Meerwasser herleiten, hat in den meisten dieser Wässer das Kalium eine starke Abreicherung erfahren. Die geringe geochemische Beweglichkeit des Kaliums wird darauf zurückgeführt, dass es auf eine spezielle Art in bestimmte Tonmineral-Strukturen inkorporiert wird und es danach nicht mehr durch Ionenaustausch-Prozesse mobilisierbar ist (HEM 1970, 151; HEM 1985, 104). Diesem Kalium-Fixation genannten Prozess unterliegen angeblich auch andere Ionen, wie Ba^{2+} und Cs^+ (vgl. 4.3.3), die in den Tiefengrundwässern der nord-schweizerischen Tertiär- und Malm-Aquifere nicht oder nur in sehr geringen Konzentrationen nachweisbar sind (Safe Drinking Water Committee 1977, 139).

Die K/Na- und K/Cl-Verhältnisse in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern zeigen im übrigen einen regionalen Unterschied: in Berlingen, Lindau, Boswil und Hünenberg, das heisst im Südosten, betragen sie (mit einer Ausnahme) $K/Na > 0,011$, und $K/Cl > 0,015$, sind also verhältnismässig ähnlich wie im Meerwasser. Im Gebiet Pfaffnau wie in Schafisheim, Weiach und Eglisau, das heisst mehr im Nordwesten, allerdings auch in Zürich-Tiefenbrunnen, sind (ebenfalls mit einer Ausnahme) dagegen bei generell niedrigeren absoluten Kalium-Konzentrationen $K/Na < 0,011$ und $K/Cl > 0,015$. Möglicherweise hat dies aber keine regionale Ursache, sondern ist statistisch eine Abhängigkeit der Kalium-Konzentration von der Temperatur und damit von der Tiefe: Die Proben der nordwestlichen Gruppe stammen aus Tiefen bis um 900 m, die Proben der südöstlichen Gruppe dagegen aus 835-2392 m.

4.3.3 Rubidium und Cäsium

Rubidium war in den meisten Wässern nicht nachweisbar. Mit in der Nähe des Bereichs der Bestimmungsgrenzen ($0,12-0,6 \text{ mmol(eq)/m}^3 = 0,01-0,05 \text{ mg/l}$) liegenden Konzentrationen wurde es im oberflächennahen Molasse-Grundwasser von Gränichen ($0,6 \text{ mmol(eq)/m}^3$), im speziellen oberflächennahen Grundwasser des Eozän-Aquifers von Steinenstadt ($0,1 \text{ mmol(eq)/m}^3$) und in einer von zwei Proben des Grundwassers der Kaiserstuhl-Vulkanite von Oberbergen ($0,5 \text{ mmol(eq)/m}^3$) nachgewiesen. Ferner wurde Rubidium vom Institut Fresenius in den je zwei ersten Proben der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser Eglisau 2-4 mit $0,1-0,2 \text{ mmol(eq)/m}^3$ ($0,01-0,02 \text{ mg/l}$) quantifiziert, in den je drei folgenden Proben nicht nachgewiesen und in den je letzten Proben als Spur angegeben. Die Konzentrationen variieren demnach gerade um die Nachweisgrenze. Dies gilt auch für das Natrium-Chlorid-Wasser des USM-Aquifers von Schafisheim ($0,1 \text{ mmol(eq)/m}^3$), wohingegen Rubidium im Wasser des Malm-Aquifers von Weiach nicht nachweisbar war. Die molaren Rb/Na -Verhältnisse der Wässer von Eglisau 2-4 und Schafisheim betragen etwa $1-5 \times 10^{-6}$ gegenüber 3×10^{-6} im Meerwasser ($0,12 \text{ mg Rb}^+/\text{l} = 1,4 \text{ mmol(eq)Rb}^+/\text{m}^3$), haben also die gleiche Grössenordnung.

Cäsium wurde vom Institut Fresenius überhaupt nur im Natrium-Wasser von Schafisheim nachgewiesen und quanti-

fiziert und dies nur in einer Konzentration von $0,03 \text{ mmol(eq)/m}^3$ ($0,004 \text{ mg/l}$), die unter dem Bereich der Bestimmungsgrenzen des Regionalprogramms von etwa $0,1\text{--}0,4 \text{ mmol(eq)/m}^3$ ($0,01\text{--}0,05 \text{ mg/l}$) liegt. Ferner werden aus je der letzten von 6 durch das Institut Fresenius untersuchten Proben der Wässer Eglisau 4 und Eglisau 3 Spuren von Cäsium erwähnt. Somit ist Cäsium mit über den üblichen Bestimmungsgrenzen liegenden Konzentrationen nur gerade in den am stärksten konzentrierten Natrium-Chlorid-Wässern der USM nachweisbar. Das molare Cs/Na-Verhältnis im Wasser von Schafisheim beträgt etwa 200×10^{-9} gegenüber etwa 5×10^{-9} im Meerwasser ($0,30 \text{ } \mu\text{g Cs}^+/\text{l} = 0,0023 \text{ mmol(eq)Cs}^+/\text{m}^3$). In diesem Wassertyp wird demnach Cäsium angereichert und unterliegt nicht wie das einen ähnlichen Durchmesser aufweisende Kalium einer Immobilisation (vgl. 4.3.2). Wenn Cäsium im Wasser von Schafisheim mit $0,03 \text{ mmol(eq)/m}^3$ vorkommt und in Wässern von Eglisau zeitweise in Spuren noch nachweisbar ist, wird hier die Annahme nicht bestätigt, dass in der Reihe der Alkali-Ionen das Cäsium bei Ionenaustausch-Prozessen von den meisten Tönen bevorzugt adsorbiert wird (HEIER & BILLINGS 1969, 55-H-1). Vielmehr ist wie in den bereits bei der Besprechung des Lithiums erwähnten Graniten von Cornwall das Cäsium gegenüber Meerwasser angereichert. Dabei kann hier wie dort an eine Herkunft aus Biotiten gedacht werden (SMEDLEY 1989, 647-650).

4.3.4 Ammonium

4.3.4.1 Oberflächennahe Grundwässer

Die Richtlinien der Europäischen Gemeinschaften (1980) und das Schweizerische Lebensmittelbuch (1985) nennen für Ammonium in Trinkwasser eine Richtzahl (Qualitätsziel) von $< 2,8 \text{ mmol(eq)NH}_4^+/\text{m}^3$ ($< 0,05 \text{ mg/l}$) und eine zulässige Höchstkonzentration von $28 \text{ mmol(eq)NH}_4^+/\text{m}^3$ ($0,5 \text{ mg/l}$). In diesen Bereichen können Ammonium-Konzentrationen gewöhnlich in Grundwässern vorhanden sein. In den untersuchten oberflächennahen Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere wird eine Konzentration von $15 \text{ mmol(eq)NH}_4^+/\text{m}^3$ nur im Wasser des tiefen Malm-Karsts von Malleray und in dem wegen des Evaporit-Einflusses speziellen Grundwasser des Eozän-Aquifers von Steinenstadt im Oberrheingraben über-

schritten. Es handelt sich um die beiden einzigen oberflächennahen Grundwässer, die auch erhöhte Eisen-Konzentrationen ($> 3 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe}^{2+}/\text{m}^3$) haben. Sie zählen ausserdem zu den oberflächennahen Grundwässern mit nachweisbaren Mangan-Konzentrationen. Obwohl in diesen Wässern bei den Probenentnahmen verhältnismässig hohe Sauerstoff-Konzentrationen und Redox-Spannungen gefunden wurden, lassen Ammonium-, Eisen- und Mangan-Konzentrationen übereinstimmend darauf schliessen, dass im Aquifer reduzierende Bedingungen herrschen und erst vor dem Ort der Probenentnahme eine Belüftung stattfindet.

4.3.4.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den untersuchten Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern wird eine Konzentration von $15 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NH}_4^+/\text{m}^3$ nicht überschritten. Im OMM-Wasser des Dettenbergtunnels bleibt sie auch bei erhöhten Eisen- und Mangan-Konzentrationen sogar unter etwa $5 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NH}_4^+/\text{m}^3$.

4.3.4.3 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Alle im Nagra Regionalprogramm untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer haben Ammonium-Konzentrationen von $> 15 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NH}_4^+/\text{m}^3$. Dies hängt mit den in diesen Wässern durchwegs reduzierenden Bedingungen zusammen. Ammonium-Konzentrationen von mehr als $100 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NH}_4^+/\text{m}^3$ (Neuwiller, Schafisheim, Weiach) sind mit hohen Schwefelwasserstoff- und/oder Methan-Konzentrationen verknüpft. In den fremden Analysen der OSM-Wässer des Milchbucktunnels werden $3\text{-}11 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ angegeben.

4.3.5 Strontium (Fig. 21, 22, 23)

4.3.5.1 Oberflächennahe Grundwässer

Die Strontium-Konzentration beträgt in den untersuchten oberflächennahen Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere, mit Ausnahme der speziellen Fälle Wildeggen und Steinenstadt, weniger als $14 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$, wobei aber $6 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$ überschritten wird, dies mit Ausnahme des

nur etwa $2 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$ enthaltenden Malm-Wassers von Malleray und eines zweifelhaften Wertes von Durlinsdorf mit 2 resp. $0,23 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$. Bemerkenswerterweise liegen die Strontium-Konzentrationen und die Sr/Ca-Verhältnisse der meisten oberflächennahen Grundwässer der Nordschweiz in ähnlichen Grössenordnungen wie in schweizerischen Flüssen:

	Sr/Ca $\times 10^{-5}$	Sr^{2+} $\text{mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$
Aare Thun ¹⁾	4,06	8,7
Aare Bern ¹⁾	3,83	8,4
Aare Hagneck ¹⁾	3,51	10,1
Aare bei Mündung in Rhein ²⁾	2,2	5,9
Rheinwasser vor Aaremündung (Mittel 1960-1962) ²⁾	2,9	7,3
Arve ¹⁾	-	8,9

1) BARTH & VON GUNTEN 1978, 219

2) HABERER 1968, 104, 106

Die molaren Sr/Ca-Verhältnisse (Fig. 21) betragen in den 6 oberflächennahen Molasse-Grundwässern $\text{Sr/Ca} = 1,6\text{-}2,8 \times 10^{-3}$, im Malm-Wasser von Welschingen $\text{Sr/Ca} = 1,3 \times 10^{-3}$ und in dem von Malleray $\text{Sr/Ca} = 1,0 \times 10^{-3}$. Diese Grössen sind damit erklärbar, dass in Tonsteinen ein mittleres molares Verhältnis von $\text{Sr/Ca} = 2,7 \times 10^{-3}$ und in Kalksteinen ein solches von $\text{Sr/Ca} = 0,7 \times 10^{-3}$ gefunden wird (Massenverhältnis von $6,0 \times 10^{-3}$ und $1,5 \times 10^{-3}$, MATTHESS 1973, 208, Tab. 67, nach TUREKIAN & KULP 1956). In der Aare bei ihrer Mündung in den Rhein beträgt das mittlere molare Verhältnis $\text{Sr/Ca} = 2,2 \times 10^{-3}$ (Mittel 1960-1962, HABERER 1968, 106).

4.3.5.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Im Konzentrationsbereich der oberflächennahen Grundwässer liegen auch die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer von Beuren und Schönenbuch, wobei aber das molare Verhältnis im Malm-Wasser von Beuren auf $\text{Sr/Ca} = 2,8 \times 10^{-3}$ und im Malm-Wasser von Schönenbuch auf $\text{Sr/Ca} = 3,2 \times 10^{-3}$ ansteigt. In zwei anderen Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Grundwässern Dettenberg und Oberbergen (Mittel) werden Konzentrationen von $32\text{-}65 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$ und molare Verhältnisse von $\text{Sr/Ca} = 9\text{-}20 \times 10^{-3}$ erreicht, was auf eine

Strontium-Anreicherung während langer unterirdischer Verweilzeiten und auf eine beginnende Entwicklung zu den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern hinweisen mag, im Falle von Oberbergen aber eher in der chemischen Zusammensetzung der vulkanischen Aquifer-Gesteine seinen Grund haben kann.

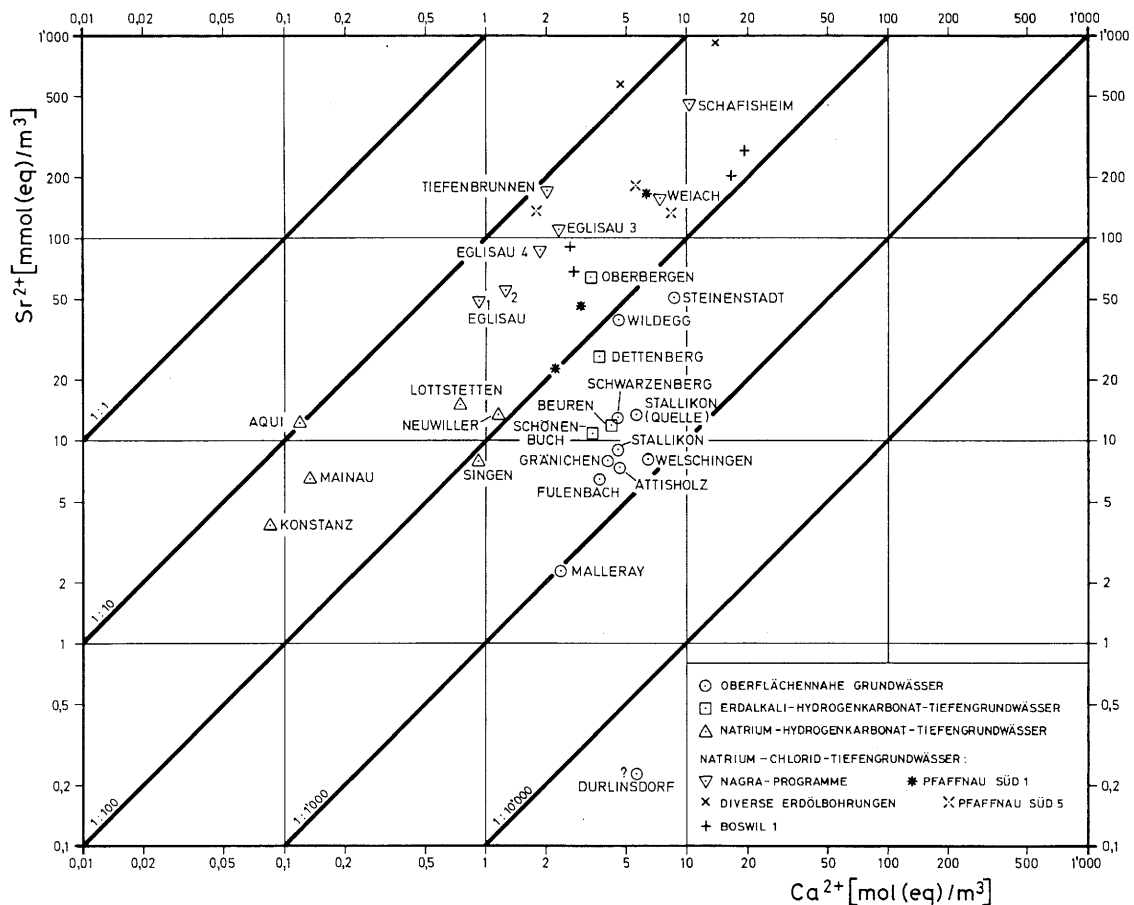


Fig. 21: Beziehung zwischen Strontium- und Calcium-Konzentration

4.3.5.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben Strontium-Konzentrationen zwischen rund $3 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$ und $15 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$. Sie liegen also in einem ähnlichen Bereich wie die oberflächennahen Grundwässer, obwohl die beiden anderen Erdalkalien, Calcium und Magnesium, durch den Kationenaustausch stark vermindert sind. Dadurch ist das molare Verhältnis in den drei Wässern der Malm- und

Dogger-Aquifere auf $\text{Sr}/\text{Ca} = 8,6 \times 10^{-3}$ (Singen) bis $\text{Sr}/\text{Ca} = 20,0 \times 10^{-3}$ (Mittel Lottstetten) und in den drei Wässern der Molasse-Aquifere auf $\text{Sr}/\text{Ca} = 46 \times 10^{-3}$ (Konstanz) bis $\text{Sr}/\text{Ca} = 102 \times 10^{-3}$ (Zürich-Aqui) erhöht.

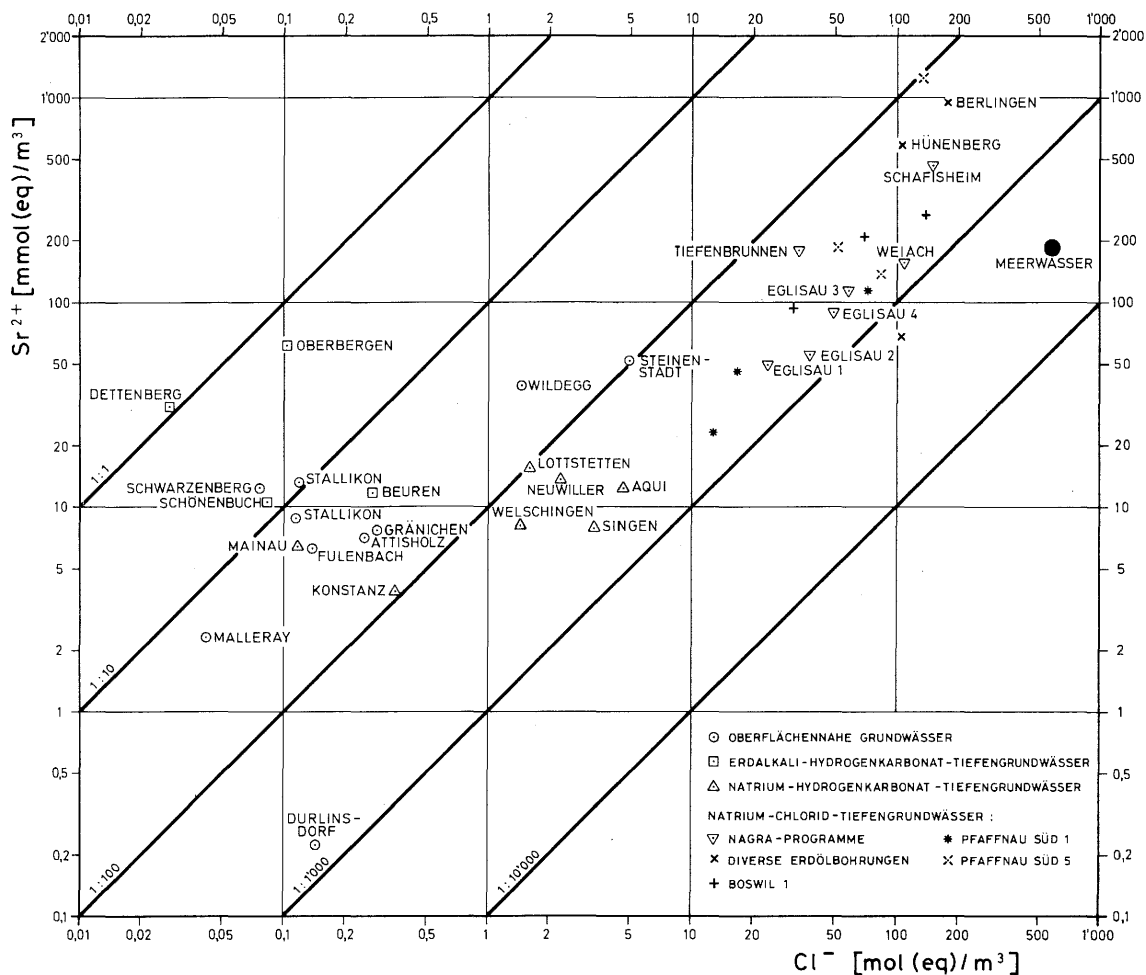


Fig. 22: Beziehung zwischen Strontium- und Chlorid-Konzentration

4.3.5.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer haben durchwegs höhere Strontium-Konzentrationen als die oberflächennahen Grundwässer, die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer (mit Ausnahme von Oberbergen) und die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer. Die Konzentration beträgt im Minimum etwa $50 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$ (Eglisau 1) und im Maximum $465 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$ (Schafisheim).

Das molare Sr/Ca-Verhältnis hat einen ähnlichen Variationsbereich wie in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern, welche aber an keiner Stelle eine höhere Konzentration als ungefähr $15 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$ (Lottstetten) haben. In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Nagra-Programme beträgt das molare Verhältnis im Minimum $\text{Sr}/\text{Ca} = 21 \times 10^{-3}$ (Weiach) und im Maximum $\text{Sr}/\text{Ca} = 86 \times 10^{-3}$. Die Eglisauer Reihe hat ziemlich einheitliche Verhältnisse von $\text{Sr}/\text{Ca} = 44\text{--}50 \times 10^{-3}$; in diesem Bereich liegt auch Schafisheim, das andere USM-Wasser.

Die Natrium-Chlorid-Wässer aus USM-Aquiferen von Erdölbohrungen zeigen, soweit in ihnen die Strontium-Konzentrationen quantifiziert wurden, ähnliche Variationsbereiche. Mit einer Ausnahme (Pfaffnau Süd 1, 595,5-702,25 m: $23 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$) ist die niedrigste quantifizierte Äquivalentkonzentration $46 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$. Die maximale Konzentration der Nagra-Programme wird in den Erdölbohrungen noch überschritten:

	Tiefe (m)	Sr^{2+} ($\text{mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$)
Hünenberg	2357-2392	571
Berlingen	1350,5-1354,5	936
Pfaffnau Süd 5	905-906,75	1233

Mit der gleichen Ausnahme wie bei der Konzentration schwanken die molaren Verhältnisse zwischen $\text{Sr}/\text{Ca} = 12 \times 10^{-3}$ (Boswil 1262,0-1263,75 m) und $\text{Sr}/\text{Ca} = 146 \times 10^{-3}$ (Pfaffnau Süd 5; 905-906,75 m).

Sowohl in den Wässern der Nagra-Programme als auch in denen der Erdölbohrungen sind die molaren Sr/Ca -Relationen grösser als der $\text{Sr}/\text{Ca} = 9 \times 10^{-3}$ betragende Wert des Meerwassers und in allen Analysen der Nagra-Programme und in den meisten Analysen von Wässern der Erdölbohrungen auch grösser als der $\text{Sr}/\text{Ca} = 14 \times 10^{-3}$ betragende Wert der durch Auslaugung aus dem Trias-Salinar gewonnenen Sole (Rheinfelder Sole nach HÖGL 1980, 220). Im Wasser von Schafisheim und in mehreren Wässern aus Erdölbohrungen ist auch die

absolute Strontium-Konzentration höher als die 185 mmol(eq) $\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$ betragende Konzentration des Meerwassers, obwohl die Chlorid-Konzentrationen deutlich unter denen des Meerwassers bleiben.

Die relative Strontium-Anreicherung gegenüber Meerwasser wird noch augenfälliger, wenn wir das Verhältnis Sr/Cl betrachten. Dieses beträgt im Meerwasser $\text{Sr}/\text{Cl} = 0,34 \times 10^{-3}$ und in der Rheinfelder Sole $\text{Sr}/\text{Cl} = 0,2 \times 10^{-3}$. In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Nagra-Untersuchungsprogramme finden wir Werte zwischen $\text{Sr}/\text{Cl} = 1,5 \times 10^{-3}$ (Weiach) und $\text{Sr}/\text{Cl} = 5,3 \times 10^{-3}$ (Zürich-Tiefenbrunnen). Die Reihe der Wässer von Eglisau und Weiach bewegt sich im engen Bereich zwischen $\text{Sr}/\text{Cl} = 1,5 \times 10^{-3}$ und $\text{Sr}/\text{Cl} = 2,1 \times 10^{-3}$. In den meisten USM-Wässern der Erdölbohrungen finden wir die Sr/Cl -Verhältnisse im gleichen Variationsbereich wie in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Nagra-Programme (Ausnahmen: Boswil 947-948,75 m mit $\text{Sr}/\text{Cl} = 0,65 \times 10^{-3}$, Hünenberg 2357-2392 m und Berlingen 1350,5-1354,5 m mit je $\text{Sr}/\text{Cl} = 5,4 \times 10^{-3}$ und Pfaffnau Süd 5 905-906,75 m mit $\text{Sr}/\text{Cl} = 9,4 \times 10^{-3}$ (Fig. 21).

4.3.5.5 Strontium-Fluorid-Verhältnis (Fig. 23)

Auffällige Unterschiede bestehen im Verhältnis zwischen Strontium und Fluorid. In den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern schwankt das Äquivalentverhältnis bei Strontium-Konzentrationen von rund 4-15 mmol(eq) $\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$ zwischen $\text{Sr}/\text{F} = 0,01$ (Mainau) und $\text{Sr}/\text{F} = 0,09$ (Zürich-Aqui). In den Strontium-Konzentrationen von rund 50-465 mmol(eq) $\text{Sr}^{2+}/\text{m}^3$ aufweisenden Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern finden sich viel höhere Äquivalentverhältnisse zwischen $\text{Sr}/\text{F} = 0,6$ (Eglisau 1) und $\text{Sr}/\text{F} = 6,0$ (Schafisheim). In diesem Streuungsbereich liegen auch die Äquivalentverhältnisse der untersuchten oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malmaquifere.

Die verschiedenen Grundwässer sind wie folgt streng unterscheidbar:

	F^{-} (mmol/m ³) (eq)	Sr^{2+} (mmol/m ³) (eq)	Sr^{2+}/F^{-} (Aequi- valent- verhält- nisse)
Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkar- bonat-Tiefengrundwässer	< 40	< 40 ^{*)}	> 1,0
Natrium-Hydrogenkarbonat- Tiefengrundwässer	> 50		< 0,1
Natrium-Chlorid-Tiefen- grundwässer (und Meerwasser)		> 40	> 0,6

*) Ausnahme: Steinenstadt

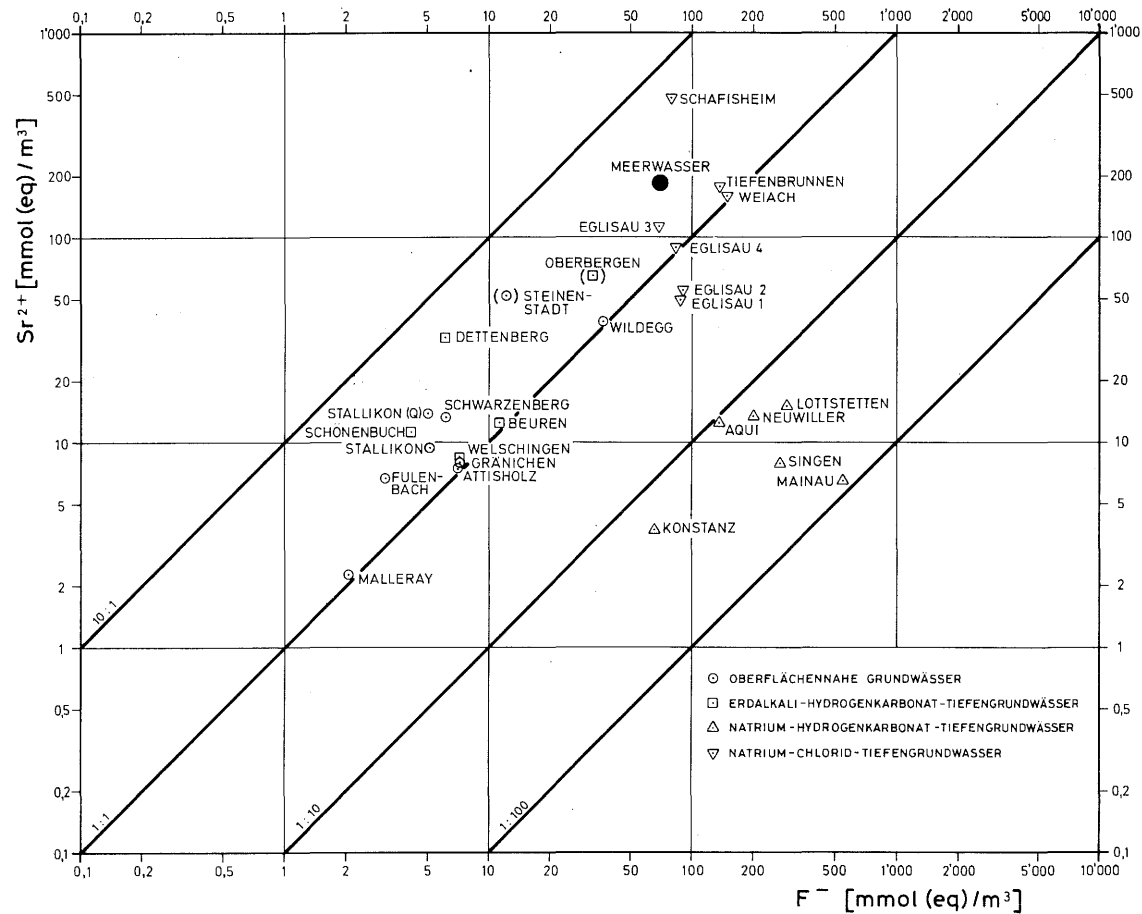


Fig. 23: Beziehung zwischen Strontium- und Fluorid-Konzentration

Wenn wir die Natrium-Chlorid- und die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer allein betrachten, besteht ein Trend von zunehmenden Fluor-Konzentrationen bei abnehmenden Strontium-Konzentrationen (wobei allerdings Konstanz aus dieser Reihe fällt).

4.3.6 Barium (Fig. 24)

Die Barium-Konzentration der oberflächennahen Grundwässer und der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer schwankt zwischen $0,4 \text{ mmol(eq)Ba}^{2+}/\text{m}^3$ (Durlinsdorf) und $3,8 \text{ mmol(eq)Ba}^{2+}/\text{m}^3$ (Welschingen). Die Konzentrationen der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer liegen im selben Variationsbereich.

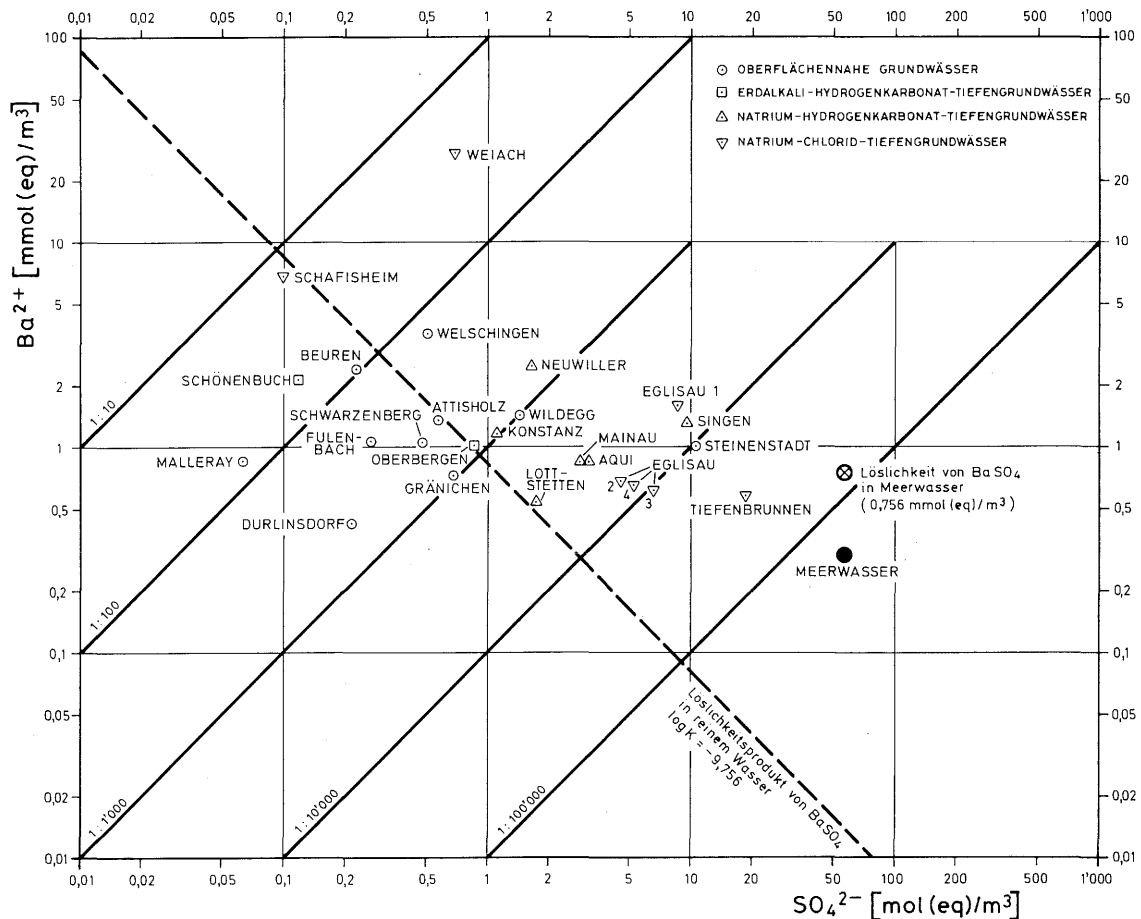


Fig. 24: Beziehung zwischen Barium- und Sulfat-Konzentration

In allen untersuchten Wässern, auch in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern, ist die Barium-Konzentration ebenfalls höher als die $0,3 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Ba}^{2+}/\text{m}^3$ betragende des Meerwassers.

Die Barium-Konzentrationen werden hauptsächlich durch die Löslichkeit von BaSO_4 kontrolliert (vgl. HEM 1985, 115, 137). Diese wird gegenüber dem Löslichkeitsprodukt in reinem Wasser durch Lösungsgenossen stark erhöht, was sich insbesondere in Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern auswirken muss. Zum Beispiel beträgt die Löslichkeit von BaSO_4 in dem $56,4 \text{ mol}(\text{eq})\text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ enthaltenden Meerwasser bei 25°C $0,753 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Ba}^{2+}/\text{m}^3$ ($87,9 \text{ } \mu\text{g BaSO}_4/\text{l}$, PUCHELT 1972, 56-H-3), wohingegen die Löslichkeit in reinem Wasser bei einer $56,4 \text{ mol}(\text{eq})\text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ entsprechenden SO_4^{2-} -Aktivität nur $0,012 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Ba}^{2+}/\text{m}^3$ beträgt ($\log K = -9,756$ nach PLUMMER et al. 1976, 19).

Die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer mit verhältnismässig hohen Sulfat-Konzentrationen zwischen $4,5$ und $18,6 \text{ mol}(\text{eq})\text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ (Zürich-Tiefenbrunnen, Eglisau 1-4) haben verhältnismässig niedrigere Barium-Konzentrationen, die zwischen $0,6$ und $1,6 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Ba}^{2+}/\text{m}^3$ variieren. Die sehr niedere Sulfat-Konzentration von $0,67 \text{ mol}(\text{eq})\text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ und $0,10 \text{ mol}(\text{eq})\text{SO}_4^{2-}/\text{m}^3$ und zugleich die höchsten Chlorid-Konzentrationen aufweisenden Wässer von Weiach und Schafisheim haben dagegen die höchsten Barium-Konzentrationen von $27,7 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Ba}^{2+}/\text{m}^3$ und $6,8 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Ba}^{2+}/\text{m}^3$. Dies bestätigt die von der Löslichkeit von Barium verursachte inverse Korrelation zwischen Sulfat und Barium, wie dies bei höheren Barium-Konzentrationen als hier in Sedimentaquiferen des Gulf of Mexico Basins ebenfalls festgestellt wurde (MACPHERSON 1989, Fig. 2, 453-454).

Sättigungsberechnungen (vgl. 4.7) haben gezeigt, dass die oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer mit Ausnahme der Mischwässer Wildegg und Steinenstadt sowie den Wässern von Welschingen und Attisholz in bezug auf Baryt untersättigt sind, wobei das USM-Wasser Attisholz gerade die Sättigung bezüglich Baryt erreicht hat. Die Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer zeigen dagegen mit Ausnahme des nur schwach untersättigten Wassers von Lottstetten und des deutlich untersättigten Wassers von Schafisheim alle eine deutliche Uebersättigung hinsichtlich Baryt.

4.3.7 Mangan (Fig. 25)

4.3.7.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In rund der Hälfte aller untersuchten oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere findet sich kein Mangan in Konzentrationen über der bei $0,07 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Mn}^{2+}/\text{m}^3$ ($0,002 \text{ mg/l}$) liegenden Nachweisgrenze. Nur in drei Wässern dieser Gruppen wird eine der zehnfachen Nachweisgrenze entsprechende Mangan-Konzentration überschritten, in Malleray mit $1,1 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$, in Schönenbuch mit $1,3 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ und in der Tiefbohrung Oberbergen mit $2,9 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$.

4.3.7.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben einen ähnlichen Variationsbereich. Nur in Singen wird mit $1,6 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Mn}^{2+}/\text{m}^3$ der zehnfache Wert der Nachweisgrenze überschritten. Eine bei $\text{pH} = 8,95$ hohe Mangan-Konzentration hat das Wasser der Insel Mainau mit $0,44 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Mn}^{2+}/\text{m}^3$.

4.3.7.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern bestehen Hinweise dafür, dass bei den zwischen -150 mV und $+100 \text{ mV}$ variierenden Redox-Spannungen die Mangan-Konzentration wie zu erwarten (HEM 1970, 128-129; HEM 1977, 531-532, WHO (1981), 37; HEM 1985, 86-88) wesentlich durch den pH-Wert kontrolliert wird. In der Eglisauer Reihe abnehmender pH-Werte nimmt die Mangan-Konzentration von Eglisau 1 mit $\text{pH} = 8,47$ zu Eglisau 3 mit $\text{pH} = 8,15$ (Mittel) von $0,22$ auf $0,68 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Mn}^{2+}/\text{m}^3$ (Mittel) zu (das Mittel von Eglisau 4 fällt mit der mittleren Mangan-Konzentration nur wegen eines Ausreissers etwas aus der Reihe). Die Reihe setzt sich im Malm-Wasser von Weiach fort, das beim viel niederen $\text{pH} = 7,26 \pm 0,08$ mit einer verhältnismässig grossen Streuung eine mittlere Konzentration von $21 \pm 14 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Mn}^{2+}/\text{m}^3$ hat.

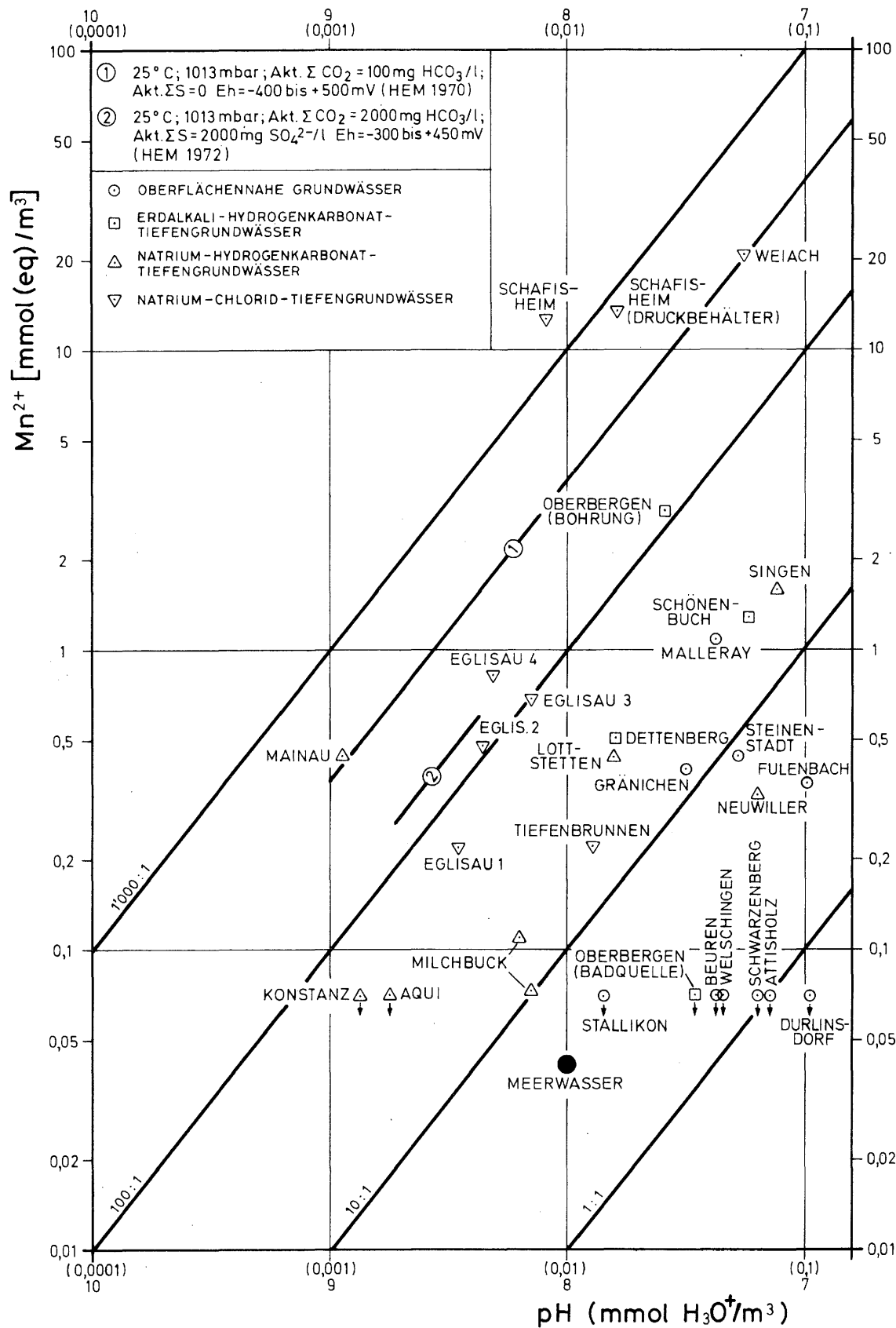


Fig. 25: Beziehung zwischen Mangan-Konzentration und pH-Wert

In dem mit dem Druckbehälter entnommenen USM-Wasser Schafisheim fand sich bei einem pH-Wert von 7,80 (Auslauf = 8,38) eine Mangan-Konzentration von $12,7 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Mn}^{2+}/\text{m}^3$ (Auslauf = 13,1). Das OMM-Wasser von Zürich-Tiefenbrunnen hat trotz verhältnismässig niederem pH ($7,89 \pm 0,06$) im Mittel eine gleich grosse Mangan-Konzentration ($0,22 \pm 0,05 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$) wie bei einem höheren pH (8,47) das Wasser Eglisau 1. Vermutlich ist im Wasser Zürich-Tiefenbrunnen die Konzentration durch die Verfügbarkeit von Mangan im Aquifer beschränkt. In allen Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern ist Mangan gegenüber dem Meerwasser angereichert, in welchem die mittlere Konzentration nur etwa $0,02\text{--}0,05 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Mn}^{2+}/\text{m}^3$ beträgt ($0,4 \text{ }\mu\text{g/l}$ nach TUREKIAN 1969, 310; $1,3 \text{ }\mu\text{g/l}$ nach WEDEPOHL 1978, 25-I-8). Ein grösserer Variationsbereich der Mittelwerte wird je nach Meer mit $0,06$ bis $6,1 \text{ }\mu\text{g/l}$ angegeben (WHO 1981, 33).

4.3.8 Eisen (Fig. 26)

In den meisten Wässern wurde sowohl Fe^{2+} als auch Fe total bestimmt. Man kann davon ausgehen, dass das Grundwasser im Aquifer nur gelöstes Eisen enthält, bei welchem es sich in den gemessenen pH- und Redoxbereichen um Fe^{2+} handelt. Differenzen zwischen Gesamteisen (Fe total) und Fe^{2+} sind danach entweder auf Veränderungen der Eisenlöslichkeit zurückzuführen (MATTHESS 1973, 190), verursacht durch geringe Verschiebungen des pH oder der Redox-Spannung in der Fassung, oder bei der Probenentnahme oder auf das Abschwemmen ungelöster Eisenoxide von Werkstoffen der Fassung. Typisch ist, dass sowohl die Fe^{2+} als auch die Gesamteisen-Konzentrationen bei einigen Probenentnahmestellen, an denen mehrere Proben untersucht wurden, sehr stark streuen.

Sind die Streuungen, wie im Falle von Lottstetten gering, so sind dies auch alle Differenzen zwischen Fe^{2+} und Gesamteisen. $30,6 \pm 2,4 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe}^{2+}/\text{m}^3$ und $34,3 \pm 2,9 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe total}$ (in Fe^{2+} -Äquivalenten) sind nicht wesentlich voneinander verschieden. In diesem Falle kann angenommen werden, dass das Gesamteisen ungefähr den im Aquifer vorhandenen Konzentrationen des gelösten Eisens entspricht.

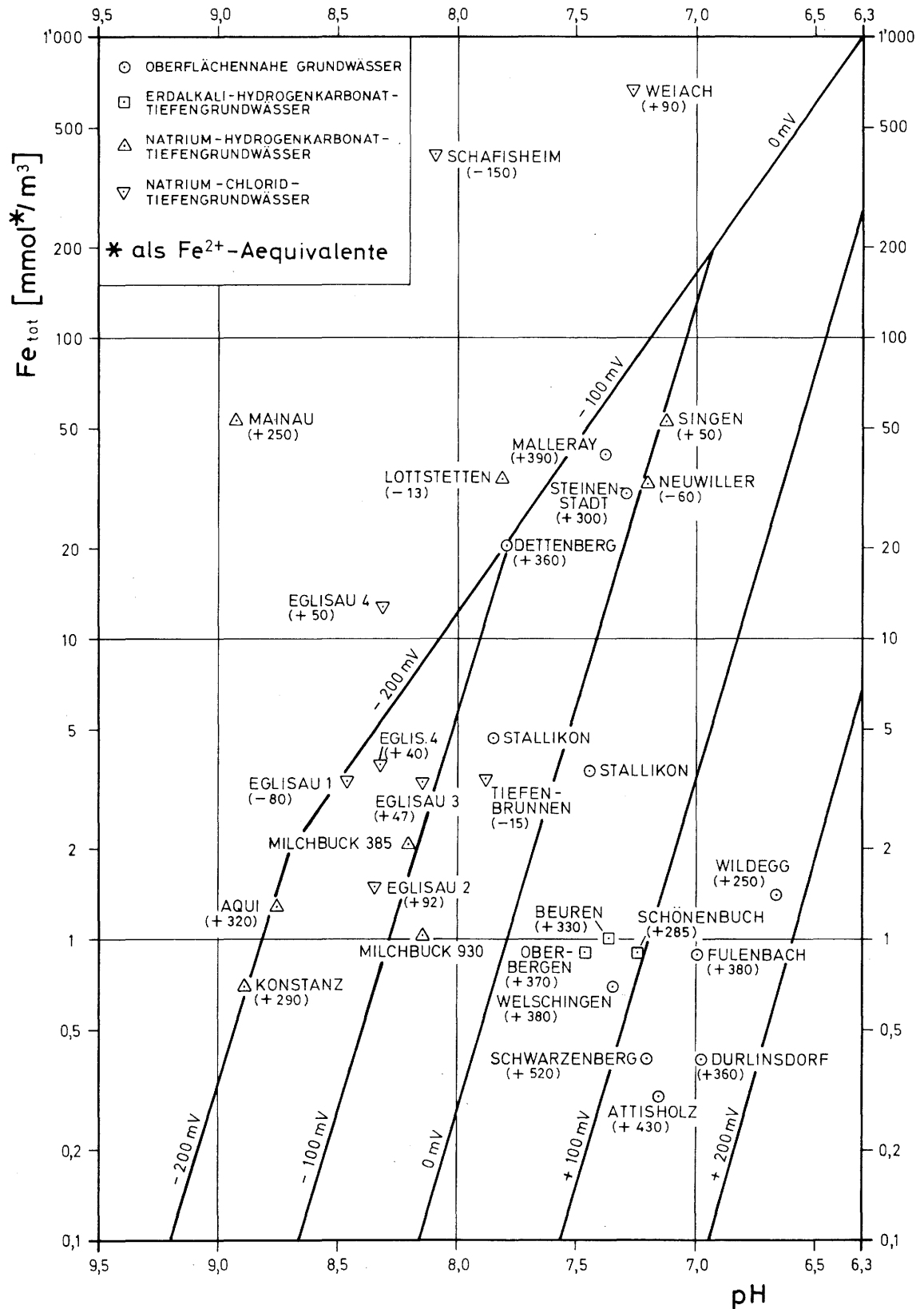


Fig. 26: Beziehung zwischen Eisen-Total-Konzentration und pH-Wert (in Klammern: Messwerte der Redox-Spannungen; Linien gleicher Redox-Spannungen nach Daten von HEM 1985, 81: Fig. 15, für die von ihm angegebenen Bedingungen)

In den Eglisauer Wässern können dagegen Schwankungen von $< 0,7-1,4 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe}^{2+}/\text{m}^3$ wie in Eglisau 2, oder solche von $< 0,7-4,3 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe}^{2+}/\text{m}^3$ wie in Eglisau 4 für das Grundwasser im Aquifer nicht als real angenommen werden. Ebenso wenig kann es sich um im Grundwasser vorkommende Variationen handeln, wenn in einer Probe des Wassers Eglisau 4 eine Konzentration von $58 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe total}/\text{m}^3$ (in Fe^{2+} -Äquivalenten), in fünf anderen aber $2,9-5,4 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe total}/\text{m}^3$ gemessen wurden. Das Wasser Eglisau 3 bestätigt dagegen, dass bei kleineren Streuungen der gemessenen Werte (Mittel $3,0 \pm 1,0 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe}^{2+}/\text{m}^3$ und $3,3 \pm 1,4 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe total}/\text{m}^3$) auch die Differenz zwischen Fe^{2+} und Fe total gering ist.

Als Schlussfolgerung ergibt sich, dass die Analysenwerte von Fe^{2+} und von Fe total nur mit Vorbehalten als geochemischen Parameter betrachtet werden können.

4.3.8.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die meisten oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Nagra-Programme enthalten keine Fe^{2+} -Konzentrationen, die über der Nachweisgrenze von höchstens $0,7 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ ($0,02 \text{ mg/l}$) liegen. In diesen Wässern ist aber Eisen als Fe total in Konzentrationen von $0,4-1,4 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ (in Fe^{2+} -Äquivalenten) vorhanden (Analysen Fresenius; in Analysen Bachema der zwei Wässer Stallikon sogar bis $4,7 \text{ mmol}/\text{m}^3$). Es handelt sich um Wässer, die bei pH-Werten zwischen etwa 6,7 und 7,5 Redox-Spannungen von etwa 250-500 mV aufweisen, und in denen daher die geringe Löslichkeit von Eisen nicht überraschend ist.*) Wenn in diesen pH- und Redox-Spannungs-Bereichen

*) Nach dem Diagramm von HEM 1985, 81, würde zum Beispiel ein Wasser mit $\text{pH} = 7,0$ und einer Redox-Spannung von 50 mV bei 25°C und 1 at eine Eisenlöslichkeit $20 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe}^{2+}/\text{m}^3$ haben, wenn die Aktivität der Schwefel-Spezies $96 \text{ mg SO}_4^{2-}/\text{l}$ ($= 2 \text{ mol}/\text{m}^3$) und die Aktivität der Kohlendioxid-Spezies 61 mg HCO_3^- ($= 1 \text{ mol}/\text{m}^3$) entspricht, bei einer Redox-Spannung von etwa +180 mV aber nur noch $0,2 \text{ mmolFe}^{2+}(\text{eq})/\text{m}^3$ (Für Wasser mit $9,6 \text{ mg SO}_4^-/\text{l} = 0,2 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$, vergleiche HEM 1977, 528: Fig. 1b).

hohe Fe^{2+} - und/oder Fe total-Aequivalentkonzentrationen auftreten, wie sie in Malleray (3,2/41,2 mmol(eq)/m³), in Steinenstadt (30,8/30,8) und im Dettenbergtunnel (20,8/-) gemessen wurden, sind im Aquifer niedrigere Sauerstoff-Konzentrationen und Redox-Spannungen zu vermuten, da bei der Probenentnahme wahrscheinlich eine nachträgliche Belüftung des Wassers stattfand.

4.3.8.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Bei den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern zeigt die Reihe Konstanz-Aqui-Milchbucktunnel-Lottstetten-Neuwiller-Singen mit abnehmenden pH-Werten erwartungsgemäss eine Zunahme der Fe^{2+} - und/oder der Fe total-Konzentrationen. Die drei Malm- und Dogger-Tiefengrundwässer Lottstetten (Mittel), Neuwiller und Singen haben unter den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern des Nagra-Regionalprogramms die niedrigsten pH-Werte (7,1-7,8) und die höchsten Eisen-Konzentrationen 30-45 mmol(eq)Fe²⁺/m³, 33-54 mmol(eq)Fe total/m³ (in Fe^{2+} -Aequivalenten). Die gemessenen Redox-Spannungen sind verhältnismässig niedrig (-60 bis +50 mV) und Sauerstoff ist nicht oder nur in extrem niedrigen Konzentrationen nachgewiesen.

Die Molasse-Tiefengrundwässer Konstanz und Zürich-Aqui haben höhere pH-Werte (8,7-8,9) und niedrige Eisen-Konzentrationen < 0,7 mmol(eq)Fe²⁺/m³, 0,7-1,3 mmol(eq)Fe total/m³. Da in einem solchen Tiefengrundwasser kein Sauerstoff vorhanden sein dürfte, dieser aber am Ort der Probenentnahme mit 1,1-1,8 g/m³ gemessen wurde, ist anzunehmen, dass die Redox-Spannung im Aquifer tiefer als gemessen (+220-290 mV) ist und gelöstes Eisen durch die Redox-Verschiebung ausgefällt wurde.

Weder mit den pH- noch mit den Eisen-Werten lässt sich das Molasse-Wasser Mainau in die Reihe der anderen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer einordnen (43 mmol(eq)Fe²⁺/m³, 57 mmol(eq)Fe total/m³, pH = 8,95 Redox-Spannung = +250 mV; die relativ hohen pH- und Fe-Werte werden auch durch die Angaben von BERTLEFF bestätigt).

4.3.8.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Unter den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern haben die Wässer Eglisau 2-4 bei $\text{pH} > 8,0$ und Redox-Spannungen von meistens zwischen 0 und +100 mV mittlere Eisen-Konzentrationen von $< 0,9-3,0 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe}^{2+}/\text{m}^3$ und von $1,5-3,8 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe total}/\text{m}^3$ (ohne Ausreisser 58 mmol/l in Eglisau 4; in Fe^{2+} -Äquivalenten). In den Variationsbereichen der Wässer Eglisau 2-4 liegen auch die Wässer Eglisau 1 mit einem etwas höheren pH-Wert (8,5), aber einer eher niedrigen Redox-Spannung (gemessen -80 mV) und Zürich-Tiefenbrunnen mit einem etwas tieferen pH-Wert (Mittel = 7,9) und einer mindestens in einer Probe verhältnismässig niedrigen Redox-Spannung (gemessen -130 mV, zweite Probe +100 mV).

Die Druckbehälterprobe des USM-Wassers Schafisheim mit einem gemessenen $\text{pH} = 7,80$ enthielt $18 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe}^{2+}/\text{m}^3$.

Einen noch kleineren gemessenen pH-Wert hat das Malm-Wasser von Weiach. Im Mittel der drei Proben betrug er $\text{pH} = 7,25 \pm 0,08$, in der Druckbehälterprobe $\text{pH} = 7,22$. Die Eisen-Konzentration betrug im Mittel $689 \pm 212 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe total}/\text{m}^3$, allein in der GTC-Druckbehälterprobe $723 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe total}/\text{m}^3$ (Fe^{2+} ist nicht bestimmt worden, die Redox-Spannung mit +90 mV nur in einer DST-Probe mit $462 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Fe total}/\text{m}^3$).

Insgesamt zeichnet sich wie bei den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern auch bei den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern als Trend eine Zunahme der Eisen-Konzentration mit abnehmendem pH ab. Die höchste Eisen-Konzentration tritt zusammen mit dem tiefsten pH-Wert wiederum in einem Malm-Wasser auf (Weiach).

4.3.9 Nickel, Kupfer, Zink und Blei

4.3.9.1 Geochemische und Werkstoff-Einflüsse

Nur in drei Wässern der Tertiär- und Malm-Aquifere waren alle vier Metalle nicht nachweisbar; wobei die Nachweisgrenzen der einzelnen Metalle bei folgenden Konzentration liegen:

Nickel:	$< 0,07 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Ni}^{2+}/\text{m}^3$	($< 0,002 \text{ mg/l}$)
Kupfer:	$< 0,06 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Cu}^{2+}/\text{m}^3$	($< 0,002 \text{ mg/l}$)
Zink:	$< 0,06 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Zn}^{2+}/\text{m}^3$	($< 0,002 \text{ mg/l}$)
Blei:	$< 0,02 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Pb}^{2+}/\text{m}^3$	($< 0,002 \text{ mg/l}$)

Dabei handelt es sich um das oberflächennahe Molassegrundwasser Attisholz, um das oberflächennahe Malm-Grundwasser Malleray und um das Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser Dettenberg (in diesem ohne Zn-Bestimmung).

Wo eines oder mehrere der vier Metalle nachweisbar sind, muss in Betracht gezogen werden, dass es sich um Korrosionsprodukte von Werkstoffen der Fassungsanlagen und -einrichtungen handeln könnte. Dies ist vor allem dann zu vermuten, wenn bei Probenentnahmestellen, an welchen mehrere Proben erhoben wurden, grosse Streuungen der Werte auftreten. So wurden im Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser des Malms von Weiach je nach Probenentnahmeart sehr unterschiedliche Zink-Konzentrationen zwischen 3 und 800 $\text{mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ (= 95-26'000 $\mu\text{g/l}$), Kupfer-Konzentrationen zwischen 0,2 und 2,9 $\text{mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ (= 6-93 $\mu\text{g/l}$) und Blei-Konzentrationen zwischen 0,14 und 7 $\text{mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ (= 15-720 $\mu\text{g/l}$) gefunden. Je nach Probenentnahmeart sehr unterschiedliche Werte ergab auch die Bestimmung der Zink-Konzentration im USM-Wasser von Schafisheim 340 und 3,4 $\text{mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ (= 11'100 und 110 $\mu\text{g/l}$). Es können auch kaum geochemische Ursachen angenommen werden, wenn im Wasser Eglisau 4 die Kupfer-Konzentration zwischen 0,06 und 2,8 $\text{mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ (0,002-0,09 mg/l , nur Analysen Fresenius) und die Zink-Konzentration zwischen $< 0,06$ und 0,34 $\text{mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ (< 2 -11 mg/l) variiert.

4.3.9.2 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Nach der Fassungsart sind aber Werkstoff-Einflüsse in den oberflächennahen Grundwässern von Schwarzenberg, Gränichen, Fulenbach und Durlinsdorf unwahrscheinlich. Die deutlich über den Nachweisgrenzen liegenden Kupfer- und Zink-Konzentrationen in den vier Wässern weisen darauf hin, dass diese Metall-Ionen in natürlichen Grundwässern vorkommen. Die Verknüpfung mit Molassekohlen in Schwarzenberg und mit Oelsanden in Fulenbach mag ein Hinweis dafür sein, dass

organische Substanzen für die Verfügbarkeit der beiden Metalle von Bedeutung sind. Gemessen wurden bis zu $0,50 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Cu}^{2+}/\text{m}^3$ (Fulenbach $16 \text{ } \mu\text{g}/\text{l}$) und bis zu $0,46 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Zn}^{2+}/\text{m}^3$ (Gränichen $15 \text{ } \mu\text{g}/\text{l}$). Nickel ist in den vier Wässern entweder nicht nachgewiesen oder nur mit Konzentrations-Werten quantifiziert, die lediglich halb so gross wie die sonst massgebenden Nachweisgrenzen sind ($1 \text{ } \mu\text{g}/\text{l}$ in Schwarzenberg und in Durlinsdorf). Blei ist in keinem der vier Wässer mit einer über der Nachweisgrenze ($0,02 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3 = 2 \text{ } \mu\text{g}/\text{l}$) liegenden Konzentration enthalten. Dieses ist dagegen mit $0,03 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Pb}^{2+}/\text{m}^3$ ($3 \text{ } \mu\text{g}/\text{l}$) in einer von zwei Proben des Vulkanit-Grundwassers von Oberbergen quantifiziert, in welchem Werkstoffeinflüsse ebenfalls unwahrscheinlich sind und Nickel, Kupfer sowie Zink nicht nachweisbar waren.

In anderen Analysen von oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern wie auch in fast allen Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern ist nicht zu entscheiden, ob über den Nachweisgrenzen liegende Konzentrationen von Nickel, Kupfer, Zink und Blei auf geochemische oder auf Werkstoff-Einflüsse zurückzuführen sind.

4.3.9.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Unter den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern ist der Datensatz von Lottstetten am vertrauenswürdigsten, weil hier 6 Proben mit dem vollständigsten Analysentyp vorliegen, deren Nickel-, Kupfer-, Zink- und Blei-Konzentrationen verhältnismässig wenig variieren, nämlich

Nickel:	< $0,07\text{--}0,10 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$	(< $2\text{--}13 \text{ } \mu\text{g}/\text{l}$
Kupfer:	< $0,06\text{--}0,19 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$	(< $2\text{--}6 \text{ } \mu\text{g}/\text{l}$, ohne einen Ausreisse von $27 \text{ } \mu\text{g}/\text{l}$)
Zink:	< $0,06\text{--}0,15 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$	(< $2\text{--}5 \text{ } \mu\text{g}/\text{l}$)
Blei:	< $0,02\text{--}0,02 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$	(< $2\text{--}2 \text{ } \mu\text{g}/\text{l}$)

Alle Konzentrationen streuen somit um die Nachweisgrenzen.

4.3.9.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Unter den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern liefern die je 6 Analysen des Instituts Fresenius der Wässer Eglisau 2 und Eglisau 3 die vertrauenswürdigsten Datensätze. Die Variationsbereiche sind verhältnismässig eng:

Nickel ist zumeist nicht nachweisbar ($< 0,07 \text{ mmol(eq)/m}^3$ oder $< 2 \text{ } \mu\text{g/l}$) oder nicht quantifizierbar (Spur) und nur in einer Probe von Eglisau 3 mit $0,10 \text{ mmol(eq)/m}^3$ ($= 3 \text{ } \mu\text{g/l}$) quantifiziert.

Kupfer variiert in Eglisau 2 zwischen $< 0,06$ und $0,09 \text{ mmol(eq)/m}^3$ ($< 2\text{--}3 \text{ } \mu\text{g/l}$) in Eglisau 3 deutlich höher zwischen $0,09$ und $0,22 \text{ mmol(eq)/m}^3$ ($3\text{--}7 \text{ } \mu\text{g/l}$; Mittel und Standardabweichung $= 0,13 \pm 0,05 \text{ mmol(eq)/m}^3$).

Zink schwankt in den beiden Wässern zwischen $< 0,06$ und $0,18 \text{ mmol(eq)/m}^3$ ($< 2\text{--}6 \text{ } \mu\text{g/l}$; Mittel und Standardabweichung $< 0,08 \pm 0,04 \text{ mmol(eq)/m}^3$ und $< 0,11 \pm 0,05 \text{ mmol(eq)/m}^3$).

Blei ist nur in je einer von sechs Proben gerade an der Nachweisgrenze von $0,02 \text{ mmol(eq)/m}^3$ ($2 \text{ } \mu\text{g/l}$) oder mit $0,03 \text{ mmol(eq)/m}^3$ ($3 \text{ } \mu\text{g/l}$) quantifiziert.

4.3.9.5 Geochemische Daten

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die oberflächennahen Grundwässer und die Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere, in deren Proben kein Verdacht von Werkstoffeeinflüssen besteht, Nickel und Blei meistens nicht in nachweisbaren Konzentrationen enthalten. Wenn Blei oder Nickel nachgewiesen werden können, liegen die Konzentrationen an oder wenig über den Nachweisgrenzen. Kupfer und Zink sind in vertrauenswürdigen Datensätzen von Tiefengrundwässern mit niedrigeren Konzentrationen (höchstens $0,22 \text{ mmol(eq)Cu}^{2+}/\text{m}^3 = 7 \text{ } \mu\text{g/l}$ und $0,18 \text{ mmol(eq)Zn}^{2+}/\text{m}^3 = 7 \text{ } \mu\text{g/l}$) enthalten als in einigen sauerstoffhaltigen und wahrscheinlich nicht unter Werkstoffeeinflüssen stehenden oberflächennahen Grundwässern (bis $0,50 \text{ mmol(eq)Cu}^{2+}/\text{m}^3 = 16 \text{ } \mu\text{g/l}$ und $0,46 \text{ mmol(eq)Zn}^{2+}/\text{m}^3 = 15 \text{ } \mu\text{g/l}$).

Die Löslichkeit von Kupfer im Gleichgewicht mit Oxiden ist im oxidierenden Milieu tatsächlich grösser als im reduzierenden Milieu und nimmt im sauerstoffhaltigen Wasser mit steigendem pH-Wert ab (GARRELS & CHRIST 1965 in WEDEPOHL 1974, 29-D-10; HEM 1970, 202; MATTHESS 1973, 206; HEM 1977, 530: Fig. 4; STUMM & MORGAN 1981, 248; HEM 1985, 141; BROOKINS 1988, 60-64). Zum Beispiel fällt die Kupferkonzentration von 64 µg/l bei pH 7,0 auf 6,4 µg/l bei pH 8,0 (HEM 1970, 202). Die Zink-Löslichkeit nimmt bis pH 9,5 ebenfalls mit steigendem pH-Wert ab (WEDEPOHL 1972, 30-H-2/3; HEM 1970, 204; MATTHESS 1973, 209; HEM 1977, 535: Fig. 12; STUMM & MORGAN 1981, 248; HEM 1985, 142; BROOKINS 1988, 54-55). In den sauerstofflosen Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere dürften Kupfer und Zink durch das pH, das Kupfer auch durch die Redox-Spannung limitiert sein, in den sauerstoffhaltigen Wässern dagegen beide eher durch die Verfügbarkeit in den Aquifer-Gesteinen.

4.3.10 Nicht oder nur ausnahmsweise nachgewiesene Spurenelemente

Die in diesem Kapitel erwähnten Spurenelemente sind im Rahmen der Nagra-Regional- und Ueberwachungsprogramme nur von Juli 1981 bis August 1982 und in der Bohrung Weiach im Juni 1983 untersucht worden. In den Analysen des USM-Wassers der Bohrung Schafisheim sind diese Spurenelemente nicht mehr berücksichtigt worden.

In keiner der vom Institut Fresenius in den Nagra-Programmen untersuchten Wasserproben aus Tertiär- und Malm-Aquiferen waren eines der folgenden Spurenelemente nachweisbar:

	Bestimmungsgrenzen	
<u>Beryllium:</u>	0,0001-0,001 mg Be/l	0,02-0,22 mmol(eq)Be ²⁺ /m ³
<u>Titan:</u>	0,005 mg Ti/l	0,10 mmol(eq)TiOOH ⁺ /m ³
<u>Zirkon:</u>	0,01 mg Zr/l	0,44 mmol(eq)Zr ⁴⁺ /m ³
<u>Vanadium:</u>	0,005 mg V/l	0,10 mmol(eq)VO ₃ ⁻ /m ³

Kobalt ist nur in einer von zwei Proben des Natrium-Chlorid-Wassers aus dem Malm von Weiach gerade mit einer an der Bestimmungsgrenze von 0,005 mg/l (0,17 mmol(eq)Co²⁺/m³) liegenden Konzentration nachgewiesen. Möglicherweise stammt es von bei der Bohrung benützten Werkstoffen.

Silber ist ebenfalls in einer von zwei Proben aus Weiach nachgewiesen, wobei die Konzentration mit $0,003 \text{ mg/l} = 0,03 \text{ mmol(eq)/m}^3$ wenig über der Bestimmungsgrenze lag. Gerade an der Bestimmungsgrenze von $0,002 \text{ mg/l} = 0,02 \text{ mmol(eq)Ag}^+/\text{m}^3$ wurde es im oberflächennahen Grundwasser von Fülenbach nachgewiesen, welches aus der Ölsandhaltigen USM stammt. In allen anderen Wässern aus Tertiär- und Malm-Aquifern war Silber nicht nachweisbar.

Zinn ist nur in einer von zwei Proben des Natrium-Chlorid-Wassers von Zürich-Tiefenbrunnen mit einer über der Bestimmungsgrenze von $0,005 \text{ mg/l} = 0,08 \text{ mmol(eq)Sn}^{2+}/\text{m}^3$ liegenden Konzentration von $0,009 \text{ mg/l} = 0,125 \text{ mmol Sn}^{2+}/\text{m}^3$ nachgewiesen.

4.4 Dissoziierte Nebenbestandteile: Anionen

4.4.1 Fluorid (Fig. 27)

4.4.1.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere haben niedrige Fluor-Konzentrationen von $< 15 \text{ mmol(eq)F}^-/\text{m}^3$ ($< 0,3 \text{ mg/l}$). Nur wenn Tiefengrundwässer beigemischt sind kann es zu etwas höheren Werten zwischen 30 und 40 $\text{mmol(eq)F}^-/\text{m}^3$ (maximal $0,7 \text{ mg/l}$) kommen, wie im Malmwasser von Wildeggen und im Wasser des Vulkanit-Aquifers von Oberbergen.

4.4.1.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Alle untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere haben durchwegs höhere Fluorid-Konzentrationen als oberflächliche Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer. Die Minimalkonzentration liegt in den Proben der Nagra-Programme bei $66 \text{ mmol(eq)F}^-/\text{m}^3$ ($1,25 \text{ mg/l}$) und in Analysen des Laboratoire d'Hydrogéologie Strasbourg von Tiefengrundwässern des Malm- und Dogger-Aquifers von Michelbach bei $55 \text{ mmol(eq)F}^-/\text{m}^3$ ($0,97 \text{ mg/l}$). Die höchsten

Konzentrationen von mindestens $200 \text{ mmol}(\text{eq})\text{F}^-/\text{m}^3$ und maximal $537 \text{ mmol}(\text{eq})\text{F}^-/\text{m}^3$ kommen in Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern vor, die weniger als $1,2 \text{ mol}(\text{eq})\text{Ca}^{2+}/\text{m}^3$ enthalten: Neuwiller, Singen, Lottstetten, Mainau.

Da einerseits die Fluor-Konzentration in Gegenwart von Calcium-Ionen durch das Löslichkeitsprodukt des Fluorits limitiert wird und andererseits Hydroxyl-Ionen wegen des nahezu gleichen Radius das an Mineraloberflächen gebundene Fluorid verdrängen können, gelten im allgemeinen stark alkalische und calciumarme Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer als die für eine Fluor-Anreicherung bevorzugtesten (KRAINOV & PETROVA 1979, 113; HEM 1970, 176-178; MATTHESS 1973, 216-217; HEM 1985, 120-123). Deshalb ist bemerkenswert, dass unter den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern die drei im Nagra-Regionalprogramm untersuchten Malm- und Dogger-Wässer

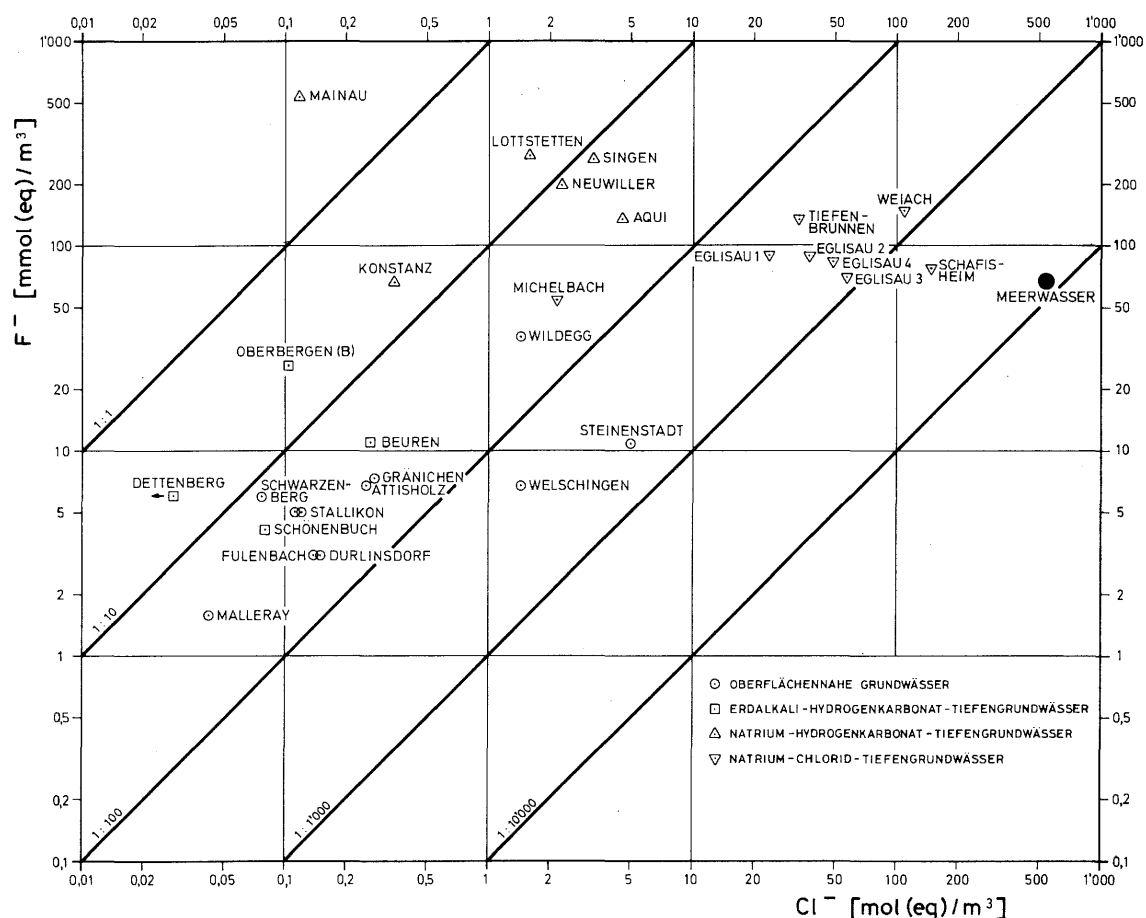


Fig. 27: Beziehung zwischen Fluorid- und Chlorid-Konzentration

Neuwiller, Singen und Lottstetten mit verhältnismässig niederen pH-Werten von 7,1-7,8 und verhältnismässig hohen Calcium-Konzentrationen von 0,9-1,2 mmol(eq)Ca²⁺/m³ zur Gruppe mit mindestens 200 mmol(eq)F⁻/m³ gehören, wohingegen in den Molasse-Wässern Konstanz und Zürich-Aqui bei pH 8,7-8,9 und 0,1-0,2 mol(eq)Ca²⁺/m³ niedere Konzentrationen von 66 und 137 mmol(eq)F⁻/m³ vorkommen. Allerdings wurde auch der Maximalwert von 537 mmol(eq)F⁻/m³ (10,2 mg/l) in einem solchen Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser mit pH 8,95 und 0,14 mol(eq)Ca²⁺/m³ in der Bohrung Mainau gefunden.

Möglicherweise stehen diese Unterschiede damit in Zusammenhang, dass nach anderen Erfahrungen die Fluor-Konzentration zunimmt, wenn unter sonst gleichen Bedingungen die Gebirgsdurchlässigkeit abnimmt (KRAINOV & PETROVA 1979, 114). In Konstanz und in Zürich-Aqui lassen die möglichen Grundwasserentnahmen von 7-10 l/s auf eine verhältnismässig gute Aquifer-Durchlässigkeit schliessen. Aus der Bohrung Mainau waren dagegen nur geringe Wasserentnahmen möglich, was eine lokal geringere Durchlässigkeit vermuten lässt. Geringere Entnahmemöglichkeiten als in Konstanz und Zürich-Aqui bestehen auch in Neuwiller, Singen und Lottstetten. KRAINOV & PETROVA zogen zwei mögliche Ursachen der Abhängigkeit der Fluor-Konzentration von der Gebirgsdurchlässigkeit in Betracht: Eine direkte Ursache - an die in den Tertiär- und Malm-Aquiferen der Nordschweiz vor allem zu denken ist - wäre die bei geringer Durchlässigkeit verstärkte Interaktion zwischen fester und flüssiger Phase. Eine indirekte Ursache wäre nach KRAINOV & PETROVA, dass der geochemische Typ der Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer mit hohen Na+K/Ca-Verhältnissen überhaupt eine Folge kleiner Durchlässigkeiten ist.

4.4.1.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere des Molassebeckens haben eine verhältnismässig kleine Variationsbreite der Fluor-Konzentrationen, die zwischen 68 mmol(eq)F⁻/m³ (Eglisau 3, Mittel) und 143 mmol(eq)F⁻/m³ (Weiach, Mittel) liegen. In der fremden Analyse des Natrium-Calcium-Sulfat-Chlorid-Wassers aus dem Malm-Aquifer von Michelbach im Oberrheingraben wurde bei einer höheren Calcium-Konzentration von 28,8 mol(eq)Ca²⁺/m³ eine etwas

geringere Fluorid-Konzentration von $51 \text{ mmol}(\text{eq})\text{F}^-/\text{m}^3$ festgestellt. In den Natrium-Chlorid-Wässern der Nagra-Programme mit Calcium-Konzentrationen zwischen $1,0$ und $10,4 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$ und pH-Werten zwischen $7,2$ - $8,5$ ist keine Abhängigkeit der Fluor-Konzentrationen von diesen Parametern zu erkennen.

Gegenüber Meerwasser, das $68,4 \text{ mmol}(\text{eq})\text{F}^-/\text{m}^3$ enthält und damit ein molares Verhältnis F/Cl = $0,000125$ hat, ist Fluor in allen Tiefengrundwässern angereichert, die marine oder brackische Formationswässer enthalten. Im chloridreichsten Tiefengrundwasser, dem USM-Wasser von Schafisheim (Mittel), beträgt das Verhältnis bereits $\text{F/Cl} = 0,0005$, in den Wässern von Eglisau, Weiach und Zürich-Tiefenbrunnen (Mittel) $\text{F/Cl} = 0,001$ - $0,004$. Mit abnehmendem Einfluss der marinen oder brackischen Formationswässer nehmen die Fluor-Konzentration und das Verhältnis F/Cl tendenziell zu. Das chloridreichste Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser, Zürich-Aqui, hat mit $137 \text{ mmol}(\text{eq})\text{F}^-/\text{m}^3$ und rund $4,5 \text{ mol}(\text{eq})\text{Cl}^-/\text{m}^3$ ein Verhältnis $\text{F/Cl} = 0,03$, das chloridärmste Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser, Mainau, mit $537 \text{ mmol}(\text{eq})\text{F}^-/\text{m}^3$ und weniger als $0,12 \text{ mol}(\text{eq})\text{Cl}^-/\text{m}^3$ ein Verhältnis $\text{F}^-/\text{Cl}^- > 4,6$.

Die bemerkenswerten Unterschiede des Sr/F-Verhältnisses zwischen den verschiedenen Wassertypen wurden bereits in Zusammenhang mit dem Strontium besprochen (vgl. 4.3.5).

4.4.2 Bromid und Iodid (Fig. 28, 29, 30)

4.4.2.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den meisten oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere sind weder Bromid ($> 0,6 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Br}^-/\text{m}^3$) noch Iodid ($< 0,4 \text{ mmol}(\text{eq})\text{I}^-/\text{m}^3$) nachweisbar. Ausnahmen sind im Oberrheingraben das durch Evaporite beeinflusste Wasser des Eozän-Aquifers von Steinenstadt mit $9,3 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Br}^-/\text{m}^3$ und $2,1 \text{ mmol}(\text{eq})\text{I}^-/\text{m}^3$ sowie in zwei Proben das Wasser aus den Kaiserstuhl-Vulkaniten von Oberbergen mit unterschiedlichen, aber beide Male quantifizierten Konzentrationen von $1,25$ und $0,28 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Br}^-/\text{m}^3$. Ferner werden im oberflächennahen Grundwasser (Quelle) von Gränichen $0,4 \text{ mmol}(\text{eq})\text{I}^-/\text{m}^3$

(0,05 mg/l) und im Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser des Dettenbergtunnels $0,1 \text{ mol(eq)}\text{I}^-/\text{m}^3$ (0,01 mg/l) verzeichnet (vgl. 4.5.2).

4.4.2.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Unter den untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern enthalten die OMM-Wässer Konstanz und Mainau ebenfalls weder nachweisbares Bromid noch nachweisbares Iodid; das Malm-Wasser von Singen enthält kein nachweisbares Bromid. In den anderen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern schwanken die Bromid-Konzentrationen zwischen $1,3 \text{ mmol(eq)}\text{Br}^-/\text{m}^3$ (Minimum Lottstetten ausser einer Probe mit nicht nachgewiesenem Br^-) und $8,8 \text{ mmol(eq)}\text{Br}^-/\text{m}^3$, die Iodid-Konzentration zwischen $1,3$ und $2,8 \text{ mmol(eq)}\text{I}^-/\text{m}^3$.

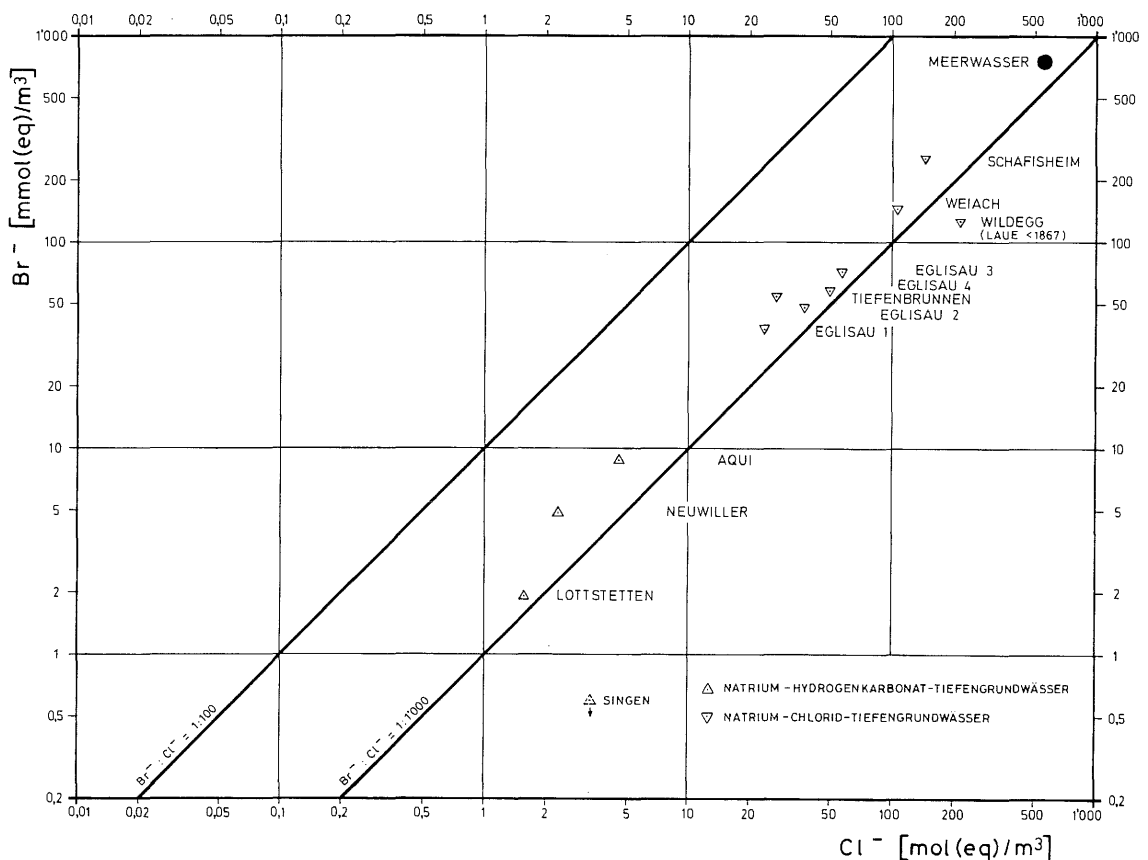


Fig. 28: Beziehung zwischen Bromid- und Chlorid-Konzentration

Bezeichnend ist, dass die beiden Wässer mit nicht nachweisbarem Bromid und Iodid geringe Chlorid-Konzentrationen ($< 0,4 \text{ mol(eq)Cl}^-/\text{m}^3$), die Wässer mit nachweisbaren Iodid- und zum Teil Bromid-Konzentrationen dagegen erhöhte Chlorid-Konzentrationen ($> 1,5 \text{ molCl}^-/\text{m}^3$) aufweisen. Darin kommt zum Ausdruck, dass die Bromide und Iodide in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern von der Beimischung von Natrium-Chlorid-Wässern stammen.

4.4.2.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In allen in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern sind die Bromid- und die Iodid-Konzentrationen höher als in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern, den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern und den oberflächennahen Grundwässern.

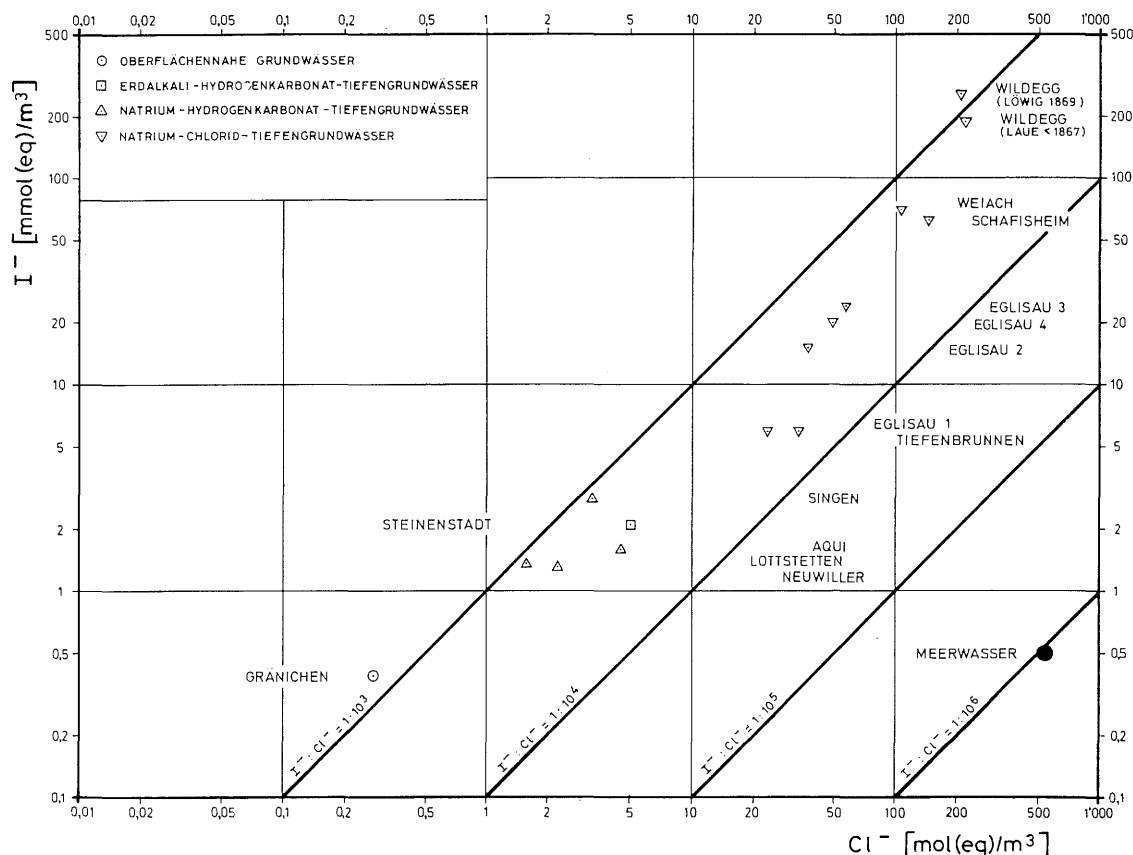


Fig. 29: Beziehung zwischen Iodid- und Chlorid-Konzentration

Die Bromid-Konzentrationen variieren zwischen 38 mmol(eq) Br⁻/m³ (Eglisau 1) und 254 mmol(eq)Br⁻/m³ (Schafisheim). Das molare Br/Cl-Verhältnis variiert jedoch nur zwischen 0,0012 (Mittel Eglisau 4) und 0,0017 (Schafisheim), ist also ähnlich wie Br/Cl = 0,00154 im Meerwasser. Im Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser Lottstetten liegt das Verhältnis Br/Cl = 0,0012 (Mittel) im gleichen Variationsbereich: in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern Zürich-Aqui und Neuwiller ist es mit Br/Cl = 0,0020-0,0021 nur wenig höher. In diesen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern ist eine Herkunft des Chlorids und des Bromids aus beigemischtem marinem oder brackischem Formationswasser anzunehmen. Das Bromid kann möglicherweise wegen seines gegenüber Chlorid grösseren Ionenradius durch Tonmembraneffekte (HEM 1970, 208 MATTHESS 1973, 217; HEM 1985, 146) oder durch die Zersetzung bromkonzentrierender Organismen (WHITE 1965, 347) wenig angereichert sein.

Das Iodwasser von Wildegger hätte nach der letzten überlieferten Analyse von LÖWIG aus dem Jahre 1869 (In: NUSSBERGER et al. 1937, 183) nur 8 mmol(eq)Br⁻/m³ und ein molares Verhältnis Br/Cl = 0,00004 gehabt. Wenn wir jedoch auf eine ältere Analyse von LAUE (In: MEYER-AHRENS 1867, 726) zurückgreifen, ergibt sich aus 126 mmol(eq)Br⁻/m³ (etwas weniger als in Weiach) mit 217'915 mmol(eq)Cl⁻/m³ ein Verhältnis Br/Cl = 0,0006, das nur noch 2-3 mal kleiner als im Meerwasser ist. Die Iodid-Konzentrationen der in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer variieren zwischen 6 mmol(eq)I⁻/m³ (Eglisau 1, Mittel Tiefenbrunnen) und 70 mmol(eq)I⁻/m³ (Mittel Weiach). Vom Wildegger Iodwasser sind u.a. 259 mmol(eq)I⁻/m³ nach LÖWIG und 189 mmol(eq)I⁻/m³ nach LAUE überliefert. Im Meerwasser beträgt die Konzentration nur 0,50 mmol(eq)I⁻/m³ (64 µg/l nach TUREKIAN 1969, 310), entsprechend einem molaren Verhältnis I/Cl = $0,9 \times 10^{-6}$. In der Gruppe der untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer einschliesslich des nur durch alte Analysen belegten Wildegger Iodwassers besteht ein deutlicher Trend von mit zunehmenden Chlorid-Konzentrationen ebenfalls zunehmenden Iodid-Konzentrationen. Dabei nehmen aber die Iodide stärker als die Chloride zu. In den chloridärmsten Wässern Zürich-Tiefenbrunnen und Eglisau 1 beträgt das molare Verhältnis I/Cl = $0,18 \times 10^{-3}$ bis $0,26 \times 10^{-3}$. In den chloridreichsten Wässern der Nagra-Programme,

Eglisau 3, Schafisheim und Weiach, steigt es auf $I/Cl = 0,4 \times 10^{-3}$ bis $0,7 \times 10^{-3}$ an und erreicht im Wildegger Iodwasser $I/Cl = 0,9 \times 10^{-3}$ (Analyse LAUE) bis $1,3 \times 10^{-3}$ (Analyse LÖWIG), wird also rund 1000 mal grösser als im Meerwasser. In denjenigen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern, die eine als Beimischung von Natrium-Chlorid-Wässern gedeutete verhältnismässig hohe Chlorid-Konzentration haben (Zürich-Aqui, Neuwiller, Lottstetten und Singen), liegen die molaren Verhältnisse mit $I/Cl = 0,4-0,9 \times 10^{-3}$ im Variationsbereich der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer.

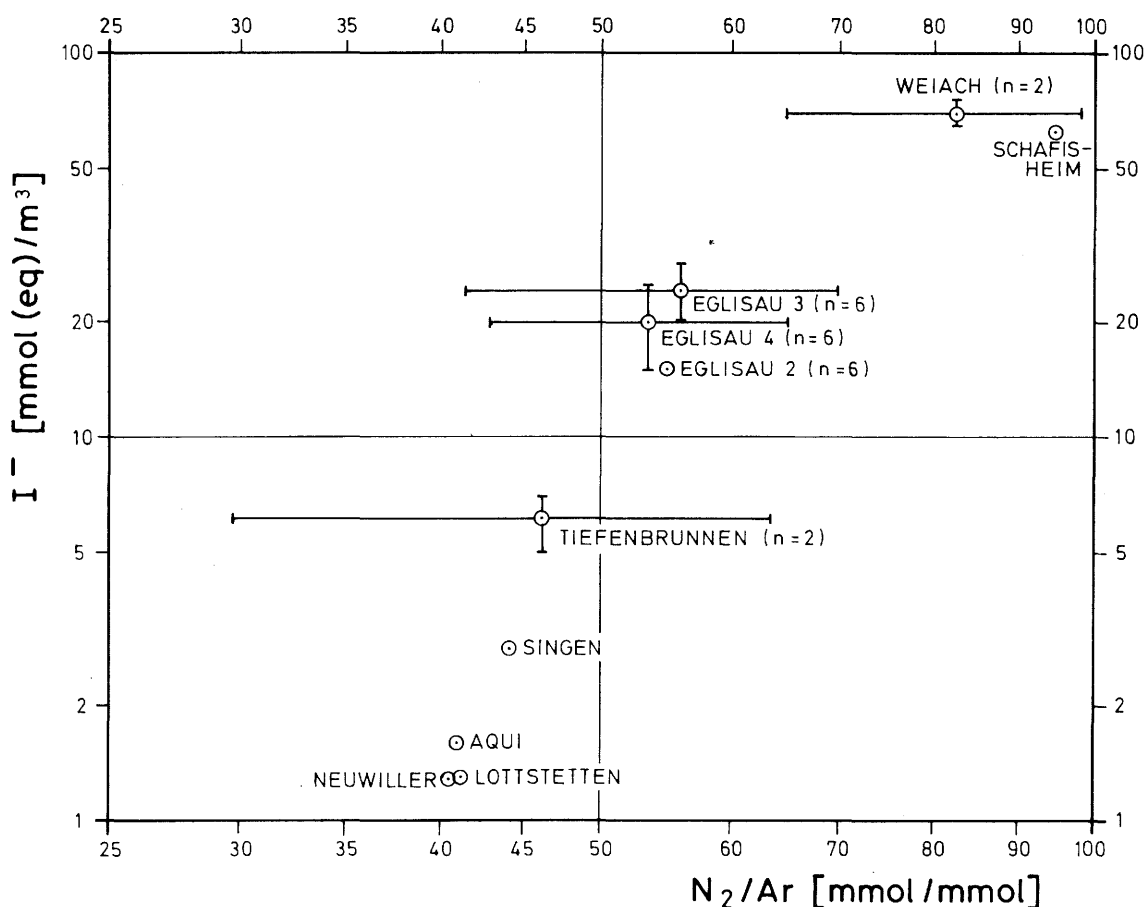


Fig. 30: Beziehung zwischen Iodid-Konzentration und dem molaren N_2/Ar -Verhältnis

Molare Verhältnisse um $I/Cl = 0,3 \times 10^{-3}$ sind in Oelfeldwässern üblich (Massenverhältnis ca. 0,001 nach DAVIS & DE WIEST 1967 in MATTHESS 1973, 218). Die Anreicherung

gegenüber dem Meerwasser beruht darauf, das Iod als biophiles Element in den Organismen gespeichert und bei deren Zersetzung freigesetzt wird. In den Analysen der Nagra-Programme geht der Zusammenhang der Iod-Anreicherung mit organischen Stoffen daraus hervor, dass die Wässer mit den höchsten Methan-Konzentrationen, mit den grössten Konzentrationen von gelöstem organischem Kohlenstoff (DOC) und mit den grössten Verhältnissen N_2/Ar auch die grössten Iodid-Konzentrationen haben. Der Vergleich mit dem Verhältnis N_2/Ar , das ebenfalls durch den Abbau von Biomasse erhöht wird, zeigt, dass die Iodid-Konzentrationen von 70 und 62 $mmol(eq)I^-/m^3$ bei einem molaren Verhältnis N_2/Ar von 83 und 95 vorkommen (Weiach, Schafisheim). Bei einem Konzentrationsverhältnis $N_2/Ar = 54-56$ beträgt die Iodid-Konzentration 15-24 $mmol(eq)I^-/m^3$ (Mittel Eglisau 2-4). Sie fällt bei einem Konzentrationsverhältnis $N_2/Ar = 45-50$ auf 6 $mmol(eq)I^-/m^3$ (Eglisau 1, Tiefenbrunnen) und schliesslich in den chloridreicheren Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern bei einem Konzentrationsverhältnis $N_2/Ar = 40-44$ auf 1-3 $mmol(eq)I^-/m^3$ (Singen, Zürich-Aqui, Lottstetten, Neuwiller) (Fig. 30).

4.4.3 Selen

Selen fand sich mit quantifizierbaren Konzentrationen nur in den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern des Malms von Beuren (1,3 $\mu g/l = 0,016 mmol(eq)/m^3$) und der Oberrheingraben-USM von Schönenbuch (0,9 $\mu g/l = 0,011 mmol(eq)/m^3$) sowie im speziellen oberflächennahen Grundwasser des Oberrheingraben-Eozäns von Steinenstadt (1,5 $\mu g/l = 0,019 mmol(eq)/m^3$). Die Vorkommen dürften für das geochemische Verhalten von Selen typisch sein, da bei den in den betreffenden Wässern gemessenen pH-Werten von 7,1-7,4 und Redox-Spannungen von $\geq +300$ mV die Spezies $HSeO_3^-$ überwiegt. Bei niedrigeren Redox-Spannungen wie sie in den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern vorkommen, ist dagegen das eine geringere Löslichkeit aufweisende elementare Selen die Gleichgewichts-Spezies (HEM 1970, 208; LEUTWEIN 1971, 34-H; MATTHESS 1973, 216; HEM 1985, 145). Da Selen in den gewöhnlichen oberflächennahen Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere nicht nachweisbar ist, dürfte der Anstieg der Konzentration

über die Bestimmungsgrenze allerdings auch eine verhältnismässig lange Verweilzeit des Wassers im Untergrund verlangen.

Unter den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern enthielt nur eine von sechs Proben des Wassers Eglisau 2 eine gerade an der Bestimmungsgrenze liegende Selen-Konzentration von $0,5 \mu\text{g/l} = 0,006 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$. Bezeichnend ist, dass es sich unter den sechs auf Selen untersuchten Proben dieser Stelle um die mit der höchsten Redox-Spannung (+170 mV gegenüber +60 bis +90 mV in den anderen 5 Proben) handelt, wobei hier der hohe pH-Wert von 8,4 die löslichen Spezies HSeO_3^- und SeO_3^{2-} zusätzlich begünstigt.

4.4.4 Nitrite und Nitrate

4.4.4.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Beziehung zwischen den verschiedenen Oxidationsstufen des Stickstoffs ist eine Funktion der Redoxspannung (bzw. der Redoxintensität). In den untersuchten Wässern ist gelöstes N_2 -Gas immer die vorwiegende anorganische Stickstoff-Spezies. In zwei Extremfällen enthält z.B. das oberflächennahe Grundwasser Welschingen $1642 \text{ mmol } \text{N}_2/\text{m}^3$ und $508 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NO}_3^-/\text{m}^3$, das Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser Weiach (Mittel) rund $3200 \text{ mmol } \text{N}_2/\text{m}^3$, $158 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NH}_4^+/\text{m}^3$ und $1,5 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NO}_2^-/\text{m}^3$.

In den oberflächennahen Grundwässern und den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern kommen an anorganischen Stickstoffverbindungen als Ionen in allen Fällen vorwiegend Nitrat und in der Regel kein nachweisbares Nitrit ($< 0,07 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NO}_2/\text{m}^3$) und höchstens in geringen Konzentrationen nachweisbares Ammonium ($< 15 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NH}_4^+/\text{m}^3$) vor.

Die beiden einzigen Wässer dieser Gruppen mit $\text{NH}_4^+ > 15 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ sind Malleray und Steinenstadt (vgl. 4.3.4). Im Wasser des tiefen Malm-Karst von Malleray ist das verhältnismässig hohe molare Verhältnis $\text{NH}_4/\text{NO}_3 = 0,74$ ein weiterer Hinweis auf die im Aquifer herrschenden reduzierenden Bedingungen. Im Wasser des Eozän-Aquifers von Steinenstadt lassen Ammonium und Nitrite ebenfalls auf Reduktions-Prozesse schliessen; die verhältnismässig hohe Konzentration

der überwiegend als Nitrat ($735 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NO}_3^-/\text{m}^3$) vorhandenen anorganischen Stickstoffverbindungen ist aber vermutlich auf organische Verbindungen in den Gesteinen der Aquifer-Formation zurückzuführen.

In den untersuchten oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern können die Nitrate allgemein bis zu etwa $50 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NO}_3^-/\text{m}^3$ (ca. 3 mg/l) einem natürlichen biogenen Background entsprechen. Höheren Konzentrationen hingegen, falls nicht aus fossilen organischen Substanzen herleitbar, weisen auf eine anthropogene Herkunft hin.

4.4.4.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Während alle untersuchten oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer mindestens $20 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ Nitrate enthalten (Ausnahme Dettenbergtunnel mit $6 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$), ist in allen in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern Nitrat entweder nicht nachweisbar ($< 2 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$) oder in einzelnen Proben aus Lottstetten und Eglisau 3 höchstens mit einer Konzentration von $7 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ enthalten (Ausnahme: 1 Probe Eglisau 4 mit $13 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ neben 5 Proben mit $< 2 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$). Nitrite in nachweisbaren Konzentrationen ($> 0,07 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NO}_2^-/\text{m}^3$) wurden nur in einzelnen Proben der Wässer von Eglisau 2-4 (bis $1,5 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NO}_2^-/\text{m}^3$) und von Weiach ($0,8\text{-}2,0 \text{ mmol}(\text{eq})\text{NO}_2^-/\text{m}^3$) gemessen. Von den periodisch untersuchten Wässern von Lottstetten, Eglisau 3 und Eglisau 4 gibt es aber ausser den Proben mit quantifizierbaren Nitratkonzentrationen auch solche ohne nachweisbares Nitrat. Entsprechende Befunde ergaben die Nitrit-Bestimmungen in den Wässern Eglisau 2-4. Man muss annehmen, dass in den betreffenden Wässern und ebenso in Weiach durch kleine Verschiebungen der Redox-Spannungen innerhalb der Fassungsanlage noch vor der Probenentnahme ein kleiner Teil des Ammoniums zu Nitrit und Nitrat oxidiert worden ist, und dass innerhalb des Aquifers das Ammonium ausser dem gelösten Stickstoff-Gas als einzige anorganische Stickstoffverbindung vorkommt.

4.4.5 Phosphor

4.4.5.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Nur in zwei der untersuchten oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer waren Phosphate nicht nachweisbar ($< 0,1 \text{ mmol/eq HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$.*) Alle diese Wässer mit zwei Ausnahmen enthalten jedoch weniger als $1,0 \text{ mmol/eq HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$ **). Der höhere Wert von $4,3 \text{ mmol/eq HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$ im Wasser von Gränichen dürfte auf anthropogene Einflüsse zurückzuführen sein.

4.4.5.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Alle Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer der Nagra-Regional- und Ueberwachungsprogramme haben, wie in der Regel die oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer, Phosphatkonzentrationen von weniger als $1,0 \text{ mmol/eq HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$ ($< 0,015 \text{ mg P/l}$). Die Konzentrationen sind auch in den Natrium-Chlorid-Wässern von Zürich-Tiefenbrunnen und Eglisau (Mittel) mit $0,2\text{-}0,6 \text{ mmol/eq HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$ eine Grössenordnung tiefer als im Meerwasser, das $5,7 \text{ mmol/eq HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$ enthält ($88 \text{ } \mu\text{g P/l}$ nach TUREKIAN 1969, 310). Die kleineren Konzentrationen sind mit der geringeren geochemischen Mobilität der Phosphate im Untergrund zu erklären, welche darauf beruht, dass sie durch Tonminerale und Metallhydroxide sorbiert werden (MATTHESS 1973, 214; KORITING 1978, 15-H-2).

*) Da vom Institut Fresenius verschiedentlich Konzentrationen zwischen $0,002$ und $0,005 \text{ mg P/l}$ quantifiziert wurden, wird entgegen KUSSMAUL, in KUSSMAUL & ANTONSEN 1985, 67, die Nachweisgrenze bei $0,002 \text{ mg P/l}$ oder gerundet $0,1 \text{ mmol/eq HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$ statt bei $0,005 \text{ mg P/l}$ oder gerundet $0,3 \text{ mmol/eq HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$ angenommen.

**) Im Wasser von Oberbergen gibt es neben einer Probe mit nicht nachweisbarem Phosphat eine andere mit $1,4 \text{ mmol/eq HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$.

Die verhältnismässig hohen Konzentrationen von 9,7 mmol(eq) $\text{HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$ in Schafisheim und von 2,7-13,6 mmol(eq) $\text{HPO}_4^{2-}/\text{m}^3$ in Weiach sind daher eigentlich überraschend. Die starke Streuung in den drei Proben von Weiach erweckt den Verdacht, dass es sich um Artefakte der Bohrarbeiten oder der Probenentnahme handeln könnte.

4.4.6 Arsen

4.4.6.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer enthalten in der Regel kein nachweisbares Arsen ($< 0,0005 \text{ mg As/l}$ oder gerundet $> 0,01 \text{ mmol HASO}_4^{2-}/\text{m}^3$). Im OSM-Wasser Schwarzenberg ist die Arsen-Konzentration mit $0,003 \text{ mmol(eq)HASO}_4^{2-}/\text{m}^3$ ($0,0001 \text{ mg As/l}$) zwar quantifiziert, liegt aber unter der üblichen Nachweisgrenze. Im Malm-Tiefengrundwasser von Beuren liegt die Konzentration gerade an der Nachweisgrenze. Im OMM-Tiefengrundwasser des Dettenbergtunnels bestimmte das Mineralwasserlabor $0,05 \text{ mmol(eq)HASO}_4^{2-}/\text{m}^3$ (Die übrigen Arsen-Werte stammen vom Institut Fresenius). Deutlich erhöht ist die Arsen-Konzentration mit $0,12 \text{ mmol(eq)HASO}_4^{2-}/\text{m}^3$ im oberflächennahen, aber subthermalen Malm-Wasser von Durlinsdorf, das auch andere leicht erhöhte Spurenelement-Konzentrationen aufweist (Br^- , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Pb^{2+} ; vgl. Kap. 4.5.1).

4.4.6.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern beträgt die Arsen-Konzentration, mit Ausnahme von Lottstetten*) und Schafisheim, mehr als $0,08 \text{ mmol(eq)HASO}_4^{2-}/\text{m}^3$. In der Regel enthalten also die Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrund-

*) In Lottstetten ergibt sich aus 6 Hauptproben ein Mittelwert von $0,09 \text{ mmol(eq)HASO}_4^{2-}/\text{m}^3$, weil in einer Probe $0,40 \text{ mmol(eq)/m}^3$ bestimmt wurden, die anderen aber durchwegs $\leq 0,05 \text{ mmol(eq)/m}^3$ enthalten, wovon zwei $< 0,01 \text{ mmol(eq)/m}^3$.

wässer mehr Arsen als die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer. Dabei besteht ein Trend zu höheren Arsen-Konzentrationen in den Natrium-Chlorid-Wässern als in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern. In den Wässern von Eglisau und Weiach betragen die Mittelwerte $0,3-0,5 \text{ mmol(eq) HAsO}_4^{2-}/\text{m}^3$; Maxima erreichen aber $1,6 \text{ mmol(eq)}/\text{m}^3$ (Eglisau 4) und $1,0 \text{ mmol(eq)}/\text{m}^3$ (Weiach). Die grösste Konzentration fand sich indessen ausserhalb des Molassebeckens im Natrium-Hydrogenkarbonat-Grundwasser des Dogger-Aquifers von Neuwiller im Oberrheingraben mit $7,7 \text{ mmol(eq)HAsO}_4^{2-}/\text{m}^3$. Im Meerwasser beträgt die Konzentration nur $0,07 \text{ mmol(eq)HAsO}_4^{2-}/\text{m}^3$ ($2,6 \text{ } \mu\text{g/l}$ nach TUREKIAN 1969, 310).

Die Spezies HAsO_4^{2-} (Oxidationsstufe +5) herrscht in oxidierendem Milieu bei pH über etwa 7 vor. Unter reduzierenden Bedingungen bei pH 7 ist $\text{HAsO}_2(\text{aq})$ (Oxidationsstufe +3) vorhanden (HEM 1970, 206; MATTHESS 1973, 215; HEM 1977, 534: Fig. 10; HEM 1985, 145).

Arsenat wird durch Eisenhydroxid und andere Substanzen mit aktiven Oberflächen sorbiert (HEM 1970, 207; MATTHESS 1973, 215). In oxidierenden Systemen kann Eisenarsenat, FeAsO_3 , gebildet werden, das zusammen mit Eisenhydroxid ausgefällt wird (HEM 1977, 534). Möglicherweise hängt daher die geringe Konzentration in der Probe von Schafisheim mit dem Vorhandensein von Eisenhydroxid zusammen, das sich in der grossen Differenz zwischen dem Gesamteisen und dem gelösten Eisen manifestiert: $695 \text{ mmol(eq)Fe total}/\text{m}^3$ und $88 \text{ mmol(eq)Fe}^{2+}/\text{m}^3$ (Auslaufprobe mit $0,03 \text{ mmol(eq)H}_2\text{AsO}_4^{2-}/\text{m}^3$).

4.4.7 Aluminium

Die Aluminium-Konzentration ist in den oberflächennahen Grundwässern, in den Erdalkali-Hydrogenkarbonat- und in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern sehr klein, oft unter der Nachweisgrenze von $0,2 \text{ mmol}/\text{m}^3$ ($0,005 \text{ mg Al/l}$), nach den Analysen des Instituts Fresenius nie über $0,4 \text{ mmol Al}/\text{m}^3$.*)

*) Der höhere Wert von $2,5 \text{ mmol Al}/\text{m}^3$ im Wasser des Dettenbergtunnels stammt aus einer Analyse des Mineralwasser-Labors, die Werte von je $1,9 \text{ mmol Al}/\text{m}^3$ in den Wässern von Stallikon aus Analysen der Bachema.

Oberhalb $\text{pH} = 7$ ist das Anion $\text{Al}(\text{OH})_4^-$ die vorherrschende gelöste Form von Aluminium (HEM 1985, 74), dessen Löslichkeit mit steigendem pH-Wert zunimmt. Im Gleichgewicht mit Bayerit ($\alpha\text{-Al}(\text{OH})_3$) treten Löslichkeiten des $\text{Al}(\text{OH})_4^-$ von 0,2-0,4 mmol/m³ bei $\text{pH} = 7,3\text{-}7,6$ auf (HEM 1985, 75: Fig. 133), im Gleichgewicht mit amorphem frischem Präzipitat allerdings nur bei $\text{pH} = 6,0\text{-}6,3$ (HEM 1969, 13-H-1; HEM 1985, 75: Fig. 133). In den oberflächennahen Grundwässern und in den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefen Grundwässern sowie in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefen Grundwässern der Malm- und Dogger-Aquifere in Singen und Neuwiller, in welchen meistens pH-Werte von 7,0 bis 7,5 vorkommen, sind die niederen Aluminium-Konzentrationen (Fresenius-Werte) meist im Gleichgewicht mit Bayerit erklärbar. Bei den pH-Werten zwischen 8,75 und 8,95 der OMM-Grundwässer Konstanz, Mainau und Zürich-Aqui, deren Aluminium-Konzentrationen nur $\leq 0,2$ mmol/m³ beträgt, wären dagegen im Gleichgewicht mit Bayerit Konzentrationen von 6-9 mmol/m³ zu erwarten, im Gleichgewicht mit amorphem frischem Präzipitat sogar 110-175 mmol/m³. Die Löslichkeit des Aluminiums kann indessen durch andere gelöste Bestandteile beeinflusst sein, zum Beispiel durch die über einer kritischen Konzentration von mehr als etwa 30 mmol/m³ gelöste Kieselsäure (HEM 1969, 13-H-7/8). Ferner ist von der Spezies $\text{Al}(\text{OH})_4^-$ zu erwarten, dass sie in den meisten natürlichen Systemen leicht adsorbiert wird (HEM 1969, 13-H-9).

In den Natrium-Chlorid-Wässern Tiefenbrunnen, Eglisau 1 sowie in mehr als der Hälfte der Hauptproben (Analysen Fresenius) von Eglisau 2-4 ist Aluminium ebenfalls nicht nachweisbar ($< 0,2$ mmol/m³). In den Hauptproben des Wassers Eglisau 3 kommen drei Werte um 0,2 mmol/m³, in denen des Wassers Eglisau 4 zwei Werte um 0,4 mmol/m³ vor. Statistische Ausreisser sind eine Probe von Eglisau 2 mit 1,4 mmol/m³ und eine Probe von Eglisau 4 mit 11 mmol/m³. Angesichts der widersprüchlichen Befunde kann Aluminium auch im Wasser der USM- und Malm-Aquifere von Eglisau kaum als ein wesentlicher gelöster Bestandteil angenommen werden.

Die verschiedenen Mechanismen der Löslichkeits-Kontrollen verhindern offenbar in allen Tertiär- und Malm-Aquiferen der Nordschweiz, dass Aluminium mit wesentlichen Konzentrationen in Lösung gehen kann.

Bei der Beurteilung der Aluminium-Daten der Nagra-Tiefbohrungen können die Daten des Nagra-Regionalprogramms nicht unbeachtet bleiben. In der Auslauf-Probe von Schafisheim sind $6,3 \text{ mmol/m}^3$ und in der Druckbehälterprobe $34,5 \text{ mmol/m}^3$ bestimmt. In Weiach sind es in zwei nach verschiedenen Arten entnommenen Proben $1,0 \text{ mmol/eq)/m}^3$ und $34,5 \text{ mmol/m}^3$. Der Verdacht besteht, dass die derartige Variationen aufweisenden Aluminium-Konzentrationen Artefakte der Bohrarbeiten und/oder der Probenentnahmen sind und deshalb für geochemische Ueberlegungen ausser Betracht fallen.

4.5 Undissoziierte Nebenbestandteile

4.5.1 Kieselsäure (Fig. 31)

4.5.1.1 Oberflächennahe Grundwässer

Die meisten untersuchten oberflächennahen Grundwässer enthalten $100\text{--}160 \text{ mmol Si(OH)}_4/\text{m}^3$.*) Das im Faltenjura auf 735 m ü.M. gefasste und ein noch höheres Einzugsgebiet aufweisende Malm-Wasser von Malleray hat nur 73 mmol/m^3 .

Das mit $16,2^\circ\text{C}$ subthermale Malm-Wasser von Durlinsdorf hat eine stark erhöhte Konzentration von $338 \text{ mmol Si(OH)}_4/\text{m}^3$, was zusammen mit den bemerkenswerten Spurenelement-Konzentrationen und dem im Jahre 1981 verhältnismässig niederen Tritium-Wert von 47 TU auf die Herkunft eines Teils des Wassers aus einem Tiefenbereich mit höheren Temperaturen schliessen lässt.

4.5.1.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die vier im Nagra-Regionalprogramm untersuchten Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben höhere Kieselsäure-Konzentrationen als, abgesehen von Durlinsdorf, die

*) Der in der Analyse des Nagra-Programms für das OSM-Wasser Schwarzenberg angegebene Wert von $80,1 \text{ mg H}_2\text{SiO}_3/\text{l} = 1026 \text{ mmol(eq)Si(OH)}_4/\text{m}^3$ wird durch eine vom Mineralwasserlabor im Auftrag der Mineralquelle Schwarzenberg AG ausgeführte Analyse mit einem Wert von $12 \text{ mg H}_2\text{SiO}_3/\text{l} = 154 \text{ mmol(eq)/m}^3$ nicht bestätigt und ist unwahrscheinlich.

oberflächennahen Grundwässer, was ihre grundsätzlich tiefere Herkunft bestätigt. Mit der Chalcedon-Geothermometer-Formel von FOURNIER (in TRUESDALL 1976)

$$t^{\circ}\text{C} = \frac{1015,1}{4,655 - \log \text{SiO}_2(\text{mg/l})} - 273,15^{\circ}\text{C}$$

ergäbe die mittlere Konzentration von 218 mmol/m^3 im Wasser von Beuren eine der Auslauftemperatur entsprechende Modell-Temperatur von 13°C , die im Wasser des Dettenbergtunnels gemessene Konzentration von 333 mmol/m^3 eine Modell-Temperatur von 29°C , die wesentlich höher als die bei der Probenentnahme gemessene Temperatur von 13°C ist. In den beiden Wässern von Schönenbuch und Oberbergen, von wo je zwei Analysen vorliegen, sind die gemessenen Kieselsäure-Konzentrationen ziemlich variabel. In Schönenbuch ergäben sich aus den Konzentrationen von 366 mmol/m^3 und 470 mmol/m^3 Modelltemperaturen von $33\text{--}43^{\circ}\text{C}$ (Auslauftemperatur ca. 13°C), in Oberbergen aus 440 mmol/m^3 und 501 mmol/m^3 Modelltemperaturen von $40\text{--}46^{\circ}\text{C}$ (Auslauftemperatur ca. 20°C).

Im Malm-Aquifer von Beuren dürfte die Kieselsäure-Konzentration durch die Löslichkeit von Chalcedon kontrolliert werden. In Oberbergen ist ein langsamer Aufstieg des Wassers aus Tiefen, in denen Temperaturen um 40°C herrschen, jedenfalls denkbar. Im Wasser des USM-Aquifers von Schönenbuch muss eher daran gedacht werden, dass die Kieselsäure-Konzentration teilweise durch die im Vergleich zu Chalcedon wesentlich grössere Löslichkeit von amorpher Kieselsäure kontrolliert wird. Für das Wasser des Dettenbergtunnels ist nicht erklärbar, dass es mehr Kieselsäure enthält als andere OMM-Wässer, die aus grösserer Tiefe stammen und höhere Auslauftemperaturen haben (Konstanz, Aquil); für weitere Interpretationen müsste eine Bestätigung des Wertes vorliegen.

*) Eine ähnliche Formel wird in FOURNIER (1981, 14) gegeben. Ihr Anwendungsbereich wird für Temperaturen zwischen 0 bis 250°C angegeben.

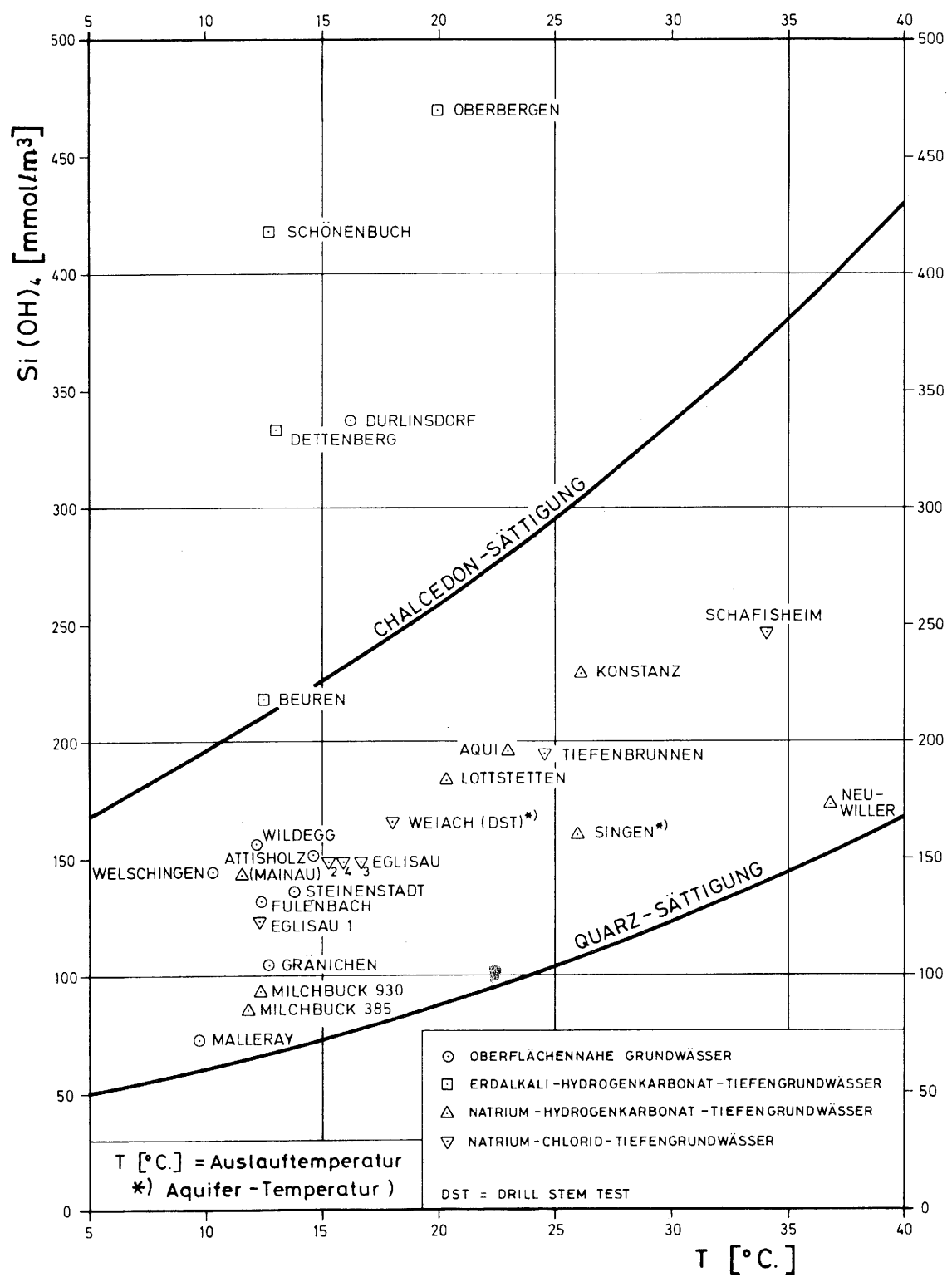


Fig. 31: Beziehung zwischen Kieselsäure-Konzentration (ungefiltert) und Temperatur

4.5.1.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben auffallend niedrigere Kieselsäure-Konzentrationen. Die mit ihnen nach der Chalcedon-Geothermometer-Formel berechneten Temperaturen sind tiefer als die Auslauf- oder die Aquifer-Temperaturen. Mit der Quarz-Geothermometer-Formel (Konduktive Abkühlung) von FOURNIER (in TRUEDELL 1976)

$$t^{\circ}\text{C} = \frac{1315}{5,205 - \log \text{SiO}_2/\text{mg/l}} - 273,15^{\circ}\text{C}$$

werden dagegen höhere Temperaturen als im Auslauf oder im Aquifer ermittelt. Mit der in Singen, Lottstetten (Mittel), Zürich-Aqui und Konstanz 160-229 mmol/m³ betragenden Konzentrationen ergäben sich mit dem Chalcedon-Geothermometer nur 3-16°C, mit dem Quarz-Geothermometer dagegen 38-50°C. In Singen beträgt die Aquifer-Temperatur 29,5°C (SCHREINER 1969, 203). Bei den Probenentnahmen des Nagra-Programms sind in Lottstetten um 20°C, in Zürich-Aqui 23°C und in Konstanz 26°C gemessen worden. In den Aquiferen selber sind an diesen Orten um wenige Grade höhere Temperaturen anzunehmen. Die effektiven Temperaturen liegen also etwa in der Mitte zwischen den mit dem Chalcedon- und den mit dem Quarz-Geothermometer berechneten.

Eine verhältnismässig niedrigere Kieselsäure-Konzentration hat mit 143 mmol/m³ das Wasser von Mainau; da aber von hier wegen des geringen Förderstroms keine zuverlässige Auslauf-Temperatur vorliegt, ist ein Temperaturvergleich nicht möglich.

Anders als bei den Wässern der Tertiär- und Malm-Aquifere des Molassebeckens verhält es sich beim Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser des Dogger-Aquifers von Neuwiller im Oberrheingraben. Die vergleichsweise sehr niedrigere Kieselsäure-Konzentration von 173 mmol/m³ ergibt nur nach der Quarz-Geothermometer-Formel mit 41°C eine Temperatur,

*) Eine ähnliche Formel wird in FOURNIER (1981, 114) gegeben. Ihr Anwendungsbereich wird für Temperaturen zwischen 0 bis 250°C angegeben. Die besten Resultate erhält man für Temperaturen über 150°C.

die der effektiven ähnlich ist. Bei der Entnahme der Probe im Nagra-Programm wurden 36,7°C gemessen, von anderen Messungen sind Temperaturen bis 38°C bekannt (SIMLER 1972, 182). Hier dürfte demnach die Kieselsäure-Konzentration durch die Löslichkeit von Quarz kontrolliert werden.

4.5.1.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern zeigt die Kieselsäure-Konzentration mit zunehmender Temperatur eine signifikante Zunahme:

	Temperatur °C	Si(OH) ₄ mmol/m ³
Eglisau 1	12,3	143
Eglisau 2 (n=6)	15,3 ± 0,3	149 ± 4
Eglisau 3 (n=6)	15,9 ± 0,1	149 ± 7
Eglisau 4 (n=6)	16,7 ± 0,8	149 ± 7
Weiach	19*)	179**)
Zürich-Tiefenbrunnen (n=2)	24,6 ± 1,1	195 ± 2
Schafisheim	34*)	246

*) Aquifer-Temperatur nach geophysikalischen Bohrlochmessungen (WEBER et al. 1986)

***) DST-Probe

Wie in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern (und übrigens, mit Ausnahme von Durlinsdorf, auch in den oberflächennahen Grundwässern) liegen die Konzentrationen ungefähr in der Mitte zwischen Quarz- und Chalcedon-Sättigung. In die obige Reihe der mit der Temperatur zunehmenden Kieselsäure-Konzentrationen fügen sich auch die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer Lottstetten, Zürich-Aqui und Konstanz ein, so dass bezüglich der Geochemie der Kieselsäure im Molassebecken kein grundsätzlicher Unterschied zwischen den beiden Wassertypen besteht.

4.5.1.5 Beurteilung der Kieselsäure als Geothermometer

Zusammenfassend ist festzustellen, dass die Kieselsäure-Konzentration in den Tertiär- und Malm-Aquiferen offen-

sichtlich teilweise durch die von Chalcedon und teilweise durch die von amorpher Kieselsäure kontrolliert werden. Die Kieselsäure ist unter diesen Umständen wenig als Geothermometer geeignet.

4.5.2 Borsäure (Fig. 32)

4.5.2.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Tiefengrundwässer

Die meisten untersuchten oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer enthalten nur geringe Bor-Konzentrationen von weniger als 3 mmol/m^3 (weniger als etwa $0,2 \text{ mg H}_3\text{BO}_3/\text{l}$). Unter den untersuchten Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern enthalten beide Proben des USM-Wassers von Schönenbuch im Oberrheingraben und eine Probe des Malm-Wassers von Beuren sogar kein nachweisbares Bor ($< 0,2 \text{ mmol/m}^3$ *). In den zwei Proben des Vulkanit-Wassers von Oberbergen fanden sich nur je $0,3 \text{ mmol/m}^3$. Die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer enthalten offenbar nur unter besonderen Bedingungen überhaupt nennenswerte Bor-Konzentrationen ($> 3 \text{ mmol/m}^3$). In Gränichen, wo auch eine erhöhte Phosphat-Konzentration festgestellt wurde, und in Stallikon kann es sich um anthropogene Einflüsse handeln. Nach neueren Untersuchungen ist Bor in Grundwässern zum Beispiel ein sehr guter Tracer für Einflüsse von Hausmülldeponien.

Im Malm-Wasser von Wildeggen manifestieren sich die Beimischungen von Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser in einer auf $31,5 \text{ mmol H}_3\text{BO}_3/\text{m}^3$ erhöhten Bor-Konzentration, in Steinensiedel der Evaporit-Einfluss in $14,4 \text{ mmol H}_3\text{BO}_3/\text{m}^3$.

Im Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser der OMM des Dettenbergtunnels wurden $6,3 \text{ mmol H}_3\text{BO}_3/\text{m}^3$ neben nachweisbarem Iod ($0,1 \text{ mmol I}^-/\text{m}^3$) gemessen. Dies ist ein Hinweis

*) In Analysen des Instituts Fresenius wird Bor ab $0,01 \text{ mg H}_3\text{BO}_3/\text{l}$ = ca. $0,0017 \text{ mg B/l}$ = ca. $0,2 \text{ mmol/m}^3$ quantifiziert. Die Nachweis- und Bestimmungsgrenze liegt demnach tiefer als nach KUSSMAUL & ANTONSEN 1985/67, wo sie mit $0,005 \text{ mg B/l}$ = ca. $0,5 \text{ mmol/m}^3$ angegeben wird.

dafür, dass die beiden in den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern korrelierenden Bestandteile auch dann aus den marinen Sedimenten freigesetzt werden, wenn diese kein Natrium-Chlorid-Formationswasser mehr enthalten (Im Wasser des Dettenbergtunnels ist die Chlorid-Konzentration mit $< 0,03 \text{ mol Cl}^-/\text{m}^3$, d.h. mit $< 1 \text{ mg Cl}^-/\text{l}$ sogar extrem klein). Im Lichte dieses Befundes muss in Betracht gezogen werden, dass in dem im Grenzbereich OMM/USM austretenden Wasser von Gränichen die ebenfalls zusammen mit Iod vorkommende, erhöhte Bor-Konzentration nicht anthropogenen, sondern sedimentären Ursprungs sein könnte.

4.5.2.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern ist der Trend von mit der Abnahme der Chlorid-Konzentration ebenfalls abnehmender Bor-Konzentration unverkennbar (Fig. 32). Die Reihe beginnt mit dem Meerwasser und setzt sich in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern Schafisheim und Weiach fort. Es folgen die Natrium-Chlorid-Wässer-Gruppe Tiefenbrunnen-Eglisau, dann die Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer Zürich-Aqui, Singen und Neuwiller und schliesslich das Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser von Konstanz. Als Fortsetzung der Reihe kann auch noch das Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser des Dettenbergtunnels genannt werden.

In dieser Reihe nimmt das molare Verhältnis B/Cl zu (Fig. 32). Es beträgt im Meerwasser $B/Cl = 0,00075$, steigt in Schafisheim, Weiach, Eglisau und Zürich-Tiefenbrunnen auf $B/Cl = 0,0015-0,0061$ (Mittelwerte), in Zürich-Aqui, Singen und Neuwiller auf $B/Cl = 0,012-0,032$ (in diesem Bereich passt auch das Mischwasser von Wildegg in die Reihe), in Konstanz auf $0,080$ und schliesslich im Dettenbergtunnel auf über $0,225$. Eine auf die Chlorid-Konzentration bezogene stärkere Bor-Anreicherung zeigt sich in Lottstetten und vor allem in Mainau, wo fast ein molares Verhältnis $B/Cl = 1$ besteht.

Das geochemische Verhalten des Bors ist ein anderes als in den gleichen Wässern das des Iods. Bei diesem findet schon in den noch stark konzentrierten Formationswässern eine An-

reicherung um drei Grössenordnungen statt, und bei fortschreitender Verdünnung bleibt das Verhältnis zwischen Iodid und der marinen Leitsubstanz Chlorid innerhalb des gleichen Variationsbereichs. Das Bor dagegen ist nicht wie das Iod zuerst angereichert und dann durch Verdünnung abgereichert worden, sondern unterlag von Anfang an wie das Chlorid dem Verdünnungseffekt, der aber im Gegensatz zum Chlorid durch einen gegenläufigen Anreicherungseffekt teilweise kompensiert wird.

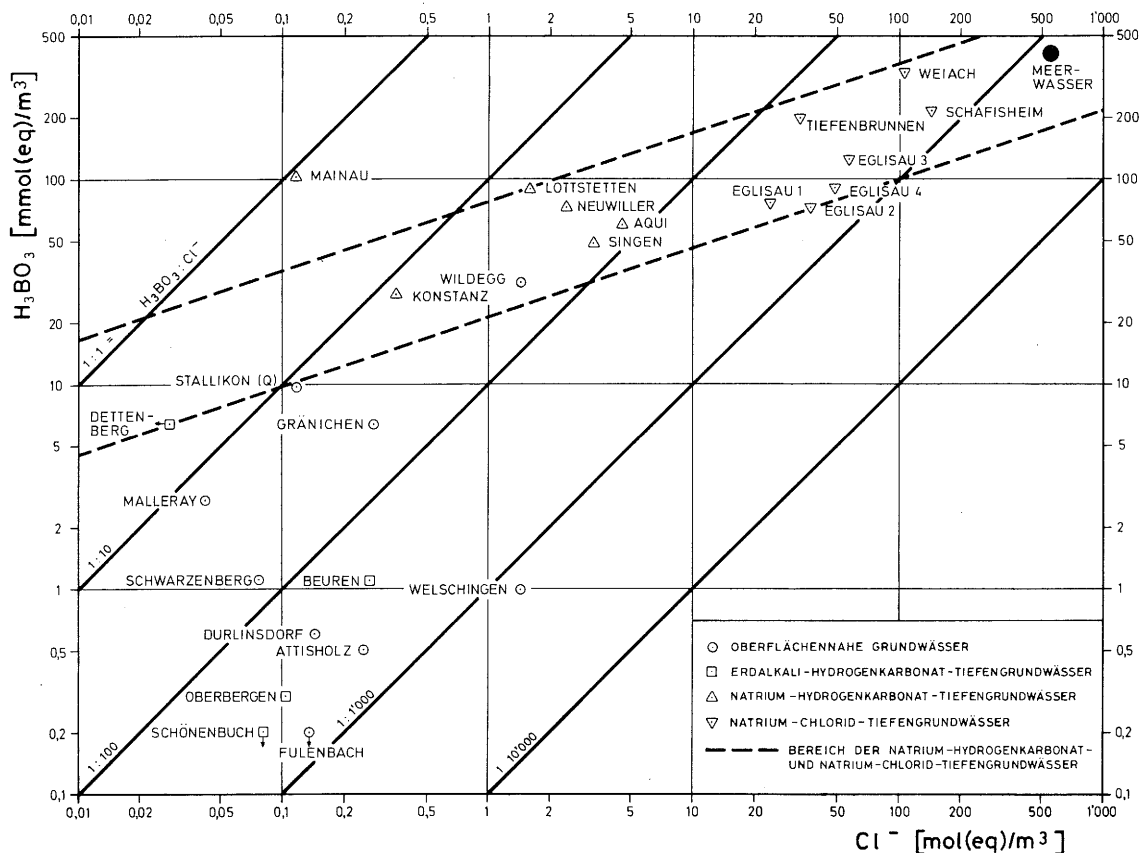


Fig. 32: Beziehung zwischen Bor- und Chlorid-Konzentration

In den Formationswässern stammt das Bor teilweise aus dem Meerwasser, das als Porenlösungen eingeschlossen wurde und während der Diagenese mit den Sediment-Mineralien reagierte. Bekannt ist, dass Bor in Erdölfeldwässern angereichert ist, mit denen die Natrium-Chlorid-Wässer des Molassebeckens verwandt sind. Solches Bor stammt letzten Endes wie das Iod von organischen Substanzen ab (HARDER 1974, 5-I-2). Einige marine Organismen enthalten Bor im

zwei- bis vierstelligen ppm-Bereich (HARDER 1974, 5-L-1). Hohe Bor-Konzentrationen gibt es auch in Illiten von Tonen hauptsächlich mariner und brackischer Herkunft. Die Konzentration von Bor im Wasser wird vor allem durch Adsorption oder Inkorporation in Illit-Mineralen kontrolliert (HARDER 1974, 5-H-1), so dass die mit zunehmender Verdünnung der Formationswässer gegenüber Chlorid stattfindende Bor-Anreicherung wahrscheinlich auf Desorptionen zurückzuführen ist.

4.5.3 Gelöster organischer Kohlenstoff (DOC)

4.5.3.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben gewöhnlich einen $\text{DOC} \leq 1 \text{ mg/l}$. DOC-Werte bis zu 1 mg/l sind im schweizerischen Lebensmittelbuch (1985) als Qualitätsziel für Trinkwasser genannt (Ein nicht zu überschreitender Grenzwert wird nicht genannt). In den USA hatte die Untersuchung von 100 Grundwasserproben aus 27 Staaten einen mittleren DOC von $1,2 \text{ mg/l}$ und einen Median-Wert von $0,7 \text{ mg/l}$ ergeben (LEENHEER et al. 1974). Unter den oberflächennahen Grundwässern des Nagra-Regionalprogramms kommt ein Wasser mit $\text{DOC} = 1,5 \text{ mg/l}$ in dem Kohleflöze enthaltenden OSM-Aquifer von Schwarzenberg vor, ferner ein Wasser mit $\text{DOC} = 2,2 \text{ mg/l}$ im subthermalen USM-Wasser von Attisholz zusammen mit einer Schwefelwasserstoff(-Sulfid)-Konzentration von 55 mg/m^3 , welche das Vorhandensein von sulfatreduzierenden Mikroorganismen voraussetzt.

4.5.3.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In den untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern wird $\text{DOC} = 1 \text{ mg/l}$ nicht überschritten*). In den Wässern Eglisau 2-4 haben die DOC-Werte eine grosse Variationsbreite, bleiben aber mit zwei Ausnahmen unter 1 mg/l .

*) In Lottstetten, wo ein Wert $\text{DOC} = 1,5 \text{ mg/l}$ erreicht, beträgt das Mittel $\text{DOC} = 0,8 \text{ mg/l}$.

Nur je ein Ausreisser in Eglisau 2 und Eglisau 4 haben mit 2,7 mg/l und 4,6 mg/l höhere DOC-Werte als 1 mg/l und sind für die Tiefengrundwässer kaum repräsentativ.

Im Natrium-Chlorid-Wasser von Weiach sind Werte von DOC = 6,5 und DOC = 18, im Wasser von Schafisheim DOC = 1,9 und 2,0 mg/l gemessen worden. Die hohen Kohlenstoff-Gehalte dieser Wässer manifestieren sich auch in ihren Methan-Konzentrationen. Eine Kontamination durch organische Zusätze der Bohrspülung ist aber nicht auszuschliessen.

4.6 Gase

4.6.1 Sauerstoff

4.6.1.1 Oberflächennahe Grundwässer

Die untersuchten oberflächennahen Grundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere enthalten generell Sauerstoff.

4.6.1.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Sauerstoff ist auch in dem als eine Mischung älterer und jüngerer Anteile zu betrachtenden Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser von Beuren enthalten. Im Wasser von Oberbergen wird der Sauerstoff wahrscheinlich durch Belüftung im Stollen oder schon beim Aufstieg angereichert. Im OSM-Wasser des Dettenbergtunnels ist der Sauerstoff vermutlich in den Fassungseinrichtungen beigemischt. Höchstens Spuren von Sauerstoff enthält dagegen das USM-Wasser von Schönenbuch.

4.6.1.3 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Für alle Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer muss angenommen werden, dass sie im Aquifer keinen gelösten Sauerstoff enthalten, auch wenn in den Proben manchmal Spuren in je nach Bestimmungsverfahren unterschiedlichen Grössen gefunden wurden.

4.6.2 Stickstoff (Fig. 33)

4.6.2.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den oberflächennahen Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere kommen Stickstoff-Konzentrationen zwischen rund 640 und 820 mmol/m³ vor. In diesem Streuungsbereich liegen die Stickstoff-Konzentrationen auch in den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern. Dies ist die Grössenordnung der Löslichkeit von atmosphärischem Stickstoff, welche nach den Daten von KLOTS & BENSON (1963, 52) bei einem Luftdruck von 101,325 kPa, einem Volumen von 78,084 % und einer Temperatur von 8°C 690 mmol/m³ beträgt. Der minimale Wert (Schwarzenberg) entspricht fast genau der Löslichkeit bei den im Einzugsgebiet von rund 200 m.ü.M. anzunehmenden Werte des Luftdrucks (92,8 kPa) und der Temperatur (7,1°C).

4.6.2.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Mit Ausnahme des Dogger-Wassers von Neuwiller (807 mmol/m³) und von einzelnen Proben des Malm-Wassers von Lottstetten (zweimal 814 mmol/m³), des USM-Wassers Eglisau 3 (1 mal 793 mmol/m³) und des OMM-Wassers von Tiefenbrunnen (1 mal 782 mmol/m³) haben dagegen die Natrium-Hydrogenkarbonat- und die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer Stickstoff-Konzentrationen von mehr als 820 mmol/m³. Konzentrationen von mehr als 1000 mmol/m³ enthalten die Natrium-Chlorid-Wässer von Mainau und Singen, die Natrium-Chlorid-Wässer von Weiach und Schafisheim sowie einzelne Proben der Wässer Eglisau 2-4.

4.6.2.3 Stickstoff-Argon-Verhältnis

In allen untersuchten oberflächennahen Grundwässern, ausser im Wasser Wildeggen, und in allen untersuchten Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern ist das N₂/Ar-Verhältnis = 40 ± 3. Dies entspricht nach den Löslichkeitsdaten von KLOTS & BENSON (1963) ungefähr dem N₂/Ar-Verhältnis von Wasser im Gleichgewicht mit der Atmosphäre (37,4 bei 2°C, 39,2 bei 27°C; Fig. 33). Das heisst, dass das Stickstoffgas in diesen Wässern ganz oder im wesentlichen aus der Atmo-

sphäre stammt. Nur wenig über dem im Gleichgewicht mit der Atmosphäre stehenden Verhältnis liegende Werte von $N_2/Ar = 40-44$ haben alle Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer. Die höheren Werte in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern zeigen, dass sie ausser atmosphärischem Stickstoffgas auch solches enthalten, das biochemisch aus organischen

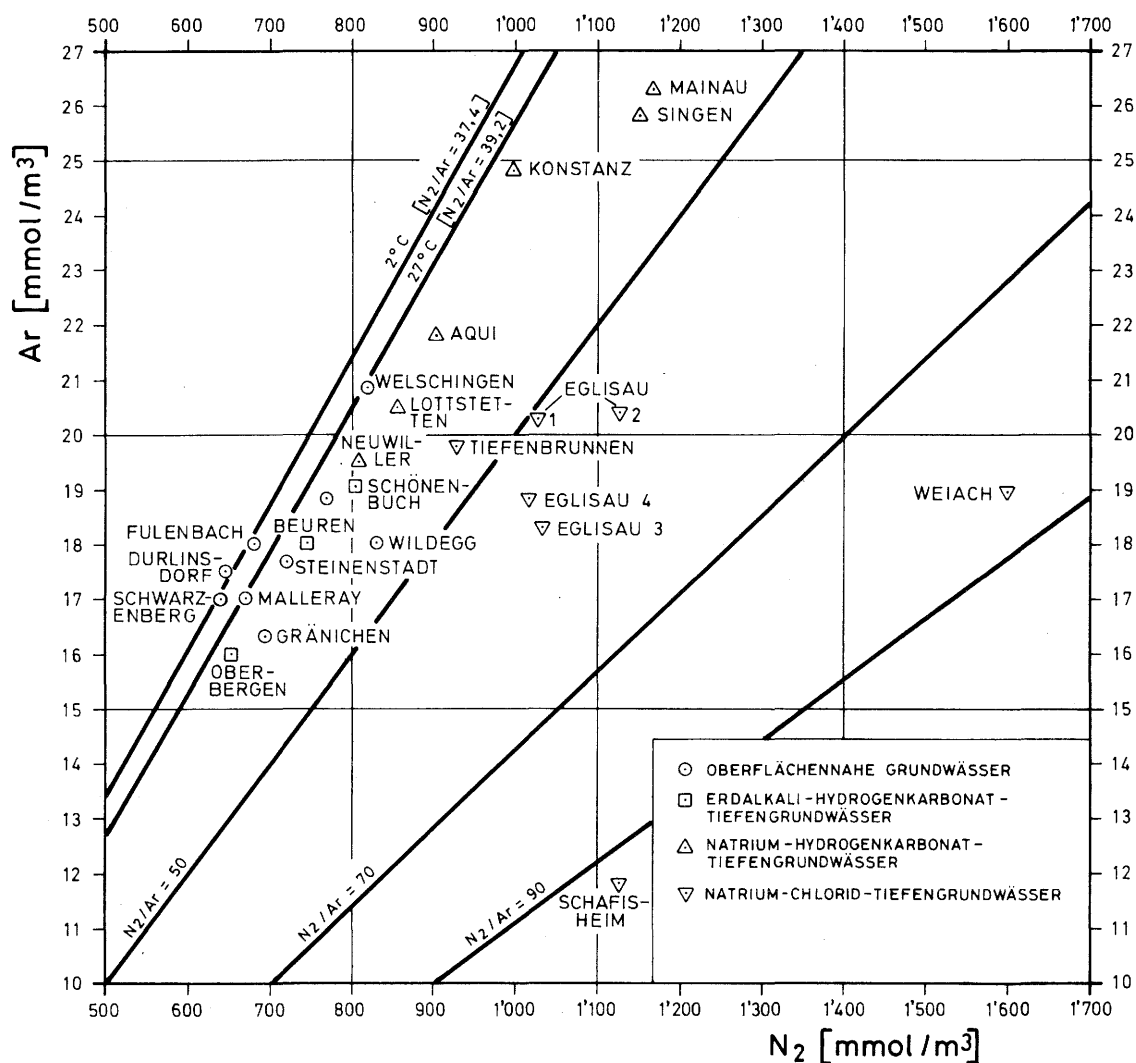


Fig. 33: Beziehung zwischen Argon- und Stickstoff-Konzentration

Stoffen freigesetzt worden ist. Am kleinsten ist das Verhältnis im OMM-Wasser Zürich-Tiefenbrunnen (Mittel 46,6); Verhältnisse von durchschnittlich 50 bis 57 haben die Wässer von Eglisau. Bezeichnend für die organische Herkunft eines Teils des Stickstoffs ist, dass die hohe Methan-Konzentrationen enthaltenden Wässer Weiach und Schafisheim auch hohe N_2/Ar -Verhältnisse von 84-96 haben.

4.6.3 Kohlendioxid

4.6.3.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In allen untersuchten oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere ist ein Teil der anorganischen Kohlenstoffverbindungen als gelöstes Kohlendioxid-Gas vorhanden.

4.6.3.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere von Konstanz, Mainau und Zürich-Aqui enthalten bei $\text{pH} > 8,75$ kein als sogenannte Basekapazität bis zum pH-Wert 8,2 (DIN 38 409 Teil 7) titrierbares Kohlendioxid. Die untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Malm- und Dogger-Aquifere enthalten dagegen gelöstes Kohlendioxid-Gas, nämlich nach den Bestimmungen der Basekapazität in Proben des Nagra-Regionalprogramms: Singen 90 mmol/m^3 , Lottstetten 140-700 mmol/m^3 (Mittel 390 mmol/m^3), Neuwiller 840 mmol/m^3 .

4.6.3.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Unter den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern enthalten diejenigen von Eglisau meistens kein als Basekapazität titrierbares Kohlendioxid. Da die pH-Werte dieser Wässer um 8,2 herum liegen, sind manchmal geringe Konzentrationen bis maximal 110 mmol/m^3 gemessen worden. Das USM-Wasser von Schafisheim enthielt in der Auslauf-Probe kein titrierbares Kohlendioxid, in der GTC-Druckbehälterprobe dagegen 230 mmol/m^3 . Im OMM-Wasser von Tiefenbrunnen sind 230-340 mmol/m^3 gemessen worden. Wie schon die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Malm- und Dogger-Aquifere zeichnet sich auch das einzige Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser aus einem Malm-Aquifer, nämlich Weiach, durch eine höhere Kohlendioxid-Konzentration von 1730-1800 mmol/m^3 aus.

4.6.4 Wasserstoff

In den untersuchten Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere ist Wasserstoff-Gas in Spuren nur in je einer Probe des Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwassers Zürich-Aqui und des Natrium-Chlorid-Tiefengrundwassers Tiefenbrunnen in quantifizierten Konzentrationen nur in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern Weiach und Schafisheim nachgewiesen (in den zuverlässigen Proben 5 bzw. 10 mmol/m³).

4.6.5 Helium (Fig. 34, 35)

In den oberflächennahen Grundwässern mit Ausnahme von Spuren in Steinenstadt und in den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern ist Helium nach den Untersuchungen des PSI nicht nachweisbar ($< 0,25 \text{ mmol/m}^3$). Ausser Konstanz und Eglisau 1 haben dagegen alle untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer quantifizierbare Helium-Konzentrationen. Sie betragen in den meisten Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern $0,5\text{-}0,8 \text{ mmol/m}^3$, in Singen $1,7 \text{ mmol/m}^3$. In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern, ausser Eglisau 1, finden wir generell höhere Konzentrationen, nämlich in Zürich-Tiefenbrunnen $1,7\text{-}2,5 \text{ mmol/m}^3$, in Schafisheim $2,5 \text{ mmol/m}^3$, in den Wässern Eglisau 2-4 $5,0\text{-}10,0 \text{ mmol/m}^3$, in Weiach $12,5\text{-}17,5 \text{ mmol/m}^3$.

Von den Wässern Oberbergen, Zürich-Aqui und Zürich-Tiefenbrunnen liegen Helium-Werte auch von Dr. J. Andrews vor *), vom Wasser Aqui ausserdem solche des Weizmann-Instituts. Im Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser der Kaiserstuhl-Vulkanite von Oberbergen beträgt danach die Helium-Konzentration $0,012 \text{ mmol/m}^3$ (nach PSI $< 0,25 \text{ mmol/m}^3$). Im Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser Zürich-Aqui, in welchem das PSI eine He-Konzentration von $0,5 \text{ mmol/m}^3$ gemessen hatte, fand Dr. J. Andrews umgerechnet $0,210\text{-}0,222 \text{ mmol/m}^3$ und das Weizmann-Institut (in der als gut

*) Die aus einer Probe von Schafisheim von Dr. J. Andrews angegebenen Edelgas-Konzentrationen sind derart extrem niedrig, dass sie nicht plausibel interpretiert werden können. Die Helium- und Argon-Werte sind auch um eine Grössenordnung kleiner als nach der PSI-Analyse. Diese Daten werden deshalb hier nicht berücksichtigt.

bewerteten Analyse) $0,410 \text{ mmol/m}^3$. Das Natrium-Chlorid-Wasser Zürich-Tiefenbrunnen, in welchem das PSI $1,7\text{--}2,5 \text{ mmol/m}^3$ gemessen hatte, enthält nach Dr. J. Andrews umgerechnet $2,423 \text{ mmol/m}^3$.

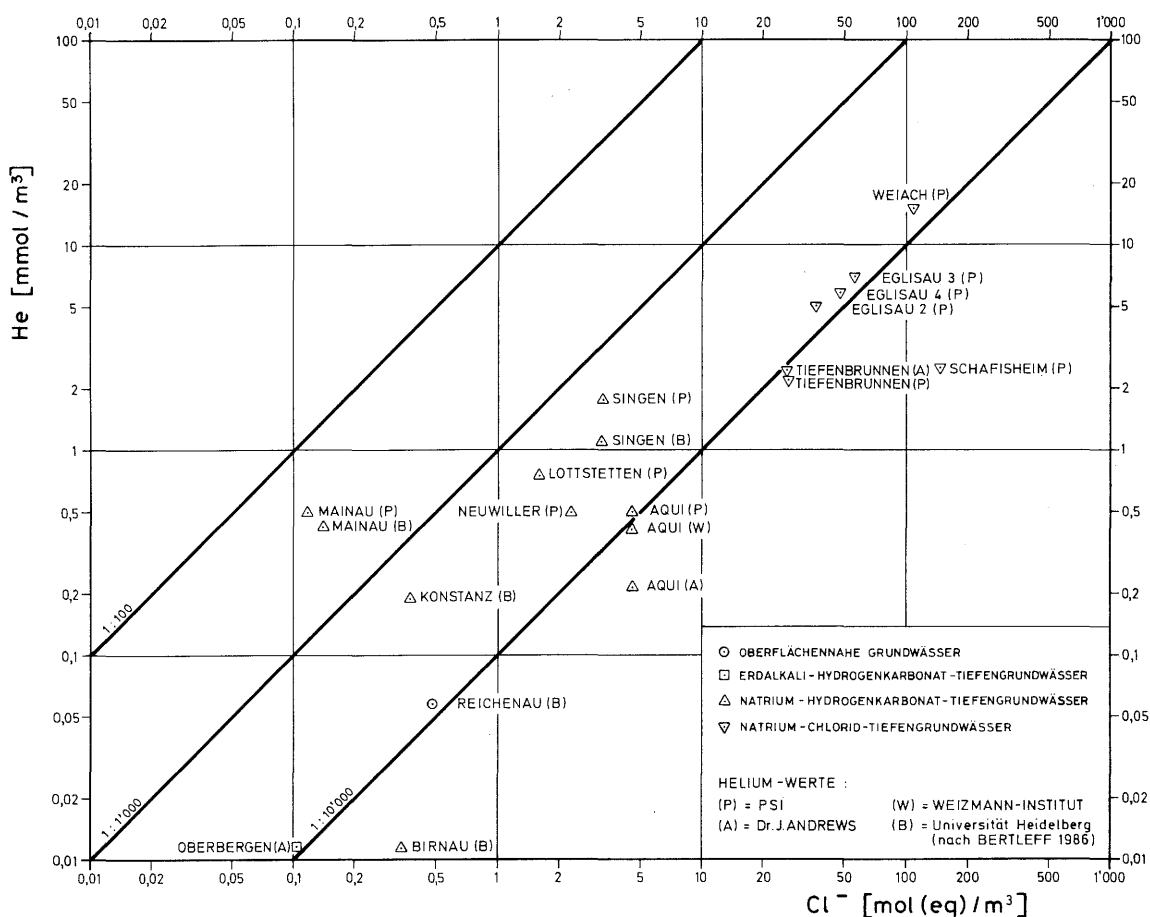


Fig. 34: Beziehung zwischen Helium- und Chlorid-Konzentration

BERTLEFF (1984, 1986, Tab. 11) berichtet aus unserem Untersuchungsgebiet über Helium-Werte aus den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern von Reichenau (Quartär aus Molasse), Birnau (OMM), Mainau (OMM), Konstanz (OMM) und Singen (Malm). Die Wässer von Reichenau und Birnau haben weniger als $0,25 \text{ mmol/m}^3$ (umgerechnet $0,057 \text{ mmol/m}^3$ und $0,012 \text{ mmol/m}^3$). Die anderen drei Werte bestätigen gut die Grössenordnung der an den gleichen Orten vom PSI ermittelten Konzentrationen:

	PSI	Univ. Heideslberg (BERTLEFF 1984, 1986)
	mmol/m ³	mmol/m ³
Konstanz	< 0,250	0,19
Mainau	0,500	0,42
Singen	1,749	1,11

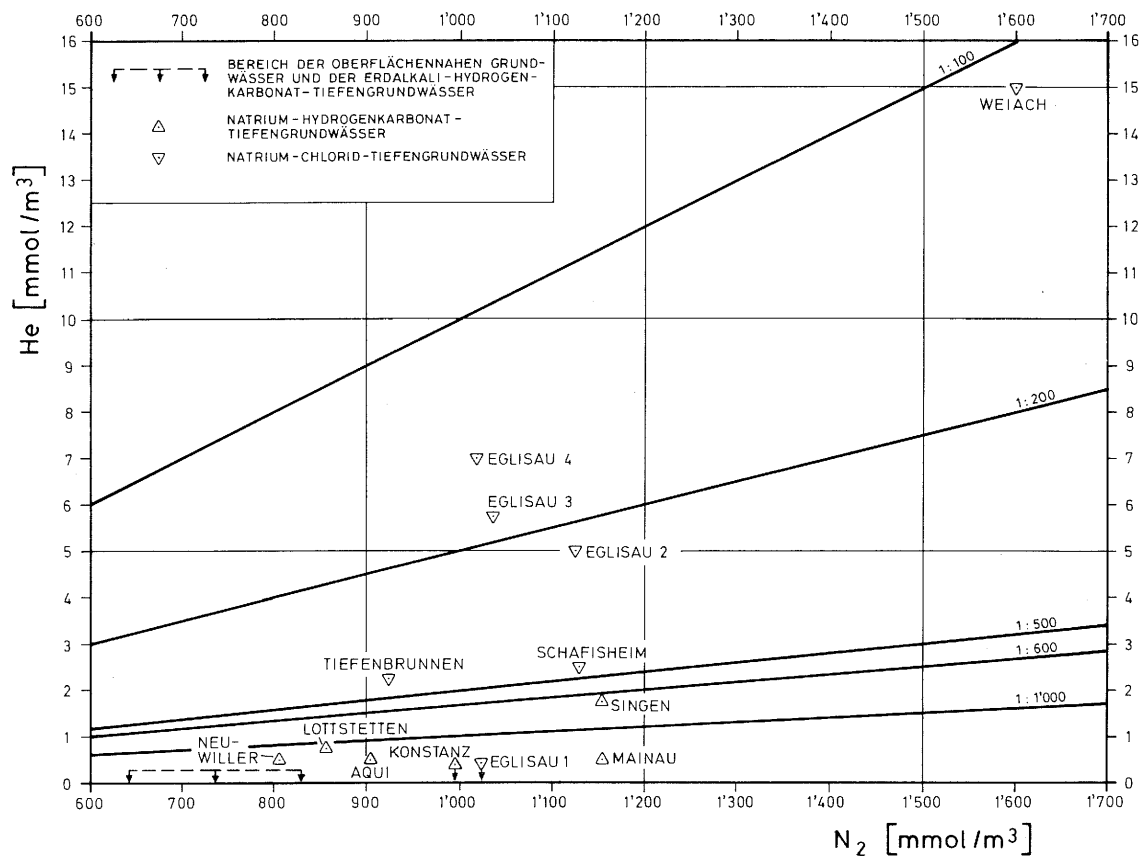


Fig. 35: Beziehung zwischen Helium- und Stickstoff-Konzentration

Die zunehmende Helium-Anreicherung von den Erdalkali-Hydrogenkarbonat- über die Natrium-Hydrogenkarbonat- zu den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern spricht für eine in dieser Reihenfolge zunehmende mittlere unterirdische Verweilzeit der Wässer. Dies wird auch durch die positive Korrelation zwischen der Chlorid- und der Helium-Konzentration bestätigt (Fig. 34). Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer haben verschiedene Helium-Stick-

stoff-Verhältnisse. In den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern sind diese kleiner als 1:600, meistens sogar kleiner als 1:1000; in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern (mit Ausnahme von Eglisau 1) sind sie grösser als 1:500 und erreichen im Extremfall nahezu 1:100 (Fig. 35).

Im Falle der Muschelkalk-Aquifere kann das Helium der Tiefengrundwässer durch einen Transport aus den tieferen Teilen der kontinentalen Kruste erklärt werden (BALDERER & LEHMANN, 1989; LEHMANN & LOOSLI, 1989; BALDERER & LEHMANN, in Vorb.). Das Verhältnis $^3\text{He}/^4\text{He} = 5,46 \times 10^{-8}$ (University of Cambridge) in der Probe der USM von Schafisheim spricht möglicherweise ebenfalls für eine Herkunft des Heliums aus dem Kristallin. Die Helium-Chlorid-Korrelation entspricht Verdünnungsreihen der älteren marinen oder brackischen Formationswässer mit den aus der Infiltration meteorischer Wässer herzuleitenden jungen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern. Mit abnehmenden Chlorid-Konzentrationen nimmt auch die Helium-Konzentration ab. Eine ähnliche Korrelation findet sich auch in den Grundwässern des Kristallins der Nordschweiz (BALDERER & LEHMANN, in Vorb.). Dort beträgt das He/Cl-Verhältnis ungefähr 1:630, während es in den Tertiär- und Malm-Aquiferen der Nordschweiz (mit Ausnahme von Mainau) zwischen ungefähr 1:2000 und 1:20'000 variiert. Der Unterschied ist auf die geringe Verfügbarkeit von Chlorid im Kristallin zurückzuführen.

4.6.6 Argon (Fig. 33, 36)

Von den meisten Proben liegen Argon-Bestimmungen des Paul Scherrer Instituts (PSI) ohne gleichzeitigen Bestimmungen anderer Edelgase (mit Ausnahme von Helium) vor. Zunächst sollen diese Argon-Werte des PSI allein diskutiert und mit den bei einigen Probeentnahmestellen von Dr. J. Andrews bestimmten oder von BERTLEFF (1984, 1986) publizierten Werten verglichen werden. Zu beachten ist, dass bei diesen Argon-Werten im Gegensatz zu den im Kapitel 4.6.7 besprochenen Ergebnissen keine Korrekturen für "excess air" und andere Einflüsse vorgenommen sind. Die Besprechung ist deshalb lediglich als Versuch zu betrachten, die für sich allein vorliegenden Argon-Werte in einer ersten Annäherung zu interpretieren.

4.6.6.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den untersuchten oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere schwankt die Argon-Konzentration (Analysen PSI) mit Ausnahme von Welschingen ($20,8 \text{ mmol/m}^3$) zwischen $15,5$ und $19,5 \text{ mmol/m}^3$ (Einzelwerte). Dies sind Argon-Konzentrationen von reinem Wasser im Gleichgewicht mit der Atmosphäre. Nach den Löslichkeitsdaten von KLOTS & BENSON (1963) und bei einem Volumenanteil von $0,934 \%$ sowie bei den anzunehmenden mittleren Luftdrücken und Temperaturen beträgt die Argon-Konzentration sowohl bei 300 m.ü.M. ($93,6 \text{ kPa}$; $9,1^\circ\text{C}$) als auch bei 700 m.ü.M. ($92,8 \text{ kPa}$; $7,1^\circ\text{C}$) etwa $17,1 \text{ mmol/m}^3$.

Die Edelgasuntersuchungen von Dr. J. Andrews ergaben im Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser von Oberbergen, wo das PSI $15,5$ - $16,5 \text{ mmol/m}^3$ gemessen hatte, eine Konzentration von $15,0 \text{ mmol/m}^3$. Das Isotopenverhältnis ist mit $^{40}\text{Ar}/^{36}\text{Ar} = 295,2$ so gross wie das atmosphärische Isotopenverhältnis ($295,5$).

4.6.6.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

An der oberen Grenze des Argon-Streuungsbereichs der oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer oder wenig darüber finden wir die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer von Neuwiller ($19,5 \text{ mmol/m}^3$) und Lottstetten ($19,8$ - $21,0$, Mittel $20,5 \text{ mmol/m}^3$). Erheblich höhere Argon-Konzentrationen von $21,8$ - $26,3 \text{ mmol/m}^3$, die auf Infiltrationstemperaturen in der Nähe des Gefrierpunktes hinweisen, haben die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer Konstanz, Mainau, Singen und Zürich-Aqui.

Im Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser Zürich-Aqui fanden das PSI $21,8 \text{ mmol Ar/m}^3$, Dr. J. Andrews $25,3$ - $46,3 \text{ mmol Ar/m}^3$ und das Weizmann-Institut $20,8 \text{ mmol Ar/m}^3$. Das Isotopenverhältnis $^{40}\text{Ar}/^{36}\text{Ar} = 291,6$ (Dr. J. Andrews) lässt auf das Fehlen einer unterirdischen Ar-Produktion aus ^{40}K schliessen.

4.6.6.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Eine extrem niedere Argon-Konzentration von 11,8 mmol/m³ *) wurde im Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser von Schafisheim gemessen, wohingegen sie im Wasser von Weiach mit 18,0-19,8 mmol/m³ im Streuungsbereich der oberflächennahen Grundwässer liegt. Die in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern von Eglisau und Tiefenbrunnen zwischen 16,0 und 21,3 mmol/m³ schwankenden Argon-Konzentrationen (Mittel Tiefenbrunnen: 19,8 mmol/m³, Mittel Eglisau 2-4 20,3; 18,3; 18,8 mmol/m³) entstehen vermutlich durch die Mischung verschiedener Wässer.

Das Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser Tiefenbrunnen enthält nach den Messungen des PSI 18,0-21,3 mmol Ar/m³, nach Dr. J. Andrews umgerechnet 21,8 mmol Ar/m³. In diesem Falle weist das Isotopenverhältnis $^{40}\text{Ar}/^{36}\text{Ar} = 302,2$ auf eine gewisse unterirdische Ar-Produktion hin.

Das im Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser von Schafisheim von Dr. J. Andrews gemessene Isotopenverhältnis $^{40}\text{Ar}/^{36}\text{Ar} = 357,3$ kann nicht auf unterirdische Argon-Produktion im Aquifer zurückgeführt werden, da es eine Akkumulationszeit erfordern würde, die doppelt so alt ist wie die Formation selbst. Es scheint, dass radiogenes ^{40}Ar von ausserhalb des Molasseaquifers stammt (RAUBER et al., in Vorb.).

4.6.6.4 Beziehungen zwischen Argon-Konzentration und Sauerstoff-18- und Deuterium-Verhältnissen (Fig. 36)

Die bei bestimmten Wassertemperaturen im Gleichgewicht mit der Atmosphäre vorhandenen Argon-Konzentrationen können mit den temperaturabhängigen Löslichkeitskoeffizienten nach der Näherungsformel von WEISS et al. (1970, zit. nach RAUBER 1987, 100) berechnet werden. Für die gleichen Temperaturen können die bei rezenten Klimabedingungen massgebenden statistischen Beziehungen zwischen dem Deuteriumgehalt der Niederschläge und der Temperatur berechnet werden (Fig. 36).

*) Wert PSI, der noch niederere Wert von 1,3 mmol/m³ nach der Analyse von Dr. J. Andrews ist kaum für das Grundwasser repräsentativ.

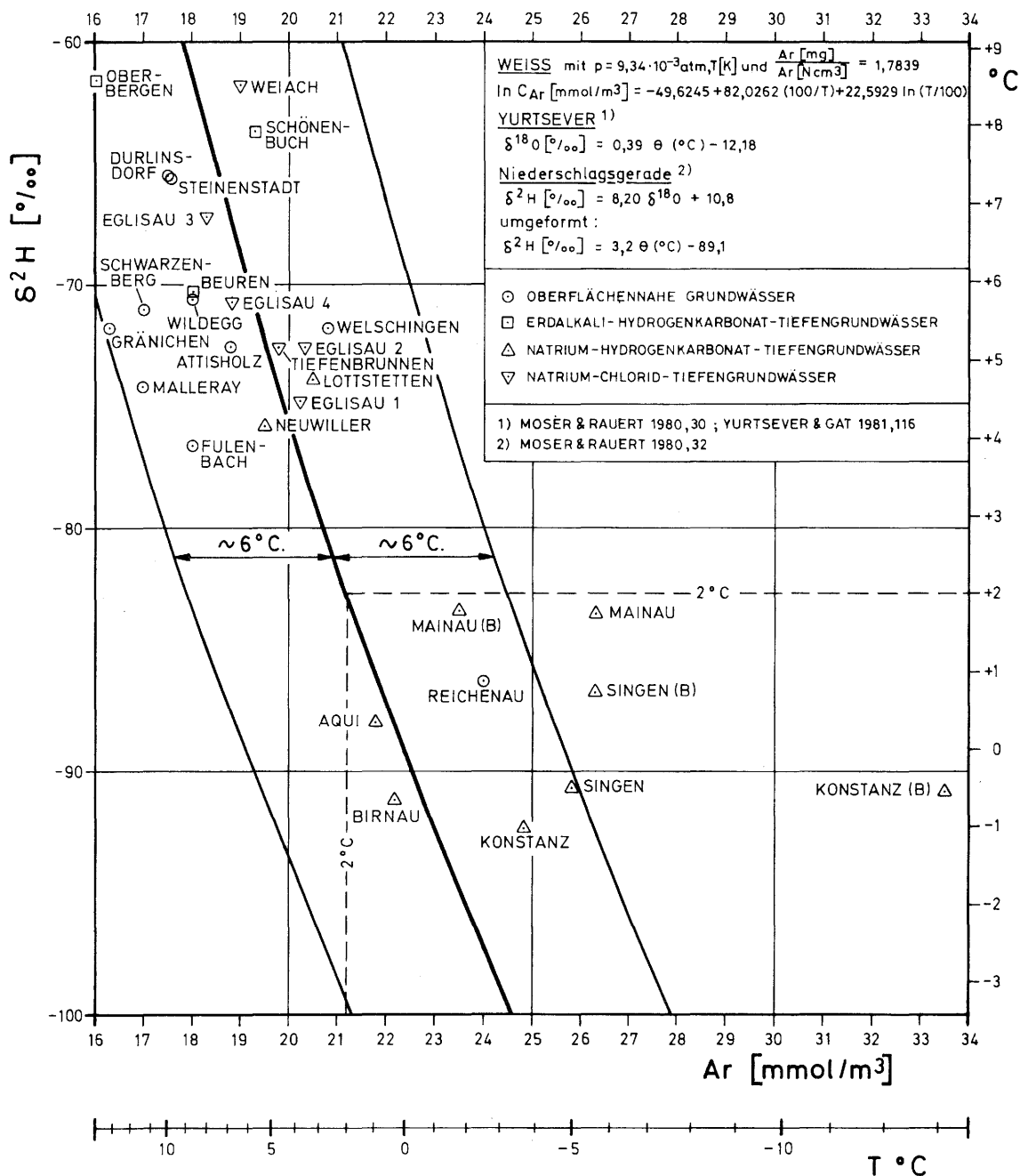


Fig. 36: Beziehung zwischen $\delta^2\text{H}$ - und Argon-Konzentration sowie jeweilige Temperaturbeziehungen

Im $\delta^2\text{H}/\text{Ar}$ -Diagramm kann die temperaturbezogene statistische Beziehung zwischen Ar und $\delta^2\text{H}$ als Kurve eingetragen werden (Fig. 36). Die in den Nagra-Programmen gemessenen Ar -Konzentrationen haben, von wenigen Ausnahmen abgesehen,

von dieser Kurve keine grösseren Abstände als $\pm 3,25 \text{ mmol Ar/m}^3$. Eine grössere negative Abweichung als $-3,25 \text{ mmol Ar/m}^3$ tritt nur im Falle des Natrium-Chlorid-Tiefengrundwassers von Schafisheim (ausserhalb des Diagramms) auf. Positive Abweichungen von mehr als $+3,25 \text{ mmol Ar/m}^3$ treten nur im Falle des Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwassers von Mainau sowie in den fremden Analysen von Singen und Konstanz auf.

Für die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer Konstanz, Mainau, Singen und Zürich-Aqui ergeben sich übereinstimmend aus $\delta^{18}\text{O}$ und $\delta^2\text{H}$ Niederschlagstemperaturen und aus der Ar-Konzentration Infiltrationstemperaturen von weniger als 2°C . Die beiden anderen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer, Lottstetten und Neuwiller, sind die einzigen dieses Typs, bei denen alle drei Parameter übereinstimmend auf Temperaturen der Niederschläge und des Infiltrationswassers um 5°C hinweisen.

In der Graphik (Fig. 36) unter dem Gefrierpunkt liegende Infiltrationen und Niederschlagstemperaturen mögen ein Hinweis auf die Grösse der Mess- und Interpretationsgenauigkeiten sein.

4.6.7 Neon, Argon, Krypton und Xenon

Nur in drei Tiefengrundwässern der Nagra-Programme aus Tertiär-Aquiferen sind andere Edelgase als Helium und Argon durch Dr. J. Andréws und in einem Falle auch durch das Weizmann-Institut bestimmt worden. Wie Argon haben auch Neon, Krypton und Xenon im Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser Zürich-Aqui die höchsten und im Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser aus den Vulkaniten von Oberbergen die niedersten Konzentrationen. Die betreffenden Konzentrationen im Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser Tiefenbrunnen liegen zwischen denen der beiden anderen Wässer. Die relativen Temperaturunterschiede werden damit bestätigt.

Weitere Edelgas-Messungen aus unserem Untersuchungsgebiet, die vom Institut für Umweltp Physik der Universität Heidelberg ausgeführt worden sind, wurden von BERTLEFF (1984, 1986, 146-149, Tab. 11) veröffentlicht.

Aus den Neon-, Argon-, Krypton- und Xenon-Konzentrationen berechneten RAUBER et al. (in Vorb.) folgende Infiltrationstemperaturen *):

Singen	$1,9 \pm 1,7^{\circ}\text{C}$
Mainau	$2,1 \pm 0,8^{\circ}\text{C}$
Birnau	$3,0 \pm 0,2^{\circ}\text{C}$
Reichenau	$2,8 \pm 1,3^{\circ}\text{C}$
Zürich-Aqui	$2,4 \pm 1,3^{\circ}\text{C}$
Zürich-Tiefenbrunnen	$9,7 \pm 5,4^{\circ}\text{C}$

Die berechneten Edelgas-Temperaturen der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer zeigen in Uebereinstimmung mit den ^2H - und ^{18}O -Gehalten, dass die Wässer in einer Kaltzeit versickert sind und widerlegen die allein aufgrund der stabilen Isotope zum Teil eventuell mögliche Annahme einer Herkunft aus den rezenten Seen. Die aus den Edelgasen berechnete Temperatur des Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwassers Tiefenbrunnen hat einen grossen Fehler, so dass eine sichere Aussage über die Infiltrationstemperatur nicht möglich ist.

*) Ferner berechnete RAUBER (1987) für das Vulkanit-Tiefengrundwasser Oberbergen aus den Edelgas-Konzentrationen eine Infiltrationstemperatur von $18,4 \pm 0,38^{\circ}\text{C}$. Im Manuskript RAUBER et al. (in Vorb.) ist diese Probenentnahmestelle nicht aufgeführt. Wahrscheinlich findet im Stollen oder schon beim Aufstieg des rund 20°C warmen Wassers eine Belüftung statt, durch welche die Gaskonzentrationen einem Gleichgewichtszustand mit der Atmosphäre angenähert werden, wobei die Edelgaskonzentrationen des bei tieferer Temperatur infiltrierten Wassers erniedrigt werden und das Wasser an Sauerstoff angereichert wird.

4.6.8 Schwefelwasserstoff und Sulfide (H_2S , HS^- , S^{2-})

4.6.8.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den untersuchten oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere ist mit Ausnahme des subthermalen USM-Wassers von Attisholz ($1,715 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$) kein Schwefelwasserstoff nachweisbar gewesen.

4.6.8.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern sind Schwefelwasserstoff-Gas und Sulfide entweder ebenfalls nicht nachweisbar ($< 0,2 \text{ mmol}/\text{m}^3$) oder nur in verhältnismässig geringen Konzentrationen vorhanden. Zu den Wässern ohne nachweisbaren Schwefelwasserstoff und ohne Sulfide gehören Zürich-Aqui, Eglisau 2-4 (vereinzelt $0,2 \text{ mmol}/\text{m}^3$ in Eglisau 3 und Spur in Eglisau 2) und Schafisheim. Konzentrationen zwischen rund $0,6$ und $3,1 \text{ mmol}/\text{m}^3$ haben Singen, Mainau, Neuwiller, Eglisau 1 und eine Probe von Zürich-Tiefenbrunnen (andere: nicht nachweisbar). Im Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser des Malm-Aquifers von Lottstetten, wo Schwefelwasserstoff vereinzelt auch nicht nachweisbar ist, treten Konzentrationen des Schwefelwasserstoffs und der Sulfide bis $0,6 \text{ mmol S}/\text{m}^3$, im Mittel $0,5 \text{ mmol S}/\text{m}^3$ auf; in den vom PSI massenspektrometrisch untersuchten Gasproben war aber Schwefelwasserstoff-Gas nicht nachweisbar ($< 0,3 \text{ mmol}/\text{m}^3$) oder vereinzelt nur in Spuren nachgewiesen. Dies trifft auch für das Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser des Malm-Aquifers von Weiach zu, in welcher die chemische Bestimmung $4,1 \text{ mmol S}/\text{m}^3$ ergab.

Während somit die Tiefengrundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere sonst im allgemeinen kein oder verhältnismässig wenig Schwefelwasserstoff enthalten, hatte man im Malm der Bohrung Eglisau 2 auf der später mit Zement verschlossenen Strecke bei 335 m Tiefe ein Natrium-Chlorid-Wasser mit über $100 \text{ mg H}_2\text{S}/\text{l}$ ($> 2900 \text{ mmol}/\text{m}^3$) angetroffen (GÜBELI 1959, 10).

4.6.9 Methan und Ethan

4.6.9.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den untersuchten oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere ist Methan bei der massenspektrometrischen Untersuchung nicht nachweisbar ($< 0,03 \text{ mmol/m}^3$) oder vereinzelt (Steinenstadt und Gränichen) in Spuren nachgewiesen.

4.6.9.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer enthalten dagegen, mit alleiniger Ausnahme des OMM-Wassers Konstanz, durchwegs quantifizierbare Methankonzentrationen ($\geq 0,03 \text{ mmol/m}^3$). Meistens sind es allerdings weniger als 10 mmol/m^3 . In Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern hat nur Mainau mit $19,95 \text{ mmol/m}^3$ eine höhere Konzentration.

Bei den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern von Eglisau ist bemerkenswert, dass aus den nur die USM erschliessenden Bohrungen 3 und 4 Wässer mit lediglich etwa $1,4 \text{ mmol CH}_4/\text{m}^3$ (Mittel), aus der bis in den Malm hineinreichenden Bohrung 2 dagegen Wässer mit $8 \text{ mmol CH}_4/\text{m}^3$ (Mittel) gefördert werden. Auch der gegenüber den Bohrungen 3 und 4 in Bohrung 1 erhöhte Einzelwert von $2,5 \text{ mmol CH}_4/\text{kg}$ dürfte damit zusammenhängen, dass diese Bohrung den Malm erreicht hatte. Auf der später mit Zement verschlossenen Strecke der Bohrung Eglisau 2 hatte man ab 425 m im Malm ein Gas mit 46,5 % Methan, 0,1 % Ethan und Spuren höherer Kohlenwasserstoffe angetroffen (GÜBELI 1959, 10; BÜCHI 1959, 15). In der nahen Bohrung Weiach enthält das aus dem Malm geförderte Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser Methan in einer Konzentration von 4000-4500 $\text{mmol CH}_4/\text{m}^3$, durchschnittlich $4264 \text{ mmol CH}_4/\text{m}^3$ und Ethan in einer Konzentration von 39,2-42,6 mmol/m^3 , durchschnittlich $40,9 \text{ mmol/m}^3$. Noch höhere Konzentrationen, nämlich rund $280'009 \text{ mmol/m}^3$ Methan und 350 mmol/m^3 Ethan, fanden sich im Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser des USM-Aquifers von Schafisheim.

4.7 Modellierung des Karbonatsystems und Sättigungsindizes (Fig. 37, 38, 39, 40, 41)

P. Wexsteen und M. Kullin

4.7.1 Einleitung und Methodik

Bei der Probenentnahme eines Wassers kann es zu einer Veränderung der physikalischen Parameter wie Temperatur und Druck kommen. Daraus resultiert oftmals eine Verschiebung des im Aquifer vorherrschenden chemischen Gleichgewichts des Wassers. In dieser Hinsicht ist das Karbonatsystem besonders empfindlich.

Mit Hilfe eines geochemischen Modells und den nötigen thermodynamischen Grundlagen können die ursprünglichen in situ Konzentrationen wie auch die Sättigungsindizes einzelner Mineralien berechnet werden. Der Sättigungsindex von Calcit wird z.B. wie folgt definiert:

$$SI_{\text{Calcit}} = \log IAP - \log KT$$

Dabei ist log KT der Wert der Gleichgewichtskonstante von Calcit bei der entsprechenden Wassertemperatur, und log IAP das Produkt der thermodynamischen Aktivitäten der wässrigen Spezies, in welches das Mineral dissoziierte (die Druckabhängigkeit des Systems konnte mit dem verwendeten Computerprogramm nicht modelliert werden, hat aber nur eine untergeordnete Bedeutung).

Ein Sättigungsindex von 0 bedeutet, dass das Wasser in bezug auf das entsprechende Mineral im Gleichgewicht steht. Ein positiver Sättigungsindex bedeutet Uebersättigung, ein negativer Untersättigung. Ein Sättigungsindex von -1 heisst z.B., dass das Wasser 1/10 mit dem entsprechenden Mineral gesättigt ist.

Die berechneten Sättigungsindizes wurden mit dem Computerprogramm PHREEQE berechnet (PARKHURST et al. 1980). Dieses Programm erlaubt die Berechnung der einzelnen chemischen Spezies im Wasser sowie das Aufstellen einer Ionenbilanz. Gleichzeitig ermöglicht es eine Simulation der geochemi-

schen Veränderungen, die als Folge des gestörten ursprünglichen Gleichgewichts zwischen Wasser und Gestein eingetreten sind.

Das Rechenprogramm PHREEQE, das für diese Berechnungen mit der thermodynamischen Datenbank NAI0289.T10 (PEARSON et al., 1989) gekoppelt wurde, erlaubt die Berechnung folgender Grössen in einem Schritt:

- Konzentration "Total Inorganic Carbon" (Molalität)
- Konzentration der wichtigsten Karbonatspezies in Molalitäten (CO_2aq , HCO_3^- , CO_3^{2-} , OH^-)
- $\log p_{\text{CO}_2}$ (bar)
- Sättigungsindizes verschiedener Mineralien

Für die Berechnungen wurden die folgenden 26 Elemente berücksichtigt:

Li	Na	K	NH_4	Mg
Ca	Sr	Ba	Mn	Fe
Al	U	F	Cl	Br
SO_4	NO_3	P	m	H_2S
SiO_2	B	N_2	CH_4	H_2
O_2				

mit m = totale Alkalinität

Da keine Berechnungen in bezug auf das Oxidations-Reduktions-System durchgeführt wurden, konnte auf die Eingabe des Redox-Potentials verzichtet werden.

Bei unbekanntem pH-Wert hingegen musste auf eine Berechnung verzichtet werden (z.B. Probe 177).

Einige Wassertemperaturen wurden durch die Probenentnahme oder durch eine spezielle geologische Situation verfälscht. In diesen Fällen wurde deshalb mit folgenden Temperaturen gerechnet:

Nr.	Name	gemessener Wert (°C)	angenommener Wert (°C)
135	Stallikon	-	8,0
137	Stallikon	-	8,0
128	Mainau	11,5	26,0
128B	Mainau	10,2	26,0
97	Singen	10,9	30,0
97B	Singen	9,7	30,0
304	Schafisheim	16,1	30,0
302	Weiach	14,0	30,0

4.7.2 Rechenmodell

Das hier verwendete Rechenmodell betrachtet hauptsächlich das Karbonatsystem und geht von der Annahme aus, dass Wasser ein chemisches Gleichgewicht mit dem Aquifergestein anstreben und bei entsprechend langen Aufenthaltszeiten auch erreichen können. Eine Uebersättigung in natürlichen Wässern wird ausgeschlossen, d.h. der erwartete Sättigungsindex von Calcit muss kleiner oder maximal gleich Null sein.

Ist in einer Wasserprobe der Sättigungsindex von Calcit jedoch grösser als Null (Uebersättigung), so wird angenommen, dass die Uebersättigung künstlich durch eine Störung des chemischen Gleichgewichts bei der Probenentnahme (CO₂-Entgasung) verursacht wurde (PEARSON et al., 1989). In diesem Fall forciert das Rechenprogramm den Sättigungsindex von Calcit gegen Null, indem mathematisch CO₂ zugeführt wird.

Gleichzeitig muss man jedoch darauf hinweisen, dass auch andere Erklärungen einer möglichen Calcitübersättigung in Frage kommen könnten: LANGMUIR (1971) erklärte eine solche Calcitübersättigung durch die Lösung von Gips und durch reaktionskinetische Prozesse (Verhältnis zwischen Gipslösung und der Calciumkarbonatausfällung, PALCIAUSKAS & DOMENICO, 1976). FREEZE & CHERRY (1979) weisen darauf hin, dass das Problem der Calcitübersättigung eventuell in einer Kombination verschiedener Faktoren zu suchen ist, wie z.B. Temperaturveränderungen, Entgasung, Ionenaustausch und Gipslösung.

4.7.3 Resultate

Die Resultate der thermodynamischen Berechnungen sind für die Stellen des Nagra-Programms und für die fremden Analysen in den Tabellen 12 und 13 zusammengestellt. Die Resultate der Erdölbohrungen sind in der Tabelle 14 zu finden.

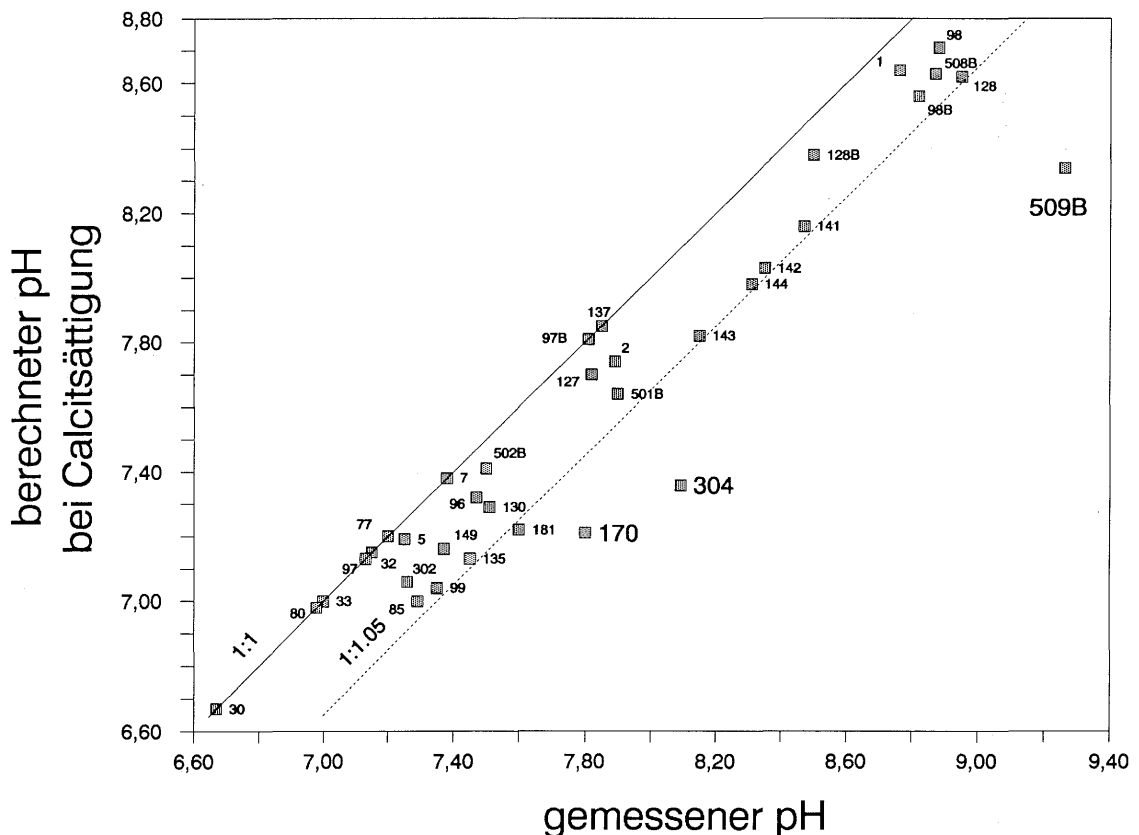


Fig. 37: Beziehung zwischen gemessenem und berechnetem pH-Wert bei Calcitsättigung

Dabei werden die von Fresenius und vom Paul Scherrer Institut (PSI) analysierten Karbonatspezies mit den in drei verschiedenen Varianten berechneten Werten verglichen. In der Variante A wurden alle Werte mit Hilfe des gemessenen pH-Wertes und der totalen Alkalinität neu berechnet. In der Rechnungsvariante B wurde nun die Annahme einer möglichen Entgasung mit einbezogen, d.h. zur Variante A wurde noch die Bedingung für calcitübersättigte Wässer gefordert, dass das Wasser mit Calcit ins Gleichgewicht gebracht wird. Die Variante C ist der Variante B ähnlich, ausser dass für

die Berechnungen die totale Alkalinität durch die "Total Inorganic Carbon"-Konzentration ersetzt wurde. Dies ist möglich, da das System überdeterminiert ist. Die beiden Varianten B und C ermöglichen dadurch eine Ueberprüfung des Systems, da bei korrekten Messwerten der totalen Alkalinität und der "Total Inorganic Carbon"-Konzentrationen das Resultat beider Varianten im Rahmen der Messfehler übereinstimmen müssten.

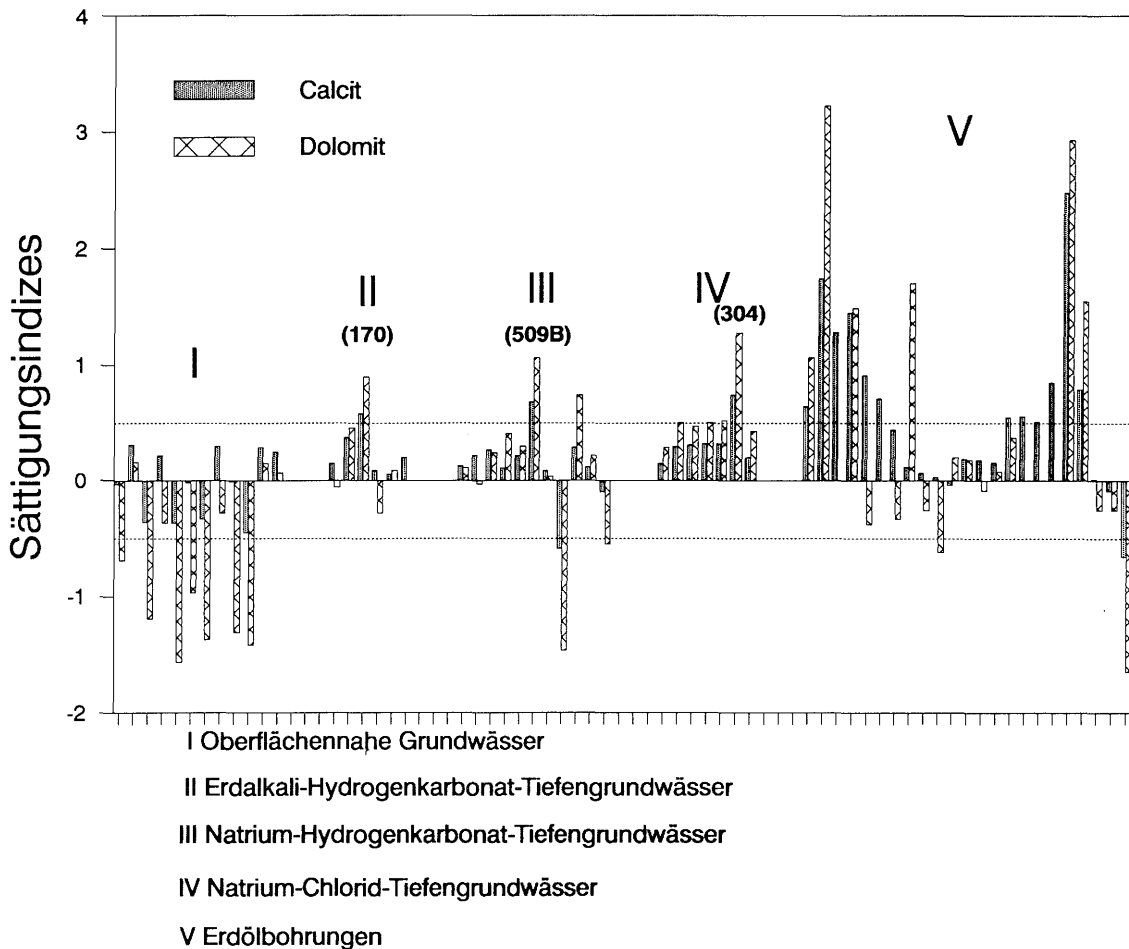


Fig. 38: Sättigungsindizes von Calcit und Dolomit

Figur 37 illustriert die Beziehung zwischen den gemessenen und den berechneten pH-Werten. Die Punktepaaire müssten bei genügender Messgenauigkeit und bei einer Probenentnahme ohne Entgasung theoretisch alle auf der 1:1-Linie liegen. Die untersuchten Wässer der Tertiär- und Malm-Aquifere mit analysiertem und berechnetem pH-Wert sind alle zu leicht

erhöhten gemessenen pH-Werten verschoben, wobei, mit Ausnahme der Wässer von Dettenberg, Schafisheim und Ravensburg, das Verhältnis 1:1,05 nicht überschritten wird. Diese relativ geringfügige Abweichung dürfte mit grosser Wahrscheinlichkeit auf eine Entgasung bei der Probenentnahme oder eventuell auch auf einen Messfehler bei der pH-Messung zurückzuführen sein. Die deutliche Abweichung der drei Wässer Dettenberg, Schafisheim und Ravensburg dürfte hauptsächlich auf eine CO_2 -Entgasung zurückzuführen sein, da die Proben auch eine starke Calcitübersättigung aufweisen (Fig. 38).

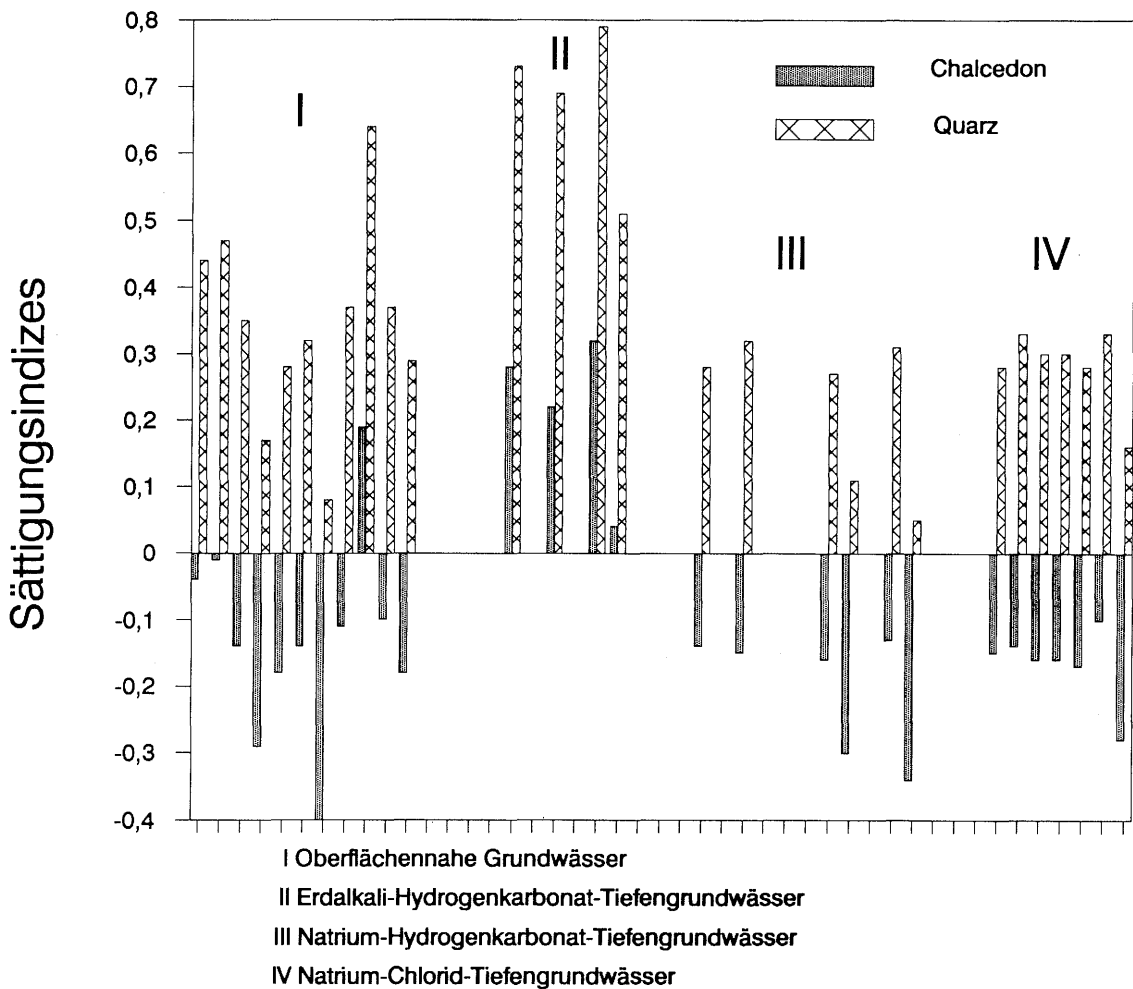


Fig. 39: Sättigungsindizes von Quarz und Chalcedon

Die Wässer der Erdölbohrungen weisen oft noch stärkere Abweichungen von der 1:1-Linie in Richtung gemessener pH-Wert auf. Auch hier sprechen die starken Calcitübersättigungen (Fig. 38) für eine Entgasung bei der Probenentnahme oder

auf einen Zementeinfluss hin. So erreichen drei Einzelproben von Boswil 1 Sättigungsindizes von über 1 (= 10-fache Uebersättigung) und eine Probe von Pfaffnau Süd 5 sogar über 2 (= 100-fache Uebersättigung).

Die Sättigungsindizes von Calcit und Dolomit sind in Figur 38 graphisch dargestellt. Daraus ist gut ersichtlich, dass die oberflächennahen Grundwässer fast immer in bezug auf Dolomit und meistens auch in bezug auf Calcit untersättigt sind. Die Tiefengrundwässer zeigen dagegen mit wenigen Ausnahmen sowohl eine Calcit- wie auch eine Dolomitübersättigung.

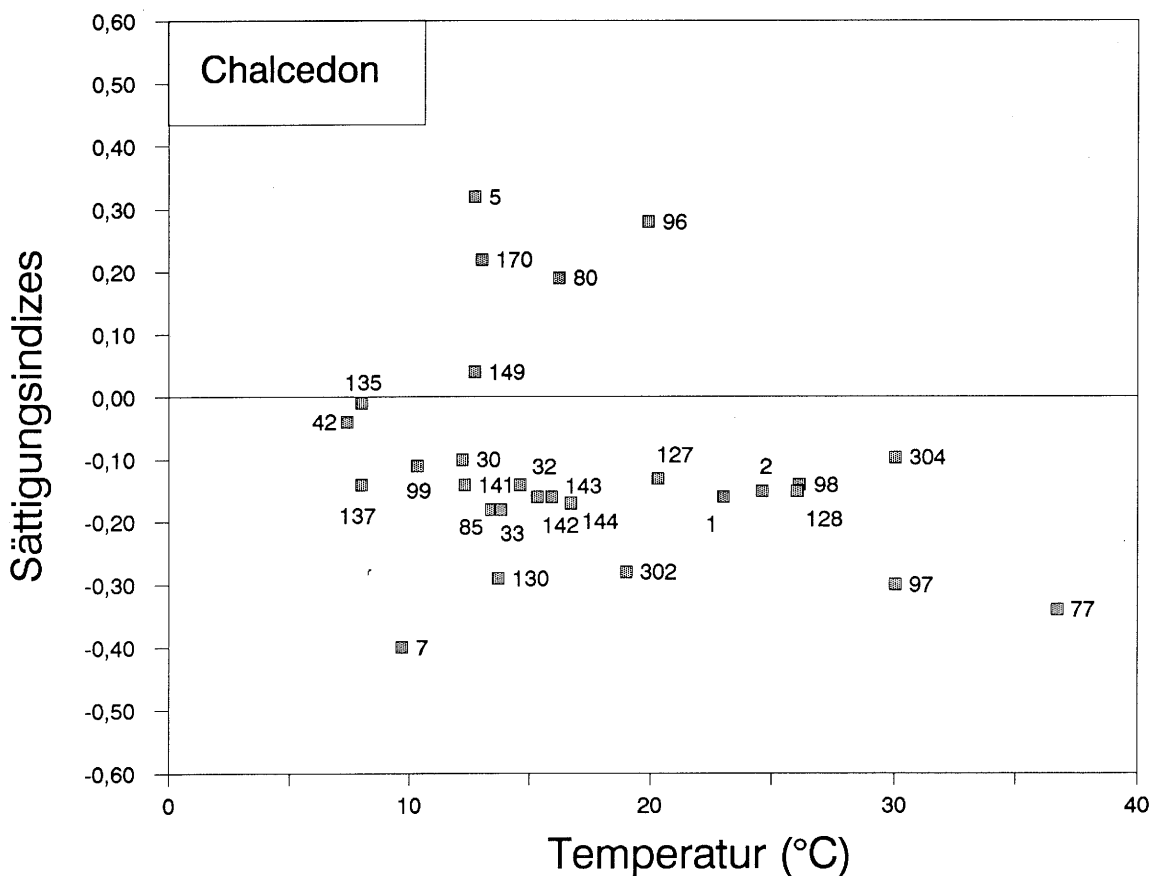


Fig. 40: Sättigungsindizes von Chalcedon

Die Figuren 39 und 40 illustrieren den Sättigungsgrad der Wässer hinsichtlich Quarz und Chalcedon. Alle Wässer zeigen eine deutliche Quarzübersättigung mit Ausnahme von Malleray (0,08), Mainau (0,07) und Neuwiller (0,05), die nur eine schwache Uebersättigung an Quarz aufweisen. Was den Sättigungszustand der Wässer in bezug auf Chalcedon betrifft,

können drei Gruppen unterschieden werden. Die oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer von Schönenbuch (5), Oberbergen (96), Dettenberg (170) und Durlinsdorf (80) sind deutlich chalcidon-übersättigt, während die drei Wässer von Beuren (149), Stallikon (149) und Schwarzenberg (42) nahezu im Gleichgewicht mit Chalcidon sind. Alle Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer hingegen sind deutlich chalcidonuntersättigt (Fig. 40).

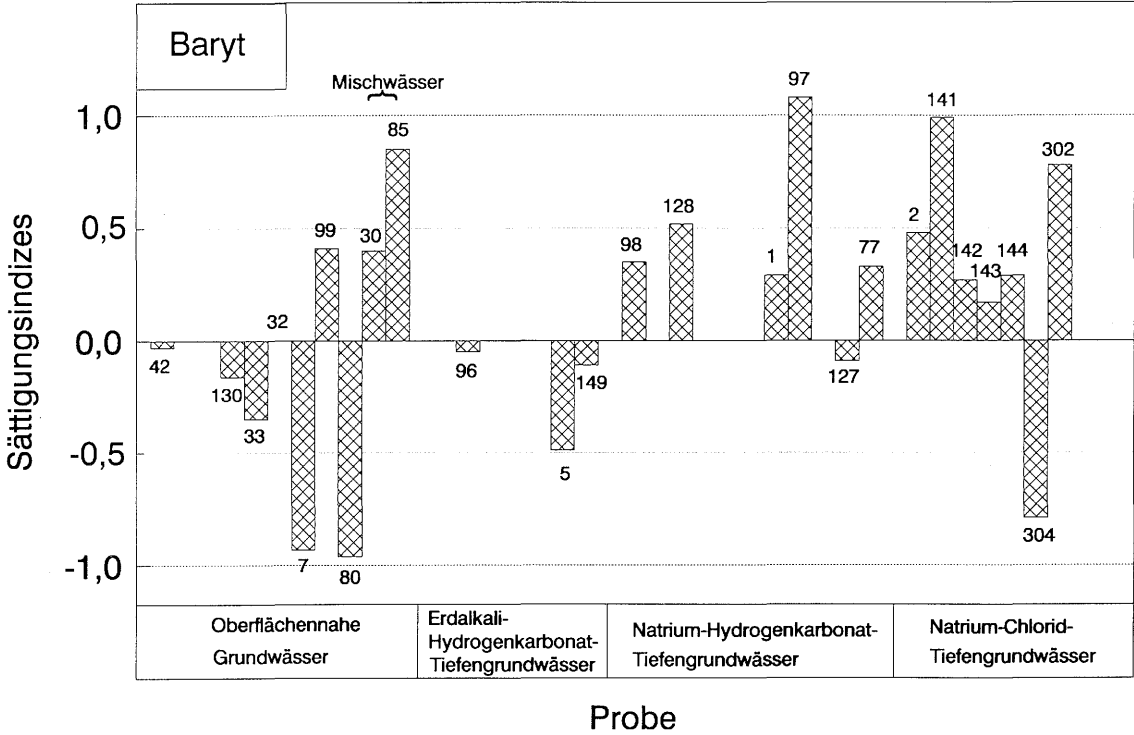


Fig. 41: Sättigungsindizes von Baryt

Ferner wurden ebenfalls die Sättigungsindizes in bezug auf Strontianit, Rhodochrosit, Siderit, Witherit, Baryt, Coelestin, Fluorit, Uraninit und auf Portlandzement berechnet (Tab. 13b-13c). Mit Ausnahme von Baryt und Siderit sind alle Wässer bezüglich der oben erwähnten Mineralien deutlich untersättigt. Einzig die Wässer von Schafisheim (304) und Eglisau (141) weisen noch in bezug auf Uraninit eine Uebersättigung auf, obwohl alle anderen Wässer hinsichtlich dieses Minerals doch deutlich bis sehr deutlich untersättigt sind.

Figur 41 illustriert die Barytsättigung der untersuchten Wässer. Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer sind mit Ausnahme von Welschingen (99) und den beiden Mischwässern Wildegg (30) und Steinenstadt (85) barytuntersättigt. Dagegen zeigen alle Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer mit Ausnahme von Lottstetten (127) und Schafisheim (304) eine deutliche Barytübersättigung mit Sättigungsindizes bis eins und darüber.

4.8 Uran und Radioaktivität

4.8.1 Uran (Fig. 42)

4.8.1.1 Oberflächennahe Grundwässer

In den meisten oberflächennahen Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere betragen die Uran-Konzentrationen weniger als $5 \mu\text{mol}/\text{m}^3$ ($< 1,2 \mu\text{g}/\text{l}$). Erhöhte Uran-Konzentrationen zwischen 10 und $20 \mu\text{mol}/\text{m}^3$ kommen in Grundwässern der Kohlen enthaltenden OSM von Schwarzenberg und Stallikon vor (SCHMASSMANN et al. 1984, 107). Nach der einen Bestimmung (PSI) enthält auch das Wasser von Wildegg um $10 \mu\text{mol U}/\text{m}^3$. In den oxidierenden Grundwässern kommt Uran mit der Oxidationsstufe +6 bei $\text{pH} > 7$ in Form gut löslicher Uranyl-Komplexe vor, vor allem als Anion des Uranyl-Hydroxy-Komplex $(\text{UO}_2)_3(\text{OH})_5^-$ und als Kation der Uranyl-Karbonat-Komplexe $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$ und $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$ (GASCOYNE 1982, 42-43). Die Konzentrationen sind aber durch die Verfügbarkeit von Uran in den Aquifergesteinen begrenzt. Typisch sind die in Verbindung mit Kohlevorkommen auftretenden erhöhten Konzentrationen: In den Huminsubstanzen enthaltenden organischen Sedimenten, wie Torfen, Ligniten und Kohlen, werden Kationen von Uran und von Thorium adsorbiert und daher stark angereichert (GASCOYNE 1982, 39).

4.8.1.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern hat das OMM-Wasser des Dettenbergtunnels nur $2 \mu\text{mol U}/\text{m}^3$, wohingegen die Konzentrationen im USM-Wasser von Schönenbuch und im Malm-Wasser von Beuren auf rund $7 \mu\text{mol U}/\text{m}^3$ und

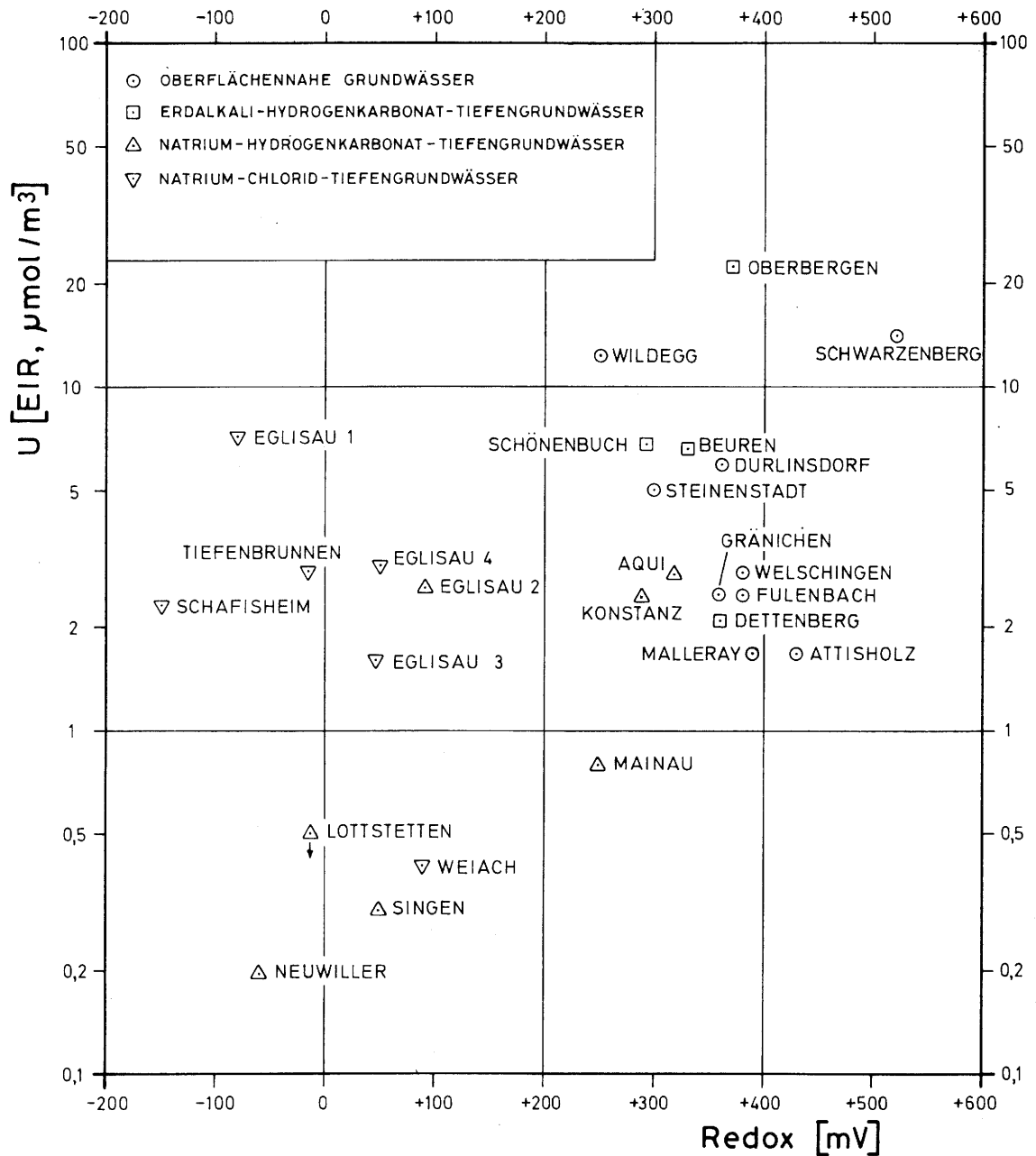


Fig. 42: Beziehung zwischen Uran-Konzentration und Redox-Spannung

im Vulkanit-Wasser von Oberbergen im Mittel auf rund $23 \mu\text{mol U}/\text{m}^3$ erhöht sind. Nahe der untersuchten Badquelle von Oberbergen kommen im vulkanischen Carbonatit uranreiche Niob-Mineralien mit bis 9 % Uran und 5 % Thorium im Mineral und bis 0,35 % Uran im vererzten Gestein vor (WIMMENAUER 1959, 56; KIRCHHEIMER 1973,95-117), so dass Uran unter den

für eine Lösung günstigen Bedingungen auch reichlich verfügbar ist und es zur höchsten Konzentration aller hier besprochenen Wässer kommt.

4.8.1.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere (Konstanz, Mainau, Zürich-Aqui) haben Uran-Konzentrationen von nur 1-3 $\mu\text{mol}/\text{m}^3$. Die Wässer der Malm- und Dogger-Aquifere (Singen, Lottstetten, Neuwiller) weisen noch niedrigere Uran-Konzentrationen von höchstens 1 $\mu\text{mol}/\text{m}^3$ auf. Teilweise liegen sie sogar unter den Nachweisgrenzen von 0,4 $\mu\text{mol}/\text{m}^3$ (Fresenius = 0,1 $\mu\text{g}/\text{l}$) und 0,2 $\mu\text{mol}/\text{m}^3$ (PSI = 0,05 $\mu\text{g}/\text{l}$). Da diese Wässer niedere Redox-Spannungen aufweisen kommt darin die gegenüber U^{+6} geringere Löslichkeit der reduzierten Form (U^{+4}) zum Ausdruck.

4.8.1.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die Uran-Konzentrationen der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer des Nagra-Regional- und Ueberwachungsprogramms (Eglisau 1-4, Zürich-Tiefenbrunnen) liegen teilweise unter den Nachweisgrenzen bis maximal 7,5 $\mu\text{mol}/\text{m}^3$, wobei der ganze Streubereich auch an ein und derselben Stelle auftreten kann (Eglisau 4). Ausserdem gibt es erhebliche systematische Differenzen zwischen den einzelnen Laboratorien.

Das Malm-Wasser von Weiach (302/6) hat nach allen Laboratorien übereinstimmend extrem niedere Konzentrationen (wie sie auch in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Malm- und Dogger-Aquifere festgestellt wurden):

	$\mu\text{mol}/\text{m}^3$	$\mu\text{g}/\text{l}$
Fresenius	< 0,4	(n.n.)
PSI	0,25	(0,06)
Harwell	0,34	0,08 $\pm$ 0,01
Berechnet ¹⁾	0,6 $\pm$ 0,6	

¹⁾ aus Uran-Aktivität (3,7 $\pm$ 3,7 Bq/ m^3 und Verhältnis $^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 1,2$ (Analysen PSI)

Das USM-Wasser von Schafisheim hat nach Bestimmungen von Fresenius und Harwell ähnlich niedere, nach der chemischen Bestimmung des PSI aber höhere Konzentrationen:

		$\mu\text{mol}/\text{m}^3$	$\mu\text{g}/\text{l}$
Fresenius	304/1	< 0,4 (n.n.)	-
PSI	304/1	1,7	0,4
PSI	304/2	2,9	0,7
Harwell	304/2	0,21	$0,005 \pm 0,004$
Berechnet ¹⁾		$0,9 \pm 0,45$	-

¹⁾ aus Uran-Aktivität ($7,4 \pm 3,7 \text{ Bq}/\text{m}^3$ und Verhältnis $^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 1,8$ (Analysen PSI))

In den sauerstoffhaltigen oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern hängt die Uran-Konzentration offenbar wesentlich von der Verfügbarkeit in den Aquifer-Gesteinen ab. In den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern werden die Uran-Konzentrationen nach oben infolge der generell tieferen Redox-Spannungen begrenzt.

4.8.2 $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnis (Fig. 43)

4.8.2.1 Oberflächennahe Grundwässer

In den meisten oberflächennahen Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere findet sich ein nahe dem Gleichgewichtswert = 1 liegendes $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnis von 1,0-1,4. Nur das im Gebiet von Oelsanden austretende USM-Wasser Fulenbach hat mit $^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 1,8$ einen etwas höheren Wert.

4.8.2.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Zum Streuungsbereich der oberflächennahen Grundwässer gehören auch die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer Beuren ($^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 0,9-1,09$) und Schönenbuch (1,1-1,3). Das die höchsten Uran-Konzentrationen aufweisende Vulkanit-Wasser Oberbergen hat das höhere Aktivitätsverhältnis $^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 2,1-2,2$ (nach PSI, Harwell; $2,32 \pm 0,02$). Unter den oxidierenden Bedingungen der oberflächennahen Grundwässer und der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

geht Uran-234 bevorzugt in Lösung, weil beim α -Zerfall von Uran-238 durch den Rückstoss (recoil) sowohl das zu Uran-234 zerfallende Thorium-234 direkt ins Wasser ausgestossen wird als auch das im Gestein entstehende Uran-234, das lockerer im durch den Rückstoss geschwächten Gitter gebunden ist (BALDERER 1983b, 53; BAERTSCHI & BALDERER, in Vorb., 7.41). Im Grundwasser kann im Laufe der Zeit Uran-234 gegenüber Uran-238 angereichert werden.

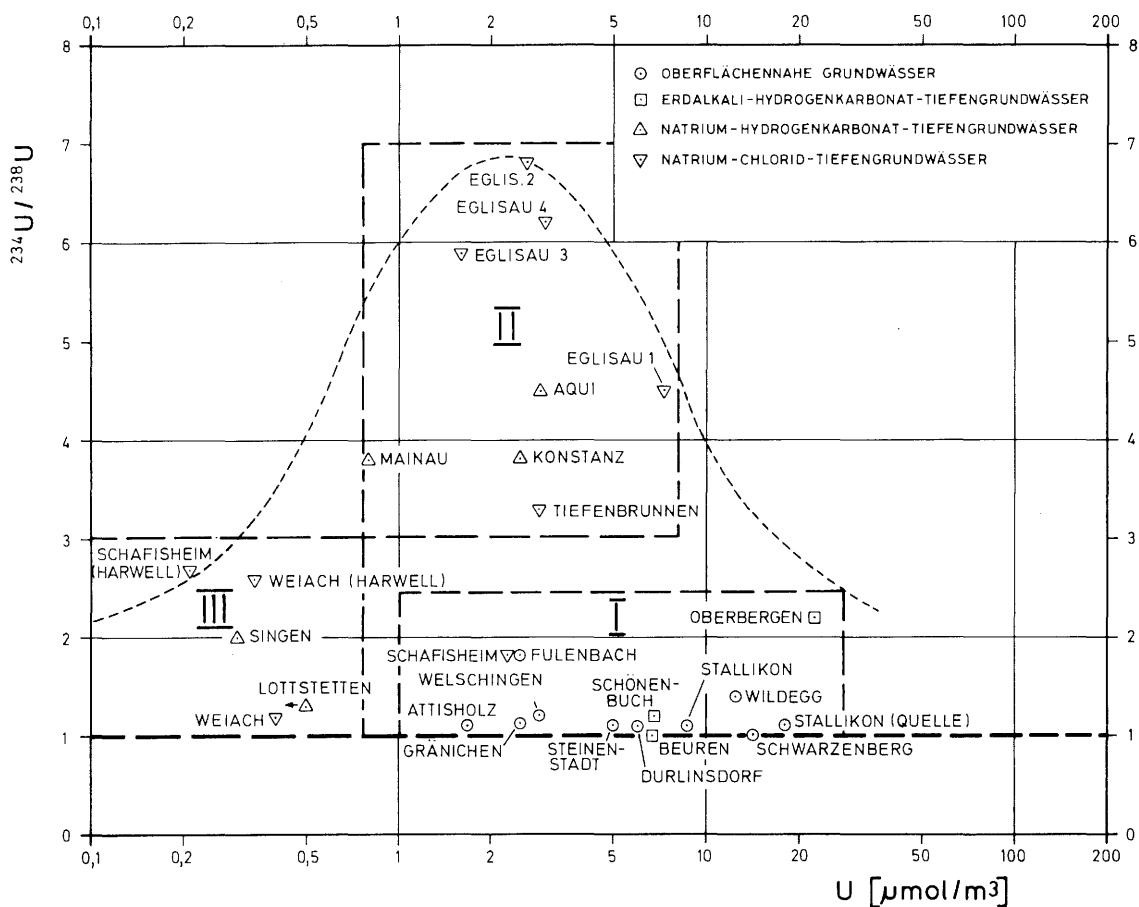


Fig. 43: Beziehung zwischen $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnis und Uran-Konzentration

4.8.2.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Molasse-Aquifere (Konstanz, Mainau, Zürich-Aquí) beträgt das Aktivitätsverhältnis $^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 3,8-4,5$. Mit abnehmender Redox-Spannung und kleineren Uran-Konzentrationen wird es den Modell-Ansätzen entsprechend (BALDERER 1983b, 51-54; BAERTSCHI & BALDERER, in Vorb.) in den Natrium-

Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Malm-Aquifere kleiner: Singen = 2,0, Lottstetten = 1,0-2,5, Mittel 1,3. Da unter den reduzierenden Bedingungen weniger Uran gelöst sein kann, nimmt die Uran-Konzentration ab, wobei aber die Abnahme von Uran-234 wegen der grösseren Zerfallsrate stärker als die von Uran-238 ist, was sich vor allem bei kurzen Verweilzeiten des Grundwassers auf das Aktivitätsverhältnis auswirken muss.

4.8.2.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Unter den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern hat das OMM-Wasser Zürich-Tiefenbrunnen nicht nur ähnliche Uran-Konzentrationen sondern mit $^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 2,9-3,6$ auch im gleichen Streuungsbereich liegende Uran-Aktivitätsverhältnisse wie die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere (Konstanz, Mainau, Zürich-Aqui). Noch höhere Aktivitätsverhältnisse von $^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 4,4-8,5$ (Mittel 4,5-6,8) haben die USM-Wässer von Eglisau. Obwohl sowohl die Konzentrations- als auch die Aktivitätsverhältnis-Daten des Urans des Malm-Wassers der Bohrung Weiach und des USM-Wassers der Bohrung Schafisheim inkohärent sind, zeigt sich bei ihnen gegenüber den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern des Nagra-Regionalprogramms (Zürich-Tiefenbrunnen, Eglisau 1-4) doch ein Trend sowohl zu niedrigeren Uran-Konzentrationen als auch zu tieferen Isotopen-Aktivitätsverhältnissen von $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$, nämlich:

	Weiach (302/6) $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$	Schafisheim (304/1,2) $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$
PSI	1,2	1,8
Harwell 1	$2,57 \pm 0,16$	$2,67 \pm 0,23$.
Harwell 2	$1,96 \pm 0,26$	

4.8.2.5 Zusammenfassende Betrachtung

Nach ihrer Uran-Konzentration und ihrem Uran-Aktivitätsverhältnis lassen sich die untersuchten Grundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere zu folgenden Gruppen zusammenfassen:

	$\mu\text{mol U/m}^3$
<u>Gruppe I</u> ($^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 1,0-2,5$)	1-25
- alle oberflächennahen Grundwässer	
- alle Erdalkali- HCO_3 -Tiefengrundwässer	
<u>Gruppe II</u> ($^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 2,5-8,5$)	0,8-8
- alle Na-HCO_3 -Tiefengrundwässer in OMM: Konstanz, Mainau, Zürich-Aqui	
- Na-Cl -Tiefengrundwässer: Eglisau 1-4 Zürich-Tiefenbrunnen	
<u>Gruppe III</u> ($^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 1,0-3,0$)	< 0,8
- alle Na-HCO_3 -Tiefengrundwässer im Malm: Singen, Lottstetten	
- Na-Cl -Tiefengrundwässer Schafisheim (Harwell), Weiach	

Gruppe I hat niedere Aktivitätsverhältnisse und, wenn im Aquifergestein genügend Uran verfügbar ist, hohe Uran-Konzentrationen. Dies ist für die oxidierenden Bedingungen in jungen Grundwässern typisch (BÄRTSCHI & BALDERER, in Vorb., 7.48).

Gruppe II hat die höchsten Aktivitätsverhältnisse. So hohe Uran-Konzentrationen, wie sie bei genügender Verfügbarkeit von Uran in Gruppe I auftreten können, kommen nicht vor. Diese Charakteristika weisen auf einen langen Kontakt von Grundwässern mit den uranhaltigen Gesteinsformationen hin. (BÄRTSCHI & BALDERER, in Vorb., 7.49).

Gruppe III hat wie Gruppe I niedere Aktivitätsverhältnisse, aber niedrigere Uran-Konzentrationen als die Gruppe I und II. Sie kann sich in reduzierenden Grundwässern während länger andauernden Verweilzeiten zu der Gruppe II entwickeln. Deshalb ist zu vermuten, dass die Wässer der Gruppe III längere mittlere Verweilzeiten als die der Gruppe II haben. Zu ihnen ist auch das Dogger-Wasser von Neuwiller zu zählen, dessen Aktivitätsverhältnis wegen der geringen Uran-Konzentration nicht bestimmbar war.

Die maximalen Aktivitätsverhältnisse kommen in einem mittleren Konzentrationsbereich bei etwa $2 \mu\text{mol/m}^3$ (ca. 0,5

ppb) vor, bei ähnlichen Konzentrationen wie im Kristallin der Nagra-Proben (BÄRTSCHI & BALDERER, in Vorb., 7.75: Fig. 7.3.5).

4.8.3 Alpha-Aktivität des Urans und des Thoriums (Fig. 44, 45)

4.8.3.1 Oberflächennahe Grundwässer

Die oberflächennahen Grundwässer mit Uran-Konzentrationen von weniger als $6 \mu\text{mol}/\text{m}^3$ haben α -Aktivitäten des Urans von $10\text{--}20 \text{ Bq}/\text{m}^3$. In den mit Molassekohlen verknüpften uranreicheren OSM-Wässern steigt die α -Aktivität des Urans in Schwarzenberg auf $78 \text{ Bq}/\text{m}^3$ und in Stallikon bis auf $109 \text{ Bq}/\text{m}^3$. Ueber die α -Aktivität des Thoriums-228 liegen aus diesen oberflächennahen Grundwässern keine Daten vor.

4.8.3.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Höhere α -Aktivitäten des Urans als die gewöhnlichen oberflächennahen Grundwässer haben mit $40\text{--}63 \text{ Bq}/\text{m}^3$ (Mittel $44\text{--}52 \text{ Bq}/\text{m}^3$) die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer Beuren und Schönenbuch. Diese Wässer haben zusätzlich ähnlich grosse α -Aktivitäten des Thoriums-228 ($34\text{--}44 \text{ Bq}/\text{m}^3$). Im Vulkanit-Tiefengrundwasser von Oberbergen beträgt die α -Aktivität des Thoriums-228 dagegen nur $26 \text{ Bq}/\text{m}^3$.

4.8.3.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere (Konstanz, Mainau, Zürich-Aqui) haben bei vergleichbaren Uran-Konzentrationen wegen des grösseren ^{234}U -Anteils höhere α -Aktivitäten des Urans als die oberflächennahen Grundwässer.*) In den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Malm- und Dogger-Aquifere (Singen, Lottstetten, Neuwiller) sind die α -Aktivitäten des Urans mit $3\text{--}7 \text{ Bq}/\text{m}^3$ entsprechend den geringen Uran-Konzentrationen extrem niedrig. Im Malm-Wasser von Lottstetten, von

*) Eine Konzentration von $2,5 \mu\text{mol U}/\text{l}$ ergibt bei einem Aktivitätsverhältnis $^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 1,0$ eine α -Aktivität des Urans von $15 \text{ Bq}/\text{m}^3$, bei $^{234}\text{U}/^{238}\text{U} = 5$ dagegen $44 \text{ Bq}/\text{m}^3$.

welchem auch Daten der α -Aktivität von ^{228}Th vorliegen, ist diese gleich gross oder grösser als die α -Aktivität des Urans und erreicht in einem Falle 37 Bq/m^3 .

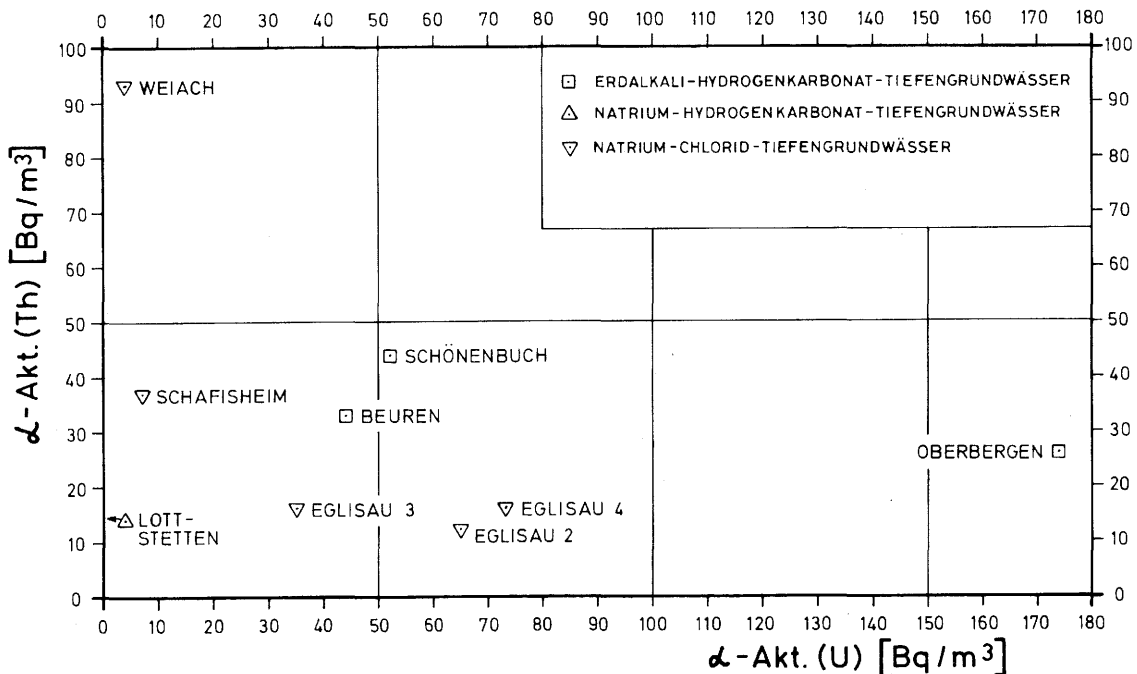


Fig. 44: Beziehung zwischen α -Aktivität von Thorium und α -Aktivität von Uran

4.8.3.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Das Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser der Bohrung Zürich-Tiefenbrunnen hat entsprechend den Uran-Konzentrationen und $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnissen auch ähnliche α -Aktivitäten des Urans wie die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere. Trotz den zumeist eher niedrigen Uran-Konzentrationen gehören die Wässer von Eglisau wegen des hohen ^{234}U -Anteils zu den Tiefengrundwässern aus Tertiär- und Malm-Aquiferen mit den höchsten α -Aktivitäten des Urans, im Extremfall 185 Bq/m^3 bei $7,5 \mu\text{mol U/m}^3$, so viel wie im Vulkanit-Tiefengrundwasser von Oberbergen erst bei $23,5 \mu\text{mol U/m}^3$ erreicht wird. Die Mittelwerte der Wässer Eglisau 2-4 schwanken zwischen 35 Bq/m^3 und 73 Bq/m^3 . Die α -Aktivitäten von ^{228}Th sind im Gegensatz zum Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser von Lottstetten meistens um ein Mehrfaches kleiner als die α -Aktivitäten des Urans.

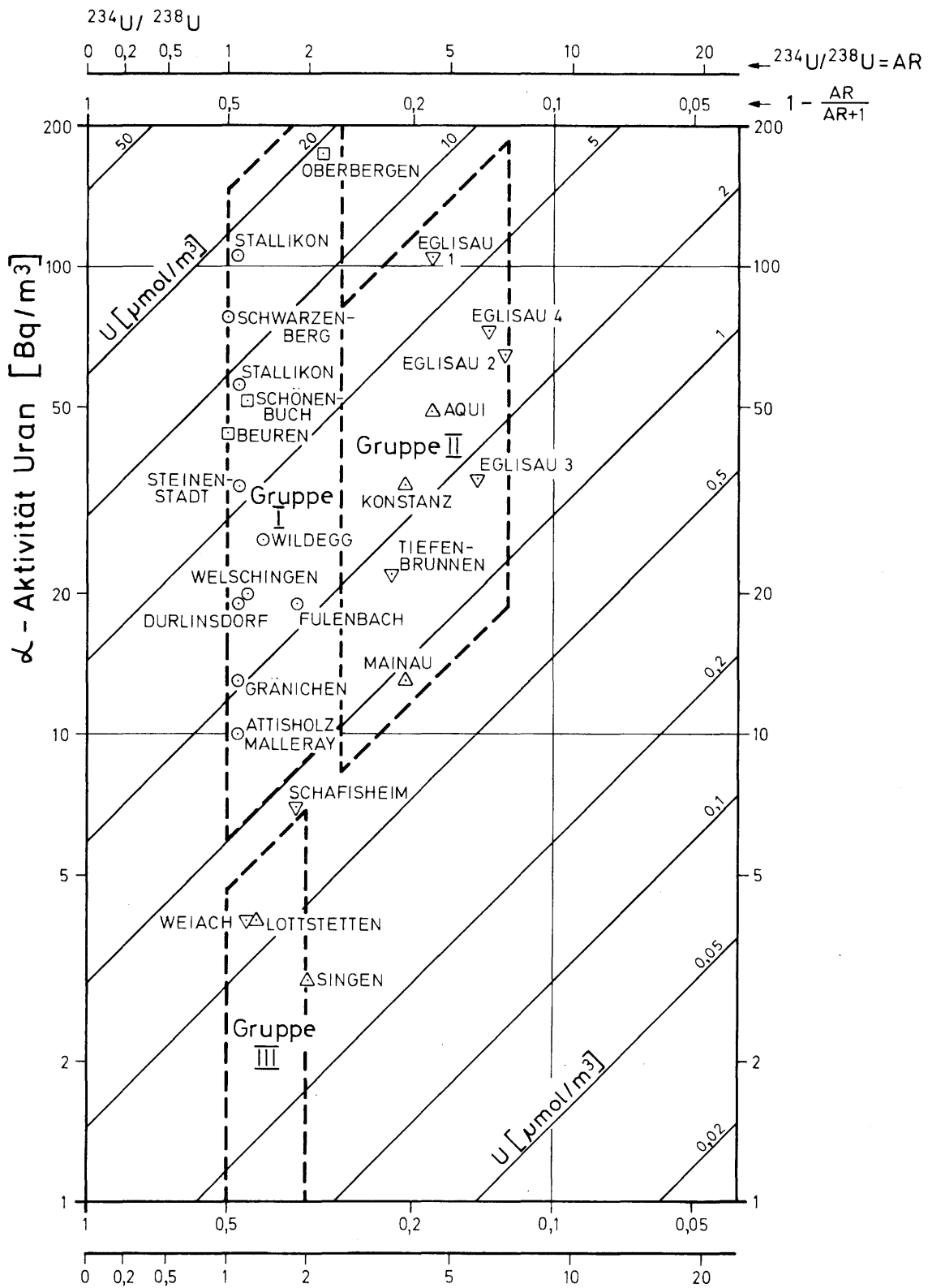


Fig. 45: Beziehung zwischen α -Aktivität von Uran und $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnis

Ganz anders verhält es sich im Malm-Wasser von Weiach und im USM-Wasser von Schafisheim. Entsprechend den verhältnismässig niedrigen Uran-Konzentrationen und $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnissen sind die α -Aktivitäten des Urans mit 4-7 Bq/m³ ähnlich niedrig wie in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Malm- und Dogger-Aquifere. Noch ausgeprägter als in Lottstetten übertrifft die α -Aktivität von ^{228}Th diejenige des Urans, in Weiach um das 25-fache, in Schafisheim um das 5-fache.

Die Gesamtbetrachtung der α -Aktivitäten des Urans zusammen mit dem $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnis zeigt die gleiche Gruppeneinteilung (Fig. 45) (I, II, III) wie sie in der zusammenfassenden Betrachtung von Uran-Konzentrationen- und Aktivitätsverhältnissen dargelegt wurde (Kap. 4.8.2.5).

4.8.4 Radon-222-Aktivität

4.8.4.1 Oberflächennahe Grundwässer

In den oberflächennahen Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere kommen meistens ^{222}Rn -Aktivitäten von weniger als 10 Bq/l vor. Eine sehr geringe ^{222}Rn -Aktivität von weniger als 1 Bq/l hat das Malm-Grundwasser von Malleray. In Molasse-Grundwässern, die entweder mit Kohlen oder mit Oelsanden verknüpft sind, liegt die ^{222}Rn -Aktivität deutlich über 10 Bq/l. In den in Verbindung mit Molasse-Kohlen stehenden Wässern treten die erhöhten ^{222}Rn -Aktivitäten (Schwarzenberg 37-40 Bq/l, Stallikon bis 28 Bq/l) zusammen mit erhöhten Uran-Konzentrationen auf. Hingegen zeigt das im Gebiet der Oelsande austretende Wasser eine hohe ^{222}Rn -Aktivität (Fulenbach 45-47 Bq/l), aber keinen ungewöhnlichen Urangehalt.

4.8.4.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Unter den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern hat das Malm-Wasser von Beuren eine ^{222}Rn -Aktivität um 10 Bq/l. Im Molasse-Grundwasser von Schönenbuch schwankt dagegen die ^{222}Rn -Aktivität stark, mit einem Minimum von 4 Bq/l und einem Maximum (PSI) von rund 30 Bq/l, wobei beide Male erhöhte Uran-Konzentrationen vorkommen. Weitaus die stärksten

^{222}Rn -Aktivitäten (nach PSI bis rund 185 Bq/l) unter allen Tertiär- und Malm-Wässern hat das Vulkanit-Wasser von Oberbergen, das sich ebenfalls durch die höchsten Uran-Konzentrationen und α -Aktivitäten auszeichnet.

4.8.4.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben wie die oberflächennahen Grundwässer in den Malm- und Dogger-Aquiferen trendmässig niedrigere ^{222}Rn -Aktivitäten als in Molasse-Aquiferen. Dies entspricht den unterschiedlichen Uran-Konzentrationen. Ein Wert von 20 Bq/l wird in keinem Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser überschritten.

4.8.4.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern Zürich-Tiefenbrunnen, Schafisheim und Weiach liegen die meisten Werte ebenfalls unter 20 Bq/l und damit im gleichen Streubereich wie in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere. Das Malm-Wasser Weiach hat unter ihnen die niedrigsten ^{222}Rn -Aktivitäten (< 10 Bq/l). Die höchsten ^{222}Rn -Aktivitäten in Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern und auch höhere als in allen untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern kommen in den USM-Wässern von Eglisau vor, welche zeitweise auch erhöhte Uran-Konzentrationen haben. In den Einzelproben korrelieren Uran und ^{222}Rn jedoch nicht.

4.8.5 Radium-226

^{226}Ra wurde nur in je einer Probe aus den Bohrungen Lottstetten und Eglisau 3 sowie im USM-Wasser der Bohrung Schafisheim bestimmt. Keine Bestimmungen liegen von Wässern mit mehr als $1,7 \mu\text{mol U/m}^3$ ($0,4 \mu\text{g U/l}$) vor. Bei geringen Uran-Konzentrationen haben die Wässer Lottstetten und Eglisau 3 auch geringe ^{226}Ra -Konzentrationen von $6,3$ – $6,7 \text{ pmol/m}^3$ ($1,5$ – $1,6 \text{ pg/l}$). Die in den beiden Wässern stark unterschiedlichen ^{222}Rn -Aktivitäten hängen offensichtlich nicht direkt von den ^{226}Ra -Konzentrationen ab. Eine rund 8 mal höhere ^{226}Ra -Konzentration von 50 pmol/m^3 (12 pg/l) hat das USM-Wasser Schafisheim, obwohl dieses Wasser keine

besonders hohen, je nach Analyse sogar sehr niedrige Uran-Konzentrationen hat und sich die ^{222}Rn -Aktivität im Streubereich der beiden anderen Wässer hält.

4.8.6 Beta-Aktivität

Ueber die β -Aktivität liegen nur von wenigen Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere Daten vor. Im Vergleich zu häufigen, in anderen Aquiferen vorkommenden Werten sind die β -Aktivitäten in den untersuchten Wässern der Tertiär- und Malm-Aquifere verhältnismässig niedrig. Die sich nach Abzug der β -Aktivität von ^{40}K ergebende Netto- β -Aktivität (Rest- β -Aktivität, nach DIN 38404, Teil 15) beträgt in zwei Proben von Lottstetten 0,17-0,26 Bq/l. In Eglisau sind die Werte wie die der anderen Aktivitäten stark schwankend, zwischen weniger als 0,2 und 1,34 Bq/l. In diesem Streubereich liegt mit 1,24 Bq/l auch die Netto- β -Aktivität des USM-Tiefengrundwassers von Schafisheim und mit 0,83 Bq/l die des Vulkanit-Wassers von Oberbergen.

4.9 Isotope

4.9.1 Tritium

4.9.1.1 Oberflächennahe Grundwässer

Für unsere Betrachtungen wurde Tritium als Hauptkriterium zur Unterscheidung der Tiefengrundwässer von den oberflächennahen Grundwässern gewählt (Kap. 4.1.1). Die 1981/82 untersuchten oberflächennahen Grundwässer der Tertiär- und Malm-Aquifere haben nach ihren mit dem Exponentialmodell beurteilten Tritium-Konzentrationen mittlere Verweilzeiten zwischen einigen wenigen Jahren (Attisholz und Gränichen mit $^3\text{H} \approx 68$ TU) und 5-10 Jahren (Welschingen mit $^3\text{H} \approx 110$ TU, wo eine lange mittlere Verweilzeit auch durch ^3H - und ^{14}C -Messungen von 1969 belegt ist, GEYH & MAIRHOFER 1970, 77). Das Wasser von Durlinsdorf mit der niedrigsten Tritium-Konzentration der oberflächennahen Grundwässer ($^3\text{H} \approx 47$ TU) ist möglicherweise eine Mischung mit einem älteren Wasser (SCHMASSMANN et al. 1984, 108, 113, 142-143). Eine

solche Mischung ist sicher das im Quartär der Insel Reichenau gefasste Natrium-Hydrogenkarbonatwasser ($^3\text{H} = 24 \text{ TU}$).

4.9.1.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-, Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Bei den hier den Tiefengrundwässern zugeordneten Wässern der Brunnen 1 und F in Beuren handelt es sich nach den ^3H - und ^{14}C -Messungen von 1969, 1981 und 1984 ($^3\text{H} \approx 5 \text{ TU}$, 17 TU , 27 TU) um eine Mischung eines jungen mit einem viel älteren Wasser (SCHMASSMANN et al. 1984, 143-144). Zu den Wässern mit nachweisbarem Tritium gehört auch das in Sauldorf aus 36-54 m Tiefe geförderte Molassewasser (1982: $^3\text{H} = 4 \text{ TU}$), dessen alte, tritiumfreie Komponente nach BERTLEFF (1984, 1986, Tab. 14) $5 \pm 1 \%$ junges Wasser ($< 30 \text{ a}$) beigemischt ist. Auch in der Badquelle Oberbergen (1981: $^3\text{H} = 3,2 \text{ TU}$ 1984: $^3\text{H} = 4,4 \text{ TU}$) dürften einem alten Wasser geringe Anteile eines jungen Wassers beigemischt sein (SCHMASSMANN et al. 1984, 113).

In allen übrigen, den Tertiär- und Malm-Aquiferen entstammenden Tiefengrundwässern der Nagra-Regional- und Tiefbohrprogramme liegt die Tritium-Konzentration unter den Nachweisgrenzen oder beträgt höchstens $1,0 \text{ TU}$, so dass sie eine unterirdische Verweilzeit von mindestens 30 Jahren haben.

Bemerkenswert ist, dass solche Wässer schon in verhältnismässig geringen Tiefen vorkommen: In Schönenbuch tritt das artesische Molassewasser des Oberrheingrabens (1981-1984: $^3\text{H} = 0,9-1,0 \text{ TU}$) in nur 44-59 m Tiefe in die Bohrung ein (SCHMASSMANN et al. 1984, 112). In der OSM des Milchbucktunnels wurden rund 30-40 m unter Gelände Wässer mit Tritium-Aktivitäten unter 3-5 TU angetroffen. Im Dettenbergtunnel liegen die Austritte des untersuchten OMM-Wassers (1986: $^3\text{H} = 1,0 \pm 0,7 \text{ TU}$) nur etwa 110 m unter Gelände. In dem OMM-Wasser erschliessenden Brunnen Birnu (1982: $^3\text{H} = 0,5 \text{ TU}$) liegt die Filterstrecke nur 25-150 m unter Gelände. In der Bohrung Eglisau 2 (1981-1985; $^3\text{H} = 0,7-1,4 \text{ TU}$, Mittel $1,0 \text{ TU}$) tritt Wasser schon ab 107,5 m aus der USM in das Bohrloch ein.

4.9.2 Sauerstoff-18 und Deuterium (Fig. 46)

4.9.2.1 Oberflächennahe Grundwässer

In den 9 oberflächennahen Tertiär- und Malm-Grundwässern des regionalen Nagra-Untersuchungsprogramms kommen Sauerstoff-18-Werte von $\delta^{18}\text{O} = -10,6 \text{ ‰}$ bis $-8,8 \text{ ‰}$ und Deuterium-Werte von $\delta^2\text{H} = -77 \text{ ‰}$ bis -65 ‰ vor. Sie

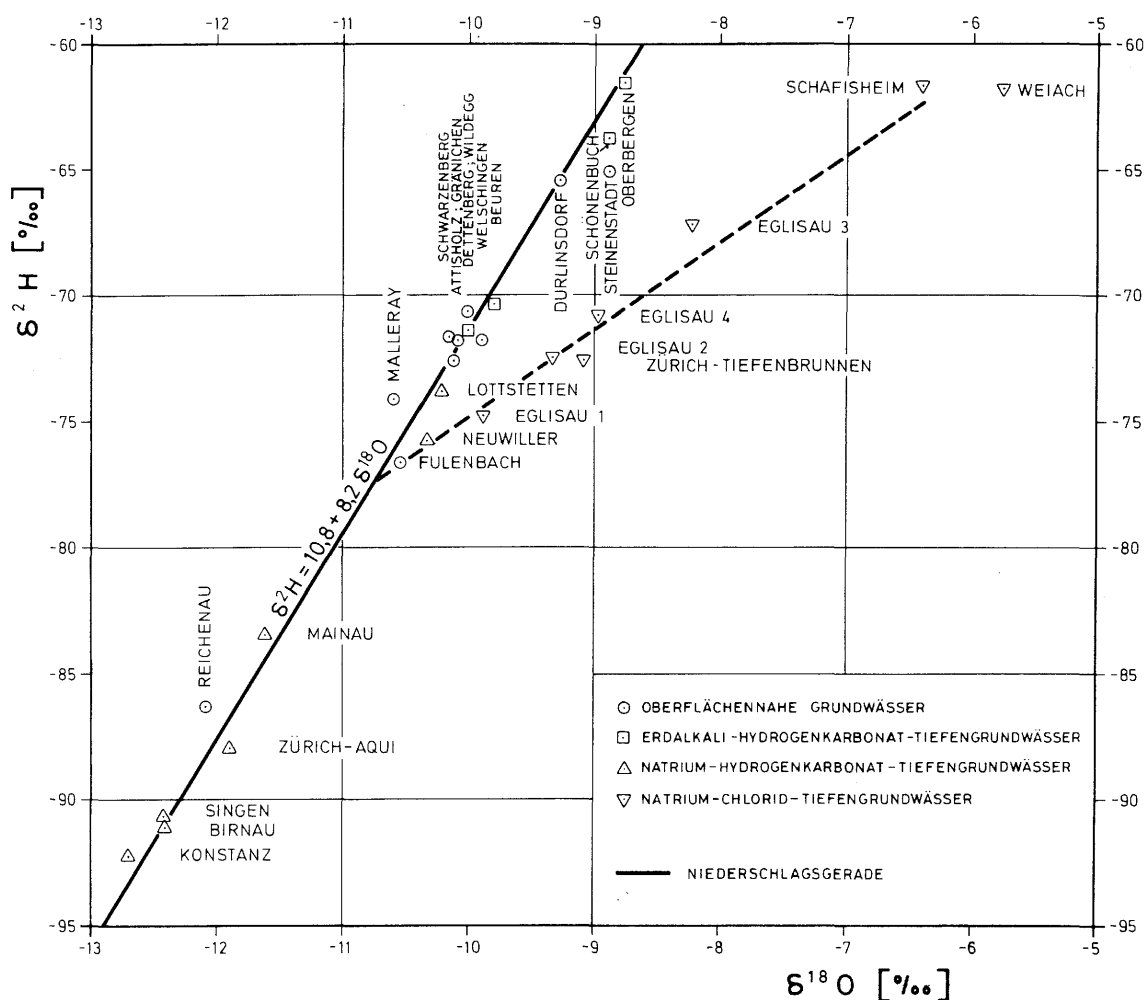


Fig. 46: Beziehung zwischen $\delta^2\text{H}$ und $\delta^{18}\text{O}$

sind statistisch betrachtet von den Einzugsgebietshöhen abhängig, wobei allerdings der Faltenjura-Südostfuss eine besondere Provinz mit gegenüber vergleichbaren Höhenlagen erniedrigten Werten bildet (SCHMASSMANN et al. 1984, 63-65, 68-69, 108; KULLIN & SCHMASSMANN, in Vorb.). Im $\delta^2\text{H}/\delta^{18}\text{O}$ -Diagramm liegen die Werte nahe der Niederschlagsgeraden $\delta^2\text{H}$

= $10,80 \pm 8,20$ $\delta^{18}\text{O}$. Die gemessenen Deuterium-Werte wichen in der Regel nicht mehr als 2 ‰ von den sich mit der Niederschlagsgeraden aus $\delta^{18}\text{O}$ rechnerisch ergebenden Deuterium-Werten ab. Ausnahmen sind Malleray (735 m ü.M.) mit einer Differenz von +2,1 ‰ und Steinenstadt (225 m ü.M.) mit -3,6 ‰.

4.9.2.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Unter den zu den Tiefengrundwässern gezählten Proben liegen $\delta^{18}\text{O}$, $\delta^2\text{H}$ und die Abweichung des gemessenen $\delta^2\text{H}$ -Wertes von der Niederschlagsgeraden bei Beuren, Dettenbergtunnel, Schönenbuch und Oberbergen in den gleichen Streuungsbereichen wie bei den 9 oberflächennahen Grundwässern (einzig in Oberbegen steigt $\delta^2\text{H}$ höher als -65 ‰ auf -61,5 ‰ an, was vermutlich auf lokale Klimaeinflüsse zurückzuführen ist; SCHMASSMANN et al. 1984, 69). Nach dem $\delta^{18}\text{O}$ gehört auch das Molassewasser von Sauldorf zu dieser Gruppe ($\delta^2\text{H}$ ist nicht bestimmt). Bei den fünf Wässern handelt es sich um solche, die in verhältnismässig geringen Tiefen erschlossen sind und zum Teil (Beuren, Oberbergen, Sauldorf) junge Grundwasseranteile enthalten (vgl. 4.9.1). Es handelt sich gewissermassen um eine Gruppe von "untiefen" Tiefengrundwässern, für welche anzunehmen ist, dass sie in einem dem heutigen ähnlichen Klima gebildet wurden.

4.9.2.3 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

In der Gruppe, zu welcher die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer von Konstanz, Mainau, Singen, Lottstetten, Zürich-Aqui und Neuwiller gehören, liegen die $\delta^2\text{H}/\delta^{18}\text{O}$ -Wertepaare wie bei den oberflächennahen Grundwässern und den vorher besprochenen "untiefen" Tiefengrundwässern in der Nähe der Niederschlagsgeraden (± 2 ‰ $\delta^2\text{H}$). Die absoluten Werte sind aber vorwiegend deutlich tiefer. Die Streuungsbereiche ($\delta^{18}\text{O} = -12,7$ bis $-10,2$ ‰, $\delta^2\text{H} = -92$ bis -73 ‰) überschneiden sich nicht mit dem der vier "untiefen" Tiefengrundwässer ($\delta^{18}\text{O} = -10,0$ bis $-8,8$ ‰, $\delta^2\text{H} = -72$ bis -61 ‰). Mit den Streuungsbereichen der 9 oberflächennahen Tertiär- und Malm-Grundwässer unterscheiden sie sich nur dadurch, dass Lottstetten (Mittel $\delta^{18}\text{O} = -10,2$ ‰, $\delta^2\text{H} = -74$ ‰) und Neuwiller ($\delta^{18}\text{O} = -10,4$ ‰, $\delta^2\text{H} = -76$ ‰) höhere Werte haben als die zwei

isotopisch besonderen Wässer Malleray (Grosse Höhenlage des Einzugsgebiets, $\delta^{18}\text{O} = -10,6 \text{ ‰}$, $\delta^2\text{H} = -74 \text{ ‰}$) und Fulenbach (Jurasüdfuss, $\delta^{18}\text{O} = -10,6 \text{ ‰}$, $\delta^2\text{H} = -77 \text{ ‰}$), wohingegen die anderen oberflächennahen Grundwässer über dem Streuungsbereich aller Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer liegen.

Ausser den sechs genannten Wässern des Nagra-Regionalprogramms gehören zu dieser Gruppe auch die OMM-Tiefengrundwässer von Birnau und Ravensburg sowie das Wasser, das mit der 80 m tiefen Bohrung im Quartär der Insel Reichenau erschlossen ist, aber vorwiegend aus der Molasse stammt (BERTLEFF 1984, 1986, 87), sodann auch Malmkarst-Wässer Aulendorf $\delta^{18}\text{O} = -11,50 \text{ ‰}$ und Jordanbad $\delta^{18}\text{O} = -12,31 \text{ ‰}$ jenseits der Karstwasserscheide Rhein/Donau (BERTLEFF, 135: Abb. 39), ferner mit ähnlich hohen $\delta^{18}\text{O}$ -Werten ($-10,17 \text{ ‰}$ bis $-10,22 \text{ ‰}$) wie Lottstetten und Neuwiller, die Wässer der OSM des Milchbucktunnels.

Aehnlich niedrige negative Werte der beiden stabilen Isotope wie in den meisten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern kommen in den vorwiegend aus alpinem Einzugsgebiet stammenden rezenten Oberflächengewässern (Rhein, Bodensee, Zürichsee usw.) vor. Dies könnte zur Annahme verleiten, das die Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer durch Infiltration aus diesen Oberflächengewässern entstanden sind. Eine solche Erklärung ist aber für die Probe von Singen nicht möglich, weil dort das hydraulische Potential höher ist als das des Bodensees oder des Rheins (SCHMASS-MANN et al. 1984, 120). Das gleiche gilt für Ravensburg, weil dort das Wasser artesisch in einem Niveau ausläuft, das ungefähr 110 m höher als der Spiegel des Bodensees ist (NAGRA 1988, Fig. 71, Beil. 4.5); BERTLEFF et al. 1987, Tab. 1, Abb. 2; BERTLEFF et al. 1988, Abb. 6). Ebenso haben die Malm-Tiefengrundwässer von Aulendorf und Jordanbad ein erheblich über dem Bodensee liegendes hydraulisches Potential (BERTLEFF 1984, 1986, Abb. 13). Zusammen mit den aus den Edalgaskonzentrationen berechneten niederen Infiltrationstemperaturen der Wässer von Singen, Mainau, Birnau, Reichenau und Zürich-Aqui (vgl. 4.6.7) lässt dies darauf schliessen, dass die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer auf Infiltrationen zurückgehen, die während eines kälteren Klimas als heute, d.h. vor mehr als ungefähr 10'000 Jahren stattgefunden haben. Das ^{39}Ar -Alter des

Wassers von Zürich-Aqui und die unteren Grenzen der ^{14}C -Modellalter zeigen ebenfalls, dass die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer ein höheres Alter als die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben, was mit der Interpretation einer kaltzeitlichen Infiltration konsistent ist. Lediglich für die Wässer von Neuwiller, Lottstetten und des Milchbucktunnels trifft diese Interpretation nicht zu, da in ihnen die stabilen Isotope nicht so stark wie in den anderen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern erniedrigt sind. Bei diesen drei Wässern dürfte es sich zwar um alte Wässer handeln, die aber unter ähnlichen klimatischen Verhältnissen wie heute, vermutlich während des Postglazials, infiltriert sind (BALDERER & PEARSON, in Vorb., 3.18-3.20).

4.9.2.4 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Eine weitere Gruppe bilden die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer. Diese unterscheiden sich von den Tiefengrundwässern der beiden anderen Gruppen dadurch, dass die gemessenen $\delta^2\text{H}$ -Werte deutlich unter der Niederschlagsgeraden liegen (BALDERER & PEARSON, in Vorb., Fig. 3.2.1). Die kleinste Abweichung von der Niederschlagsgeraden tritt dabei im Wasser mit der kleinsten Salinität, Eglisau 1 ($-4,5 \text{ ‰}$ bei $23,4 \text{ mol Cl}^-/\text{m}^3$), die grössten Abweichungen in den Wässern mit den grössten Salinitäten, Schafisheim ($-19,9 \text{ ‰}$ bei $146,5 \text{ mol Cl}^-/\text{m}^3$) und Weiach ($-25,4 \text{ ‰}$ bei $108,4 \text{ mol Cl}^-/\text{m}^3$), auf (Fig. 44). Die absoluten $\delta^{18}\text{O}$ - und $\delta^2\text{H}$ -Werte sind zumeist deutlich höher als in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern.

Die Streuungsbereiche der beiden Gruppen von $\delta^2\text{H}$ überschneiden sich nur gerade dadurch, dass der Wert in Lottstetten auf -74 ‰ (Mittel) steigt und in den am schwächsten salinen Wasser der dritten Gruppe, Eglisau 1, auf -75 ‰ fällt. Stärker überschneiden sich die Streuungsbereiche der absoluten Werte von $\delta^{18}\text{O}$ und $\delta^2\text{H}$ der oberflächennahen Grundwässer (mit den "untiefen" Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern) und der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer. Aber nur in den am stärksten salinen Wässern Eglisau 3 (Mittel $-8,2 \text{ ‰}$), Schafisheim ($-6,4 \text{ ‰}$) und Weiach ($-5,8 \text{ ‰}$) kommen in Tiefengrundwässern von Tertiär- und Malm-Aquiferen überhaupt Werte von $\delta^{18}\text{O} > -8,8 \text{ ‰}$ vor.

Die Abweichung der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer von der Niederschlagsgeraden ist durch einen Sauerstoff-Isotopenaustausch mit dem Gestein erklärbar. Alle untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer gehören zu einer Mischreihe zwischen zwei Endgliedern. Das isotopisch schwerere Endglied ist wahrscheinlich ein brackisches oder sogar ein marines Wasser der Molasseperiode, währenddem ein Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser das isotopisch leichte Endglied bildet (SCHMASSMANN et al. 1984, 132).

4.9.3 Kohlenstoff-13 (Fig. 47)

4.9.3.1 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer*)

Die Gruppe der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer unterscheidet sich nach dem $\delta^{13}\text{C}$ deutlich von den anderen Tiefengrundwässern. Das Wasser von Schönenbuch hat mit $\delta^{13}\text{C} = -14,2 \text{ ‰}$ den tiefsten Wert; in den anderen 3 Wässern mit diesbezüglichen Daten schwankt $\delta^{13}\text{C}$ zwischen $-11,2 \text{ ‰}$ und $-10,5 \text{ ‰}$.

Diese Werte entstehen durch das Lösen von Karbonat, dessen $\delta^{13}\text{C}$ -Werte zwischen ungefähr 0 ‰ und -7 ‰ (vgl. BÜRGISSEER et al. 1983, 745) liegen, und durch Kohlendioxid, das vorwiegend bei der Infiltration aus der Bodenluft der Wurzelzone aufgenommen wurde und daher wie die organischen Kohlenstoffverbindungen der Pflanzen einen $\delta^{13}\text{C}$ -Wert von etwa -25 ‰ hat.

4.9.3.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die aus den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern bestehende Gruppe hat nach den Daten des Nagra-Regionalprogramms und nach BERTLEFF (1984, 1986) $\delta^{13}\text{C}$ -Werte zwischen $-6,4 \text{ ‰}$ und $-3,0 \text{ ‰}$. Tieferer $\delta^{13}\text{C}$ -Werte von $-8,0$ bis $-7,8 \text{ ‰}$ hat das im Quartär der Insel Reichenau erschlossene und Tritium enthaltende und daher eine Mischung darstellende Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser. Mit dem $\delta^{13}\text{C}$

*) Aus oberflächennahen Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere liegen in den Nagra-Programmen keine ^{13}C - und ^{14}C -Daten vor.

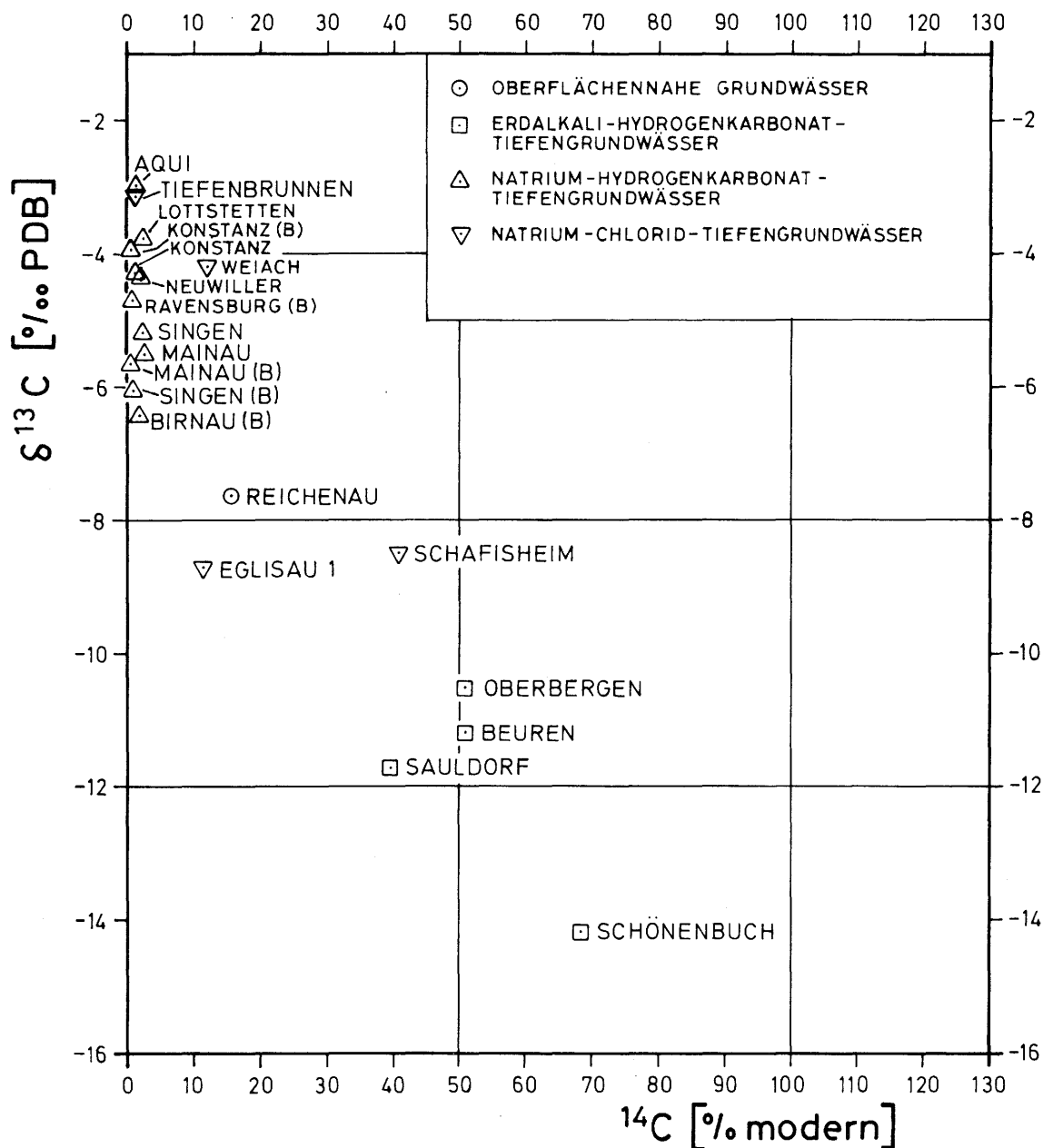


Fig. 47: Beziehung zwischen $\delta^{13}\text{C}$ und $\delta^{14}\text{C}$

ergibt sich, wie schon BERTLEFF (1984, 1986, 161) festgestellt hat, eine strenge Trennung zwischen den Wässern mit relativ hohen $\delta^{18}\text{O}$ - und $\delta^2\text{H}$ -Werten (Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer) und den Wässern mit relativ tiefen $\delta^{18}\text{O}$ - und $\delta^2\text{H}$ -Werten (Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer). Wie im Datenmaterial von BERTLEFF liegen auch in dem der Nagra-Programme kaum Werte aus Uebergangsbereichen zwischen den beiden Gruppen vor.

Durch das wiederholte Lösen und Ausfällen von Karbonat erreicht das Wasser einen Gleichgewichtszustand mit dem marinen Karbonatgestein ($\delta^{13}\text{C} \approx 0 \text{ ‰}$) von $\delta^{13}\text{C} = -3 \text{ ‰}$. Dies ist ungefähr der höchste in den Tiefengrundwässern erreichte $\delta^{13}\text{C}$ -Wert (PEARSON, in Vorb., 5.20).

4.9.3.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Während sich bei $\delta^{18}\text{O}$ und $\delta^2\text{H}$ die Streuungsbereiche der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer und der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer überschneiden, sind diese beiden Gruppen nach dem $\delta^{13}\text{C}$ deutlich zu unterscheiden. Die $\delta^{13}\text{C}$ -Werte der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer schwanken zwischen $-8,7 \text{ ‰}$ und $-3,7 \text{ ‰}$. Dieser Streuungsbereich überschneidet sich mit dem der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer, geht aber noch tiefer. Die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer lassen sich mit stabilen Isotopen besser nach $\delta^{13}\text{C}$ von den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern, die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer nach $\delta^{18}\text{O}$ und $\delta^2\text{H}$ von den Erdalkali-Hydrogenkarbonat- und den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern unterscheiden.

4.9.4 Kohlenstoff-14 (Fig. 47, 48)

4.9.4.1 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Alle untersuchten Wässer der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben ^{14}C -Werte zwischen rund 40 % und rund 70 % modern. Für das Wasser von Sauldorf berechnete PEARSON (in Vorb.) ein ^{14}C -Modellalter von $1,5 \pm 0,8 \text{ ka}$, für das von Oberbergen ein solches von $0,2 \pm 1,0 \text{ ka}$. Die Wässer von Schönenbuch und Beuren werden als "modern" bezeichnet.

4.9.4.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Alle untersuchten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer mit Ausnahme von Reichenau und Milchbucktunnel enthalten kein nachweisbares ^{14}C oder höchstens 2,2 % modern. Der ^{14}C -Wert (15,2 % modern, Mittel) des im Quartär der Insel Reichenau erbohrten Natrium-Hydrogenkarbonat-Wassers

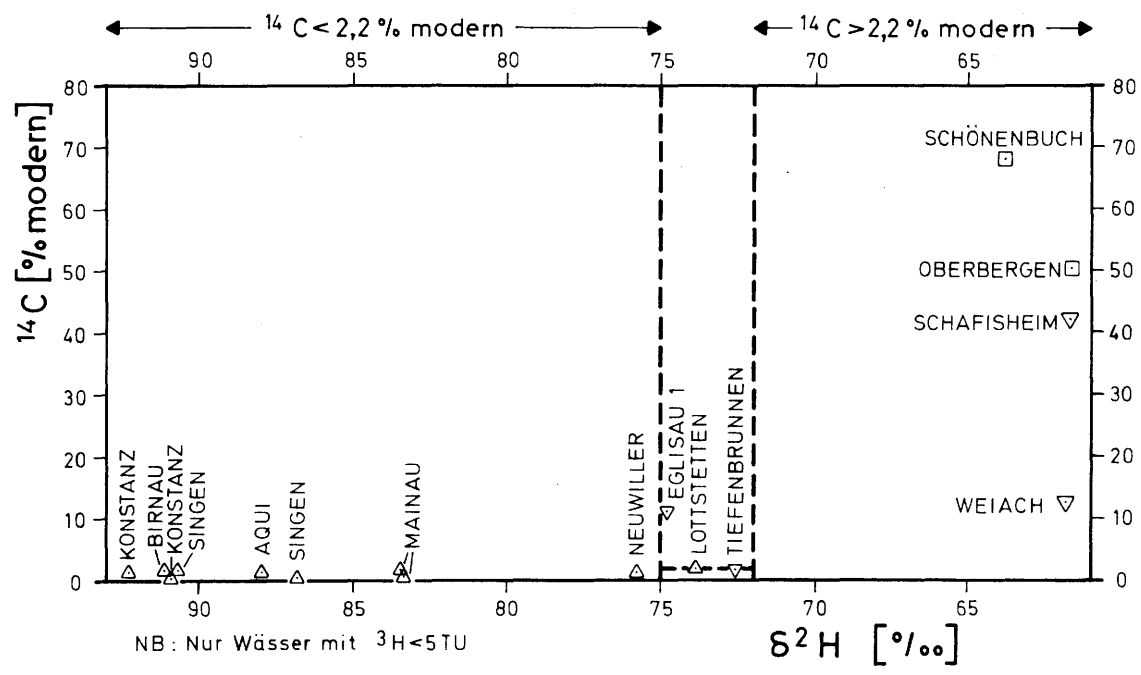
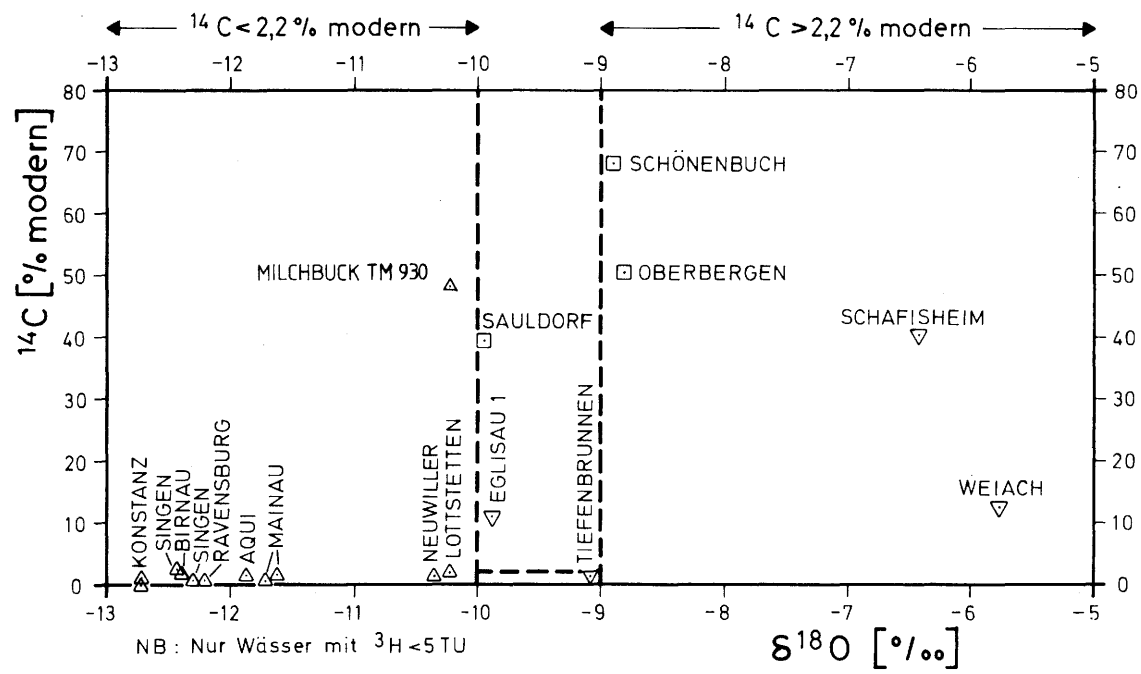


Fig. 48: Beziehungen zwischen $\delta^{14}\text{C}$ und $\delta^{18}\text{O}$ resp. $\delta^2\text{H}$

zeigt wie schon die Tritium-Konzentration von $^3\text{H} = 24 \text{ TU}$, dass es sich um ein Mischwasser handelt. Von PEARSON (in Vorb.) wurden für die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer Modellalter zwischen mehr als 13 ka und mehr als 31 ka berechnet. Dies bestätigt die Interpretation der in den Wässern gemessenen stabilen Isotope und Edelgase, wonach die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer auf Infiltrationen während einer pleistozänen Kaltzeit zurückzuführen sind.

4.9.4.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Unter den vier auf ^{14}C untersuchten Proben der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer hat nur das OMM-Wasser von Zürich-Tiefenbrunnen kein nachweisbares ^{14}C ($< 2,2 \text{ ‰}$ modern). Die Wässer Weiach (Malm) und Eglisau 1 (Malm, ?USM), in welchen Tritium nicht nachgewiesen ist, haben ^{14}C -Werte von 12,5 % modern und 11,1 % modern. In der ebenfalls kein nachweisbares Tritium enthaltenden Probe aus dem USM-Aquifer von Schafisheim wurden sogar 40,5 % modern gemessen. Doch mag es sich hier um den Einfluss von organischen Zusatzstoffen der Bohrspülung handeln.

Unter den vier Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern mit ^{14}C -Daten ist das Wasser Zürich-Tiefenbrunnen das einzige aus dem Beckeninnern, wo in einem höheren Niveau die Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer nachgewiesen sind. Die anderen drei Wässer liegen in der Nähe des nördlichen Molassebeckenrandes, wo die reinen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer vermutlich nicht erhalten geblieben sind und wo sich holozäne Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Wässer den ursprünglichen Natrium-Chlorid-Wässern oder Mischungen von solchen mit Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern (SCHMASSMANN et al. 1984, 131-135) beimengen konnten.

Zur Verbreitung von ^{14}C in den Tiefengrundwässern mit $^3\text{H} < 5 \text{ TU}$ kann generell noch folgendes festgestellt werden (Fig. 48):

Einerseits kommt ^{14}C in Wässern mit $^3\text{H} < 5 \text{ TU}$ mit einer 2,2 % modern überschreitenden Konzentration nur dann vor, wenn $\delta^{18}\text{O} > -10 \text{ ‰}$ (Ausnahme Milchbucktunnel) und $\delta^2\text{H} > -75 \text{ ‰}$. Andererseits haben alle Wässer $^{14}\text{C} > 2,2 \text{ ‰}$ modern, wenn $\delta^{18}\text{O} > -9 \text{ ‰}$ und $\delta^2\text{H} > -73 \text{ ‰}$. Nur in

kleinen Uebergangsbereichen von $\delta^{18}\text{O} = -10 \text{ ‰}$ bis -9 ‰ und von $\delta^2\text{H} = -75 \text{ ‰}$ bis -73 ‰ kommen sowohl Wässer mit $^{14}\text{C} < 2,2 \text{ ‰}$ als auch solche mit $^{14}\text{C} > 2,2 \text{ ‰}$ modern vor.

Statistisch manifestiert sich bei einer Zunahme des $\delta^{13}\text{C}$ -Wertes eine Abnahme des ^{14}C -Wertes und umgekehrt (Fig. 47). Auf die gleiche Beziehung in den Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere des süddeutschen Molassebeckens wies bereits BERTLEFF (1984, 1986, 159-160) hin (BALDERER et al. 1987, 459). Darin kommt die mit zunehmendem Alter fortschreitende Annäherung an den Gleichgewichtszustand mit dem Gestein zum Ausdruck.

PEARSON (in Vorb.) berechnete für das Wasser von Tiefenbrunnen ein Modellalter von mehr als 13 ka. Für das Wasser Eglisau 1, das das am stärksten verdünnte Wasser der Eglisauer Reihe ist, gibt PEARSON für die alte Komponente ein Modellalter von mehr als 9 ka und für die junge Komponente ein Alter von weniger als 15 ka an. Da in der Probe von Weiach eine Beimischung von Spülflüssigkeit oder anderem jungem Wasser nicht ausgeschlossen werden kann, lässt sich nur angeben, dass das Wasser mehr als 1 ka alt ist. Für das Wasser von Schafisheim gibt die ^{14}C -Modellrechnung ein "modernes" Wasser, was aber mit dem chemischen Charakter dieses Wassers nicht konsistent ist.

4.9.5 Krypton-85, Argon-39 und Chlor-36

Bestimmungen von ^{85}Kr und ^{39}Ar liegen aus Tertiär- und Malm-Aquiferen nur von den Tiefengrundwässern Zürich-Aqui und Zürich-Tiefenbrunnen vor. Die ^{85}Kr -Resultate zeigen in Uebereinstimmung mit den ^3H -Werten, dass in den beiden Wässern junge Komponenten fehlen (LOOSLI et al., in Vorb. Kap. 4). Die ^{39}Ar -Konzentration ist im höheren Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser Zürich-Aqui kleiner als $4,7 \text{ ‰}$ modern und beträgt im tieferen Natrium-Chlorid-Wasser Zürich-Tiefenbrunnen ca. $8 \pm 5 \text{ ‰}$ modern.

Nach LOOSLI et al. (in Vorb.) kann aus dem ^{39}Ar -Resultat von Zürich-Aqui zuverlässig geschlossen werden, dass das Wasser älter als 1'200 Jahre ist. Im Falle von Zürich-Tiefenbrunnen kann nach LOOSLI et al. (in Vorb.) das gesamte Wasser älter als 700 Jahre sein. Das ^{39}Ar -Resultat könnte aber u.a. auch mit einer Mischung eines mehr als

1000 Jahre alten Wassers und einer wenige hundert Jahre alten Komponente erklärt werden.

Eine ^{36}Cl -Bestimmung wurde nur im USM-Tiefengrundwasser Schafisheim ausgeführt und ergab ein Verhältnis von $^{36}\text{Cl}/\text{Cl} = 18 \pm 5 \times 10^{-15}$ (LEHMANN et al., in Vorb., Kap. 6.2).

4.9.6 Schwefel-34 und Sauerstoff-18 in Sulfaten (Fig. 49)

4.9.6.1 Oberflächennahe Grundwässer

Aus oberflächennahen Grundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere liegen Daten über ^{34}S und ^{18}O in Sulfaten vom OSM-Wasser Schwarzenberg und von den Malm-Wässern Wildeggen und Durlinsdorf vor. Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte (-5,6 bis +5,2 ‰) wie auch die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte (+4,2 bis +10,5 ‰) sind niedriger als in den untersuchten Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere. In allen drei Fällen ist anzunehmen, dass die geringen SO_4 -Konzentrationen nicht oder nur indirekt aus evaporitischen Sulfaten stammen und auf die Oxidation von Sulfiden zurückzuführen sind (SCHMASSMANN et al. 1984, 108-109, 144, 156; BALDERER et al., in Vorb. Kap. 7.1).

4.9.6.2 Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer Egli-sau 2-4 ($\delta^{34}\text{S}$ = von 21,0 bis 22,6 ‰) liegen im Bereiche der miozänen marinen Evaporite nach CLAYPOOL et al. (1980, 210: Fig. 4), die sich auf Daten aus dem Mittelmeergebiet und aus Polen stützen. Dies weist darauf hin, dass die im Wasser gelösten Sulfate zur gleichen Epoche wie die Aquifergesteine gehören. In einer Gipsprobe aus der USM von Noréaz bei Yverdon-les-Bains wurde von der Université de Paris Sud Werte von $\delta^{34}\text{S}$ = +15,96 ‰ und $\delta^{18}\text{O}$ = +19,16 ‰ SMOW gemessen. Dies zeigt, dass der Bereich miozäner Evaporite in der schweizerischen USM unter den von CLAYPOOL et al. (1980) angegebenen Bereich geht und dass deshalb auch das Sulfat des Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwassers von Zürich-Aqui mit $\delta^{34}\text{S}$ = 17,5 ‰ auf Sulfate mit Molasse-Alter zurückgeführt werden kann. Der tiefere Wert von $\delta^{34}\text{S}$ = 12,59 ‰ im sulfatärmeren Malm-Wasser von Weiach wird in BALDERER et al. (in Vorb.) damit

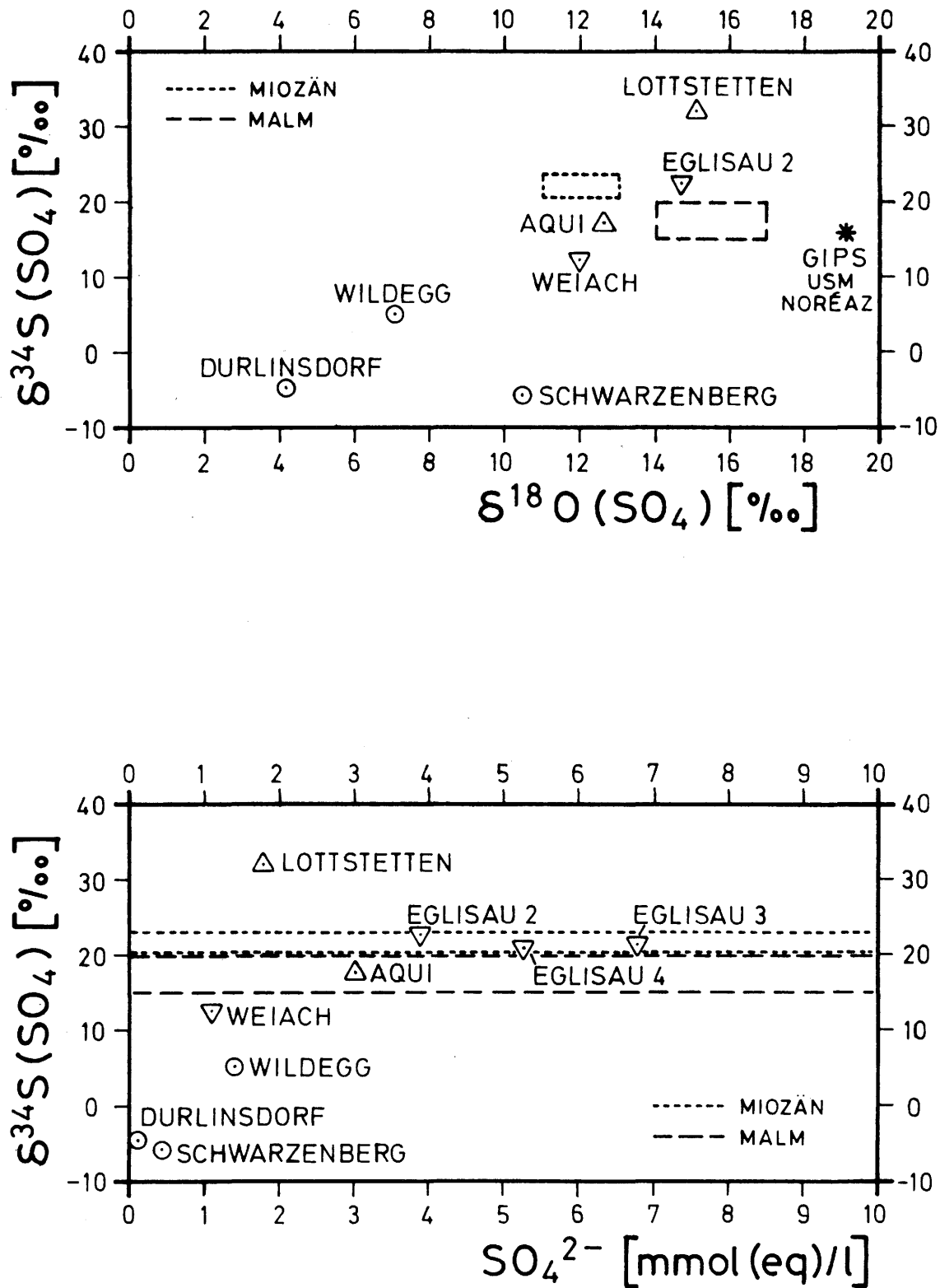


Fig. 49: Beziehungen zwischen $\delta^{34}\text{S}$ und $\delta^{18}\text{O}$ resp. Sulfat. Bereiche der Evaporitmineralien nach BALDERER et al. (in. Vorb., Tab. 7.7.1, Fig. 7.1.2 und 7.1.3)

erklärt, dass das Wasser ausser miozänem Sulfat möglicherweise auch Sulfat enthält, das durch die Oxidation von reduziertem Schwefel entstanden ist. Einen ausserhalb des bekannten Bereichs der Tertiär-Evaporite liegenden $\delta^{34}\text{S}$ -Wert hat das Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser aus dem Malm von Lottstetten mit $\delta^{34}\text{S} = 29,83 \text{ ‰}$ (Orsay) bzw. $\delta^{34}\text{S} = 34,1 \text{ ‰}$ (Nielsen). Da dieses Wasser Schwefelwasserstoff enthält, halten es BALDERER et al. (in Vorb.) für möglich, dass bei der Reduktion eines Teils der Sulfate zu H_2S das Isotop ^{34}S in dem in Lösung bleibenden Sulfat angereichert worden ist.

5. Zusammenfassung der Auswertung der hydrochemischen und isotopenhydrologischen Daten

5.1 Zusammenfassung nach einzelnen Wasserinhaltsstoffen und -eigenschaften

5.1.1 Wassertypen

Aufgrund des Tritiumgehaltes wird wie folgt zwischen oberflächennahen Grundwässern und Tiefengrundwässern unterschieden:

- $^3\text{H} > 20 \text{ TU}$: oberflächennahe Grundwässer
- $^3\text{H} \leq 20 \text{ TU}$: Tiefengrundwässer

Die Tiefengrundwässer werden nach den vorherrschenden Ionen unterteilt in:

- Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser
- Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer
- Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die Faktorenanalyse ergab eine entsprechende Gruppierung, wobei die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer zusammen mit den oberflächennahen Grundwässern eine Gruppe bilden.

5.1.2 Natrium und Chlorid

Die oberflächennahen Grundwässer enthalten im allgemeinen weniger als $0,2 \text{ mol(eq)/m}^3$ Natrium und Chlorid. Einzig anthropogen beeinflusste Wässer zeigen höhere Werte. Das Na/Cl-Verhältnis ist in Malm-Wässern < 1 , in Molasse-Wässern > 1 , was auf Ionenaustauschreaktionen hinweist.

Die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer zeigen bei geringen Konzentrationen generell etwas höhere Na/Cl-Verhältnisse.

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer sind typische Kationenaustauschwässer mit Na/Cl-Verhältnissen zwischen 13 und 710.

Die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer besitzen Natrium- und Chlorid-Konzentrationen zwischen ca. 10 und 175 mol(eq)/m^3 , wobei das Na/Cl-Verhältnis häufig wie im Meerwasser bei ungefähr 1 liegt. Es kommen aber auch Verhältnisse bis ungefähr 3 vor, die auf erhebliche Beimischungen von Austauschwässern oder Kationen-Austauschreaktionen im Aquifer hinweisen.

5.1.3 Calcium und Magnesium

Bei Konzentrationen von Ca+Mg zwischen 3 und $8,3 \text{ mol(eq)/m}^3$ liegt das (Ca+Mg)/Cl-Verhältnis in den oberflächennahen Grundwässern und bei den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern zwischen 2,5 und 220.

In den Natrium-Hydrogenkarbonat- und in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern ist das (Ca+Mg)/Cl-Verhältnis wesentlich tiefer, nämlich bei 0,4 bis 1,9 und bei 0,04 bis 0,3. In den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär-Aquifere sind die Erdalkalikonzentrationen mit 0,1 bis $0,6 \text{ mol/m}^3$ extrem niedrig. In den Malm- und Dogger-Aquiferen hat dieser Wassertyp Erdalkalikonzentrationen von 1,3 bis $3,3 \text{ mol/m}^3$. Sowohl in den Natrium-Hydrogenkarbonat- wie auch in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern wird bei einer Zunahme von (Ca+Mg) ein abnehmender pH-Wert beobachtet.

5.1.4 Magnesium-Calcium-Verhältnis

In den meisten oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere kommen molare Mg/Ca-Verhältnisse zwischen 0,14 und 0,50 vor. Die Austauschwässer des Natrium-Hydrogenkarbonat-Typs sowie die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer haben tendenziell eher höhere Mg/Ca-Verhältnisse (0,5 -1).

5.1.5 Sulfat

Die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer sind meistens relativ arm an Sulfaten (0,06 bis 1,0 mol(eq)/m³). In den Molasse-Aquiferen ist das SO₄/Cl-Verhältnis $\geq 1,9$, in den Malm-Aquiferen dagegen $\leq 1,5$. Dies weist auf die unterschiedliche Verfügbarkeit der Schwefelverbindungen hin.

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben in der Regel etwas höhere Sulfat-Konzentrationen (bis 10 mol(eq)/m³), in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Nagra-Programme steigt sie bis auf 18,6 mol(eq)/m³ an und in den Erdölbohrungen wurden sogar Werte bis zu 59 mol(eq)/m³ registriert. Das molare Verhältnis SO₄/Cl = 0,103 des Meerwassers wird in vielen Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern übertroffen. In anderen Wässern dieses Typs fällt es unter 0,1, was als Folge einer unter dem Einfluss hoher Konzentrationen organischer Kohlenstoffverbindungen stattfindenden Reduktion des Sulfates zu erklären ist.

5.1.6 Hydrogenkarbonat und Karbonat

Die Hydrogenkarbonat-Konzentration der oberflächennahen Grundwässer und der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer liegt zwischen 2,9 und 6,5 mol(eq)/m³. Berechnungen zeigen, dass der ursprüngliche Kohlendioxid-Partialdruck um mindestens einen Faktor 100 höher war, als in der freien Atmosphäre, was auf die biogene Anreicherung in den von den Wässern durchsickerten Böden zurückzuführen ist.

In den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern variiert die Hydrogenkarbonat-Konzentration zwischen 6,8 und 9,2 mol(eq)/m³. Dies ist mit der Oxidation von Methan und höhe-

ren Kohlenwasserstoffen zu erklären, die mit der Reduktion von Sulfaten zu Sulfiden aus Schwefelwasserstoff einhergeht.

Die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer haben teilweise geringere Hydrogenkarbonat-Konzentrationen als die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer, obwohl auch sie Methan und zum Teil Schwefelwasserstoff und Sulfide enthalten.

5.1.7 pH-Wert

Die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben in der Regel, wenn keine besonderen Einflüsse vorliegen, pH-Werte von 7,0 bis 7,8.

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere haben durchwegs sehr hohe pH-Werte um 8,2 bis 9,3, die der Malm- und Dogger-Aquifere dagegen niedrigere Werte von $\text{pH} < 8,0$, was mit dem bei den höheren Calcium-Konzentrationen herrschenden Gleichgewicht zu erklären ist.

Die in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere haben verhältnismässig hohe Werte von $\text{pH} \geq 7,8$, im einen untersuchten Malm-Wasser dagegen nur 7,2. Aus Erdölbohrungen sind aber auch Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere mit tiefen pH-Werten bekannt.

5.1.8 Redox-Spannungen

Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben Redox-Spannungen zwischen +250 mV und +520 mV.

Verhältnismässig hohe Redox-Spannungen um +250 mV bis +320 mV haben auch die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere. In den Wässern des gleichen chemischen Typs kommen dagegen in den Malm- und Dogger-Aquiferen zusammen mit den tieferen pH-Werten auch tiefere Redox-Spannungen zwischen -60 mV und +50 mV vor.

Tiefe Redox-Spannungen zwischen -150 mV und +90 mV haben auch die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer.

5.1.9 Lithium

In den oberflächennahen Grundwässern und den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern konnte nur beim Vorliegen spezieller Einflüsse Lithium überhaupt nachgewiesen werden ($21,4 \text{ mmol(eq)/m}^3$).

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer im Molassebecken besitzen Lithiumgehalte zwischen $2,5$ und 20 mmol(eq)/m^3 , während die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer in der Regel mehr als 20 mmol(eq)/m^3 aufweisen. Das Li/Cl-Verhältnis weist in allen Proben der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer ähnliche Werte von $0,5-2 \times 10^{-3}$ auf. In diesen Wässern mit hohen marinen oder brackischen Anteilen hat aber eine gegenüber Meerwasser starke Lithium-Anreicherung stattgefunden.

5.1.10 Kalium

In den oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern mit Natrium $< 1 \text{ mmol(eq)/m}^3$ variieren die Kalium-Konzentrationen zwischen 10 und 130 mmol(eq)/m^3 , wobei das K/Na-Verhältnis $0,05-0,25$ beträgt.

Die absoluten Konzentrationen der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere variieren zwischen 28 und 60 mmol(eq)/m^3 , wohingegen die Wässer dieses Typs der Malm- und Dogger-Aquifere höhere Konzentrationen von $120-250 \text{ mmol(eq)/m}^3$ aufweisen.

Die Kalium-Konzentration der in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer schwankt zwischen 69 und 750 mmol(eq)/m^3 , in Erdölbohrungen wurden bis über $4000 \text{ mmol(eq)/m}^3$ gemessen. Die K/Na-Verhältnisse sind sowohl in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern mit $0,003-0,029$ als auch in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern, einschliesslich der aus Erdölbohrungen stammenden mit $0,002-0,0037$ durchwegs kleiner als in den oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern. In der überwiegenden Zahl der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer sind die Verhältnisse K/Na und K/Cl kleiner als im Meerwasser, was auf eine Abreicherung des Kaliums infolge Fixation in Tonen schliessen lässt.

5.1.11 Ammonium

Die Ammonium-Konzentration liegt in den oberflächennahen Grundwässern und in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern meistens unter ungefähr $10 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$. Die durchwegs mehr als $15 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ betragenden Konzentrationen in den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern hängt mit den in diesen Wässern herrschenden reduzierenden Bedingungen zusammen.

5.1.12 Strontium

In den oberflächennahen Grundwässern kommen Strontium-Konzentrationen von $2\text{-}14 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ und Verhältnisse $\text{Sr}/\text{Ca} = 1,0\text{-}2,8 \times 10^{-3}$ vor, die ungefähr dem Bereich der mittleren Verhältnisse in Kalksteinen und in Tongesteinen entsprechen.

In den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern kommen zum Teil ähnliche Strontium-Konzentrationen und Sr/Ca -Verhältnisse (bis $3,2 \times 10^{-3}$) wie in den oberflächennahen Grundwässern vor. Zum Teil sind Konzentrationen und Sr/Ca -Verhältnisse durch besondere Bedingungen erhöht, so durch beginnende Austauschprozesse oder durch den Kontakt mit Vulkaniten.

Ebenfalls im ähnlichen Bereich wie die oberflächennahen Grundwässer liegen die Strontium-Konzentrationen mit $3\text{-}15 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern. Dadurch, dass in diesen Austauschwässern die beiden anderen Erdalkalien, Calcium und Magnesium stark vermindert sind, ist aber das Verhältnis in den Malm- und Dogger-Aquiferen auf $\text{Sr}/\text{Ca} = 8\text{-}20 \times 10^{-3}$ und in den Molasse-Aquiferen auf $\text{Sr}/\text{Ca} = 46\text{-}103 \times 10^{-3}$ erhöht.

Höhere Strontium-Konzentrationen als in den anderen Wassertypen kommen in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern vor, nämlich mindestens $50 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ und, aus Erdölbohrungen, bis über $1200 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$. Das Verhältnis Sr/Ca hat jedoch mit $21\text{-}146 \times 10^{-3}$ einen ähnlichen Bereich wie in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern. In den marine oder brackische Anteile enthaltenden Wässern zeigt das Sr/Ca - und, noch deutlicher das Sr/Cl -Verhältnis eine relative Strontium-Anreicherung gegenüber Meerwasser.

Eine strenge Unterscheidung der Grundwässer ist mit den Sr/F-Verhältnissen möglich:

(mmol(eq)/m ³)	F ⁻	Sr ²⁺	Sr ²⁺ /F ⁻
oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat- Tiefengrundwässer:	< 40		> 1,0
Natrium-Hydrogenkarbonat- Tiefengrundwässer:	> 50	< 40	< 0,1
Natrium-Chlorid- Tiefengrundwässer:		> 40	> 0,6

5.1.13 Barium

Die Barium-Konzentration ist in allen Wassertypen höher als im Meerwasser. Sie werden hauptsächlich durch die Löslichkeit von BaSO₄ kontrolliert. Wässer mit hohen Sulfatkonzentrationen zeigen daher generell relativ niedrige Barium-Konzentrationen.

5.1.14 Mangan

In vielen Proben der oberflächennahen Grundwässer sowie der Erdalkali-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer ist Mangan nicht nachweisbar. Bei pH > 8 wird in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern 0,5 mmol(eq)/m³, bei pH < 8 in allen drei Wassertypen 3 mmol(eq)/m³ nicht überschritten. Generell höhere Mangan-Konzentrationen kommen in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern vor und erreichen bei pH > 8 gegen 1 mmol(eq)/m³ und bei pH < 8 bis mehr als 20 mmol(eq)/m³. In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern ist das Mangan gegenüber dem Meerwasser angereichert.

5.1.15 Eisen

Die gemessenen Eisen-Konzentrationen sind mit Vorsicht zu beurteilen, da in manchen Proben nicht auszuschliessen ist, dass Eisen aus Werkstoffen in das Wasser gelangt ist. In

den oberflächennahen Grundwässern und den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern ist Eisen meistens nicht nachweisbar. Sowohl in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern wie auch in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern zeichnet sich ein Trend zu höheren Eisen-Konzentrationen bei abnehmendem pH ab.

5.1.16 Nickel, Kupfer, Zink und Blei

Nachweisbare Konzentrationen dieser Metalle sind oft auf Verunreinigungen aus Werkstoffen zurückzuführen. Jedoch lassen sich in bestimmten Proben Werkstoffeinflüsse ausschliessen, so dass geringe Konzentrationen dieser Metalle als gegeben angesehen werden müssen. Dabei wurde Nickel und Blei in keinen Konzentrationen beobachtet, die wesentlich über den Nachweisgrenzen liegen. Kupfer und Zink sind einzeln in sauerstoffhaltigen oberflächennahen Grundwässern mit Konzentrationen bis $0,5 \text{ mmol(eq)/m}^3$ nachgewiesen, wenn die Wässer mit einem Verdacht auf Werkstoffeinflüsse ausser Betracht gelassen werden.

5.1.17 Fluorid

Die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben im allgemeinen niedrige Fluor-Konzentrationen ($< 15 \text{ mmol(eq)/m}^3$).

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer besitzen hingegen deutlich höhere Konzentrationen ($66\text{--}537 \text{ mmol(eq)/m}^3$) während die Konzentrationen der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer ($68\text{--}143 \text{ mmol(eq)/m}^3$) im unteren Bereich der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer liegen. Stark alkalische und calciumarme Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer gelten für eine Fluoranreicherung als die bevorzugtesten, da einerseits die Fluorkonzentration bei der Anwesenheit von Ca durch das Löslichkeitsprodukt des Fluorits limitiert wird und andererseits die Hydroxylionen das an Mineraloberflächen gebundene Fluorid verdrängen können. Ausserdem ist in Betracht zu ziehen, dass die Fluor-Konzentration bei abnehmender Gebirgsdurchlässigkeit durch eine verstärkte Interaktion zwischen fester und flüssiger Phase zunimmt.

5.1.18 Bromid und Iodid

In den oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern sind Iodid und Bromid in der Regel nicht nachweisbar.

Die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer haben die höchsten Bromid- und Iodid-Konzentrationen (38 bis 254 mmol(eq)/m³ resp. 6 bis 259 mmol(eq)/m³). Erhöhte Konzentrationen in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern sind auf eine Beimischung von Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern zurückzuführen, da nur solche Wässer erhöhte Iodid- und Bromid-Konzentrationen aufweisen, die auch erhöhte Cl-Konzentrationen besitzen. Die Bromid-Konzentration hat eine enge Beziehung zur Chlorid-Konzentration. Das Br/Cl-Verhältnis ist in allen Proben mit quantifizierbarem Bromid ähnlich wie im Meerwasser. In der Beziehung Br/Cl manifestiert sich somit eine einfache Mischungsreihe von marinem und meteorischem Wasser. Iod ist in den Tiefengrundwässern gegenüber Meerwasser stark angereichert. Die Anreicherung beruht darauf, dass Iod in den Organismen gespeichert und bei deren Zersetzung freigesetzt wird. Das aus den Organismen freigesetzte Iod verhält sich in der Mischreihe von marinem und meteorischem Wasser dann ähnlich wie das im Meerwasser schon ursprünglich gelöste Bromid.

5.1.19 Nitrate und Nitrite

In den oberflächennahen Grundwässern und den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern wurden Nitrate in Konzentrationen von mehr als 20 mmol(eq)/m³ festgestellt. Werte von mehr als 50 mmol(eq)/m³ deuten auf einen anthropogenen Einfluss hin. In den meisten Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Nagra-Programme waren Nitrate nicht nachweisbar. Bei nachgewiesenem Nitrat muss für diese Wässer angenommen werden, dass durch kleine Verschiebungen der Redox-Spannungen innerhalb der Fassungsanlage noch vor der Probenentnahme ein kleiner Teil des Ammoniums zu Nitrit und Nitrat oxidiert worden ist.

5.1.20 Arsen

Die oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer enthalten in der Regel kein Arsen

in über der üblichen Nachweisgrenze von $0,01 \text{ mmol(eq)/m}^3$ liegenden Konzentrationen. Dagegen enthalten die meisten Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer mehr als $0,08 \text{ mmol(eq)/m}^3$, wobei letztere tendenziell höhere Werte aufweisen. In den oxidierenden Systemen der oberflächennahen Grundwässer und der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer kann Arsen zusammen mit Eisenhydroxid ausgefällt werden.

5.1.21 Kieselsäure

Die Kieselsäurekonzentrationen der oberflächennahen Grundwässer, der Natrium-Hydrogenkarbonat- und der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer liegen zwischen der Quarz- und Chalcedon-Sättigung (100 bis 250 mmol(eq)/m^3), während in einigen Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern (218 bis 500 mmol(eq)/m^3) die Kieselsäure-Konzentration möglicherweise durch die Löslichkeit von amorpher Kieselsäure kontrolliert wird. In den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern zeigt die Kieselsäure-Konzentration mit steigender Temperatur eine signifikante Zunahme.

5.1.22 Aluminium

Verschieden Mechanismen der Löslichkeitskontrolle verhindern offenbar, dass Aluminium mit wesentlichen Konzentrationen von mehr als $0,4 \text{ mmol(eq)/m}^3$ in Lösung geht. Bei höheren gemessenen Konzentrationen besteht der Verdacht, dass sie Artefakte der Bohrarbeiten oder der Probenentnahme sind.

5.1.23 Borsäure

Die Bor-Konzentrationen liegen in den oberflächennahen Grundwässern und in den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern meistens unter 3 mmol(eq)/m^3 .

In den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern ist ein unverkennbarer Trend von mit abnehmender Chlorid-Konzentration ebenfalls abnehmender Bor-Konzentration zu verzeichnen. Dabei nimmt bei zunehmen-

der Verdünnung, ausgehend vom Meerwasser, das molare Verhältnis B/Cl zu. Dies im Gegensatz zum Brom und Iod, wo bei zunehmender Verdünnung des Wassers das Verhältnis zum Chlorid innerhalb gleicher Variationsbereiche konstant bleibt. Die relative Bor-Anreicherung ist wahrscheinlich auf Desorptionen an Tonmineralien (Illite) zurückzuführen.

5.1.24 Gelöster organischer Kohlenstoff (DOC)

Bei allen Wassertypen bleibt der DOC-Gehalt meistens unter 1 mg/l. Erhöhte Gehalte in Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern treten zusammen mit hohen Methan-Konzentrationen auf.

5.1.25 Sauerstoff

Während die untersuchten oberflächennahen Grundwässer immer Sauerstoff enthalten, kommt dieser in den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern nur teilweise vor. Für alle Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer muss angenommen werden, dass sie trotz den in den Proben gemessenen Spuren im Aquifer keinen gelösten Sauerstoff enthalten.

5.1.26 Stickstoff

Die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben Stickstoff-Konzentrationen zwischen 640 und 820 mmol/m³, was den Löslichkeiten von atmosphärischem Stickstoff entspricht oder wenig darüber liegt.

Die Konzentrationen in den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern liegen dagegen in der Regel höher (850 bis 1600 mmol/m³). Das N₂/Ar-Verhältnis ist in den oberflächennahen Grundwässern und Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern im Gleichgewicht mit der Atmosphäre, während die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer nur wenig darüber liegen. Die höheren Verhältnisse der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer weisen auf einen Stickstoffanteil aus organischem Material hin.

5.1.27 Kohlendioxid

Während in allen oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern Kohlendioxid-Gas vorhanden ist, zeigen unter den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer nur diejenigen in den Malm-Aquiferen titrierbares Kohlendioxid-Gas. Unter den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer kommt in der Molasse zum Teil titrierbares Kohlendioxid vor; aber ebenfalls ist im einzigen Malm-Wasser die Konzentration höher.

5.1.28 Helium

Die zunehmende Helium-Anreicherung von den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern (Spuren) über die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer ($0,5$ bis $1,75 \text{ mmol/m}^3$) bis zu den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern ($2,5$ bis $17,5 \text{ mmol/m}^3$) spricht für eine in dieser Reihenfolge zunehmende unterirdische Verweilzeit.

5.1.29 Argon

Die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer besitzen Argon-Konzentrationen zwischen $15,5$ und $19,5 \text{ mmol/m}^3$, die im Gleichgewicht mit der Atmosphäre sind. Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben höhere Konzentrationen von $19,5$ bis $26,3 \text{ mmol/m}^3$. Diese weisen wie die $\delta^{18}\text{O}$ - und $\delta^2\text{H}$ -Werte auf ein kaltes Klima während der Infiltration der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer hin. Das erhöhte $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ -Verhältnis ($302,2$) im Wasser von Tiefenbrunnen weist auf eine unterirdische Argon-Produktion hin.

5.1.30 Neon, Argon, Krypton, Xenon

Die Edelgas-Konzentrationen bestätigen die tiefen Infiltrationstemperaturen der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer und lassen auf eine Infiltration während einer pleistozänen Kaltzeit schliessen.

5.1.31 Schwefelwasserstoff und Sulfide

Schwefelwasserstoffe und Sulfide konnten in allen Wassertypen nicht oder nur in verhältnismässig niederen Konzentrationen (bis maximal 4 mmol/m^3) nachgewiesen werden.

5.1.32 Methan und Ethan

Im Gegensatz zu den oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern enthalten die Natrium-Hydrogenkarbonat- und die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer meistens quantifizierbare Methan-Konzentrationen von mehr als $0,03 \text{ mmol/m}^3$, aber in der Regel nicht mehr als 10 mmol/m^3 . In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern haben Bohrungen, die den Malm erreichten oder allein diesen erbohrten, tendentiell erhöhte Werte; die maximale Konzentration von rund $28'000 \text{ mmol/m}^3$ Methan zusammen mit 350 mmol/m^3 Ethan ist aber in einem USM Aquifer festgestellt worden (Schafisheim).

5.1.33 Uran und Radioaktivität

In den oxidierenden oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern hängt die Uran-Konzentration offenbar wesentlich von der Verfügbarkeit in den Aquifer-Gesteinen ab, wobei im Kontakt mit Molasse-Kohlen oder mit uranreichen Vulkaniten Konzentrationen bis um $20\text{--}25 \text{ }\mu\text{mol/m}^3$ vorkommen können.

In den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern dürfte die Uran-Konzentration durch die Redox-Spannung kontrolliert werden, wobei in der Regel $3 \text{ }\mu\text{mol/m}^3$ nicht überschritten werden.

Die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer haben meistens $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnisse nahe beim Gleichgewichtswert ($= 1$); nur im uranreichen Vulkanit-Wasser von Oberbergen wird ein Wert von 2,2 erreicht. Nur Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer mit Uran-Konzentrationen von $0,8\text{--}8 \text{ }\mu\text{mol/m}^3$ (PSI), darunter alle Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse, haben höhere Aktivitätsverhältnisse von 2,5–8,5, was zeigt, dass Uran-234

bevorzugt in Lösung gegangen ist. Das weist tendenziell auf eine lange unterirdische Verweilzeit hin. Da die Löslichkeit des Urans unter reduzierenden Bedingungen gering und die Uran-234-Zerfallsrate grösser als diejenige von Uran-238 ist, fällt schliesslich bei noch längeren unterirdischen Verweilzeiten die Uran-Konzentration auf unter $0,8 \mu\text{mol}/\text{m}^3$ und das $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnis auf 1-3, wie dies in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Malm-Aquifere und in den am stärksten salinen Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Fall ist.

Die Messungen der α -Aktivität des Urans bestätigen im wesentlichen die Ergebnisse der Messungen von Uran-Konzentrationen und $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnisse.

5.1.34 Radon

In den oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern kommen meistens ^{222}Rn -Aktivitäten von weniger als 10 Bq/l vor. Erhöhte Aktivitäten treten in Verbindung mit den Vorkommen von Molasse-Kohlen, Oelsanden und den uranreichen Vulkaniten des Kaiserstuhls auf, im letzten Fall bis 185 Bq/l.

Die Natrium-Hydrogenkarbonat- und die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer haben entsprechend den Uran-Konzentrationen in den Malm- und Dogger-Aquiferen trendmässig niedrigere Radon-Aktivitäten als in Molasse-Aquiferen. Doch wurden 20 Bq/l nicht überschritten.

5.1.35 Tritium

Tritium wurde als Kriterium zur Unterscheidung der Tiefengrundwässer und der oberflächennahen Grundwässer gewählt. Als Tiefengrundwässer werden Wässer mit $\text{TU} \leq 1$ und damit eine unterirdischen Verweilzeit ≥ 30 Jahre betrachtet. Wo die Tritiumwerte 1981-1982 zwischen 1 und 20 betrugen, liegen Beimischungen jüngerer Wässer vor. War $\text{TU} \geq 20$, so handelt es sich um oberflächennahe Grundwässer oder um Mischwässer mit erheblichen Anteilen von solchen jungen Wässern.

5.1.36 Sauerstoff-18 und Deuterium

Die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte und die $\delta^2\text{H}$ -Werte der oberflächennahen Grundwässer und der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer liegen nahe bei der Niederschlagsgeraden $\delta^2\text{H} = 10,8 + 8,2 \cdot \delta^{18}\text{O}$. Die Werte variieren zwischen $-10,6 \text{ ‰}$ und $-8,8 \text{ ‰}$ resp. -77 ‰ und -61 ‰ und hängen im wesentlichen von der Höhe des Einzugsgebietes ab. Diese Wässer sind unter rezenten Klimabedingungen infiltriert worden.

Die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte und die $\delta^2\text{H}$ -Werte der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer liegen ebenfalls in der Nähe der Niederschlagsgeraden, sie besitzen jedoch vorwiegend deutlich tiefere absolute Werte ($-12,7 \text{ ‰}$ bis $-10,2 \text{ ‰}$ resp. -92 ‰ bis -73 ‰). Zusammen mit anderen Untersuchungsmethoden zwingt dies zum Schluss, dass die Zeit der Infiltration für die meisten Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer während einer pleistozänen Kaltzeit stattfand und daher mehr als 10'000 Jahre zurückliegt. Vereinzelt kommen aber in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern auch höhere $\delta^{18}\text{O}$ - und $\delta^2\text{H}$ -Werte vor, die auf ein postglaziales Alter hinweisen.

In den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern liegen die $\delta^2\text{H}$ -Werte deutlich unter der Niederschlagsgeraden, wobei die Abweichung in salineren Wässern zunimmt. Diese Wässer gehören zu einer Mischreihe, deren isotopisch schwere Endglied wahrscheinlich ein brackisches oder marines Wasser der Molasseperiode ist, das isotopisch leichte Endglied dagegen den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern zuzählen ist.

5.1.37 Kohlenstoff-13

Mit den ^{13}C -Werten unterscheiden sich die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer ($-10,5 \text{ ‰}$ bis $-14,2 \text{ ‰}$) deutlich von den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern ($-6,4 \text{ ‰}$ bis $-3,0 \text{ ‰}$). Bei der Evolution dieser Wässer erreicht ^{13}C schliesslich ungefähr ein Gleichgewicht mit marinen Karbonaten ($\delta^{13}\text{C} = -3 \text{ ‰}$).

Die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer ($-8,7 \text{ ‰}$ bis $-3,1 \text{ ‰}$) überschneiden sich mit den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern, besitzen aber zum Teil noch tiefere Werte.

5.1.38 Kohlenstoff-14

Die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer besitzen ^{14}C -Werte zwischen 40 % und 70 % modern. Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer (Ausnahme: Milchbucktunnel) enthalten dagegen kein nachweisbares ^{14}C . Ihr ^{14}C -Modellalter liegt zwischen mehr als 13 ka und weniger als 21 ka. Zur Gruppe mit einem Modellalter von mehr als 13 ka gehört auch ein Natrium-Chlorid-Wasser im innern des Molassebeckens (Zürich-Tiefenbrunnen). Am nördlichen Rand des Molassebeckens weist Kohlenstoff-14 in Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern auf eine eventuelle Vermischung mit Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern hin, die dort direkt oberhalb der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer liegen.

Statistisch manifestiert sich in den Tiefengrundwässern der drei chemisch unterschiedlichen Typen bei einer Zunahme des $\delta^{13}\text{C}$ -Wertes eine Abnahme des ^{14}C -Wertes (C-Austausch mit Aquifergestein).

5.1.39 Krypton-85 und Argon-39

Die Bestimmungen von Krypton-85 und Argon-39 in je einem Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser bestätigen, dass junge Komponenten fehlen und dass die unterirdische Verweilzeit mindestens 700-1100 Jahre beträgt und somit auch entsprechend der Interpretation anderer Daten mehr als 10 ka oder mehr als 13 ka betragen kann.

5.1.40 Schwefel-34 und Sauerstoff-18 in Sulfaten

Die $\delta^{34}\text{S}$ -Werte und die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte sind in drei untersuchten oberflächennahen Grundwässern tiefer als in den Tiefengrundwässern und weisen darauf hin, dass die geringen Sulfat-Konzentrationen auf eine Oxidation von Sulfiden zurückzuführen sind. In den Tiefengrundwässern kommen meisten $\delta^{34}\text{S}$ -Werte vor, die auf eine Herkunft der Sulfate aus miozänen Serien hinweisen. Einerseits durch die Reduktion von Sulfaten zu Sulfiden und andererseits durch die Oxidation von reduziertem Schwefel kann es aber zu Verschiebungen des ursprünglichen $\delta^{34}\text{S}$ -Gehaltes kommen.

5.2 Zusammenfassung nach Wassertypen gegliedert

5.2.1 Oberflächennahe Grundwässer

Alle oberflächennahen Grundwässer haben Tritiumaktivitäten über 20 TU. Es gibt nur wenige andere Kriterien zur Unterscheidung von oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern. Dazu gehören die tieferen Kieselsäure-Konzentrationen (100 bis 160 mmol(eq)/m³) und die stets positive und relativ hohe Werte aufweisenden Redox-Spannungen (+250 bis +520 mV).

5.2.2 Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Mit Ausnahme der Wässer, die oberflächennahe Grundwässer beigemischt haben, liegen die Tritiumaktivitäten unter einer Tritiumeinheit (TU). Ferner zeichnen sich Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer durch die höchsten Kieselsäure-Konzentrationen aus und scheinen als die einzigen durch die Löslichkeit von amorpher Kieselsäure kontrollierten Wasser zu sein. Die gegenüber anderen Grundwassertypen viel niedrigeren $\delta^{13}\text{C}$ -Werte (-10,5 ‰ bis -14,2 ‰) und hohen ^{14}C -Werte (40 % bis 70 % modern) sind charakteristisch für diese Wässer.

5.2.3 Gemeinsamkeiten der oberflächennahen Grundwässer (ohne Mischwässer) und der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer, sowie deren Unterscheidung von den anderen Tiefengrundwässern

Die in beiden Wassertypen eher tiefen pH-Werte ($\leq 7,8$) unterscheiden sich von den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern der Molasse-Aquifere. Durch hohe Redox-Spannungen ($\geq +250$ mV) sind sie von den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Malm-Aquifere und generell von den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern unterscheidbar. Helium kommt, im Gegensatz zu den anderen Wassertypen in keiner 0,3 mmol/m³ übersteigenden Konzentration vor. Die Stickstoff-Konzentrationen sind im allgemeinen tiefer als in den anderen Wassertypen (≤ 880 mmol/m³) und die molaren N₂/Ar-Verhältnisse liegen im Gleichgewicht mit der Atmosphäre (40 ± 3). Die K/Na-Verhältnisse $\geq 0,05$ sind höher als in den Natrium-Hydrogen-

karbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern. Anorganische Stickstoffverbindungen treten abgesehen vom gelösten Stickstoffgas vorwiegend in Form von Nitrat auf, wobei die Konzentrationen $20 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ überschreiten, während das in den Natrium-Hydrogenkarbonat- und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern vorherrschende Ammonium meistens unter $10 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ bleibt. Die oberflächennahen Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer unterscheiden sich von den beiden anderen Wassertypen ferner dadurch, dass die Fluor-Konzentrationen unter $15 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ liegen und dass Bromid, Iodid sowie Arsen in der Regel nicht nachweisbar sind. Das $(\text{Ca}+\text{Mg})/\text{Cl}$ -Verhältnis ist das höchste aller untersuchten Wassertypen ($\geq 2,5$ bis 220). Die Deuterium-Werte liegen zwischen -77 ‰ und -61 ‰ , die $\delta^{18}\text{O}$ -Werte zwischen $-10,6 \text{ ‰}$ und $-8,8 \text{ ‰}$, was sie von den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern unterscheidet. Im Unterschied zu den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern liegen die Deuterium und $\delta^{18}\text{O}$ -Werte auf der Niederschlagsgeraden. Die Argon-Konzentrationen betragen $15,5$ bis $19,5 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ und die $^{40}\text{Ar}/^{36}\text{Ar}$ -Verhältnisse sind, soweit bestimmt, im Gleichgewicht mit der Atmosphäre (295,5). Die Uran-Konzentration ist unterschiedlich, kann aber mit $20\text{--}25 \text{ } \mu\text{mol}/\text{m}^3$ deutlich höhere Werte als in den anderen Wassertypen erreichen. Das $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnis liegt in der Regel nahe dem Gleichgewichtswert 1 und unterscheidet die beiden Wassertypen deutlich von den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern.

5.2.4 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Sie zeichnen sich in den Molasse-Aquiferen durch die höchsten pH-Werte ($> 8,5$) und verhältnismässig hohe Redox-Spannungen (-60 bis $+320 \text{ mV}$) aus. In den Malm- und Dogger-Aquiferen sind die pH-Werte (zwischen $7,2\text{--}8,0$) und die Redox-Spannungen (-60 bis $+50$) niedriger. Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer sind typische Kationenaustauschwässer mit einem hohen Na/Cl -Verhältnis zwischen 13 und 710 . Das $(\text{Ca}+\text{Mg})/\text{Cl}$ -Verhältnis liegt mit seinem Schwankungsbereich von $0,4$ bis $1,9$ tiefer als in den oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern ($2,5\text{--}200$), aber noch über demjenigen der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer ($0,04\text{--}0,3$). Im Gegensatz zu den kein nachweisbares Lithium enthaltenden ober-

flächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern besitzen diese Wässer im Molassebecken Lithium-Konzentrationen zwischen 2,5 bis 20 mmol(eq)/m³. Die Kalium-Konzentrationen der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer der Molasse-Aquifere liegen im Bereiche der oberflächennahen Grundwässer und der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer. In den Malm- und Dogger-Aquiferen kommen höhere Konzentrationen vor, jedoch besitzen Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer generell ein kleineres K/Na-Verhältnis ($\leq 0,03$) als die oberflächennahen Grundwässer und die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer. Mit dem Sr/F-Verhältnis ($< 0,1$) lassen sich die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer streng von den anderen Wassertypen unterscheiden. Fehlendes oder nur in Spuren vorkommendes Nitrat sowie die NH₄-Konzentrationen von über 15 mmol(eq)/m³ wie in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern weisen auf die reduzierenden Bedingungen im Aquifer hin. Arsen ist wie sonst nur noch in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern in Konzentrationen von in der Regel $\geq 0,08$ mmol(eq)/m³ vorhanden. Erhöhte Bromid- und Iodid-Konzentrationen in Wässern mit erhöhten Cl-Konzentrationen sind mit der Beimischung von Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern zu erklären. Im Gegensatz zu den oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern kommt zwischen 0,5 - 1,75 mmol(eq)/m³ Helium vor, das dann in den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern in noch höheren Konzentrationen vorliegt. Die $\delta^{18}\text{O}$ - und $\delta^2\text{H}$ -Werte liegen wie bei den oberflächennahen Grundwässern und den Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern auf der Niederschlagsgeraden, jedoch mit deutlich tieferen absoluten Werten als in den anderen untersuchten Wassertypen. Die berechneten Edelgas-Temperaturen zeigen in Uebereinstimmung mit den $\delta^{18}\text{O}$ - und $\delta^2\text{H}$ -Werten, dass die Wässer während einer pleistozänen Kaltzeit infiltriert wurden. Die $\delta^{13}\text{C}$ -Werte liegen zwischen -6,4 bis -3,0 ‰ und die ^{14}C -Werte sind generell kleiner als 2,2 % modern, was Modellalter von mehr als 13 ka ergibt (Ausnahme: Milchbucktunnel). Die Uran-Konzentrationen ($< 5 \mu\text{mol}/\text{m}^3$) erreichen nicht so hohe Werte, wie sie in den oberflächennahen Grundwässern und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern auftreten können. Wenn die Uran-Konzentration wie in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Molasse-Aquifere $> 0,8 \mu\text{mol}/\text{m}^3$ beträgt, steigt aber das

$^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnis bis gegen 5 an. Bei Konzentrationen $< 0,8 \mu\text{mol}/\text{m}^3$ (PSI), wie in den Malm-Aquiferen, fällt dagegen das Aktivitätsverhältnis auf ≤ 2 .

5.2.5 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer haben, wie der Name schon sagt, zusammen mit sehr hohen Natrium-Konzentrationen ($34\text{--}132 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$) auch sehr hohe Konzentrationen an Chlorid ($23\text{--}147 \text{ mol}(\text{eq})/\text{m}^3$). Das Na/Cl-Verhältnis beträgt häufig ungefähr 1, kann aber bis auf ungefähr 3 ansteigen. Verhältnisse ≥ 1 deuten entweder auf eine Beimischung von Austauschwässern oder aber auf Kationen-Austauschreaktionen. Das (Ca+Mg)/Cl-Verhältnis ist das kleinste aller untersuchten Wassertypen ($0,04\text{--}0,3$). Der pH-Wert ist in den Molasse-Aquiferen weniger hoch ($\geq 7,8$) als bei den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern, aber höher als bei den restlichen Wassertypen. Die Redox-Spannungen liegen zwischen -150 und $+90 \text{ mV}$ und sind damit niedriger als in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern der Molasse-Aquifere, aber im gleichen Bereich wie die der Malm- und Dogger-Aquifere. Der Wassertyp zeichnet sich durch hohe Fluorid-Konzentrationen ($\geq 50 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$) und durch die höchsten Strontium-Konzentrationen ($> 40 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$) aus, wodurch ein deutlich höheres Sr/F-Verhältnis ($> 0,6$) als in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern entsteht. Das Br/Cl-Verhältnis ist ähnlich wie im Meerwasser, wohingegen das I/Cl-Verhältnis deutlich über demjenigen von Meerwasser liegt. Die Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer besitzen die höchsten Helium-Konzentrationen ($2,5\text{--}14,5 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$). Die Arsen-Konzentrationen sind tendentiell höher als in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern. Molare N_2/Ar -Verhältnisse von > 40 deuten auf eine biogene Stickstoffquelle im Aquifer hin. Ein Charakteristikum ist, dass die $\delta^2\text{H}$ -Werte im $\delta^{18}\text{O}/\delta^2\text{H}$ -Diagramm deutlich unter der Niederschlagsgeraden liegen, wobei die Abweichung mit der Salinität des Wassers zunimmt. Wie in den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern sind erhöhte Uran-Konzentrationen ($0,8\text{--}8 \mu\text{mol}/\text{m}^3$) mit hohen $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Aktivitätsverhältnissen ($> 2,5\text{--}8,5$) und niedere Uran-Konzentrationen mit niederen Aktivitätsverhältnissen verknüpft. Darin kommen zunehmende Verweilzeiten im reduzierenden Milieu zum Ausdruck.

5.3. Zusammenfassung der Unterschiede zwischen Tertiär- und Malm-Wässern

Obwohl im Molassebecken regional gesehen eine hydraulische Verbindung zwischen den Tiefengrundwässern der Tertiär- und Malm-Aquifere besteht (Kap. 2.1), sind gewisse Unterschiede bemerkbar. Indessen sind solche Unterschiede nur innerhalb der einzelnen Wassertypengruppen zu erkennen. Die enge Verwandtschaft von Tertiär- und Malm-Wässern innerhalb einer Wassertypengruppe wird auch dadurch belegt, dass die Tiefengrundwässer beider Aquifere in den gleichen Gruppen der Faktorenanalyse erscheinen (Fig. 12).

5.3.1 Oberflächennahe Grundwässer und Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Hier lassen sich die untersuchten Tertiär- und Malm-Wässer durch das Sulfat/Chlorid-Verhältnis unterscheiden, welches bei den Molasse-Wässern mit $\text{SO}_4/\text{Cl} \geq 1,9$ deutlich höher ist als bei den Malm-Wässern ($\text{SO}_4/\text{Cl} \leq 1,5$). Keine klaren Unterschiede liefern die Redox-Spannung und der pH-Wert, obwohl beide bei den Malm-Wässern tendentiell eher tiefere Werte aufweisen.

Die oberflächennahen Grundwässer lassen sich noch durch das Na/Cl-Verhältnis unterscheiden. Die untersuchten Molasse-Wässer weisen ein Na/Cl-Verhältnis > 1 , die Malm-Wässer eines < 1 auf.

5.3.2 Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Bei den Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässern sind die Tertiär- und die Malm-Wässer klar durch die Kalium-, Erdalkalien- und Kohlendioxid-Konzentrationen, durch das Strontium/Calcium-Verhältnis, durch den pH-Wert sowie durch die Redox-Spannung voneinander unterschieden.

Die Kalium-Konzentration ist in den untersuchten Molasse-Wässern tiefer und liegt zwischen $28\text{--}60 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ (Ausnahme: Fremde Analyse von Ravensburg mit $205 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$). In den Malm-Aquiferen des Molassebeckens und in den Dogger-Aquiferen des Oberrheingrabens wurden Kalium-Konzentrationen zwischen 123 und $254 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ gemessen.

Die Summe der Erdalkalien (Ca+Mg) schwankt bei den untersuchten Molasse-Wässern zwischen 0,1 und 0,6 mmol(eq)/m³ und ist damit deutlich tiefer als in den untersuchten Malm- und Dogger-Wässern (1,3 bis 3,3 mmol(eq)/m³).

In den Molasse-Wässern konnte kein als sogenannte Basekapazität bis zum pH-Wert 8,2 titrierbares Kohlendioxid nachgewiesen werden. Die Wässer der Malm- und Dogger-Aquifere enthalten dagegen gelöstes Kohlendioxid-Gas (90 bis 840 mmol/m³).

Die untersuchten Molasse-Wässer lassen sich im weiteren durch ein höheres Strontium/Calcium-Verhältnis (46×10^{-3} bis 103×10^{-3}) von den Malm- und Dogger-Wässern (8×10^{-3} bis 20×10^{-3}) unterscheiden.

Sowohl die pH-Werte ($\leq 8,1$) als auch die Redox-Spannungen ($\leq +50$ mV) sind bei den untersuchten Malm- und Dogger-Wässern tiefer als bei den Wässern aus den Molasse-Aquiferen ($> 8,1$ resp. $\geq +250$ mV).

Tendentiell weisen die untersuchten Malm- und Dogger-Wässer zudem tiefere Uran-Konzentrationen und Radon-Aktivitäten auf als die Wässer aus den Molasse-Aquiferen.

5.3.3 Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In dieser Wassertypengruppe liegt nur ein Malm-Wasser (Weiach) aus dem Nagraprogramm vor, das mit den Molasse-Wässern verglichen werden kann. Bei den Fremden Analysen Wildegg und Michelbach wurden im wesentlichen nur die Hauptelemente ohne pH-Wert analysiert.

Auch bei den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern scheint sich im pH-Wert ein Unterschied zwischen Tertiär- und Malm-Wässern abzuzeichnen. So hat das Malm-Wasser von Weiach mit 7,26 deutlich den tiefsten pH-Wert in dieser Wassertypengruppe. Von Erdölbohrungen sind jedoch auch Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer mit tiefen pH-Werten aus Molasse-Aquiferen bekannt.

Obwohl in den Wässern der Molasse-Aquifere teilweise gelöstes Kohlendioxid-Gas nachgewiesen werden konnte (bis 240 mmol/m³), weist das Malm-Wasser von Weiach den höchsten Wert auf (1730 bis 1800 mmol/m³).

Ferner zeigen sich in Bohrungen, die den Malm erreichten oder allein diesen erbohrten, tendentiell erhöhte Methan- und Ethan-Konzentrationen. Das Malm-Wasser von Weiach hat zudem deutlich tiefere Werte der Uran-Konzentration, der Uran-Alpha-Aktivität, der Radon-Aktivität und des $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ -Verhältnisses als die Wässer der Molasse-Aquifere, hingegen eine deutlich höhere Thorium-Alpha-Aktivität. Zum Teil ähnliche Werte wurden jedoch auch im USM-Wasser von Schafisheim registriert.

6. HYDROGEOLOGISCHE INTERPRETATION DER HYDROCHEMIE DES MOLASSEBECKENS

6.1 Vertikale Abfolge der Wassertypen (Fig.50)

Die hydrochemischen- und die Isotopen-Untersuchungen zeigen, dass in den Tertiär- und Malm-Aquiferen des Molassebeckens drei Hauptwassertypen mit Uebergangsbereichen geschichtet übereinanderliegen:

- (1) Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Grundwässer aus holozänen Infiltrationen (Oberflächennahe und Tiefen-Grundwässer)
- (2) Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer aus kaltzeitlichen, pleistozänen Infiltrationen
- (3) Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer aus einer Mischung mariner und/oder brackischer Formationswässer mit meteorischen Wässern (Infiltrationswässer und/oder limnisch-fluviatile Formationswässer).

6.1.1 Bereiche der Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Grundwässer

Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Grundwässer (1) finden sich im Molassebecken als oberflächennahe Grundwässer, zum Beispiel in Schwarzenberg, Stallikon, Gränichen, Fulenbach und Attisholz. In Sauldorf ist ein OMM-Tiefengrundwasser dieses Typs in 36-54 m Tiefe erschlossen.

In der OMM des Dettenbergtunnels zeigt sich nur etwa 110 m unter Gelände im Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Grundwasser (1) bei einer niederen Chlorid-Konzentration eine erhöhte Natrium-Konzentration ($> 10 \%$ der Kationensumme), die

bereits auf einen beginnenden Austausch oder auf Einflüsse des tieferen Natrium-Hydrogenkarbonat-Typs hinweist. Ein ähnliches Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Grundwasser (1) mit erhöhter Natrium-Konzentration findet sich in der USM von Eglisau (Bohrung 3) 18-51 m tief über dem ab 70 m mit einem tieferen hydraulischen Potential vorkommenden Natrium-Chlorid-Tiefengrundwasser (3). Der eigentliche Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser-Typ (2) fehlt demnach in diesem randlichen Gebiet des Molassebeckens, in welchem die USM zu Tage tritt und die prätertiäre Landoberfläche weniger als 250 m tief liegt.

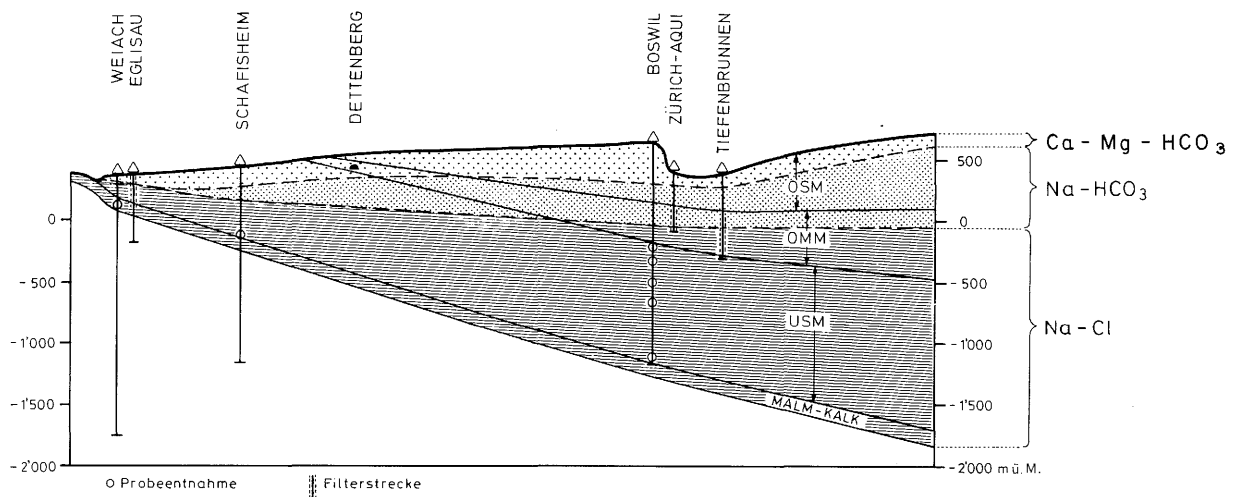


Fig. 50: Verbreitung der Wassertypen im schweizerischen Molassebecken (Kantone Zürich und Aargau)

Am Nordrand des Molassebeckens gegen die Schwäbische Alb gehen die Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Grundwässer (1) bis in den Malm-Aquifer hinein, so in Welschingen und Beuren. Ebenfalls am Nordrand des Trogs, aber gegen den Faltenjura, ist im untersuchten oberflächennahen Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Grundwasser des Malms von Wildeggen bereits eine geringe Beimischung des tieferen Natrium-Chlorid-Tiefengrundwassers (3) vorhanden und wie in Eglisau ein (besonderes) Natrium-Hydrogenkarbonat-Grundwasser (2) nicht zu erkennen.

6.1.2 Bereiche der Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer

Die Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer des Molassebeckens (2) sind vor allem aus dem Bodensee-Raum, ferner von der Bohrung Zürich-Aqui gut bekannt.

Auf der Untersee-Insel Reichenau ist mit einer nur 80 m tiefen Bohrung im Quartär ein Grundwasser erschlossen, das überwiegend durch Zuflüsse solcher Tiefengrundwässer des Molasse-Aquifers gespeist wird. In Birnu am Nordufer des Ueberlinger Sees wird Tiefengrundwasser des Natrium-Hydrogenkarbonat-Typs aus einer nur 150 m tiefen, ab 25 m verfilterten Bohrung gewonnen. In Konstanz sind die Filter, durch welche Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser in die Bohrung eintritt, zwischen 500 m und 625 m, in Ravensburg zwischen 376 m und 532 m, in Zürich-Aqui zwischen 295 m und 500 m eingebaut. Im Milchbucktunnel (Zürich) wurden Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwässer nur 30-40 m unter Gelände und 30-40 m über dem Niveau von Zürichsee und Limmat angefahren.

Von den Erdölbohrungen sind keine vollständigen Analysen aus Tiefen von weniger als etwa 450 m verfügbar. Deshalb ist ungewiss, ob die in der Bohrung Pfaffnau Süd 2 bis in etwa 660 m und in der Bohrung Pfaffnau Süd 4 bis in etwa 540 m Tiefe festgestellten chloridarmen Grundwässer (LEMCKE et al. 1968, 32: Fig. 8; RYBACH et al. 1981, Beil. 22) zum Erdalkali-Hydrogenkarbonat- oder zum Natrium-Hydrogenkarbonat-Typ gehören. In der Bohrung Pfaffnau Süd 5 bei 497-717 m lassen allerdings Natrium-Chlorid-Wässer mit verhältnismässig hohen Hydrogenkarbonat- und Karbonat-Anteilen (bei 636-702 m bis 29 Äquivalent-5 %) eine Ueberlagerung mit Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern als wahrscheinlich erscheinen.

Ein anderer Typ eines Kationenaustauschwassers als die Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer, aber auch bereits mit einer deutlich salinen Komponente ($> 10 \text{ mol Cl}^-/\text{m}^3$), sind die Natrium-Sulfat-Chlorid-Wässer, die in der Bohrung Pfaffnau Süd 1 bis zu einer Tiefe von höchstens 671 m angetroffen wurden.

6.1.3 Lage der Grenze zwischen Hydrogenkarbonat-Wässern und Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern (Fig. 51, 52)

Mit den Daten über die Tiefen, aus denen in Bohrungen einerseits Erdalkali- oder Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer und andererseits Natrium-Chlorid-Wässer (inkl. Natrium-Sulfat-Wässer) gefördert wurden, kann punktförmig festgestellt werden, welche Koten die Grenze zwischen den Hydrogenkarbonat-Wässern und den Natrium-Chlorid-Wässern höchstens haben kann und welche sie mindestens haben muss.

Lage der Grenze zwischen Hydrogenkarbonat-Wässern und Natrium-Chlorid-Wässern:

(i = interpretiert)

	ab Gelände (m)	Kote ü.M. (m)	ab Basis OMM (m)	ab Ober- fläche Malm (m)
Weiach >OK Teststrecke (Na-Cl-Wasser)	>-243	>+126	>-300i	>- 57
Eglisau 3 <UK Süßwasserbrunnen (Ca-HCO ₃ -Wasser) >Oberster Mineralwasserzufluss (Na-Cl-Wasser)	< -55 > -70	<+322 >+307	<-120i >-135i	<+170i >+155i
Eglisau 2 >Oberster Mineralwasserzufluss (Na-Cl-Wasser)	>-120	>+262	>-180i	>+116
Wildeggen ≥Mineralwasserzutritt (Na-Cl-Wasser)	≥-108	≥+249	≥-110i	≥-110i
Schafisheim >OK Teststrecke (Na-Cl-Wasser)	>-553	>-132	>-500i	>+ 23
Pfaffnau 1 (Tab. 8) >OK oberste Teststrecke mit NaCl-Wasser	>-446	> +54	>-500i	>+245
Pfaffnau Süd 2 (LEMCKE et al. 1968, Fig. 8) <UK Teststrecke unterste "Süßwasser"-Probe >OK Teststrecke oberste NaCl-Wasser-Probe	<-664 >-707	< +33 > -10	<-280 >-323	<+593i >+550i
Pfaffnau Süd 5 (Tab. 9) >OK Teststrecke oberste NaCl-Wasser-Probe	>-497	>+216	>-223	>+690i
Pfaffnau Süd 4 (RYBACH et al. 1981, Beilage 22) <UK Teststrecke unterste "Süßwasser"-Probe >OK Teststrecke oberste NaCl-Wasser-Probe	<-542 >-696	<+169 > +15	<-112 >-266	<+834i >+680i
Boswil 1 (Tab. 8) >OK Teststrecke oberste NaCl-Wasser-Probe	>-835	>-187	> -26	>+988
Zürich-Aqui <UK Brunnen (Na-HCO ₃ -Wasser)	<-500	< -80	<+150i	<+1200i
Zürich-Tiefenbrunnen >OK Filter (Na-Cl-Wasser)	>-330	> +78	>+386	>+1600i
Kloten (Geothermiebohrung) <Untergrenze OMM-Aquifer (Na-HCO ₃ -Wasser)	<-382	< +49	±0	<+700i
Lottstetten <UK Wasserzutritte (Na-HCO ₃ -Wasser)	<-385	< +20	(<-450i)	<-135
Singen <Hauptzutritt (Na-HCO ₃ -Wasser)	<-555	<-125	(<-480i)	<-179
Konstanz <UK Filter (Na-HCO ₃ -Wasser)	<-625	<-225	< -7	<+950i

6.1.3.1 Westliche Gebiete

Die westlich der Töss von zahlreichen Bohrungen vorhandenen Analysen ergeben ein kohärentes Bild: Die Obergrenze der Natrium-Chlorid-Wässer fällt gegen Südsüdosten ab. Bei Eglisau in der Nähe des nördlichen Trograndes liegt sie innerhalb der Unteren Süsswassermolasse wenig höher als +300 m ü.M., bei Wildeggen am Trogrand im Malm auf etwa +250 m ü.M..

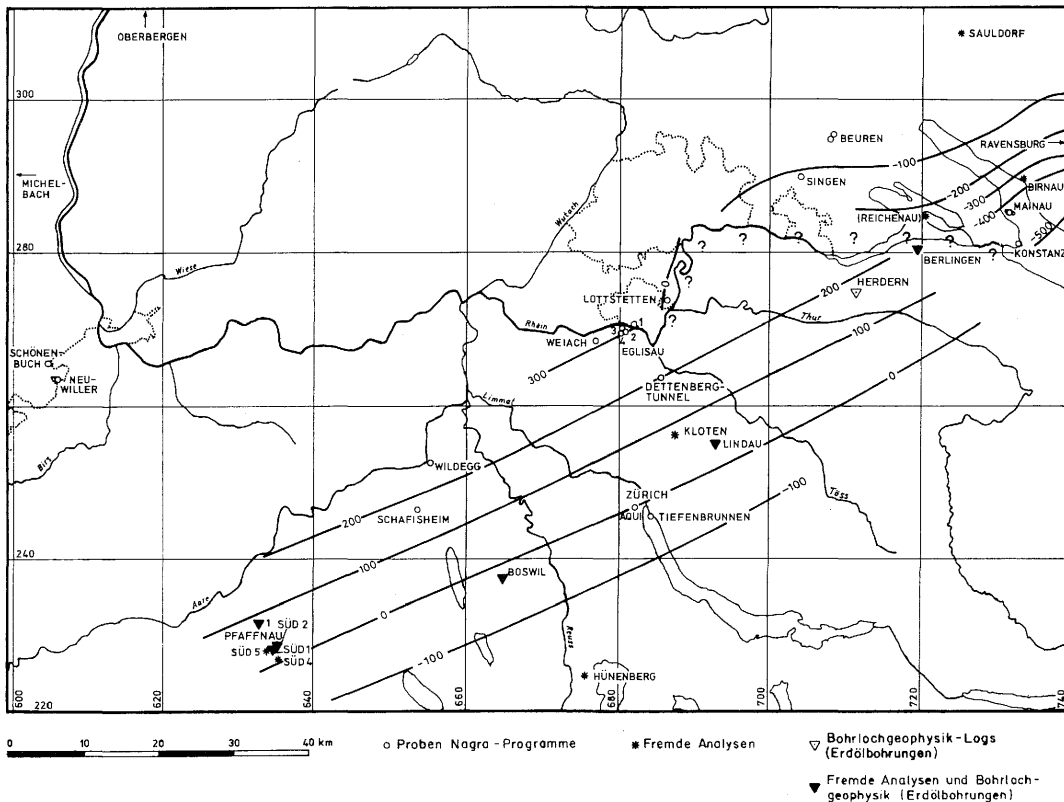


Fig. 51: Approximative Lage der Obergrenze der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer im nordschweizerischen und angrenzenden süddeutschen Molassebecken (Koten m ü.M.)

Die Isohypse 0 m ü.M. verläuft unweit südlich der Bohrungen Pfaffnau Süd und durch Zürich in westsüdwest-ostnord-östlicher Richtung. Im Gebiet Pfaffnau Süd haben einzig zwei Proben aus der Bohrung Pfaffnau Süd-5 bis rund 200 m über der dargestellten Grenzfläche noch Natrium-Chlorid-Wässer, wobei vorläufig offen bleiben muss, ob es sich um isolierte, stagnierende Linsen oder um aufsteigende Wässer handelt (Fig. 52).

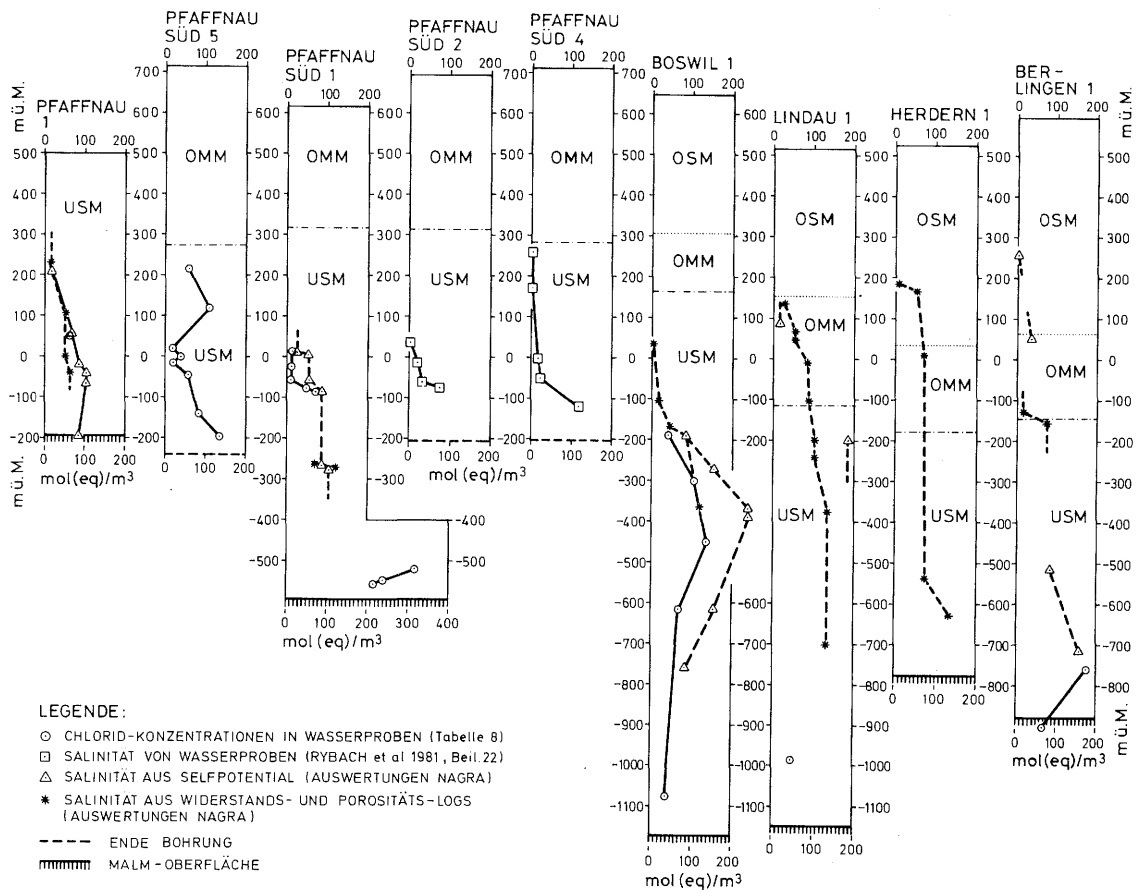


Fig. 52: Salinitätsprofile von Erdölbohrungen

In Zürich dürfte die Bohrung Aqui von +125 m bis -80 m ü.M. mit der Chlorid-Konzentration des geförderten Wassers von $4,5 \text{ mol Cl}^-/\text{m}^3$ (30 % der Anionen-Äquivalente) ausser dem überwiegenden Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser (Hydrogenkarbonat = 48 % der Anionen-Äquivalente) in der Tiefe bereits etwas Natrium-Chlorid-Wasser erschliessen. Die Bohrung Zürich-Tiefenbrunnen erschliesst dagegen von +78 m ü.M. bis -308 m ü.M. ein Natrium-Chlorid-Sulfat-Wasser mit einem Chlorid-Anteil von $33 \text{ mol Cl}^-/\text{m}^3$ (59 % der Anionen-Äquivalente), dem aus dem Uebergangsbereich aber auch noch Wasser des Natrium-Hydrogenkarbonat-Typs beigemischt ist.

Die Geothermiebohrung Kloten erschliesst nach den im Archiv der Nagra verfügbaren Unterlagen zwischen OK Filterrohr bei +267 m ü.M. und der OMM-Untergrenze bei +49 m ü.M. ähnlich wie die Bohrung Zürich-Aqui ein Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser (Hydrogenkarbonat = 53 % der Anionenäquivalente),

das aber auch $3,25 \text{ mmol}(\text{eq})/\text{m}^3$ Chlorid (25 ‰ der Anionen-äquivalente) enthält und deshalb ähnlich wie die Bohrung Aquí in der Tiefe bereits etwas Natrium-Chlorid-Wasser erschliessen dürfte. Die Obergrenze des Natrium-Chlorid-Tiefengrundwassers dürfte demnach eher etwas höher als +50 m ü.M. liegen.

Am nördlichen Trogrand bei Wildegg liegt die Obergrenze der Natrium-Chlorid-Wässer wie erwähnt im Malm. In Eglisau (Bohrung 3) findet sie sich innerhalb der USM rund 160 m über der Malm-Oberfläche oder rund 130 m unter der ehemaligen (erodierten) OMM-Basis. Weiter im Troginnern, im Gebiet der Bohrungen von Pfaffnau Süd liegt sie zwischen etwa 550 und 700 m über der Malm-Oberfläche, hat aber wegen der grösseren Mächtigkeit der USM mit 200-300 m auch einen grösseren Abstand zur OMM-Basis. In Zürich liegt die Grenze der beiden Wassertypen zwar ungefähr im gleichen absoluten Niveau wie im Gebiet von Pfaffnau Süd, hier aber bereits mehr als 1200 m über der Malm-Oberfläche innerhalb der OMM.

Auswertungen der Nagra von bohrlochgeophysikalischen Logs aus Erdölbohrungen (Fig. 52) bestätigen generell die aus Wasseranalysen hervorgehende Lage der gegen Südsüdosten einfallenden Obergrenze der Natrium-Chlorid-Wässer und zeigen, dass sich diese östlich der Töss noch bis in die Nähe des Bodensees fortsetzt. Die Interpretationen von Self-potential-Logs haben vor allem bei nicht oder nur schwach salinen Wässern allerdings einen lediglich qualitativen Charakter, da sie streng genommen nur für Natrium-Chlorid-Wässer gelten. Der Vergleich, der für die Bohrungen Pfaffnau Süd 1 und Boswil 1 aus den Selfpotential-Logs ermittelten Salinitäten mit den Chlorid-Konzentrationen der Wasserproben zeigt, dass erstere allgemein zu hoch sein dürften (Fig. 52) Auch die aus Widerstands- und Porositäts-Logs ermittelten Salinitäten sind nicht unbedingt als Absolutwerte zu betrachten, zeigen aber ebenfalls Trends der Veränderung an. Zuverlässiger dürften Interpretationen für die Bohrung Herdern sein, wo sie sich auf Inductions/Laterolog und Dichtelog stützen konnten.

Grössenordnungsmässig können wir annehmen, dass Chlorid-Ionen in den Molasse-Tiefengrundwässern meistens überwie-

gen, wenn ihre Konzentration rund 10 mol(eq)/m^3 entsprechend einer "Salinität" von rund $0,6 \text{ g NaCl/l}$ übertrifft. Wässer mit einer Salinität von 1 g NaCl/l dürften demnach bereits zu den Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässern zu zählen sein. Die entsprechenden Modell-Salinitäten aus bohrloch-geophysikalischen Messungen sind vermutlich höher. In der Bohrung Boswil 1 bestätigt das aus Widerstandsmessung und Porosität (Sonic-log) abgeleitete Vorkommen von Wässern mit einer Modell-Salinität von weniger als 1 g/l bis $+37 \text{ m ü.M.}$ (610 m tief) und die darunter bis Kote -103 m (750 m tief) gefundenen Modell-Salinitäten von ungefähr 1 g/l , dass die Obergrenze der Natrium-Chlorid-Wässer dort in der Nähe der Null-Isohypse liegt.

In der Bohrung Lindau wurde eine entsprechend ermittelte Modell-Salinität von 1 g/l bis $+84 \text{ m ü.M.}$ (432 m tief) gefunden. In der Bohrung Herdern ergaben die von der Nagra vorgenommenen Auswertungen von Inductions/Latero-Logs und Dichtelog, dass die Salinität bis Kote $+185 \text{ m ü.M.}$ (342 m tief) weniger als 1 g/l (17 mol(eq)/m^3) beträgt und dann bei Kote $+165 \text{ m ü.M.}$ (362 m tief) auf 3 g/l (rund 50 mol(eq)/m^3) ansteigt. Demnach ist zu vermuten, dass die Obergrenze der Natrium-Chlorid-Wässer hier in etwa 185 m ü.M. liegt. Mit diesem Ergebnis ist konsistent, dass in der Bohrung Berlingen die Auswertung des Selfpotential-Logs bis $+253 \text{ m ü.M.}$ (340 m tief) eine Modell-Salinität von weniger als 1 g/l , bei $+53 \text{ m ü.M.}$ (540 m tief) aber bereits 2 g/l ergab.

6.1.3.2 Oestliche Gebiete

Gänzlich andere Tiefenlagen der Grenze zwischen Hydrogenkarbonat-Wässern und Natrium-Chlorid-Wässern als in der Molasse westlich des Bodensees und des Rheins finden wir im Bodensee-Gebiet und nordöstlich von Eglisau. Während in Eglisau Hydrogenkarbonat-Wässer nur über der Kote von etwa $+310 \text{ m ü.M.}$ in der USM vorkommen, gehen sie in Lottstetten bis mindestens zur Kote $+20 \text{ m ü.M.}$ und in Singen bis mindestens zur Kote -125 m ü.M. in den Malm hinein. In der Bohrung Lottstetten findet sich der Austritt des Natrium-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwassers in den Quaderkalken, in der Bohrung Singen an der Grenze der Quaderkalke gegen die hangenden Massenkalken. In beiden Bohrungen wurden tiefer im Malm keine Wasseraustritte festgestellt. Vermutlich sind

die unter den Quaderkalken folgenden Kimmeridge-Mergel und die liegenden Oxfordkalke nicht verkarstet, so dass der Malm hier unter den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern keine Natrium-Chlorid-Wässer enthält. Doch sind den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern noch Relikte von Natrium-Chlorid-Wässern beigemischt, die sich in einer gegenüber den OMM-Wässern von Konstanz, Mainau und Birnau deutlich erhöhten Chlorid-Konzentration von $1,6 \text{ mol/m}^3$ (Mittel) in Lottstetten und von $3,2 \text{ mol/m}^3$ in Singen manifestieren.

Für das Molassebecken des Bodensee-Gebiets und nördlich davon hat LEMCKE (1976, 13: Fig. 2; 1979a, 243: Abb. 6.35; 1988, 94: Abb. 59) die Streichlinien der "Süss-/Salzwassergrenze" aufgrund der Daten von Erdölbohrungen dargestellt. Danach fällt diese Grenze wie im schweizerischen Molassebecken westlich des Rheins und des Bodensees in Richtung gegen den Alpenrand ab. Unter Fronhofen, wo die Basis der OMM (Koten Fronhofen 1+2 = 192-210 m ü.M.) rund 500 m höher als in Zürich (Bohrung Tiefenbrunnen -308 m ü.M.) liegt, findet sich die Süss-Salzwassergrenze auf Koten um -200 m ü.M., also hier in der USM rund 400 m unter der OMM-Basis statt wie dort in der OMM rund 300 m über der Basis. In Ettenkirch, wo die Basis der OMM (-201 m ü.M.) noch rund 100 m höher als in Zürich liegt, ist die Süss-Salzwassergrenze sogar auf -667 m ü.M. gefallen, das heisst auf ein 600-700 m tieferes absolutes Niveau als in Zürich.

Auch im Vergleich zum Gebiet Pfaffnau Süd ergibt sich, dass die Obergrenze der Natrium-Chlorid-Wässer in entsprechenden geologischen Situationen im Bodensee-Raum tiefer liegt als im schweizerischen Molassebecken: Bei Koten der Basis der OMM um +300 m ü.M. (274-318 m) findet sich die Obergrenze der Natrium-Chlorid-Wässer im Gebiet Pfaffnau Süd etwas über 0 m ü.M., das heisst mehr als 200 m höher als in Fronhofen oder mindestens noch 100 m näher der OMM-Basis als dort.

Mit hydrodynamischen Modellen wird noch zu versuchen sein, die Ursache der im Westen und im Osten der Untersuchungsregion unterschiedlichen Höhenlagen der Wassertypen-Grenze zu erklären.

Im süddeutschen Molassebecken östlich der Iller stellte LEMCKE (1979a, 243: Abb. 6.35; 1988, 94: Abb. 59) fest, dass die Obergrenze der Salzwässer gegen Süden bis in den

Bereich der alpenparallelen Grossmulde, zu welcher die OMM durch seitliche Einengung verbogen ist (LEMCKE 1981, 15: Fig. 11), auf Niveaus unter Kote -800 m abfällt und bis zum Alpenrand (Rand der aufgeschobenen Molasse) wieder ansteigt. Aus dem nordschweizerischen Molassebecken liegen von diesen südlichen Bereichen keine Daten vor.

6.1.4 Untere Begrenzung der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer im süddeutschen Molassebecken

Im süddeutschen Molassebecken kommen nach LEMCKE & TUNN (1956) in Tertiär- und Malm-Aquiferen unter dem "Salzwasserbereich" nochmals "Süswässer" vor. Bei den zunächst dem Bodensee gelegenen Bohrungen vermutet LEMCKE die Untergrenze des "Salzwasserbereichs" in Fronhofen an der Tertiär-Malm-Grenze und nimmt sie in Baitenhausen etwa 100 m höher an (TUNN in: LEMCKE & TUNN 1956, 42: Tab. 2). Nach den publizierten Analysen aus östlicheren Teilen des süddeutschen Molassebeckens (TUNN in: LEMCKE & TUNN 1956, 37: Tab. 1) zählen LEMCKE & TUNN allerdings zum unteren "Süswasserbereich" auch ein Wasser mit noch verhältnismässig hoher Chlorid-Konzentration, das nach der üblichen Terminologie eigentlich ein Natrium-Chlorid-Wasser ist (Bohrung Gensdorf 1 in Ostbayern 2092-2095 m tief, 151-154 m unter Oberkante Malm: $22,0 \text{ mol Cl}^-/\text{m}^3$ oder 71 % der Anionen-Summe). Indessen kommen dort ebenfalls Wässer mit niedrigeren Chlorid-Konzentrationen unter dem "Salzwasserbereich" vor (Bohrung Schwabmünchen 1 südsüdwestlich Augsburg, 1288-1289 m tief, 76-77 m über Oberkante Malm in den Baustein-Schichten der UMM: Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser mit nur $1,1 \text{ mol Cl}^-/\text{m}^3$ oder 9 % der Anionen-Summe).

6.1.5 Nördliche Grenze des Verbreitungsgebietes der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer im Bodenseeraum

In Oberschwaben östlich der Karstwasserscheide Rhein-Donau haben Geothermiebohrungen im Malm Hydrogenkarbonat-Wässer angetroffen, und zwar mit zunehmender Tiefe des Aquifers und damit mit zunehmender Entfernung vom Trogrand (Daten nach WERNER 1978, STRAYLE et al. 1983 und BERTLEFF 1984, 1986):

	Tiefe Filter- strecke m	Kote Filter- strecke m ü.M.	Cl ⁻ mol/m ³	Wassertyp
Saulgau 1	553- 638	+ 68/- 17	0,2	<u>Ca</u> -Mg- <u>HCO</u> ₃
Saulgau 3	583- 928	+ 39/-306	1,3	<u>Ca</u> -Mg- <u>HCO</u> ₃ (-Cl)
Bad Buchau	606- 705	- 25/-124	0,2	Ca-Mg(-Na)- <u>HCO</u> ₃
Jordanbad	935-1001	-396/-462	0,8	Na-Mg-Ca- <u>HCO</u> ₃ (-Cl)
Aulendorf	1162-1215	-627/-650	1,7	<u>Na</u> -Ca-(Mg)- <u>HCO</u> ₃ -Cl

Der Einfluss der in dieser Region am Trogrand in den Malm infiltrierten Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Wässer nimmt demnach mit zunehmender Entfernung vom Rand des an die Schwäbische Alb anstossenden Trogs zugunsten der aus der hangenden Molasse zusickernden Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer ab. Unter diesen Molasse-Wässern herrscht der Einfluss der Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer vor, denen aber offenbar in unterschiedlichem Masse auch Relikte von Natrium-Chlorid-Wässern beigemischt sind.

Nach LEMCKES Interpretation der Erdölbohrdaten (1976, Fig. 2; 1979a, 243: Abb. 6.35, 1988, 94: Abb. 59) läge die Obergrenze des "Salzwassers" bei Saulgau und Bad Buchau auf Koten über -100 m ü.M., extrapoliert um etwa Kote 0 m ü.M., das heisst unter der Malm-Oberfläche, was in Verbindung mit den aus grösseren Tiefen stammenden Daten der Malm-Wässer vermuten lässt, dass Natrium-Chlorid-Wässer hier überhaupt fehlen. Wenn LEMCKES Interpretation zuträfe, läge die Obergrenze des Salzwassers bei Aulendorf etwa bei Kote -200 m ü.M. oder etwa 300 m über der Malm-Oberfläche. Im Malm ist aber ein Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser mit einem gegenüber Hydrogenkarbonat untergeordneten Chlorid-Anteil angetroffen worden. Dieses Natrium-Hydrogenkarbonat-Wasser könnte in diesem Falle nicht vertikal aus der Molasse in den Malm zugesickert sein, sondern müsste lateral von ausserhalb des Verbreitungsgebietes der Natrium-Chlorid-Wässer den Malm der Bohrung Aulendorf erreichen.

Im übrigen haben schon ANDRES und FRISCH (1981, 114) darauf hingewiesen, dass in den Darstellungen von LEMCKE eine abgesunkene Süss-/Salzwassergrenzfläche nur in weniger als

der halben Fläche des süddeutschen Molassebeckens wirklich nachgewiesen ist.

Wahrscheinlich haben die Natrium-Chlorid-Wässer innerhalb des süddeutschen Molassebeckens bis zum Bodenseeraum eine Nordgrenze ihres Verbreitungsgebietes, die südlich der Bohrung Aulendorf, aber nördlich einer Linie Fröhofen-Berlingen verlaufen dürfte. Ausserhalb dieser Nordgrenze des Verbreitungsgebietes der Natrium-Chlorid-Wässer stehen die Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer der Molasse ohne eine Zwischenlage von Natrium-Chlorid-Wässern in direkter Verbindung mit dem Karstaquifer des Malms, wie dies auch in Singen und Lottstetten anzunehmen ist. Weiter östlich geht das Verbreitungsgebiet der Natrium-Chlorid-Wässer dagegen bis zum Trogrand oder zumindest bis in dessen Nähe (Eglisau, Weiach, Wildegg).

6.1.6 Bereich der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer bis zur Untergrenze der Tertiär-Malm-Aquifergruppe des nordschweizerischen Molassebeckens

Ausser dort, wo in Tertiär- und Malm-Aquiferen die Natrium-Chlorid-Wässer unter den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern gar nicht erreicht wurden (Konstanz, Mainau, Birnau) oder höchstens knapp angetastet worden sind (Zürich-Aqui) oder, abgesehen von den Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern beige-mischten Relikten, vermutlich fehlen (Lottstetten, Singen), sind die in Bohrungen aus den betreffenden Aquiferen erhobenen tiefsten Proben immer Natrium-Chlorid-Wässer. Unter den Bohrungen, von denen Daten aus verschiedenen Tiefen vorliegen, zeigen deren vier in den tiefsten Proben jeweils die höchsten Chlorid-Konzentrationen, nämlich:

Bohrung	Tiefe m	mol Cl ⁻ /m ³	
Eglisau 2	237-252	52,8	
Pfaffnau Süd 2	770-772	ca. 75	(nach Diagramm in RYBACH et al. 1981, Beilage 22)
Pfaffnau Süd 4	830-834	ca. 120	
Pfaffnau Süd 5	905-907	131,4	

Die tiefste Probe der Bohrung Eglisau 2 stammt aus dem Malm 1-16 m unter dessen Oberfläche.

In zwei Bohrungen zeigt sich innerhalb der USM nach der Tiefe zunächst eine Zunahme bis zu einem Maximalwert und dann eine Abnahme zu niedrigeren Konzentrationen:

Bohrung	Maximal-Konzentration		Tiefste Probe	
	Tiefe (m)	mol Cl ⁻ /m ³	Tiefe (m)	mol Cl ⁻ /m ³
Pfaffnau Süd 1	1129-1139	313,1	1168-1170	237,8
Boswil	1096-1098	135,4	1262-1264	69,0

In keiner Bohrung bestehen Hinweise für in Tertiär- und Malm-Aquiferen unterhalb der Natrium-Chlorid-Wässer folgende Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer ("Süßwässer").

6.2 Modelle der säkularen Fliessysteme in den Tertiär- und Malm-Aquiferen

6.2.1 Modelle von K. LEMCKE (Fig. 53)

Die Grundwässer im Karst-Aquifer des Malms haben im süddeutschen Molassebecken hydraulische Potentiale, die niedriger sind als der auf die Landoberfläche bezogene hydrostatische Druck und als die in den Molasse-Aquiferen gemessenen hydraulischen Potentiale. Dies hat LEMCKE auch für das schweizerische Molassebecken angenommen.

Nach dem von LEMCKE entwickelten Modell bewirkt dieses nach unten gerichtete Druckgefälle, dass das durch Niederschläge laufend ergänzte Porenwasser "in säkularer Langsamkeit" aus der Molasse in den Malm abwandert, was schon zu erheblichen Verschiebungen der ursprünglichen Porenhalte nach unten geführt habe. Das ursprünglich in der marinen Oberen Meeresmolasse enthaltene Salzwasser ist nach diesem Modell so weit abwärts gewandert, dass die Obergrenze des Salzwassers heute weit unter der Obergrenze der Oberen Meeresmolasse, meistens mitten in der Unteren Süßwassermolasse verläuft.

Die Abwärtsbewegung ist nach LEMCKE erst seit dem Oberpliozän oder Frühquartär mit dem Einschneiden der Donau und des Hochrheins in den Malmkarst und der damit in diesem einhergehenden Erniedrigung des hydraulischen Potentials in Gang gekommen. Vorher hatten die hydraulischen Potentiale bis in den Malm-Aquifer hinunter die Grösse der hydrostatischen Drücke (LEMCKE in: LEMCKE & TUNN, 1956, 47-52,; ENGELHARDT 1973, 238-239; LEMCKE 1976, 12-15; VILLINGER 1977, 80; LEMCKE 1979a, 241, LEMCKE 1979b, 312-315, LEMCKE 1988, 89-93). Konsequenterweise, unseres Wissens allerdings von LEMCKE nie expressis verbis so gesagt, hatten nach diesem Modell die einzelnen Molasse-Formationen bis zum Oberpliozän oder Frühquartär noch ihre ursprünglichen Formationswässer enthalten. Infolge der Abwärtswanderung wären die an den meisten Orten heute in der Oberen Meeresmolasse und über der Obergrenze des Salzwassers in

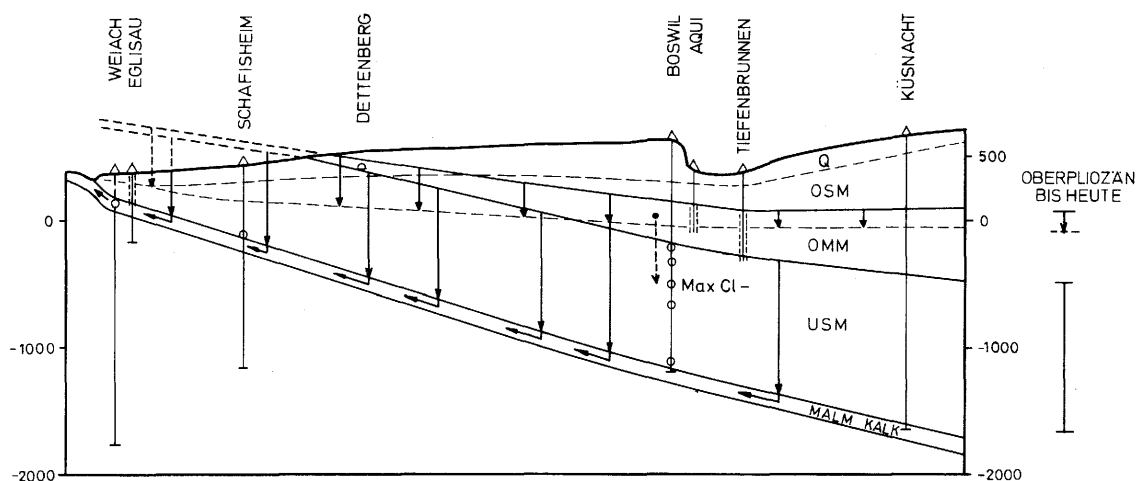


Fig. 53: Verbreitung der Wassertypen im schweizerischen Molassebecken erklärt mit dem LEMCKE-MODELL (schematisch). Absinken eines OMM-Formationswassers

der Unteren Süsswassermolasse enthaltenen "Süsswässer" (tatsächlich Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer) die ursprünglichen Formationswässer der Oberen Süsswassermolasse. Die heute an den meisten Orten in der Unteren Süsswassermolasse vorhandenen Salzwässer wären dagegen die ursprünglichen Formationswässer der Oberen Meeresmolasse und die im süd-

deutschen Molassebecken unter den Salzwasserbereich festgestellten "Süßwasser" die ursprünglichen Formationswässer der Unteren Süßwassermolasse.

6.2.2 Modell von P. UDLUFT (Fig. 54)

Eine grundsätzlich andere vor-oberpliozäne Ausgangslage als LEMCKE nimmt UDLUFT (1975, 21-22) im süddeutschen Molassebecken an. UDLUFT verweist dabei auf MILDE et al. (1969); welche die grundsätzlichen Unterschiede im hydrodynamischen Verhalten von Wässern während der Sedimentations- und während der Infiltrationsphasen (Sedimentations- und Infiltrationsetappen von MILDE et al.) hervorgehoben haben. Während der Sedimentationsphase findet in Tonen eine mechanische Porenreduktion statt, wobei Haftwasser ausgepresst wird und in wasserleitende Schichten (z.B. Sandsteine) gelangen kann. Beim Vorherrschen toniger Sedimente

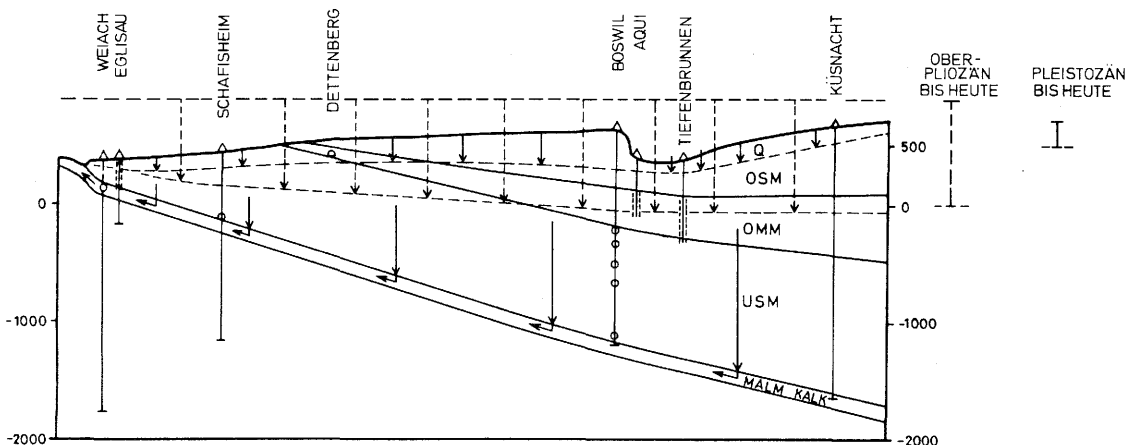


Fig. 54: Verbreitung der Wassertypen im schweizerischen Molassebecken erklärt mit dem UDLUFT-MODELL (schematisch). Absinken des bis im Oberpliozän entstandenen Molasse-Mischwassers

gegenüber sandigen ist durch das Freisetzen umfangreicher Wassermengen ein oftmaliger Wasseraustausch in den wasserleitenden Schichten möglich. Diese Porenwässer bewegen sich während der Sedimentationsphase im allgemeinen vom Beckenzentrum (Raum maximaler Absenkung) zum Beckenrand (Raum minimaler Absenkung). Weil der Kompaktionsdruck den hydro-

statischen Druck übertraf und im Beckeninnern am grössten war, entstanden nach UDLUFT während der Füllung des Molassebeckens auch Fliessrichtungen gegen den Trogrand und eine Durchmischung verschiedenartiger Wässer. Gleichzeitig kam es nach UDLUFT zu einer kontinuierlichen Gradierung der Wässer verschiedener Dichte, so dass schliesslich die tiefste Stelle des Sedimentationstrogs das Wasser mit der grössten Dichte enthielt (UDLUFT 1975; UDLUFT 1981, 631).

Diese Vorgänge führten zu einer weitgehenden Vermischung der Grenzen mariner, brackischer und limnisch-fluviatiler Formationswässer. Am Ende des Pliozäns bestand danach im abgeschlossenen Molassebecken ein einheitlicher Gradient der Salinität bis in den Malm hinein. Wie nach dem LEMCKESchen Fliessmodell entstand dann infolge der im Malm-Aquifer eingetretenen Erniedrigung des hydraulischen Potentials eine abwärts gerichtete Strömung aus den Poren-Aquiferen der Molasse in die Karst- und Kluft-Aquifere des Malms, aus welchen das Wasser zur Donau und zum Hochrhein abfliesst.

Die Konsequenz des von UDLUFT modifizierten Modells, die aber auch von diesem Autor nicht expressis verbis gezogen wurde, ist, dass die noch zur Zeit des Oberpliozäns oder Frühquartärs im Molassebecken mit einer nach unten zunehmenden Salinität vorkommende Mischung der verschiedenen ursprünglichen Formationswässer seither abgesunken und in höheren Teilen der Molasse durch infiltrierte Niederschlagswässer ersetzt worden ist. Die Obergrenze der Natrium-Chlorid-Wässer ist in diesem Falle nicht wie nach dem LEMCKE'schen Modell die hinuntergewanderte Grenze zwischen den Formationswässern der Oberen Süsswassermolasse und der Oberen Meeresmolasse, sondern die hinuntergewanderte oberpliozäne oder frühquartäre Grundwasseroberfläche (Oberfläche der Mischung tertiärer Formations- oder Sedimentationswässer), welche von den im Pleistozän (evtl. frühestens im jüngsten Oberpliozän) infiltrierten Wässern überlagert wird. Mit diesem Modell steht in Einklang, dass nach neueren, unabhängig voneinander in der gleichen Zeit gewonnenen Erkenntnissen (SCHMASSMANN et al. 1984, BERTLEFF 1984, 1986) sowohl die Isotopen- als auch die Edelgas-Daten auf eine kaltzeitliche Herkunft der über den Natrium-Chlorid-Wässern vorkommenden Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässer ("Süswässer") schliessen lassen. In einem nach dem LEMCKE'schen Modell von mittelmiozänen Formationswässern

(OSM) abstammenden Wasser müssten im Gegenteil Hinweise auf ein wärmeres Klima als heute erwartet werden (SCHWARZBACH 1950, 139-141; SCHWARZBACH 1974, 206-214; SCHREINER 1976, 20, nach HANTKE 1954; HANTKE 1980, 1031-1043; NILSSON 1983, 18; ZIEGLER 1986, 64; SCHWARZBACH 1988, 196-198).

6.2.3 Regionales Strömungsmodell (Fig. 55)

LEMCKE betrachtete den annähernd parallelen Verlauf der Isohypsen (= Streichlinien LEMCKES) der Obergrenzen von Oberer Meeresmolasse und von Salzwässern als Beweis des Absinkens einer ursprünglich an der Obergrenze der Oberen Meeresmolasse gelegenen "Süss-/Salzwassergrenze". Bis zu einer Entfernung von etwa 20 km von Alpenrand (Rand der aufgeschobenen Molasse = Faltenmolasse) verlaufen die Isohypsen der "Süss-/Salzwassergrenze" (LEMCKE 1979a, Abb. 6.35) im süddeutschen Molassebecken jedoch auch annähernd

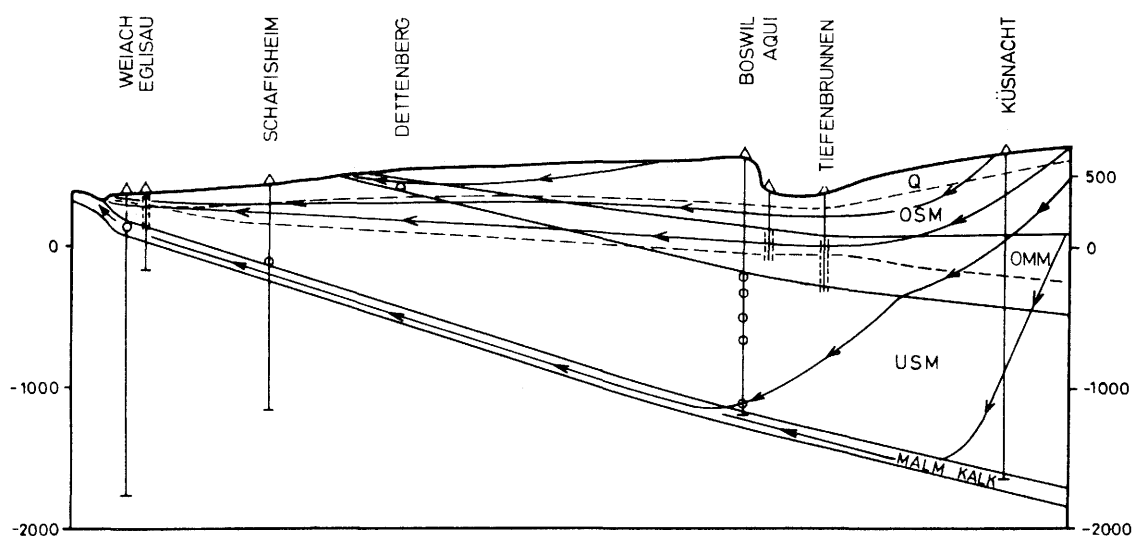


Fig. 55: Verbreitung der Wassertypen im schweizerischen Molassebecken erklärt mit regionalem Strömungsmodell (z.B. EGGER 1981, schematisch), interpretiert. Ergebnis: Regionales Grundwasser-FlieBsystem mit Ueberschichtung von

- Holozänen Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Wässern
- Pleistozänen Natrium-Hydrogenkarbonat-Wässern
- Molasse-Formationsmischwässern (Oberpliozäner Mischzustand)

parallel zu den Isohypsen der Malmoberfläche (LEMCKE 1981, Fig. 10). Aehnliches ergibt sich aus den spärlicheren Daten

auch im schweizerischen Teil des Molassebeckens. Im Grunde genommen kann einfach festgestellt werden, dass die Obergrenze der Natrium-Chlorid-Wässer gegen Süden abfällt. Dies kann eine andere Ursache haben als das vertikale Absinken einer ursprünglichen Formationswasser-Grenze.

Wenn ein Strömungsmodell zutrifft, wie es EGGER (1983, 68-70: Abb. 13) für das Molassebecken zwischen Iller und Isar schematisch dargestellt hat, herrschen im Norden in der höheren Molasse horizontale Fliesskomponenten gegen den regionalen Vorfluter (Donau im Gebiet zwischen Iller und Isar, Rhein und Aare im schweizerischen Molassebecken) vor, so dass die tertiären Natrium-Chlorid-Wässer von den pleistozänen (und holozänen) Wässern überströmt werden. Die zwischen Gelände und Malmoberfläche grössten abwärtsgerichteten vertikalen Fliesskomponenten sind nach diesem Modell im Süden vorhanden, wodurch die im Pleistozän infiltrierten Wässer tiefer absinken und tiefer als im Norden die Natrium-Chlorid-Wässer verdrängen konnten. Diesem schematischen Modell (Fig. 51, EGGER 1983) entsprechen im Prinzip die detaillierten Profile (des Regionalmodells 1987 der NAGRA (1988, 94-96: Fig. 4.17-4.19).

Der östlich der Iller nahe dem Alpenrand beobachtete Anstieg der Obergrenze des Salzwassers kann mit einer hier andauernden seitlichen Kompaktion durch die von den Alpen ausgehenden Spannungen (LEMCKE 1973, 36-37) in Verbindung gebracht werden, wobei offen bleibt, ob dadurch das Porenwasser nach oben gedrückt und der nach unten wirkende "Karstwassermechanismus" übertönt wird (LEMCKE 1976, 13; 1979a, 244) oder umgekehrt Porenlösungen aus der Molasse verstärkt in den Malm-Aquifer eindringen (UDLUFT 1975, 21-22). Aufgrund der Verteilung der seismischen Geschwindigkeiten im ostschweizerischen Molassebecken muss auch hier mit einer gegen den Alpenrand zunehmenden lateralen Kompression der Molassesedimente gerechnet werden (LOHR 1967), welche die Fliesssysteme beeinflussen könnte, worüber aber bisher aus der Schweiz keine konkreten Daten vorliegen.

Als weiteren Beweis für ein schichtiges Herabwandern ursprünglicher Formationswässer nannte LEMCKE eine innerhalb der Molasse verlaufende untere Grenze des Salzwasserbereichs (vgl. 6.1.4). UDLUFT (1975, 18) fand diese aber in seinem Untersuchungsgebiet östlich des Lechs nicht bestätigt. Nach UDLUFT nimmt in der ungefalteten Molasse die

Mineralkonzentration der Wässer generell mit der Tiefe zu und erreicht ihre höchsten Werte jeweils in der tiefstmöglichen Lage über dem Einflussbereich des Malm (dieser Einflussbereich umfasst dort zum Teil auch das Cenoman und die Bausteinschichten). Im schweizerischen Molassebecken finden wir im allgemeinen ebenfalls eine Zunahme der Chlorid-Konzentration mit der Tiefe. Nur die aus den Bohrungen Pfaffnau Süd 1 und Boswil 1 entnommenen tiefsten Proben von Molasse-Wässern haben niedrigere Konzentrationen als Wässer höherer Horizonte (vgl. 6.1.6), gehören aber noch eindeutig zum Natrium-Chlorid-Typ und sind keine "Süßwässer". Möglicherweise findet in den tiefsten Molasseschichten eine Verdünnung mit örtlich von unten sich beimischendem Grundwasser des Malm-Aquifers statt, das nicht nur durch die absinkenden Porengrundwässer der Molasse, sondern in regional unterschiedlicher Masse auch durch Infiltrationen an den Trogrändern gespeist wird und gegen die regionalen Vorfluter abströmt.

6.2.4 Ursprung der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer

In marinen Formationswässern sind im allgemeinen die relativen Anteile von Calcium und Hydrogenkarbonat grösser und die von Magnesium und Sulfat kleiner als im Meerwasser, die von Natrium und Chlorid aber nicht oder nur wenig verändert. Die Konzentrationen sind in den marinen Formationswässern zumeist höher als im Meerwasser (ENGELHARDT 1973, 226). Die Natrium-Chlorid-Wässer der schweizerischen und der süddeutschen Molasse haben aber Natrium- und Chlorid-Konzentrationen, die weit unter denen des Meerwassers liegen. Dieses enthält bei einer 35 g/kg betragenden Massenkonzentration aller gelösten anorganischen Bestandteile $545,9 \text{ mmol}(\text{eq})\text{Cl}^-/\text{kg} = 559,4 \text{ mol}(\text{eq})\text{Cl}^-/\text{m}^3$ (20°C). In den in den Nagra-Programmen untersuchten Natrium-Chlorid-Wässern der Tertiär- und Malm-Aquifere finden sich nur $23,4 \text{ mol}(\text{eq})\text{Cl}^-/\text{m}^3$ (Eglisau 1) bis $145,9 \text{ mol}(\text{eq})\text{Cl}^-/\text{m}^3$ (Mittel Schafisheim). In Erdölbohrungen wurden bis zu $313 \text{ mol}(\text{eq})\text{Cl}^-/\text{m}^3$ (Pfaffnau Süd 1, 1129-1139 m) festgestellt.

Eigentliche marine Formationswässer sind somit im Molassebecken nicht nachgewiesen. Die nachgewiesenen Natrium-Chlorid-Wässer mit relativ niederen Konzentrationen lassen sich als Mischungen eines salinen Wassers ("Salzwasser")

mit einem nicht salinen, meteorischen Wasser ("Süßwasser") erklären.

Ausser durch Mischung mit geologisch jungen, pleistozänen und eventuell holozänen meteorischen Wässern können Natrium-Chlorid-Wässer mit erheblich geringeren Konzentrationen als Meerwasser in der Molasse auch durch Mischung von tertiärem Meerwasser mit tertiären meteorischen Wässern entstanden sein.

Dazu gehören die Brackwässer, die durch Mischung von Meerwasser mit aus meteorischen Wässern bestehendem Flusswasser im Mündungsbereich von Flüssen, in Strandseen oder in abgetrennten Meeresbuchten entstehen. So könnte für das saline Endglied der Eglisauer Mischreihe in der Unteren Süßwasser-Molasse ein Brackwasser als Formationswasser (konntes Wasser) angenommen werden. In der Unteren Süßwasser-Molasse sind Brackwassersedimente nämlich sowohl aus Bayern nach Westen bis zur Iller als auch aus der Westschweiz bekannt und auch in der Ostschweiz möglich (LEMCKE 1973, 25; BÜCHI & SCHLANKE 1977, 62; TRÜMPY 1980, 27; SCHMASSMANN et al. 1984, 132).

Eine Mischung von tertiärem Meerwasser mit tertiärem meteorischem Wasser wäre auch nach dem Modell von UDLUFT entstanden, nach welchem es vor dem Oberpliozän im Molassebecken zu einer Durchmischung der marinen, brackischen und limnisch-fluviatilen Formationswässer und zu einer von der Oberfläche bis zur oder unter die Basis des Sedimentationstrogos stattfindenden Gradierung gekommen war.

Wenn auf die eine oder andere Weise dem tertiären Meerwasser auch tertiäre meteorische Wässer beigemischt sind, wäre zu erwarten, dass die Relationen der stabilen Isotope mit dem damaligen Klima im Einklang stehen. Analog den für den oberösterreichischen Molassebecken von ANDREWS et al. (1987, 51-52: Fig. 6-7) gegebenen Darstellungen wurde $\delta^2\text{H}$ gegen die Chlorid-Konzentration aufgetragen.

Zum Vergleich werden die Verdünnungs-Geraden (im einfach-logarithmischen Massstab als Kurven erscheinend) gezeichnet, die sich unter folgenden Annahmen ergaben (Fig. 56):

Endglied	$\text{mol}(\text{eq})\text{Cl}^-/\text{m}^3$	$\delta^2\text{H}_{\text{O}/\text{OO}}$
1 Meerwasser	559,4	0
2 Meteorisches Wasser		
2a ungefähr wie rezent im südlichen Oberrheintal	0	-66
2b ungefähr wie rezent im schweizerischen Mittelland	0	-72
2c -	0	-78
2d -	0	-84
2e Pleistozän (wie etwa im Mittel von Konstanz, Birnau, Aqul, Singen)	0	-90

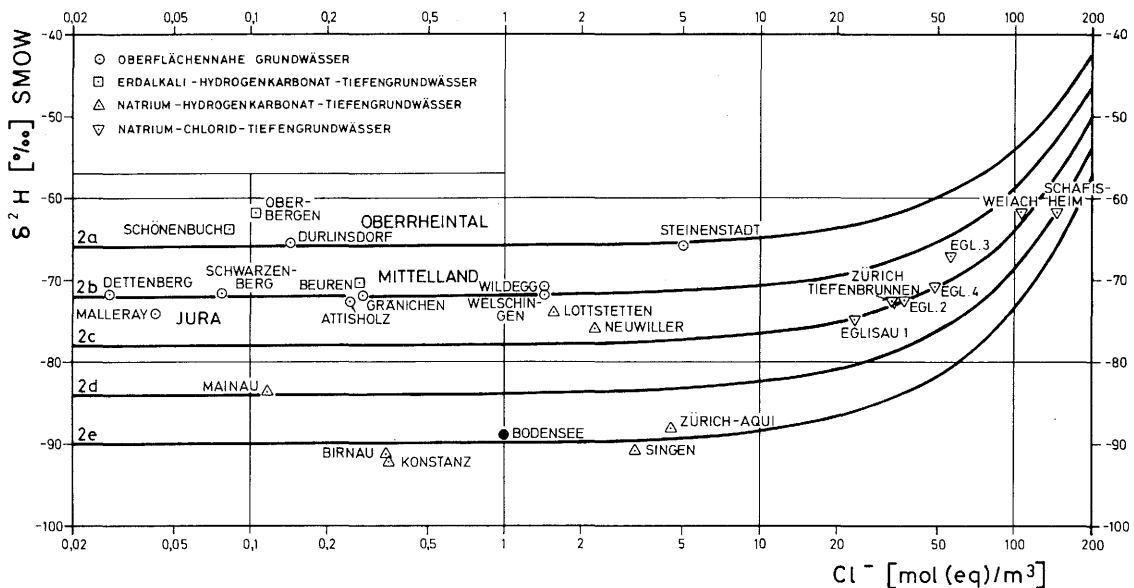


Fig. 56: Beziehung zwischen $\delta^2\text{H}$ und Chlorid-Konzentration. Mischungsgeraden (Kurven im einfachlogarithmischen Diagramm) von Meerwasser und meteorischen Wässern mit variablen $\delta^2\text{H}$ -Werten

Alle untersuchten Natrium-Chlorid-Wässer streuen um die Mischungsgerade, die aus den Endgliedern 1 und 2c berechnet wurde. Im meteorischen Endglied ist der ^2H -Wert 12 ‰ höher als im pleistozän-kaltzeitlich interpretierten Endglied 2e, rund 11 ‰ höher als im heutigen Bodensee (Konstanz Mittel 1979/(80: $\delta^2\text{H} = -88,8$ ‰) und rund 6 ‰ niedriger als in rezenten Grundwässern des schweizerischen Molassebeckens (Endglied 2b). Wenn man annimmt, dass die mit allen Nagra-Daten konsistenteste Beziehung $\delta^2\text{H} = 3,0 \text{ T } (^\circ\text{C}) - 92$ ‰ zutrifft, bedeutet dies für das meteorische Endglied der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer mit $4,7^\circ\text{C}$ im Mittel eine 4°C höhere Temperatur als im Einzugsgebiet des pleistozänen Wassers, eine $3,6^\circ\text{C}$ höhere Temperatur als im Einzugsgebiet des rezenten Rheins und eine 2°C tiefere Temperatur als heute in den Einzugsgebieten untersuchter Quellen des schweizerischen Mittellandes.

Da vom Oberoligozän bis zum Mittelmiozän ein wärmeres Klima als heute geherrscht hatte*), spricht dies gegen die Annahme, dass das meteorische Endglied der Mischreihe im Tertiär nur über den Schwemmebenen des Molassebeckens als Niederschlag gefallen ist. Jene Ebenen waren aber von Wasser überschwemmt, das zu einem wesentlichen Teil über die Schuttfächer aus höheren alpinen Einzugsgebieten zufluss, ähnlich dem Wasser der heutigen alpinen Flüsse. Im nicht-salinen, meteorischen Endglied der Mischreihe liegt jedoch $\delta^2\text{H}$ deutlich höher als heute im Bodensee-Obersee, der zudem bereits ein gemischt alpin-mittelländisches Einzugsgebiet hat. Deshalb ist die $\delta^2\text{H}$ -Differenz zwischen dem meteorischen Endglied der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer und einem nur alpinen rezenten Fluss wahrscheinlich grösser als zwischen jenem Endglied und dem rezenten Bodensee-Obersee. Dazu kommt, dass die alpinen Einzugsgebiete des Molassebeckens im Miozän vermutlich im Durchschnitt höher gelegen hatten als heute: Nach einem Rekonstruktions-Profil

*) Nach SCHWARZBACH (1988, 209: Abb. 143), betrug die mittlere Jahrestemperatur in Mitteleuropa im Ober-Oligozän etwa $16-19^\circ\text{C}$ und fiel bis zum Mittel-Miozän auf etwa $15-17^\circ\text{C}$. ZIEGLER (1986, 64) schätzt die mittlere Jahrestemperatur zur Zeit des mittelmiozänen Oehninger Maarsees zu 15°C , das heisst $6-7^\circ\text{C}$ höher als heute in jener Gegend.

von HSÜ (1979, 358: Fig. 2c; DIEBOLD & MÜLLER 1985, 58: Fig. 26) erhoben sich die Alpen südöstlich des schweizerischen Molassebeckens am Ende des Mittelmiozäns bis auf mehr als 5000 m ü.M.. Nach TRÜMPY (1985, 39) hatten die Alpen im späten Oligozän vielleicht Gipfelhöhen von 6000 m. Demnach ist durchaus denkbar, dass die sich mit dem salinen Endglied vermischenden meteorischen Wässer in den Einzugsgebieten alpiner Flüsse gefallen sind, als die Temperatur im schweizerischen Mittelland 6-7°C wärmer als heute war. Die ^2H -Daten der Natrium-Chlorid-Wässer sind zwar kein Beweis für ein tertiäres Alter von nicht salinen, meteorischen Anteilen der Natrium-Chlorid-Tiefengrundwässer, stehen aber zur Annahme eines solchen Alters auch nicht in Widerspruch.

LITERATURVERZEICHNIS

- ANDRES, G. & FRISCH, H. (1981): Hydrogeologie und Hydraulik im Malmkarst des Molassebeckens und der angrenzenden Fränkisch-Schwäbischen Alb. In: ANDRES, G. & WIRTH, H. (Eds.), Die Thermal- und Schwefelwasservorkommen von Bad Gögging mit Beiträgen zum geologisch-tektonischen Rahmen sowie zur Hydraulik des Tiefengrundwassers im Malmkarst des Molassebeckens. - Schriftenr. bayer. Landesamt Wasserwirtsch., 15, 108-117, Beil. 1.
- ANDREWS, J.N., YOUNGMAN, M.J., GOLDBRUNNER, J.E. & DARLING, W.G. (1987): The Geochemistry of Formation Waters in the Molasse Basin of Upper Austria. - Environ. Geol. Water Sci., 10/1, 43-57.
- APEL, R. & VILLINGER, E. (1979): Die Schwäbisch-Fränkische Alb und ihr nördliches Vorland. In: KELLER, R. (Gesamtleitung), Hydrogeologischer Atlas der Bundesrepublik Deutschland. Textband 222-240. - Deutsche Forschungsgemeinschaft, Bonn.
- BAERTSCHI, P. & BALDERER, W. (in Vorb.) Uranium- and Thorium-Series Nuclides. In: PEARSON et al. (Eds.), Isotope Hydrogeology of Northern Switzerland. - NTB 88-01, Nagra, Baden.
- BALDERER, W. (1979): Die Obere Süsswassermolasse als hydrogeologisches Gesamtsystem. - Bull. Centre. Hydrogéol. Univ. Neuchâtel, 3, 27-39.
- BALDERER, W. (1982): Berechnungsmethoden zur quantitativen Abschätzung der Durchlässigkeit von porösen Festgesteinen mit Hilfe des Quellabflusses. - Bull. Centre Hydrogéol. Univ. Neuchâtel, 4, 231-258.
- BALDERER, W. (1983a): Hydrogeologie der Oberen Süsswassermolasse im Einzugsgebiet des Aubaches (Schweiz). - Steir. Beitr. z. Hydrogeologie, 34/35, 15-54, 1 Tafel.
- BALDERER, W. (1983b): Bedeutung der Isotopenmethoden bei der hydrogeologischen Charakterisierung potentieller Endlagerstandorte für hochradioaktive Abfälle. - NTB 83-04, Nagra, Baden.
- BALDERER, W. (1985): The Nagra Investigation Project for the Assessment of Repositories for High Level Radioactive Wastes in Geologic Formations: Mineralogical Magazine, 49, 281-288.
- BALDERER, W. (1986): Ergebnisse der Isotopenuntersuchungen und der Modellrechnungen zur hydrogeologischen Charakterisierung der Tiefengrundwässer. - NIB 86-19, Nagra, Baden.

- BALDERER, W. (1989): Hydrochemie der Quellen der Oberen Süsswassermolasse im Einzugsgebiet des Aubaches (Schweiz) - Steir. Beitr. z. Hydrogeologie, 40, 49-74.
- BALDERER, W., RAUERT, W. & STICHLER, W. (1987): Environmental isotope study of the deep groundwaters in northern Switzerland. - Intern. Atomic Energy Agency SM-299/114, 455-474, Wien.
- BALDERER, W. & LEHMANN, B.E. (1989): $^3\text{He}/^4\text{He}$ -ratios as indicators of the origin of helium in groundwater: Examples from the deep Nagra boreholes in Northern Switzerland, 45-47. In: MILES, D.L. (Ed.), Proceed. 6th Intern. Symp. Water-Rock Interaction, Malvern. - Balkema, Rotterdam, Brookfields.
- BALDERER, W. & LEHMANN, B.E. (in Vorb.): ^3He and ^4He . In: PEARSON et al. (Eds.), Isotope Hydrogeology of Northern Switzerland. - NTB 88-01, Nagra, Baden.
- BALDERER, W. & PEARSON, F.J. (in Vorb.): Isotopic Composition of Groundwater. In: PEARSON et al. (Eds.), Isotope Hydrogeology of Northern Switzerland. - NTB 88-01, Nagra, Baden.
- BALDERER, W., PEARSON, F.J. & SOREAU, S. (in Vorb.): Sulphur and Oxygen Isotopes in Sulphate and Sulphide. In: PEARSON et al. (Eds.), Isotope Hydrogeology of Northern Switzerland. - NTB 88-01, Nagra, Baden.
- BARTH, G. & VON GUNTEN, H.R. (1978): Determination of trace elements in the river Aare (Switzerland) by Neutron Activation Techniques. In: FREI, R.W. (Ed.), Recent advances in environmental analysis, 207-224. - Gordon and Breach Science Publishers, London, New York, Paris.
- BERTLEFF, B.W. (1984): Das Strömungssystem der Grundwässer im Malm-Karst des West-Teils des süddeutschen Molassebeckens. - Diss. natur.-math. Gesamtfak. Univ. Heidelberg.
- BERTLEFF, B.W. (1986): Das Strömungssystem der Grundwässer im Malm-Karst des West-Teils des süddeutschen Molassebeckens. - Abh. geol. Landesamt Baden-Württemberg, 12, 1-271.
- BERTLEFF, B., STRAYLE, G., WERNER, J. & HAENEL, R. (1985): Hydrogeothermische Energiebilanz und Grundwasserhaushalt des Malmkarsts im süddeutschen Molassebecken. Projekt Isotopenhydrogeologie und Hydrogeothermie. - Programm Energieforschung und Energietechnologien. - Statusreport 1985 Geotechnik und Lagerstätten. Projektleitung Energieforschung (PLE) KFA Jülich, Jülich, 112-124.

- BERTLEFF, B., HAMMER, W., JOACHIM, H., KOZIOROWSKI, G., STOBER, I., STRAYLE, G., VILLINGER, E. & WERNER, J. (1987): Hydrogeothermiebohrungen in Baden-Württemberg. Eine Uebersicht. - Z. dt. geol. Ges., 138, 411-423.
- BERTLEFF, B., KOZIOROWSKI, G., LEIBER, J., OHMERT, W., PRESTEL, R., STOBER, I., STRAYLE, G., VILLINGER, E. & WERNER, J. (1988): Ergebnisse der Hydrogeothermiebohrungen in Baden-Württemberg. - Jh. geol. Landesamt Baden-Württemberg, 30, 27-116.
- BÖGLI, A. (1978): Karsthydrographie und physische Speläologie. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- BROOKINS, D.G. (1988): Eh-pH Diagrams for Geochemistry. - Springer, Berlin, Heidelberg.
- BÜCHI, U.P. (1959): Bohrung Eglisau Nr. 2 - Ergebnisse der technischen Tests. - Bull. Ver. schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing., 26/70, 15-16.
- BÜCHI, U.P., WIENER, G. & HOFMANN, F. (1965a): Neue Erkenntnisse im Molassebecken auf Grund von Erdöltiefbohrungen in der Zentral- und Ostschweiz. - Eclogae geol. Helv., 58/1, 87-108, Taf. 1.
- BÜCHI, U.P., LEMCKE, K., WIENER, G. & ZIMDARS, J. (1965b): Geologische Ergebnisse der Erdölexploration auf das Mesozoikum im Untergrund des schweizerischen Molassebeckens. - Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing., 32/82, 7-38.
- BÜCHI, U.P. & SCHLANKE, S. (1977): Zur Paläogeographie der schweizerischen Molasse. - Erdöl-Erdgas-Z. Sonderausg. 1977, 57-69.
- BURGER, A. (1979): Recherche de critères pour la protection des eaux souterraines karstiques contre la pollution. Application au Jura suisse. - Bull. Centre Hydrogéol. Univ. Neuchâtel, 3, 115-154.
- BURGER, A. (1983): Prospection et captage des eaux souterraines des roches carbonatées du Jura. - Gaz-Eaux-Eaux usées, 63/9, 533-583.
- BURGER, A. & PASQUIER, F. (1984): Prospection et captage d'eau par forages dans la vallée de la Brévine (Jura Suisse). In: BURGER, A. & DUBERTRET, L. (Ed.), Hydrology of Karstic Terrains. Case Histories. - International Contributions to Hydrogeology, 1, 145-149.

- BÜRGISSE, H.M.; FURRER, H. & HÜNERMANN, K.A. (1983): Stratigraphie und Säugetierfaunen der mittelmiozänen Fossilfundstellen Hüllistein und Martinsbrünneli (Obere Süsswassermolasse, Nordostschweiz). - *Eclogae Geol. Helv.*, 76, 3, 733-762.
- CADISCH, J. (1937): Geologie der Schweizer Mineral- und Heilquellen. In: NUSSBERGER et al., Die Mineral- und Heilquellen der Schweiz. - Zimmermann & Cie, Bern.
- CADISCH, J. (1959): Geologische Ergebnisse der Mineralquellenbohrung Eglisau II. - *Bull. Ver. Schweiz. Petrol.- Geol. u. -Ing.*, 26/70, 5-8.
- CLAYPOOL, G.E., HOLSER, W.T., KAPLAN, I.R., SAKAI, H. & ZAK, I. (1980): The age of sulfur and oxygen isotopes in marine sulphates and their mutual interpretation. - *Chemical Geology*, 28, 199-260.
- DIEBOLD, P. & MÜLLER, W.H. (1985): Szenarien der geologischen Langzeit-Sicherheit: Risikoanalyse für ein Endlager für hochaktive Abfälle in der Nordschweiz. - NTB 84-26, Nagra, Baden.
- DIN 38409, Teil 7 (1979): Deutsches Einheitsverfahren für Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung - Bestimmung der Säure und Basekapazität.
- EGGER, R. (1983): Hydrogeologische und hydrochemische Ergebnisse. In: ANDRES, G. & EGGER, R. (Eds.), Untersuchungen zum Grundwasserhaushalt des Tiefenwassers der Oberen Süsswassermolasse durch Grundwasseraltersbestimmung. - Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft, München.
- ENGELHARDT, W. (1973): Sediment-Petrologie Teil III: Die Bildung von Sedimenten und Sedimentgesteinen. - Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart.
- EUROPÄISCHE GEMEINSCHAFT (1980): Richtlinie des Rates vom 15. Juli 1980 über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch. - Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaft L 229, 11-29.
- FISCHER, H. & LUTERBACHER, H.P. (1963): Das Mesozoikum der Bohrungen Courtian 1 und Altishofen 1 - *Beitr. Geol. Karte Schweiz*, NF 115.
- FLURY, F., KÜBLER, B., REY, J.-PH. & SCHINDLER, B.-A. (1983): Galerie Delémont-Bellerive. Observations géologiques et hydrogéologiques. - *Eclogae geol. Helv.*, 76/3, 507-522.

- FOURNIER, R.O. (1981): Application of Water Geochemistry to Geothermal Exploration and Reservoir Engineering. In: RYBACH, L. & MUFFLER, L.J.P. (Eds.). - Geothermal Systems: Principles and Case Histories, Wilers & Sons Ltd., 109-143.
- FREEZE, R.A. & CHERRY, J.A. (1979): Groundwater. - Prentice Hall, New Jersey.
- GASCOYNE, M. (1982): Geochemistry of the actinides and their daughters. In: IVANOVICH & HARMON, Uranium Series Disequilibrium. - Clarendon, Oxford.
- GEY, M.A. & MAIRHOFER, J. (1970): Der natürliche Carbon-14- und Tritium-Gehalt der Wässer. In: BATSCHE, H. et al., Kombinierte Karstwasseruntersuchungen im Gebiet der Donauversickerung (Baden-Württemberg) in den Jahren 1967-1969. - Steir. Beitr. z. Hydrogeologie, 22, 63-81.
- GEYER, O.F. & GWINNER, M.P. (1986): Geologie von Baden-Württemberg, 3. Aufl. - Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart.
- GOLDBRUNNER, J.E. (1988): Tiefengrundwässer im Oberösterreichischen Molassebecken und im Steirischen Becken. - Steir. Beitr. Hydrogeol. 39, 5-94.
- GROSCHOPF, R., KESSLER, G., LEIBER, J., MAUS, H., WOLF, O., SCHREINER, A. & WIMMENAUER, W. (1977): Erläuterungen zur Geologischen Karte von Freiburg im Breisgau und Umgebung 1:50'000. - Landesvermessungsamt, Stuttgart.
- GÜBELI, O. (1959): Zum Chemismus der erbohrten Mineralquellen in Eglisau. - Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing., 26/70, 9-14.
- HABERER, K. (1968): Der natürliche Strontiumgehalt in Oberflächengewässern. - Vom Wasser, 35, 100-108.
- HALDIMANN, P., NAEF, H., SCHMASSMANN, H. (1984): Fluvatile Erosions- und Akkumulationsformen als Indizien jungpleistozäner und holozäner Bewegungen in der Nordschweiz und angrenzenden Gebieten. - NTB 84-16, Nagra, Baden.
- HANTKE, R. (1954): Die obermiozäne Öhninger Fundstelle Schrotzburg (Schienenberg, Süd-Baden). - Denkschr. schweiz. natf. Ges., 80/2, 31-118.
- HANTKE, R. (1980): Die Bedeutung der als ausgestorben betrachteten Leguminosen-Gattung. *Podogonium* HEER (= *Gleditsia* L.) für die Obere Süßwassermolasse und für die Vogesen-Schüttung im Delsberger Becken (Jura). - *Eclogae geol. Helv.*, 73/3, 1031-1043.

- HARDER, H. (1974): Boron (Chapters B-0). In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/1, 5-B-1/5-0-3. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- HARTMANN, A. (1925): Die Mineral- und Heilquellen des Kantons Aargau. - Mitt. Aargauischen natf. Ges., 17, 255-320.
- HEIER, K.S. & BILLINGS, G.K. (1969a): Cesium. Adsorption by Minerals. In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/4, 55-H-1. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- HEIER, K.S. & BILLINGS, G.K. (1969b): Lithium, Adsorption Processes Controlling Concentrations in Natural Waters. In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/1, 3-H-1. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- HEM, J.D. (1969): Aluminium. In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/1, - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- HEM, J.D. (1970): Study and Interpretation of the Chemical Characteristics of Natural Water. Second Ed. - US Geol. Survey Water-Supply Paper 1473, Washington DC.
- HEM, J.D. (1977): Reactions of metal Ions at surfaces of hydrous Iron Oxide. - Geochimica et Cosmochimica Acta, 41, 527-538.
- HEM, J.D. (1985): Study and Interpretation of the Chemical Characteristics of Natural Water. - US Geol. Survey Water Supply Paper 2254, Washington DC.
- HOFMANN, F. (1976): Ueberblick über die geologische Entwicklungsgeschichte der Region Schaffhausen seit dem Ende der Jurazeit. - Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing., 42/102, 1-16.
- HOFMANN, F. & HÜBSCHER, H. (1977): Geologieführer der Region Schaffhausen. - Meier, Schaffhausen.
- HÖGL, O. (1980): Die Mineral- und Heilquellen der Schweiz. - Haupt, Bern, Stuttgart.
- HÖTZL, H. (1973): Die Hydrogeologie und Hydrochemie des Einzugsgebietes der obersten Donau. - Steir. Beitr. z. Hydrogeologie, 25, 5-102.
- HÖTZL, H. (1975): Auswertung und Interpretation hydrochemischer Daten mittels Faktorenanalyse. Z. dt. geol. Ges., 126, 121-134.
- HSÜ, K.J. (1979): Thin-skinned plate tectonics during neoalpine orogenesis. - Amer. J. Sci. 279, 353-366.

- JÄCKLI, H. & KEMPF, TH. (1980): Hydrogeologische Karte der Schweiz 1:100'000 Blatt Bodensee, Erläuterungen.
- KIMMEIER, F., PERROCHET, P., ANDREWS, R. & KIRALY, L. (1985): Simulation par modèle mathématique des écoulements souterrains entre Alpes et Forêt Noire. - NTB 84-50, Nagra, Baden.
- KIRALY, L. (1973): Notice explicative de la carte hydrogéologique du canton de Neuchâtel. - Suppl. Soc. neuchât. Sci. nat., 96.
- KIRALY, L. (1975): Rapport du l'état actuel des connaissances dans la domaine des caractères physiques des roches karstiques. In: BURGER, A. & DUBERTRET, L. (Ed.), Hydrogeology of Karstic Terrains, 53-67. - Int. Ass. Hydrogeologists, Paris.
- KIRALY, L. (1978): La notion d'unité hydrogéologique - essai de définition. Bull. Centre d'Hydrogéol. Univ. Neuchâtel, 2, 83-216.
- KIRCHHEIMER, F. (1973): Weitere Mitteilungen über das Vorkommen radioaktiver Substanzen in Süddeutschland. - Abh. geol. Landesamt Baden-Württemberg, 15, 33-125.
- KLOTS, E. & BENSON, B.B. (1963): Solubilities of Nitrogen, Oxygen and Argon in Distilled Water - J. mar. Res., 21, 48-59.
- KORITING, S. (1978): Solubilities of Compounds which Control the Concentration of Phosphorus in Natural Waters; Adsorption Processes. In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/2, 15-H-1/6. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- KRAINOV, S.R. & PETROVA, N.G. (1979): Fluorine-bearing ground waters as a result of the interaction in the system "Water-Rock". In: Hydrogeochemistry of mineralized waters, Conference of Cieplice Spa (Poland) 1978, Proceedings, 109-115. - Geol. Inst. Warsaw.
- KULLIN, M. & SCHMASSMANN, H. (in Vorb.): Isotopic Composition of Modern Recharge. In: PEARSON et al. (Eds.), Isotope Hydrogeology of Northern Switzerland. - NTB 88-01, Nagra, Baden.
- KÜPFER, TH., HUFSCHMIED, P. & PASQUIER, F. (1989): Hydraulische Tests in Tiefbohrungen der Nagra - Nagra informiert 3+4/89, 7-23.
- KUSSMAUL, H. & ANTONSEN, O. (1985): Hydrochemische Labormethoden für das Nagra-Untersuchungsprogramm. - NTB 85-04, Nagra, Baden.

- LANGMUIR, D. (1971): The geochemistry of some carbonate groundwaters in central Pennsylvania. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 35, 1023-1045.
- LEENHEER, J.A., MALCOLM, R.L., MCKINLEY, P.W. & ECCLES, L.A. (1974): Occurrence of Dissolved Organic Carbon in Selected Ground-Water Samples in the United States. - *Jour. Research. U.S. Geol. Survey*, 2, No 3, 3H-369.
- LEHMANN, B.E. & LOOSLI, H.H. (1989): Transfer of underground produced ^{37}Ar , ^{39}Ar and ^{40}Ar from rock into water, 429-432. In: MILES, D.L. (Ed.), *Proceed. 6th Intern. Symp. Water-Rock Interaction*, Malvern. - Balkema, Rotterdam, Brookfields.
- LEHMANN, B.E., LOOSLI, H.H., BALDERER, W., FONTES, J.CH., MICHELOT, J.L. & SOREAU, S. (in Vorb.): Chlorine-36. In: PEARSON et al. (Eds.), *Isotope Hydrogeology of Northern Switzerland*. - NTB 88-01, Nagra, Baden.
- LEMCKE, K. (1973): Zur nachpermischen Geschichte des nördlichen Alpenvorlandes. - *Geologica Bavarica*, 69, 5-48.
- LEMCKE, K. (1976): Uebertiefe Grundwässer im süddeutschen Alpenvorland. - *Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing.*, 42/103, 9-18.
- LEMCKE, K. (1979a): Gespanntes Malmkarstwasser im Untergrund des süddeutschen Alpenlandes. In: KELLER, R. (Ed.), *Hydrogeologischer Atlas der Bundesrepublik Deutschland. Textband*, 240-245. - Deutsche Forschungsgemeinschaft, Bonn.
- LEMCKE, K. (1979b): Dreissig Jahre Oel- und Gassuche im süddeutschen Alpenvorland. - *Jber. Mitt. oberrhein. geol. Ver.*, N.F. 61, 305-319.
- LEMCKE, K. (1981): Das heutige Bild des deutschen Alpenvorlandes nach drei Jahrzehnten Oel- und Gasexploration. - *Eclogae geol. Helv.*, 74/1, 1-18.
- LEMCKE, K. (1987): Zur Frage der alten Verkarstung des Malms im Untergrund des deutschen Molassebeckens und dessen Nordrand. - *Bull. Ver. schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing.*, 53/125, 33-46.
- LEMCKE, K. (1988): *Geologie von Bayern - 1. Das bayerische Alpenvorland vor der Eiszeit*. - Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart.
- LEMCKE, K. & TUNN, W. (1956): Tiefenwässer in der süddeutschen Molasse und in ihrer verkarsteten Malmunterlage. - *Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing.*, 23/64, 35-56, Basel.

- LEMCKE, K. & WAGNER, R. (1961): Zur Kenntnis des vortertiären Untergrundes im Bodenseegebiet. - Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing., 27/73, 9-14.
- LEMCKE, K., BÜCHI, U.P. & WIENER, G. (1968): Einige Ergebnisse der Erdölexploration auf die mittelländische Molasse in der Zentralschweiz. - Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing., 35/87, 15-34.
- LEUTWEIN, F. (1971): Solubilities of Compounds which Control Selenium Concentrations in Natural Waters; Valence States in Natural Environments; Adsorption. In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/3. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- LOHR, J. (1967): Die seismischen Geschwindigkeiten in der Ostschweiz. - Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing., 34/85, 29-38.
- LOOSLI, H.H., LEHMANN, B.E. & DÄPPEN, G. (in Vorb.): Dating by Radionuclides. In: PEARSON et al. (Eds.), Isotope Hydrogeology of Northern Switzerland. - NTB 88-01, Nagra, Baden.
- MASON, B. & MOORE, B.M. (1985): Grundzüge der Geochemie - Enke, Stuttgart.
- MATHEY, B. & SIMEONI, G. (1971): Estimation de la perméabilité en terrains calcaires par essais d'injection d'eau. Actes congrès d'Hydrologie en Pays Calcaires. - Besançon.
- MATTER, A. (1980): Schwarzenberg-Blatten-Wolhusen-Zell-St. Urban-Berne. In: MATTER, A., HOMEWOOD, P., CARON, C., RIGASSI, D., VAN STUIJENBERG, J., WEIDMANN, M. & WINKLER, W.: Excursion No. V, Flysch and Molasse of Western and Central Switzerland. Geology of Switzerland. A Guide-Book, Part B: Geological Excursion. - Wepf, Basel.
- MATTER, A., PETERS, T.J., ISENSCHMID, CH., BLÄSI & ZIEGLER, H.J. (1987): Sondierbohrung Riniken - Geologie. - NTB 86-02, Nagra, Baden.
- MATTER, A., PETERS, T.J., BLÄSI, H.-R., MEYER, J., ISCHI, H. & MEYER, CH. (1988a): Sondierbohrung Weiach - Geologie. - NTB 86-01, Nagra, Baden.
- MATTER, A., PETERS, T.J., BLÄSI, H.-R., SCHENKER, F. & WEISS, H.-P. (1988b): Sondierbohrung Schafisheim - Geologie. - NTB 86-03, Nagra, Baden.
- MATTHESS, G. (1973): Die Beschaffenheit des Grundwassers. - Lehrbuch der Hydrogeologie Bd. 2. - Bornträger, Berlin, Stuttgart.

- MacPHERSON, G.L. (1989): Sources of lithium and barium in Gulf of Mexico Basin formation waters. In: MILES, D.L. (Ed.), Proceed. Symp. Water-Rock Interaction WRI-6, 453-456. - Balkema, Rotterdam, Brookfields.
- MEYER-AHRENS (1867): Die Heilquellen und Kurorte der Schweiz und einiger der Schweiz zunächst angrenzenden Gegenden der Nachbarstaaten. Orell-Füssli Verlag, Zürich.
- MEYER VON KNONAU, G. (1844): Der Kanton Zürich. Historisch-Geographisch-statistisches Gemälde der Schweiz, 1. Bd., 1. Teil- - Huber, St. Gallen, Bern.
- MILDE, G., HAGENDORF, U. & TETZLAFF, U. (1969): Arbeitsmethodische Beiträge zur Paläohydrogeologie. - Z. angew. Geol., 15/7, 368-373.
- MOSER, H. & RAUERT, W. (1980): Isotopenmethoden in der Hydrologie. - Bornträger, Berlin, Stuttgart.
- MOTOR COLUMBUS INGENIEURUNTERNEHMUNG AG (1981): Grundlagen für Schutz und Bewirtschaftung der Grundwässer des Kantons Bern. Hydrogeologie Laufental. - Wasser- und Energiewirtschaftsamt des Kantons Bern, Bern.
- MÜLLER, W.H., HUBER, M., ISLER, A., KLEBOTH, P. (1984): Erläuterungen zur "Geologischen Karte der zentralen Nordschweiz 1:100'000". - NTB 84-25, Nagra, Baden.
- MURDY, J., KIRALY, L. & MÜLLER, I. (1979): Analyse multivariée du chimisme de quelques sources karstiques du Jura Suisse et Franc-Comtois. - Bull. Centre Hydrogéol. Univ. Neuchâtel, 3, 1-21.
- NAEF, H., DIEBOLD, P., SCHLANKE, S. (1985): Sedimentation und Tektonik im Tertiär der Nordschweiz. - NTB 85-14, Nagra, Baden.
- NAGRA (1985a): Sondierbohrung Böttstein - Untersuchungsbericht. - NTB 85-01, Nagra, Baden.
- NAGRA (1985b): Projekt Gewähr 1985: Endlager für hochaktive Abfälle: Das System der Sicherheitsbarrieren. - Projektbericht. - NGB 85-04, Nagra, Baden.
- NAGRA (1988): Sedimentstudie - Zwischenbericht 1988: Möglichkeiten zur Endlagerung langlebiger radioaktiver Abfälle in den Sedimenten der Schweiz. - NTB 88-25, Nagra, Baden.
- NAGRA (1989): Sondierbohrung Weiach - Untersuchungsbericht. - NTB 88-08, Nagra, Baden.
- NILSSON, T. (1983): The Pleistocene. - Enke, Stuttgart.

- NUSSBERGER, G., CADISCH, J., KELLER, A., NUSSBERGER, A. & WERDER, J. (1937): Die Mineral- und Heilquellen der Schweiz. - Zimmermann, Bern.
- PALCIALISKAS, V.V. & DOMENICO, P.A. (1976): Solution chemistry, mass transfer, and the approach to chemical equilibrium in porous carbonate rocks and sediments. - Geol. Soc. Amer. Bull., 87, 207-214.
- PARKHURST, D.L., THORSTENSON, D.C. & PLUMMER, L.N. (1980): PHREEQE - A computer program for geochemical calculations. - U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations, 80-96, 210 p.
- PASQUIER, F. (1978): Les conditions hydrogéologiques du stockage souterrain d'eau chaude en Suisse. - Bull. Centre. Hydrogéol. Univ. Neuchâtel, 2, 63-81.
- PEARSON, F.J. (1985): Sondierbohrung Böttstein - Results of Hydrochemical Investigations: Analysis and Interpretation. - NTB 85-05, Nagra, Baden.
- PEARSON, F.J. (in Vorb.): Carbonate Isotopes. In: PEARSON et al. (Eds.), Isotope Hydrogeology of Northern Switzerland. - NTB 88-01, Nagra, Baden.
- PEARSON, F.J., LOLCAMA, J.L. SCHOLTIS, A. (1989): Chemistry of waters in the Böttstein, Weiach, Riniken, Schafisheim, Kaisten and Leuggern boreholes. - NTB 86-19, Nagra, Baden.
- PEARSON, F.J., BALDERER, W., LOOSLI, H.H., LEHMANN, B.E., MATTER, A., PETERS, T.J., SCHMASSMANN, H. & GAUTSCHI, A. (in Vorb.): Isotope Hydrogeology of Northern Switzerland. - NTB 88-01, Nagra, Baden.
- PETERS, T.J., MATTER, A., BLÄSI, H.-R. & GAUTSCHI, A. (1986): Sondierbohrung Böttstein - Geologie, - NTB 85-02, Nagra, Baden.
- PETERS, T.J., MATTER, A., ISENSCHMID, CH., BLÄSI, H.-R., MEYER, J., & ZIEGLER, H.-J. (1988): Sondierbohrung Kaisten - Geologie. - NTB 86-04, Nagra, Baden.
- PETERS, T.J., MATTER, A., BLÄSI, H.-R., ISENSCHMID, CH., KLEBOTH, P., MEYER, CH. & MEYER, J. (1989): Sondierbohrung Leuggern - Geologie. - NTB 86-05, Nagra, Baden.
- PLUMMER, L.N. et al. (1976): WATEQF: A fortran IV Version of WATEQ, a computer program for calculating chemical equilibrium of natural waters. Users guide. - U.S. Geol. Surv. Water Resours. Invest., 76-13.

- PUCHELT, H. (1972): Solubilities of Compounds which Control Concentrations of Barium in Natural Waters (I), Adsorption Processes (II). In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/4, 56-H-3. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- RAUBER, D. (1987): Edelgase im Grundwasser. - Diss. d. Universität Bern.
- RAUBER, D., LOOSLI, H.H. & SCHMASSMANN, H. (in Vorb.): Noble Gases in Groundwater. In: PEARSON et al. (Eds.), Isotope Hydrogeology of Northern Switzerland. - NTB 88-01, Nagra, Baden.
- RYBACH, L., BÜCHI, U.P., BODMER, PH., GRIESSER, J.-C., ISRANG, L., KAPPELER, S., RELLSTAB, W., SCHLANKE, S., WEISS, H.P. (1981): Geothermische Datensynthese der Schweiz. - Schriftreihe des Bundesamtes für Energiewirtschaft, 26.
- SAFE DRINKING WATER COMMITTEE, Advisory Center on Toxicology, Assembly of Life Sciences, National Research Council (1977): Drinking Water and Health. - National Academy of Sciences, Washington DC.
- SCHAD, A., SÖLL, H. & WITTMANN, O. (1955): Ergebnisse von Bohrungen im Tertiärhügelland zwischen Müllheim und Istein im badischen Oberland. - Jh. geol. Landesamt Baden-Württemberg, 1, 300-360.
- SCHMASSMANN, H. (1977): Die Mineral- und Thermalwässer von Bad Liestorf. - Mitt. natf. Ges. Solothurn, 27, 150-290.
- SCHMASSMANN, H. (1980): Geologie und Genese der schweizerischen Mineral- und Thermalwässer. In: HÖGL, O. (Ed.), Die Mineral- und Heilquellen der Schweiz. - Haupt, Bern u. Stuttgart, 47-100.
- SCHMASSMANN, H. (1987): Neue Erkenntnisse zur Beschaffenheit der Tiefengrundwässer der Nordschweiz. - Eclogae geol. Helv., 80/2, 569-578.
- SCHMASSMANN, H., BALDERER, W., KANZ, W., PEKDEGER, A. (1984): Beschaffenheit der Tiefengrundwässer in der zentralen Nordschweiz und angrenzenden Gebieten. - NTB 84-21, Nagra, Baden.
- SCHOELLER, H. (1969): Acide carbonique des eaux souterraines. - Bull. B.R.G.M. Sect. III, no 1-1969, 1-32.
- SCHOTTERER, U. (1980): Tritium- und ¹⁸O-Variationen einiger Quellen im Schweizer Jura. - Eclogae geol. Helv., 73/3, 909-913.

- SCHOTTERER, U. (1981): Tritium- und ^{18}O -Messungen an tiefen Karstwässern im Laufental. In: Grundlagen für Schutz und Bewirtschaftung der Grundwasser des Kantons Bern. Hydrogeologie Laufental, Anhang 1 (142-147). - Wasser- u. Energiewirtschaftsamt des Kantons Bern, Bern.
- SCHREINER, A. (1968): Geologische Ergebnisse der Thermalwasserbohrung Singen 1966, 195-204. - Hegau Heft 1/2-1967.
- SCHREINER, A. (1969): Zur Geschichte des Ueberlinger Sees. - GWF (Wasser-Abwasser) 110, 811-814.
- SCHREINER, A. (1973): Erläuterungen zu Blatt 8219 Singen, Geologische Karte von Baden-Württemberg 1:25'000. - Stuttgart.
- SCHREINER, A. (1974): Erläuterungen zur Geologischen Karte des Landkreises Konstanz mit Umgebung 1:50'000. - Stuttgart.
- SCHREINER, A. (1976): Hegau und westlicher Bodensee. - Sammlung geologischer Führer, 62, Bornträger, Berlin, Stuttgart.
- SCHREINER, A. (1978): Geologische Karte von Baden-Württemberg 1:25'000. Erläuterungen zu Blatt 8119 Eigeltingen.
- SCHWARZBACH, M. (1974): Das Klima der Vorzeit, 3. Auflage. - Enke, Stuttgart.
- SCHWARZBACH, M. (1988): Das Klima der Vorzeit, 4. Auflage. - Enke, Stuttgart.
- Schweizerisches Lebensmittelbuch (1985): Kapitel 27A Trinkwasser. Neuauflage. - Bern.
- SIMEONI, G.P. (1976): Etude de la perméabilité des formations calcaires du Jura neuchâtelais. - Bull. Centr. Univ. Neuchâtel, 1, 9-18.
- SIMLER, L. (1972): L'Hydrogéologie du département du Haut-Rhin. - Sci. Géol. Bull., 25, 2-3, 173-184, Strasbourg.
- SMEDLEY, P.L. (1989): Alkali metal enrichments in groundwaters from the Carnmenellis area, Cornwall, 647-650. In: MILES, D.L. (Ed.), Proceed. 6th Intern. Symp. Water-Rock Interaction, Malvern. - Balkema, Rotterdam, Brookfields.
- SPICHER, A. (1972): Geotektonik, Profile. In: Atlas der Schweiz, 5. - Eidg. Landestopographie, Wabern-Bern.
- SPICHER, A. (1980a): Geologische Karte der Schweiz 1:500'000, 2. Ausgabe. - Schweiz. Geol. Kommission.

- SPICHER, A. (1980b): Tektonische Karte der Schweiz 1:500'000, 2. Ausgabe. - Schweiz. Geol. Kommission.
- SPICHER, A. (1980c): Tectonic profiles through Switzerland, 1:500'000. In: TRÜMPY, R., An Outline of the Geology of Switzerland. - Geology of Switzerland, A Guide-Book, Part A. - Wepf, Basel, New York.
- STICHLER, W., RAUERT, W., WEISE, S., WOLF, M., KOSCHEL, G., STIER, P., PRESTEL, R., HEDIN, K., BERTLEFF, B. (1987): Isotopenhydrologische und hydrochemische Untersuchungen zur Erkundung des Fliesssystems im Malmkarstaquifer des süddeutschen Alpenvorlandes. - Z.d.t. geol. Ges. 138, 387-398, Hannover.
- SPRECHER, C., MÜLLER, W.H. (1986): Geophysikalisches Untersuchungsprogramm Nordschweiz. Reflexionsseismik 82. - NTB 84-15, Nagra, Baden.
- STOBER, I (1988): Geohydraulische Ergebnisse. In: BERTLEFF, B., KOZIOROWSKI, G., LEIBER, J., OHMERT, W., PRESTEL, R., STOBER, I., STRAYLE, G., VILLINGER, E. & WERNER, J. (1988), Ergebnisse der Hydrogeothermiebohrungen in Baden-Württemberg. - Jh. geol. Landesamt Baden-Württemberg, 30, 27-116.
- STRAYLE, G., VILLINGER, E. & WERNER, J. (1982): Erfahrungen bei Geothermiebohrungen in Oberschwaben. - Ges. SIA Dokumentation 59, 95-103. - Mitt. Schweiz. Ges. Boden- und Felsmechanik, 107, 95-103.
- STUMM, W. & MORGAN, J.J. (1981): Aquatic Chemistry, 2nd. Ed. - Wiley, New York.
- TRIPET, J.-P. (1973): Etude hydrogéologique du bassin de la source de l'Areuse (Jura neuchâtelois). - Mat. Géol. Suisse - Hydrogéologie, 21.
- TRIPET, J.-P. (1984): Etude des propriétés hydrauliques d'aquifères karstiques par essais et mesures dans des forages (Bassin de Laufon, Jura Suisse). - Bull. Centre Hydrogéol. Univ. Neuchâtel, 5, 39-68.
- TRUEDELLE, A.H. (1976): Summary of Section III. Geochemical Techniques in Exploration. - Proc. 2nd Symp. on Dev. of Geothermal Resources, San Francisco 1975.
- TRÜMPY, R. (1961): Malm. In: BÜCHI et al., Geologische Ergebnisse der Bohrung Künsnacht 1 - Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing., 28/74, 11-12.
- TRÜMPY, R. (1980): An Outline of the Geology of Switzerland. - Geology of Switzerland, A Guide-Book, Part A. - Wepf, Basel, New York.

- TRÜMPY, R. (1985): Die Plattentektonik und die Entstehung der Alpen. - Njbl. natf. Ges. Zürich 187.
- TUREKIAN, K. (1969): The Oceans, Streams and Atmosphere. In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry Vol. I. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- UDLUFT, P. (1975): Das tiefere Grundwasser zwischen Vindelizischem Rücken und Alpenrand. - Geol. Jb. C, 11, 3-29.
- UDLUFT, P. (1981): Die Süss-Salzwassergrenze Süddeutschlands als Ausdruck der Grundwasserdynamik.- Z. dt. geol. Ges., 132, 623-636.
- USDOWSKI, H.E. (1970): Solubilities of Magnesium Compounds which Control Concentrations in Natural Waters, Adsorption Processes. In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/I, 12-H-1. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- VILLINGER, E. (1972): Seichter Karst und Tiefer Karst in der Schwäbischen Alb. - Geol. Jb. C, 2, 153-188.
- VILLINGER, E. (1977): Ueber Potentialverteilung und Strömungssysteme im Karstwasser der Schwäbischen Alb (Oberer Jura, SW-Deutschland). - Geol. Jb. C, 18, 3-93, Taf. 1-2.
- VILLINGER, E. (1982): Hydrogeologische Aspekte zur geothermischen Anomalie im Gebiet Urach-Boll am Nordrand der Schwäbischen Alb (SW-Deutschland). - Geol. Jb. C, 32, 3-41.
- VILLINGER, E. (1986): Untersuchungen zur Flussgeschichte von Aare-Donau/Alpenrhein und zur Entwicklung des Malmkarsts in Südwestdeutschland. - Jh. geol. Landesamt Baden-Württemberg, 28, 295-362.
- VILLINGER, E. (1988): Bemerkungen zur Verkarstung des Malms unter dem westlichen süddeutschen Molassebecken. - Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing., 54/127, 41-59.
- VOLLMAYR, T. (1971): Zur Geologie des Feldes Pfullendorf-Ostrach. - Bull. Ver. Schweiz. Petrol.-Geol. u. -Ing., 37/92, 1-20.
- WALGENWITZ, F., MAGET, PH., TIETZE, R. & NEEB, I. (1979): Synthèse géothermique du fossé rhénan supérieur. - Strasbourg, Freiburg.
- WEBER, H.P., SATTEL, G., SPRECHER, C. (1986): Sondierbohrungen Weiach, Riniken, Schafisheim, Kaisten, Leuggern. Geophysikalische Daten. - NTB 85-50, Nagra, Baden.

- WEDEPOHL, K.H. (1972): Solubilities of Compounds which Control Concentrations of Zinc in Natural Waters. Adsorption Processes. In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/3, 30-H-1/5. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- WEDEPOHL, K.H. (1974): Copper Abundance in Rock-Forming Minerals, Phase Equilibria, Copper Minerals. In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/3, 29-D-1/16, 29-H-1/4. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- WEDEPOHL, K.H. (1978): Manganese - Abundance in the Atmosphere and in Natural Waters. In: WEDEPOHL, K.H. (Ed.), Handbook of Geochemistry, II/3, 25-I-8. - Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- WEISE, S., WOLF, M., FRITZ, P., RAUERT, W., STICHLER, W., PREISEL, R. & STUTE, M. (1989): Isotopenhydrologische Untersuchungen im Süddeutschen Molassebecken. Abschlussbericht. - Neuherberg März 1989 (Manuskript).
- WERNER, J. (1978): Die Thermalwasserbohrung Saulgau (Württemberg). - Abh. geol. Landesamt Baden-Württemberg, 8, 129-164.
- WEXSTEEN, P. (1986): Relations entre le chimisme et l'hydrogramme de la source de l'Areuse (Jura Neuchâtelois, Suisse). - Bull. Centre Hydrogéol. Univ. Neuchâtel, 6, 7-25.
- WHITE, D.E. (1965): Saline Waters of Sedimentary Rocks. - Semicentennial Commemorative Volume, Memoir 4, Fluids in Subsurface Environments, 342-366. - American Association of Petroleum Geologists, Tulsa, Oklahoma, USA.
- WIMMENAUER, W. (1959): Die kontaktmetamorphen Gesteine und Karbonatite. In: Erklärungen zur geologischen Exkursionskarte des Kaiserstuhls 1:25'000.
- WHO (1981): Manganese - Environmental Health Criteria 17, Int. Programme on Chemical Safety, Geneva.
- WITTWER, C. (1986): Probenahmen und chemische Analysen von Grundwässern aus den Sondierbohrungen. - NTB 85-49, Nagra, Baden.
- YURTSEVER, Y. & GAT, J.R. (1981): Atmospheric Waters. In: Stable Isotope Hydrology. - IAEA Tech. Rep. Series, 210, 103-142.
- ZIEGLER, B. (1986): Der schwäbische Lindwurm: Funde aus der Urzeit. - Theiss, Stuttgart.

ANHANG

Tabelle 1:
Dissoziierte Hauptbestandteile

			Na ⁺	K ⁺	Na ⁺ +K ⁺	Mg ⁺⁺	Ca ⁺⁺	Ca ⁺⁺ +Mg ⁺⁺	Cl ⁻	SO ₄ ⁻	HCO ₃ ⁻ +CO ₃ ⁻	HCO ₃ ⁻ PSI	CO ₂ aus Einzelwerten der chem. Analysen
			mol(eq)/m ³	mol(eq)/m ³	mol(eq)/m ³	mol(eq)/m ³	mol(eq)/m ³	mol(eq)/m ³	mol(eq)/m ³	mol(eq)/m ³	mol(eq)/m ³	mol/m ³	mol/m ³
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER													
OSM													
42	Schwarzenberg	21.07.1982	0,135	0,020	0,155	1,621	4,566	6,187	0,076	0,468	5,785	6,12	6,171
135	Stallikon (Quelle)	18.11.1981	0,178	0,028	0,206	2,715	5,529	8,254	0,118	1,645	6,457	-	7,025
137	Stallikon	18.11.1981	0,365	0,026	0,391	2,301	4,591	6,894	0,113	0,937	5,802	-	5,938
USM													
130	Gränichen	26.11.1981	0,311	0,266	0,577	0,771	4,067	4,838	0,274	0,658	4,376	4,68	4,967
33	Fulenbach	14.07.1981	0,165	0,014	0,179	0,662	3,708	4,370	0,137	0,264	3,884	4,49	4,248
32	Attisholz	09.09.1981	0,261	0,013	0,274	0,650	4,666	5,316	0,248	0,548	4,884	7,68	5,747
Malm													
7	Malleray	09.09.1981	0,004	0,010	0,015	0,650	2,380	3,030	0,042	0,062	2,884	3,01	3,202
99	Welschingen	27.07.1981	0,679	0,107	0,786	1,119	6,437	7,556	1,413	0,493	5,998	6,77	6,384
80	Durlinsdorf	22.07.1982	0,121	0,029	0,150	0,327	5,744	6,071	0,141	0,212	5,818	6,94	6,861
Mischwässer													
30	Wildeggen	21.07.1981	3,515	0,141	3,656	1,728	1,591	6,419	1,413	1,401	6,998	7,89	7,410
85	Steinstadt	18.08.1981	9,395	0,166	9,561	3,784	8,623	12,407	4,993	10,422	6,556	1,46	7,919
501B	Reichenau	21.03.1983	4,850	0,033	4,883	0,851	1,850	2,701	0,490	1,951	4,799	-	4,949
ERDALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER													
Vulkanit (Oberrheingraben)													
96	Oberbergen (Badquelle)	Mittel(2) 1981-1984	0,474±0,013	0,111±0,004	0,585±0,017	1,390±0,011	3,187±0,032	4,577±0,026	0,103±0,035	0,809±0,004	4,286±0,058	4,55±0,01	4,596
181	Oberbergen (Tiefbohrung)	14.12.1970	0,609	0,130	0,739	1,900	3,598	5,498	0,161	1,062	5,000	-	5,227
OMM													
170	Dettenberg	02.07.1986	0,870	0,100	0,970	2,468	3,693	6,161	<0,028	0,833	6,392	-	6,778
502B	Sauldorf	12.10.1982	0,147	0,015	0,162	1,710	3,330	5,040	0,080	0,234	4,920	-	5,145
USM (Oberrheingraben)													
5	Schönenbuch	Mittel(2) 1981-1984	0,194±0,028	0,023±0,011	0,216±0,038	4,019±0,006	3,391±0,011	7,409±0,017	0,081±0,002	0,116±0,016	7,359±0,023	8,09±0,11	8,392
Malm													
149	Beuren	28.07.1981	0,337	0,046	0,383	2,048	4,251	6,299	0,265	0,227	6,031	6,62	6,599
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER													
OSM													
145	Milchbuck Tm 385	27.02.1980	7,873	0,032	7,905	0,136	0,269	0,605	0,104	0,406	6,441	-	-
146	Milchbuck Tm 930	27.02.1980	9,134	0,060	9,194	0,222	0,205	0,427	0,268	0,814	7,309	-	-
OMM													
98	Konstanz	29.07.1981	8,178	0,032	8,210	0,049	0,085	0,134	0,347	1,093	6,904	6,60	5,803
98B	Konstanz	21.03.1983	7,699	0,028	7,727	0,040	0,140	0,180	0,370	1,063	5,340	-	5,339
128	Mainau	29.07.1981	12,266	0,043	12,309	0,082	0,135	0,217	0,117	2,848	9,198	8,74	8,598
128B	Mainau	21.03.1983	11,320	0,036	11,356	0,280	0,220	0,500	0,140	2,729	5,680	-	5,680
508B	Birnau	22.03.1983	4,315	0,028	4,343	0,179	0,220	0,399	0,340	0,369	3,420	-	3,420
509B	Ravensburg	07.07.1983	7,090	0,205	7,295	0,058	0,160	0,218	0,010	0,396	7,129	-	7,129
1	Aqui	21.07.1981	14,311	0,044	14,355	0,074	0,120	0,194	4,482	3,027	7,104	6,68	5,903
Malm													
97	Singen	28.07.1981	18,356	0,134	18,490	0,378	0,928	1,306	3,224	9,531	6,851	6,67	6,942
97B	Singen	21.03.1983	17,199	0,123	17,322	1,060	0,960	2,020	3,220	9,967	5,480	-	5,480
127	Lottstetten	Mittel(6) 1981-1985	10,591±0,130	0,254±0,006	10,845±0,134	0,722±0,062	0,754±0,013	1,476±0,053	1,558±0,057	1,753±0,024	8,864±0,019	9,01±0,15	9,250
Dogger													
77	Neuwiller	07.09.1981	8,830	0,205	9,035	0,452	1,168	1,620	2,285	1,651	7,178	7,60	8,619
177	Michelbach 1015-1059 m	08.05.1971	7,830	0,217	8,047	1,029	1,717	3,346	2,189	3,373	6,165	-	-
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGUNDWÄSSER													
OMM													
2	Tiefenbrunnen	Mittel(2) 1981-1982	52,241±0,062	0,178±0,001	52,419±0,063	1,695±0,012	2,016±0,007	3,711±0,019	32,860±0,199	18,644±0,065	4,876±0,035	4,83±0,04	5,159
USM (-Malm)													
141	Eglisau 1	24.07.1981	34,668	0,069	34,737	0,897	0,928	1,825	23,358	8,528	4,750	4,53	<4,350
142	Eglisau 2	Mittel(6) 1982-1985	43,295±1,294	0,079±0,004	43,374±1,298	0,979±0,055	1,269±0,096	2,248±0,151	36,969±1,410	4,539±0,135	4,111±0,104	3,86±0,10	<4,059
143	Eglisau 3	Mittel(6) 1981-1985	62,412±3,662	0,114±0,008	62,525±3,670	1,769±0,166	2,334±0,326	4,102±0,492	48,886±11,390	5,159±1,494	3,923±1,052	3,65±0,52	<3,860
144	Eglisau 4	Mittel(6) 1981-1985	54,379±10,699	0,098±0,020	54,478±10,719	1,497±0,441	1,881±0,554	3,379±0,995	56,732±3,804	6,561±0,504	3,330±0,226	3,09±0,20	<3,359
304	Schaffisheim 553-563 m	Mittel(2) 20.12.1983	131,907±0,153	0,489±0,015	132,395±0,168	5,603±0,081	10,419±0,127	16,022±0,209	146,913±0,618	0,098	2,205±0,569	-	2,293
Malm													
302	Weiach 242.9-267.0 m	Mittel(3) 5./6.03.1983	98,957±3,262	0,748±0,022	99,705±3,284	7,451±0,465	7,392±0,228	14,843±0,693	107,011±1,382	0,672±0,417	7,637±1,068	-	9,398
30	Wildeggen	1869	166,532	0,077	166,629	34,057	33,932	67,989	206,961	25,727	1,165	-	-
79	Michelbach 742-840 m	09.05.1971	60,897	1,330	62,227	9,131	28,842	37,973	39,940	52,050	12,197	-	-

Tabelle 2:
Physikalisch-chemische Parameter und Ionensummen

			pH	Redox- spannung mV	t °C	Leitfähigkeit bei 20°C µS/cm	Σ Kationen mol(eq)/m³	Σ Anionen mol(eq)/m³
			-log(H ⁺)					
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER								
OSM								
42	Schwarzenberg	21.07.1982	7,20	+520	7,4	486	6,356	6,378
135	Stallikon (Quelle)	18.11.1981	7,45	-	8,0*	631	<8,493	<8,277
137	Stallikon	18.11.1981	7,85	-	8,0*	556	<7,312	7,165
USM								
130	Gränichen	26.11.1981	7,51	+360	13,7	439	5,432	5,472
33	Fulenbach	14.07.1981	7,00	+380	13,4	362	4,558	4,567
32	Attisholz	09.09.1981	7,15	+430	14,6	428	5,610	5,788
Malm								
7	Malleray	09.09.1981	7,38	+390	9,7	238	<3,226	<3,250
99	Welschingen	27.07.1981	7,35	+380	10,3	662	8,361	8,420
80	Durlinsdorf	22.07.1982	6,98	+360	16,2	491	6,221	6,243
Mischwässer								
30	Wildeggen	21.07.1981	6,67	+250	12,2	741	10,055	10,068
85	Steinenstadt	18.08.1981	7,29	+300	13,8	1714	22,255	22,732
501B	Reichenau	21.03.1983	7,90	-	12,8	-	7,584	7,481
ERDALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER								
Vulkanit (Oberrheingraben)								
96	Oberbergen (Badquelle)	Mittel(2) 1981-1984	7,47±0,24	+370±28	19,9±0,9	398±3	5,227±0,023	5,247±0,018
181	Oberbergen (Tiefbohrung)	14.12.1970	7,6	-	19,5	-	6,257	6,223
OMM								
170	Dettenberg	02.07.1986	7,80	+360	13,0	540	<7,189	<7,270
502B	Sauldorf	12.10.1982	7,50	-	7,9	-	5,210	5,256
USM (Oberrheingraben)								
5	Schönenbuch	Mittel(2) 1981-1984	7,25±0,21	+285±78	12,7±0,5	553±15	7,641±0,014	7,606±0,038
Malm								
149	Beuren	28.07.1981	7,37	+330	12,7	493	6,713	6,711
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER								
OSM								
145	Milchbuck Tm 385	27.02.1980	8,2	-	11,8	557	8,516	6,962
146	Milchbuck Tm 930	27.02.1980	8,15	-	12,2	676	9,633	8,401
OMM								
98	Konstanz	29.07.1981	8,88	+290	26,1	629	8,376	8,409
98B	Konstanz	21.03.1983	8,82	+250	25,5	-	7,908	6,775
128	Mainau	29.07.1981	8,95	+250	26,0*	1094	12,613	12,699
128B	Mainau	21.03.1983	8,50	-	26,0*	-	11,880	8,551
508B	Birna	22.03.1983	8,87	-	15,8	-	4,742	4,131
509B	Ravensburg	07.07.1983	9,26	-	27,0	-	7,516	7,564
1	Aqui	21.07.1981	8,76	+320	23,0	1182	14,586	14,760
Malm								
97	Singen	28.07.1981	7,13	+50	30,0*	1585	19,901	19,874
97B	Singen	21.03.1983	8,11	-	30,0*	-	19,399	18,668
127	Lottstetten	Mittel(6) 1981-1985	7,82±0,15	-13±41	20,3±0,3	967±19	12,445±0,100	12,457±0,067
Dogger								
77	Neuwiller	07.09.1981	7,20	-60	36,7	780	10,877	11,327
177	Michelbach 1015-1059 m	08.05.1971	-	-	46,0	796	11,192	11,811
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGUNDWÄSSER								
OMM								
2	Tiefenbrunnen	Mittel(2) 1981-1982	7,89±0,06	-15±16,1	24,6±1,1	4887±367	56,379±0,071	56,576±0,057
USM(-Malm)								
141	Eglisau 1	24.07.1981	8,47	-80	12,3	3250	36,675	36,767
142	Eglisau 2	Mittel(6) 1982-1985	8,35±0,09	+92±40	15,3±0,3	4150±116	45,759±1,232	45,774±1,285
143	Eglisau 3	Mittel(6) 1981-1985	8,15±0,12	+47±38	15,9±0,2	5815±388	68,024±3,510	67,958±3,504
144	Eglisau 4	Mittel(6) 1981-1985	8,31±0,23	+50±60	16,7±0,8	5045±1020	58,035±10,727	58,133±10,774
304	Schafisheim 553-563 m	Mittel(2) 20.12.1983	8,09±0,41	-150	34,0*	13740±45	149,458±0,043	149,427±0,165
Malm								
302	Welach 242.9-267.0 m	Mittel(3) 5./6.03.1983	7,26±0,08	+90	33,0*	10790±203	115,291±2,212	115,741±2,224
30	Wildeggen	1869	-	-	11,2	-	234,628	234,120
79	Michelbach 742-840 m	09.05.1971	-	-	36,0	7746	100,200	104,299

*) geschätzte oder gemessene Aquifer-Temperatur

Tabelle 3:
Dissoziierte Nebenbestandteile (Kationen)

			Li ⁺ mmol(eq)/m ³	NH ₄ ⁺ mmol(eq)/m ³	Sr ²⁺ mmol(eq)/m ³	Ba ²⁺ mmol(eq)/m ³	Mn ²⁺ mmol(eq)/m ³	Fe ²⁺ mmol(eq)/m ³	Ni ²⁺ mmol(eq)/m ³	Cu ²⁺ mmol(eq)/m ³	Zn ²⁺ mmol(eq)/m ³	Pb ²⁺ mmol/(eq)m ³	Fe total* mmol(eq)/m ³
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER													
OSM													
42	Schwarzenberg	21.07.1982	<1,4	<1,1	13,0	1,09	<0,07	<0,7	<0,07	0,19	0,18	<0,02	0,4
135	Stallikon (Quelle)	18.11.1981	<14,4	4,4	13,7	-	0,11	<0,4	-	-	-	-	3,6
137	Stallikon	18.11.1981	<14,4	3,3	9,1	-	<0,07	<0,4	-	-	-	-	4,7
USM													
130	Gränichen	26.11.1981	<1,4	7,2	8,0	0,73	0,40	<0,7	<0,07	<0,06	0,46	<0,02	-
33	Fulenbach	14.07.1981	<1,4	1,1	6,6	1,09	0,36	<0,7	<0,07	0,50	0,28	<0,02	0,4
32	Attisholz	09.09.1981	1,4	1,1	7,5	1,38	<0,07	<0,7	<0,07	<0,06	<0,06	<0,02	0,3
Malm													
7	Malleray	09.09.1981	<1,4	44,3	2,3	0,87	1,09	3,2	<0,07	<0,06	<0,06	<0,02	41,2
99	Welschingen	27.07.1981	<1,4	7,8	8,2	3,78	<0,07	<0,7	<0,07	0,09	0,15	<0,02	0,7
80	Durlinsdorf	22.07.1982	<1,4	<1,1	0,23(?)	0,44	<0,07	<0,7	<0,07	0,06	0,15	0,02	0,4
Mischwässer													
30	Wildeg	21.07.1981	2,9	2,8	39,7	1,46	<0,07	<0,7	0,10	22,03	11,93	0,07	1,4
85	Steinenstadt	18.08.1981	158,5	44,3	51,6	1,02	0,44	30,8	<0,07	<0,06	0,28	<0,02	30,8
501B	Reichenau	21.03.1983	-	-	-	-	-	1,1	-	-	-	-	-
ERDAALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER													
Vulkanit (Oberrheingraben)													
96	Oberbergen (Badquelle)	Mittel(2) 1981-1984	<1,4	<1,1	64,8±3,2	1,02±0,00	<0,07	<0,7	<0,07	-	<0,06	<0,02±0,1	0,9±0,2
181	Oberbergen (Tiefbohrung)	14.12.1970	-	0	-	-	2,9	17,2	-	-	-	-	-
OMM													
170	Dettenberg	02.07.1986	<2,9	1,1	32,0	-	0,51	20,8	<0,17	<0,15	-	<0,05	-
502B	Sauldorf	12.10.1982	-	-	-	-	-	7,9	-	-	-	-	-
USM (Oberrheingraben)													
5	Schönenbuch	Mittel(2) 1981-1984	2,8±0,0	<1,1	11,0±0,0	2,18	1,27±0,10	<0,7	<0,07	<0,06	<0,06	0,03	0,9±0,3
Malm													
149	Beuren	28.07.1981	<1,4	10,5	12,1	2,48	<0,07	<0,7	<0,07	<0,06	5,20	<0,02	1,0
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER													
OSM													
145	Milchbuck Tm 385	27.02.1980	-	3,3	-	-	1,1	2,15	-	-	-	-	-
146	Milchbuck Tm 930	27.02.1980	-	10,5	-	-	0,1	1,1	-	-	-	-	-
OMM													
98	Konstanz	29.07.1981	2,9	24,9	3,9	1,16	<0,07	<0,7	0,10	0,13	<0,06	<0,02	0,7
98B	Konstanz	21.03.1983	-	-	-	-	-	0,7	-	-	-	-	-
128	Mainau	29.07.1981	5,8	28,8	6,6	0,87	0,44	43,0	0,07	<0,06	1,84	<0,02	57,3
128B	Mainau	21.03.1983	-	-	-	-	-	25,1	-	-	-	-	-
508B	Birnu	22.03.1983	-	-	-	-	-	<0,4	-	-	-	-	-
509B	Ravensburg	07.07.1983	-	-	-	-	-	4,3	-	-	-	-	-
1	Aqui	21.07.1981	4,3	16,6	12,3	0,87	<0,07	<0,7	<0,07	3,15	0,49	<0,02	1,3
Malm													
97	Singen	28.07.1981	15,9	32,7	8,0	1,31	1,57	44,8	<0,07	<0,06	0,67	<0,02	53,7
97B	Singen	21.03.1983	-	-	-	-	-	58,0	-	-	-	-	-
127	Lottstetten	Mittel(6) 1981-1985	18,7±1,8	58,1±11,1	15,1±1,6	0,55±0,11	0,44±0,34	30,6±2,4	<0,07±0,01	<0,21±0,31	<0,10±0,05	<0,02±0,00	34,3±2,9
Dugger													
77	Neuwiller	07.09.1981	53,3	122,0	13,5	2,48	0,33	30,4	0,07	<0,06	<0,06	<0,02	32,9
177	Michelbach 1015-1059 m	08.05.1971	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGUNDWÄSSER													
OMM													
2	Tiefbrunnen	Mittel(2) 1981-1982	45,1±1,0	58,2±19,6	172,6±4,5	0,58±0,52	0,22±0,05	<1,8±2,5	<0,07	0,06±0,00	1,10±1,30	<0,02	3,4±0,3
USM(-Malm)													
141	Eglisau 1	24.07.1981	33,1	27,2	49,5	1,60	0,22	2,9	0,10	<0,06	0,21	<0,02	3,5
142	Eglisau 2	Mittel(6) 1982-1985	46,1±3,4	25,6±17,2	55,9±3,1	0,68±0,17	0,48±0,12	0,5±0,7	<0,07±0,00	<0,08±0,02	<0,08±0,04	<0,02±0,00	1,5±1,3
143	Eglisau 3	Mittel(6) 1981-1985	66,3±11,0	32,6±16,4	111,9±17,0	0,62±0,15	0,68±0,35	3,0±1,0	<0,07±0,01	0,62±1,09	<0,14±0,15	<0,02±0,00	12,8±22,2
144	Eglisau 4	Mittel(6) 1981-1985	58,4±10,0	<27,8±15,7	88,8±24,9	0,66±0,25	0,82±0,57	<2,3±1,8	<0,07±0,01	0,13±0,08	<0,11±0,05	<0,02±0,00	3,3±1,4
304	Schafisheim 553-563 m	Mittel(2) 20.12.1983	273,8±0,0	144,1	464,5±1,6	6,84	12,92±0,26	87,7	0,14±0,00	0,13±0,00	171,49±237,76	0,43±0,06	406,5±407,7
Malm													
302	Weisach 242.9-267.0 m	Mittel(3) 5./6.03.1983	140,8±28,0	158,0±3,9	158,3±6,6	27,7±11,4	20,75±14,2	-	1,09±0,59	1,32±1,43	286,52±441,73	2,68±3,7	688,8±211,6
30	Wildeg	1869	-	-	-	-	-	10,7	-	-	-	-	-
79	Michelbach 742-840 m	09.05.1971	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

*) als Fe³⁺-Äquivalente

Tabelle 4:
Dissoziierte (Anionen) und undissoziierte Nebenbestandteile

			F ⁻ mmol(eq)/m ³	Br ⁻ mmol(eq)/m ³	I ⁻ mmol(eq)/m ³	NO ₂ ⁻ mmol(eq)/m ³	NO ₃ ⁻ mmol(eq)/m ³	HPO ₄ ²⁻ mmol(eq)/m ³	HAsO ₄ ²⁻ mmol(eq)/m ³	Al(OH) ₄ ⁻ mmol(eq)/m ³	Si(OH) ₄ mmol/m ³	H ₂ BO ₃ mmol/m ³	DOC mg/l
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER													
OSM													
42	Schwarzenberg	21.07.1982	6	<0,6	<0,4	<0,07	42	0,2	0,003	0,2	154	1,1	1,50
135	Stallikon (Quelle)	18.11.1981	5	<0,1	<0,1	<0,11	50	-	-	1,9	168	9,7	-
137	Stallikon	18.11.1981	5	<0,1	<0,1	<0,11	306	-	-	1,9	127	<8	-
USM													
130	Gränichen	26.11.1981	7	<0,6	0,4	<0,07	153	4,3	<0,01	0,2	105	6,3	0,87
33	Fulenbach	14.07.1981	3	<0,6	<0,4	<0,07	279	0,1	<0,01	0,2	132	<0,2	0,50
32	Attisholz	09.09.1981	7	<0,6	<0,4	<0,07	102	<0,1	<0,01	<0,2	152	0,5	2,20
Malm													
7	Malleray	09.09.1981	2	<0,6	<0,4	<0,07	60	<0,1	<0,01	<0,2	73	2,7	0,21
99	Welschingen	27.07.1981	7	<0,6	<0,4	<0,07	508	0,1	<0,01	0,2	145	1,0	0,40
80	Durlinsdorf	22.07.1982	3	0,8	<0,4	<0,07	66	0,8	0,12	0,4	338	0,6	1,30
Mischwässer													
30	Wildeggen	21.07.1981	37	<0,6	<0,4	<0,07	218	0,5	<0,01	<0,2	156	31,5	0,80
85	Steinensdorf	18.08.1981	12	9,3	2,1	2,82	735	0,8	<0,01	<0,2	136	14,4	0,57
501B	Reichenau	21.03.1983	-	-	-	-	277	-	-	-	-	-	-
ERDAALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER													
Vulkanit (Oberrheingraben)													
96	Oberbergen (Badquelle)	Mittel(2) 1981-1984	32±3	0,8±0,7	<0,4±0,0	<0,07±0,00	17±6	<0,7±1,0	<0,01±0,00	<0,2±0,0	470±43	0,3±0,0	0,26±0,30
181	Oberbergen (Tiefbohrung)	14.12.1970	-	-	-	0,48	0	-	-	-	-	-	-
OMM													
170	Dettenberg	02.07.1986	6	<1,3	0,1	<0,22	6	<1,3	0,05	2,6	333	6,3	-
502B	Sauldorf	12.10.1982	-	-	-	-	23	-	-	-	-	-	-
USM (Oberrheingraben)													
5	Schönenbuch	Mittel(2) 1981-1984	4±0	<0,6±0,0	<0,4±0,0	<0,07±0,1	48±13	<0,4±0,0	0,01	<0,2±0,0	418±73	<0,2±0,0	0,75±0,49
Malm													
149	Beuren	28.07.1981	11	<0,6	<0,4	<0,07	177	0,1	0,01	<0,2	218±3	1,1±0,8	0,90
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER													
OSM													
145	Milchbuck Tm 385	27.02.1980	-	-	-	8,7	2	-	-	-	85	-	-
146	Milchbuck Tm 930	27.02.1980	-	-	-	0,18	10	-	-	-	93	-	-
OMM													
98	Konstanz	29.07.1981	66	<0,6	<0,4	<0,07	<2	0,6	0,08	<0,2	229	27,8	0,40
98B	Konstanz	21.03.1983	-	-	-	-	3	-	-	-	-	-	-
128	Mainau	29.07.1981	537	<0,6	<0,4	<0,07	<2	0,2	0,16	<0,2	143	101,7	0,10
128B	Mainau	21.03.1983	-	-	-	-	2	-	-	-	-	-	-
508B	Birnau	22.03.1983	-	-	-	-	3	-	-	-	-	-	-
509B	Ravensburg	07.07.1983	-	-	-	-	30	-	-	-	-	-	-
1	Aqui	21.07.1981	137	8,8	1,6	<0,07	<2	0,5	0,13	0,2	196	60,0	0,50
Malm													
97	Singen	28.07.1981	265	<0,6	2,8	<0,07	<2	0,2	0,27	<0,2	160	48,2	0,40
97B	Singen	21.03.1983	-	-	-	-	2	-	-	-	-	-	-
127	Lottstetten	Mittel(6) 1981-1985	284±18	<1,9±1,0	1,3±0,1	<0,07±0,00	<3±3	<0,4±0,3	<0,09±0,15	<0,2±0,0	183±8	88,9±7,27	0,81±0,40
Dogger													
77	Neuwiller	07.09.1981	200	4,9	1,3	<0,07	<2	<0,1	7,74	<0,2	173	72,8	0,31
177	Michelbach 1015-1059 m	08.05.1971	55	0	-	-	29	-	-	-	-	-	-
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGUNDWÄSSER													
OMM													
2	Tiefenbrunnen	Mittel(2) 1981-1982	135±20	54±1	6±1	<0,07±0,00	<2±0	0,2±0,1	0,19±0,00	<0,2±0,0	195±2	199,6±1,4	0,43±0,25
USM (-Malm)													
141	Eglisau 1	24.07.1981	87	38	6	<0,07	<2	0,5	0,43	<0,2	143	75,7	0,40
142	Eglisau 2	Mittel(6) 1982-1985	88±2	48±3	15±1	<0,05±0,08	<2±0	0,5±0,2	0,32±0,15	<0,2±0,5	149±4	90,4±1,9	0,92±0,89
143	Eglisau 3	Mittel(6) 1981-1985	68±9	71±6	24±4	<0,35±0,53	<3±2	0,5±0,2	0,53±0,52	<2,0±4,4	149±7	106,2±5,3	1,11±1,72
144	Eglisau 4	Mittel(6) 1981-1985	83±30	58±14	20±5	<0,37±0,58	<2±5	<0,6±0,4	0,40±0,29	<0,2±0,0	149±7	125,6±6,9	0,48±0,24
304	Schafisheim 553-563 m	Mittel(2) 20.12.1983	77±3	254	62	<0,07	<2	9,7	0,03±0,01	20,4±19,9	246	215,5±1,7	1,95±0,07
Malm													
302	Weich 242.9-267.0 m	Mittel(3) 5./6.03.1983	143±5	143±3	70±5	1,52±0,61	<2±0	8,4±5,4	0,42±0,49	17,7±24,7	120±83	331,0±17,3	12,25±8,13
30	Wildeggen	1869	-	8	259	-	-	-	-	-	-	-	-
79	Michelbach 742-840 m	09.05.1971	51	-	-	-	61	-	-	-	-	-	-

*) als Fe³⁺-Äquivalente

Tabelle 5:
Gelöste Gase

			O ₂ (chem. Labor) mmol/m ³	O ₂ (PSI) mmol/m ³	N ₂ (PSI) mmol/m ³	Ar (PSI) mmol/m ³	CO ₂ (chem. Labor) mmol/m ³	CO ₂ (PSI) mmol/m ³	H ₂ (PSI) mmol/m ³	He (PSI) mmol/m ³	H ₂ S, H ₂ S', S' (chem. Labor) mmol/m ³	H ₂ S (PSI) mmol/m ³	CH ₄ (PSI) mmol/m ³
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER													
OSM													
42	Schwarzenberg	21.07.1982	313	318,8	64,3	17,0	386	620,3	<0,3	<0,3	-	<0,3	<0,03
135	Stallikon (Quelle)	18.11.1981	294	-	-	-	568	-	-	-	<0,6	-	-
137	Stallikon	18.11.1981	344	-	-	-	136	-	-	-	<0,0	-	-
USM													
130	Gränichen	26.11.1981	122	81,3	69,3	16,3	571	370,4	<0,3	<0,3	<0,2	<0,3	<0,03
33	Fulenbach	14.07.1981	197	237,5	682	18,0	364	861,2	<0,3	<0,3	<0,2	-	<0,03
32	Attisholz	09.09.1981	100	90,6	768	18,8	863	711,2	<0,3	<0,3	1,7	-	<0,03
Malm													
7	Malleray	09.09.1981	-	331,3	675	17,0	318	190,9	<0,3	<0,3	<0,2	<0,3	<0,03
99	Welschingen	27.07.1981	238	259,4	821	20,8	386	961,1	<0,3	<0,3	<0,2	-	<0,03
80	Durlinsdorf	22.07.1982	203	189,1	646	17,5	1045	1379,2	<0,3	<0,3	<0,2	<0,3	<0,03
Mischwässer													
30	Wildeggen	21.07.1981	32	40,6	831	18,0	432	1070,2	<0,3	<0,3	<0,2	-	<0,03
85	Steinenstadt	18.08.1981	194	156,3	725	17,7	1363	1370,1	<0,3	<0,3	<0,2	-	<0,03
501B	Reichenau	21.03.1983	-	-	-	24,0	150	-	-	0,1	-	-	-
ERDAALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER													
Vulkanit (Oberrheingraben)													
96	Oberbergen (Badquelle)	Mittel(2) 1981-1984	141±20	112,5±0,028	653±21	16,0±0,5	318±165	<379,5±27,3	<0,3±0	<0,3±0	<0,2±0	<0,3±0	<0,03±0
181	Oberbergen (Tiefbohrung)	14.12.1970	50	-	-	-	227	-	-	-	-	-	-
OMM													
170	Dettenberg	02.07.1986	178	-	-	-	386	-	-	-	0	-	-
502B	Sauldorf	12.10.1982	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
USM (Oberrheingraben)													
5	Schönenbuch	Mittel(2) 1981-1984	7±0	<0,31±0,31	803±10	19,3±0,3	1045±272	940,7	<0,3±0	<0,3±0	<0,2±0	<0,3±0	<0,03±0
Malm													
149	Beuren	28.07.1981	81±9	75±15	746,1±3,6	18±0	727±227	761,2±56,8	<0,3±0	<0,3±0	<0,2±0	<0,3±0	<0,03±0
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER													
OSM													
145	Milchbuck Tm 385	27.02.1980	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
146	Milchbuck Tm 930	27.02.1980	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
OMM													
98	Konstanz	29.07.1981	34	3,75	992	24,8	<45	29,5	<0,3	<0,3	<0,2±0	-	<0,03±0
98B	Konstanz	21.03.1983	-	-	-	33,5	-	-	-	0,2	-	-	-
128	Mainau	29.07.1981	19	<68,75	1153	26,3	<45	50,0	<0,3	0,5	0,6	-	19,95
128B	Mainau	21.03.1983	-	-	-	23,5	-	-	-	0,4	-	-	-
508B	Birnu	22.03.1983	-	-	-	22,2	-	-	-	0,0	-	-	-
509B	Ravensburg	07.07.1983	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
1	Aqui	21.07.1981	56	<0,31	903	21,8	<45	50,0	<0,3	0,5	<0,2	-	1,87
Malm													
97	Singen	28.07.1981	<3	0,625	1153	25,8	91	70,4	<0,3	1,8	<0,6	-	0,62
97B	Singen	21.03.1983	-	-	-	26,3	182	-	-	1,1	2,2	-	-
127	Lottstetten	Mittel(6) 1981-1985	<3	<0,31±0	857±25	20,5±0,5	386±205	<456,7±22,7	<0,3±0	0,8±0,3	4,5±2,3	<0,3±0	0,62±0
Douger													
77	Neuwiller	07.09.1981	<3	<4,37	807	19,5	841	599,9	<0,3	0,5	3,2	-	2,49
177	Michelbach 1015-1059 m	08.05.1971	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGUNDWÄSSER													
OMM													
2	Tiefenbrunnen	Mittel(2) 1981-1982	19±30	1,562±2,188	925±200	19,8±2,3	295±91	145,4±6,8	<0,3±0	2,3±1,5	<1,0±1,4	<0,3±0	3,43±0,44
USM (-Malm)													
141	Eglisau 1	24.07.1981	<3	0,313	1025	20,3	<45	50,0	<0,3±0	<0,3	1,2	-	2,49
142	Eglisau 2	Mittel(6) 1982-1985	<6±6	0,938±2,188	1124±25	20,3±0,3	<45±22	<65,9±11,4	<0,3±0	5,0±0	<0,2±0	<0,3±0	7,92±0,24
143	Eglisau 3	Mittel(6) 1981-1985	<13±16	0,313±0,626	1035±160	18,3±1,5	<45±22	<75,0±22,7	<0,3±0	5,8±0	<0,2±0	<0,3±0	1,37±0,25
144	Eglisau 4	Mittel(6) 1981-1985	<6±9	0,00±0	1017±110	18,8±1,5	<45±22	<77,3±31,8	<0,3±0	7,0±0	<0,2±0	<0,3±0	1,43±0,31
304	Schafisheim 553-563 m	20.12.1983 (304/2)	<3	0,0	1128	11,8	227	<79,5	9,9	2,5	-	<0,3	27944,34
Malm													
302	Weiach 242.9-267.0 m	5./6.03.1983 (302/6,7)	<3	1,250±0,938	1599±178	19,0±1,3	1795	886,2±20,4	5,0±0	15,0±3,5	4,1	<0,3	4263,65
30	Wildeggen	1869	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
79	Michelbach 742-840 m	09.05.1971	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

PSI: Gibt die Konzentrationen in mg/kg an. Die Umrechnung erfolgte unter der vereinfachten Annahme einer Dichte = 1.
In den mit "B" bezeichneten Proben stammen die Ar- und He-Werte aus BERTLEFF (1984, 1986).

Tabelle 6:
Uran und Radioaktivität

			Uran (Fresenius)	Uran (PSI)	$^{235}\text{U}/^{238}\text{U}$	α -Aktivität Uran	α -Aktivität Thorium	Radon-222- Aktivität (Fresenius)	Radon-222- Aktivität (PSI)	β -Aktivität Brutto	β -Aktivität Netto
			$\mu\text{mol/m}^3$	$\mu\text{mol/m}^3$		Bq/m ³	Bq/m ³	Bq/l	Bq/l	Bq/l	Bq/l
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER											
OSM											
42	Schwarzenberg	21.07.1982	13	14,3	1,0	78	-	39,9	37,0	-	-
135	Stallikon (Quelle)	18.11.1981	-	18,1	1,1	107	-	-	27,7	-	-
137	Stallikon	18.11.1981	-	8,8	1,1	56	-	-	11,1	-	-
USM											
130	Gränichen	26.11.1981	3	2,5	1,1	13	-	1,1	2,6	-	-
33	Fulenbach	14.07.1981	-	2,5	1,8	19	-	45,5	47,0	-	-
32	Attisholz	09.09.1981	-	1,7	1,1	10	-	3,3	4,7	-	-
Malm											
7	Malleray	09.09.1981	<1	1,7	1,1	10	-	0,7	0,9	-	-
99	Welschingen	27.07.1981	3	2,9	1,2	20	-	5,2	8,2	-	-
80	Durlinsdorf	22.07.1982	3	2,5	1,1	19	-	7,4	11,1	-	-
Mischwässer											
30	Wildeggen	21.07.1981	3	12,2	1,4	26	-	<0,7	4,7	-	-
85	Steinenstadt	18.08.1981	4	5,0	1,1	34	-	8,5	8,4	-	-
501B	Reichenau	21.03.1983	-	-	-	-	-	-	-	-	-
ERDAALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGRUNDWÄSSER											
Vulkanit (Oberheingraben)											
96	Oberbergen (Badquelle)	Mittel(2) 1981-1984	21±0	22,7±1,2	2,2±0,1	174±15	26	104,9±27,0	164,5±28,5	0,96	0,83
181	Oberbergen (Tiefbohrung)	14.12.1970	-	-	-	-	-	-	-	-	-
OMM											
170	Dettenberg	02.07.1986	-	2,1	-	-	-	-	-	-	-
502B	Sauldorf	12.10.1982	-	-	-	-	-	-	-	-	-
USM (Oberheingraben)											
5	Schönenbuch	Mittel(2) 1981-1984	8	6,9±0,3	1,2±0,1	52±16	44	9,8±8,1	16,8±18,2	-	-
Malm											
149	Beuren	28.07.1981	7	6,7±0,6	1,0±0,1	44±5	33	9,5±2,9	11,1±5,2	-	-
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGRUNDWÄSSER											
OSM											
145	Milchbuck Tm 385	27.02.1980	-	-	-	-	-	-	-	-	-
146	Milchbuck Tm 930	27.02.1980	-	-	-	-	-	-	-	-	-
OMM											
98	Konstanz	29.07.1981	2	2,5	3,8	34	-	16,7	18,6	-	-
98B	Konstanz	21.03.1983	-	-	-	-	-	-	-	-	-
128	Mainau	29.07.1981	2	0,8	3,8	13	-	<0,7	8,1	-	-
128B	Mainau	21.03.1983	-	-	-	-	-	-	-	-	-
508B	Birnau	22.03.1983	-	-	-	-	-	-	-	-	-
509B	Ravensburg	07.07.1983	-	-	-	-	-	-	-	-	-
1	Aqui	21.07.1981	3	2,9	4,5	48	-	11,8	10,8	-	-
Malm											
97	Singen	28.07.1981	1	0,3	2,0	3	-	<0,7	<1,0	-	-
97B	Singen	21.03.1983	-	-	-	-	-	-	-	-	-
127	Lottstetten	Mittel(6) 1981-1985	<1±0	<0,5±0,3	1,3±0,7	<4±2	14±16	8,3±5,9	7,4±1,5	0,53±0,07	0,22±0,05
Dogger											
77	Neuwiller	07.09.1981	<1	0,2±0,7	-	4	-	3,0	2,1	-	-
177	Michelbach 1015-1059 m	08.05.1971	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGRUNDWÄSSER											
OMM											
2	Tiefenbrunnen	Mittel(2) 1981-1982	<1±1	2,9±1,2	3,3±0,5	22±5	-	15,2±2,6	17,2±7,1	-	-
USM(-Malm)											
141	Eglisau 1	24.07.1981	3	7,1	4,5	105	-	14,4	22,0	-	-
142	Eglisau 2	Mittel(6) 1982-1985	<2±1	2,6±0,2	6,8±0,7	65±16	12±6	37,6±6,1	39,4±8,7	0,90±0,75	0,81±0,75
143	Eglisau 3	Mittel(6) 1981-1985	<1±1	1,6±0,4	5,9±1,6	35±8	16±10	27,8±7,1	38,7±7,3	0,76	0,64
144	Eglisau 4	Mittel(6) 1981-1985	<2±3	3,0±2,4	6,2±1,0	73±58	16±10	30,2±5,5	33,3±10,9	0,63±0,30	0,49±0,30
304	Schafisheim 553-563 m	Mittel(2) 20.12.1983	<1	2,3±0,9	1,8	7	37	14,8	12,6	1,85	1,24
Malm											
302	Weiach 242,9-267,0 m	Mittel (3) 5./6.03.1983	<1	0,4±0,2	1,2	4	9,3	7,8	<3,7	-	-
30	Wildeggen	1869	-	-	-	-	-	-	-	-	-
79	Michelbach 742-840 m	09.05.1971	-	-	-	-	-	-	-	-	-

Tabelle 8:
Dissöziierte Hauptbestandteile

					Na ⁺ mol(eq)/m³	K ⁺ mol(eq)/m³	Na ⁺ +K ⁺ mol(eq)/m³	Mg ²⁺ mol(eq)/m³	Ca ²⁺ mol(eq)/m³	Ca ²⁺ +Mg ²⁺ mol(eq)/m³	Cl ⁻ mol(eq)/m³	SO ₄ ²⁻ mol(eq)/m³	HCO ₃ ⁻ +CO ₃ ²⁻ mol(eq)/m³
ERDÖLBOHRUNGEN: USM													
601	BERLINGEN 1												
1	1350.5-1354.5	m	(1352.5)	27.09.64	174,338	2,788	177,126	5,100	14,022	19,122	174,400	16,843	4,999
4	1479.2-1509.3	m	(1494.25)	21.07.64	89,518	0,818	90,336	1,728	5,190	6,918	64,762	8,953	18,349
602	BOSWIL 1												
1	835.0- 836.75	m	(835.9)	17.02.66	63,071	2,327	65,398	n.n.	0,699	<0,699	40,899	13,658	11,656
2	947.0- 948.75	m	(947.9)	17.02.66	126,143	4,245	130,388	0,082	2,745	2,827	104,364	23,318	4,250
3	1096.0-1097.75	m	(1096.9)	15.02.66	160,941	3,043	163,984	0,082	19,212	19,294	135,391	39,808	7,375
4	1262.0-1263.75	m	(1262.9)	14.02.66	116,138	2,481	118,619	<0,082	16,717	<16,799	68,965	58,983	7,899
5	1721.0-1722.75	m	(1721.9)	11.02.66	47,847	0,358	48,205	<0,082	2,645	<2,727	31,027	2,561	16,880
603	HÜNENBERG 1												
1	2357 -2392	m	(2347.5)	23.05.65	152,241	1,765	154,006	0,329	4,741	5,070	106,056	24,401	27,697
604	LINDAU 1												
1	1457.25-1541.3	m	(1499.3)	14.05.64	89,866	2,864	92,730	n.n.	n.n.	n.n.	46,061	14,449	23,040
605	PFAFFNAU 1												
1-3	446.0- 453.0	m	(449.5)	08.-14.01.64 (Mittel 3 Proben)	66,058±0,889	0,733±0,015	66,791±0,904	1,206±0,332	3,111±0,144	4,317±0,476	66,313±0,7	0,382±0,335	3,644±0,147
606	PFAFFNAU SÜD 1												
1	598.5- 605.5	m	(602.0)	06.10.67	28,752	<0,128	<28,880	0,165	0,948	1,113	14,554	10,139	5,802
2	595.5- 702.25	m	(648.9)	24.03.65	37,408	0,128	37,536	0,658	2,246	2,904	12,890	21,736	5,572
3	636.0- 650.0	m	(643.0)	08.10.67	33,450	<0,128	<33,578	1,069	2,096	3,165	10,859	21,632	4,605
4	636.0- 702.25	m	(669.1)	29.03.65	41,975	0,128	42,103	0,823	2,994	3,817	16,331	24,047	5,162
5	671.5- 702.25	m	(686.9)	24.09.67	59,722	<0,128	<59,850	1,892	4,142	6,034	47,161	13,949	4,097
6	700.5- 702.25	m	(701.4)	15.03.68	70,901	0,435	71,336	0,905	6,387	7,292	70,601	2,686	4,671
-	1129.3-1139.1	m	(1134.2)	-	-	-	-	-	-	-	313,127	-	-
-	1165.0-1177.9	m	(1171.5)	-	-	-	-	-	-	-	212,173	-	-
-	1168.0-1169.8	m	(1168.9)	-	-	-	-	-	-	-	237,839	-	-
608	PFAFFNAU SÜD 5												
1	497.0- 498.75	m	(497.9)	25.01.66	64,289	0,537	64,826	-	0,100	>0,100	56,977	1,416	7,226
2	591.0- 592.75	m	(591.9)	24.01.66	120,706	0,639	121,345	-	0,100	>0,100	109,300	1,541	10,309
3	690.5- 691.5	m	(691.0)	22.01.66	36,538	0,153	36,691	-	0,449	>0,449	18,334	11,035	8,077
4	713.0- 716.5	m	(714.8)	21.01.66	63,506	1,534	65,040	0,082	7,784	7,866	38,643	13,991	21,130
5	725.0- 726.75	m	(725.9)	20.01.66	53,067	0,281	53,348	0,658	0,948	1,606	19,180	31,563	4,147
6	760.0- 761.75	m	(760.9)	19.01.66	95,695	0,742	96,437	2,139	5,589	7,728	53,592	48,094	2,393
7	854.0- 855.75	m	(854.9)	18.01.66	80,035	0,332	80,367	1,069	1,796	2,865	80,388	n.n.	2,557
8	905.0- 906.75	m	(905.9)	16.01.66	120,053	0,818	120,871	2,797	8,433	11,230	131,442	n.n.	2,114

Tabelle 9:
Physikalisch-chemische Parameter und Ionensummen

				pH -log(H ⁺)	el. Leitfähigkeit µS/cm	Σ Kationen mol(eq)/m ³	Σ Anionen mol(eq)/m ³
<u>ERDÖLBOHRUNGEN: USM</u>							
601	<u>BERLINGEN 1</u>						
1	1350.5-1354.5 m	(1352.5)	27.09.64	7,4	20500	197,614	196,241
4	1479.2-1509.3 m	(1494.25)	21.07.64	8,3	7700	97,253	92,063
602	<u>BOSWIL 1</u>						
1	835.0- 836.75 m	(835.9)	17.02.66	9,5	6000	<66,410	66,213
2	947.0- 948.75 m	(947.9)	17.02.66	9,8	11600	<133,430	131,932
3	1096.0-1097.75 m	(1096.9)	15.02.66	7,6	14900	<183,754	182,573
4	1262.0-1263.75 m	(1262.9)	14.02.66	7,4	10900	<135,715	135,847
5	1721.0-1722.75 m	(1721.9)	11.02.66	7,2	4600	51,054	50,468
603	<u>HÜNENBERG 1</u>						
1	2357 -2392 m	(2347.5)	23.05.65	7,7	12700	159,790	158,329
604	<u>LINDAU 1</u>						
1	1457.25-1541.3 m	(1499.3)	14.05.64	10,3	7100	92,838	83,550
605	<u>PFAFFNAU 1</u>						
1-3	446.0- 453.0 m	(449.5)	08.-14.01.64 (Mittel 3 Proben)	7,67±0,06	6720±56	71,192±0,948	70,339±0,966
606	<u>PFAFFNAU SÜD 1</u>						
1	598.5- 605.5 m	(602.0)	06.10.67	7,9	2780	<29,866	30,495
2	595.5- 702.25 m	(648.9)	24.03.65	7,8	3700	<40,498	40,199
3	636.0- 650.0 m	(643.0)	08.10.67	7,9	3310	<36,617	37,097
4	636.0- 702.25 m	(669.1)	29.03.65	7,7	4200	45,965	45,541
5	671.5- 702.25 m	(686.9)	24.09.67	7,6	5934	<65,758	65,208
6	700.5- 702.25 m	(701.4)	15.03.68	7,7	7300	<78,886	77,957
-	1129.3-1139.1 m	(1134.2)	-	-	-	-	-
-	1165.0-1177.9 m	(1171.5)	-	-	-	-	-
-	1168.0-1169.8 m	(1168.9)	-	-	-	-	-
608	<u>PFAFFNAU SÜD 5</u>						
1	497.0- 498.75 m	(497.9)	25.01.66	10,9	6300	<65,128	65,658
2	591.0- 592.75 m	(591.9)	24.01.66	10,4	11300	<121,647	121,149
3	690.5- 691.5 m	(691.0)	22.01.66	9,1	-	37,140	37,446
4	713.0- 716.5 m	(714.8)	21.01.66	11,7	-	<72,999	73,764
5	725.0- 726.75 m	(725.9)	20.01.66	9,1	4900	<54,990	54,890
6	760.0- 761.75 m	(760.9)	19.01.66	7,7	9000	<104,438	104,079
7	854.0- 855.75 m	(854.9)	18.01.66	7,8	8000	<83,462	82,945
8	905.0- 906.75 m	(905.9)	16.01.66	6,7	12500	133,426	133,556

Tabelle 10:
Erdölbohrungen
Dissoziierte und undissoziierte Nebenbestandteile

				Li ⁺ mmol(eq)/m ³	NH ₄ ⁺ mmol(eq)/m ³	Sr ²⁺ mmol(eq)/m ³	Fe ²⁺ mmol(eq)/m ³	Br ⁻ mmol(eq)/m ³	I ⁻ mmol(eq)/m ³	H ₂ SiO ₃ mmol(eq)/m ³	H ₃ BO ₃ mmol(eq)/m ³	H ₂ S mmol(eq)/m ³
<u>ERDÖLBOHRUNGEN: USM</u>												
601	<u>BERLINGEN 1</u>											
1	1350.5-1354.5 m	(1352.5)	27.09.64	n.n.	n.n.	936	430	n.n.	n.n.	-	744	-
4	1479.2-1509.3 m	(1494.25)	21.07.64	n.n.	n.n.	n.n.	Sp.	n.n.	n.n.	-	906	-
602	<u>BOSWIL 1</u>											
1	835.0- 836.75 m	(835.9)	17.02.66	n.n.	277	n.n.	<36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
2	947.0- 948.75 m	(947.9)	17.02.66	n.n.	111	68	<36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
3	1096.0-1097.75 m	(1096.9)	15.02.66	n.n.	166	274	<36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
4	1262.0-1263.75 m	(1262.9)	14.02.66	n.n.	55	205	<36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
5	1721.0-1722.75 m	(1721.9)	11.02.66	n.n.	n.n.	91	<36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
603	<u>HÜNENBERG 1</u>											
1	2357 -2392 m	(2347.5)	23.05.65	n.n.	n.n.	571	143	175	n.n.	-	n.n.	-
604	<u>LINDAU 1</u>											
1	1457.25-1541.3 m	(1499.3)	14.05.64	n.n.	Sp.	n.n.	107	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
605	<u>PFAFFNAU 1</u>											
1-3	446.1 - 453.0 m	(449.5)	08.-14.01.64 (Mittel 3 Proben)	n.n.	n.n.	Sp.	84±83	Sp.	n.n.	-	n.n.	Sp.
606	<u>PFAFFNAU SÜD 1</u>											
1	598.5- 605.5 m	(602.0)	06.10.67	n.n.	n.n.	n.n.	<2	n.n.	n.n.	-	307	-
2	595.5- 702.25 m	(648.1)	24.03.65	n.n.	n.n.	23	<36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
3	636.0- 650.0 m	(643.0)	08.10.67	n.n.	n.n.	n.n.	<2	n.n.	n.n.	-	307	-
4	636.0- 702.25 m	(669.1)	29.03.65	n.n.	n.n.	46	Sp.	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
5	671.5- 702.25 m	(686.9)	24.09.67	n.n.	n.n.	n.n.	<2	n.n.	n.n.	-	307	-
6	700.5- 702.25 m	(701.4)	15.03.68	<144	n.n.	114	Sp.	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
-	1129.3-1139.1 m	(1134.2)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	1165.0-1177.9 m	(1171.5)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
-	1168.0-1169.8 m	(1168.9)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
608	<u>PFAFFNAU SÜD 5</u>											
.1	497.0- 498.75 m	(497.9)	25.01.66	n.n.	166	n.n.	<36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
2	591.0- 592.75 m	(591.9)	24.01.66	n.n.	166	n.n.	<36	n.n.	n.n.	-	226	-
3	690.5- 691.5 m	(691.0)	22.01.66	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	n.n.	-	259	-
4	713.0- 716.5 m	(714.8)	21.01.66	n.n.	55	n.n.	<36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
5	725.0- 726.75 m	(725.9)	20.01.66	n.n.	n.n.	n.n.	<36	n.n.	n.n.	-	226	-
6	760.0- 761.75 m	(760.9)	19.01.66	n.n.	<55	183	<36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
7	854.0- 855.75 m	(854.9)	18.01.66	n.n.	<55	137	<36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-
8	905.0- 906.75 m	(905.9)	16.01.66	n.n.	<55	233	36	n.n.	n.n.	-	n.n.	-

Tabelle 11:
Faktorenanalyse

a) Korrelationsmatrix

	Na	K	Mg	Ca	Cl	SO ₄	m	pH
Na	1.000							
K	0.756	1.000						
Mg	0.235	-0.060	1.000					
Ca	0.578	0.473	0.387	1.000				
Cl	0.957	0.665	0.399	0.614	1.000			
SO ₄	0.570	0.554	-0.165	0.439	0.356	1.000		
m	0.257	0.381	-0.224	0.011	0.106	0.148	1.000	
pH	0.133	0.356	-0.364	-0.296	0.019	0.136	0.386	1.000

b) Anteile der einzelnen Faktoren an der Gesamtvarianz

	Faktor1	Faktor2	Faktor3	Faktor4	Faktor5	Faktor6	Total
Varianz	3.55	1.98	0.89	0.66	0.39	0.33	7.80
%	46	25	11	8	5	4	99

c) Ladung der Faktoren

	Faktor1	Faktor2	Faktor3
Na	0.95583	-0.01991	0.09409
Cl	0.89423	-0.22699	0.22360
K	0.85135	0.31775	0.00067
Ca	0.72172	-0.43718	-0.19767
SO ₄	0.65698	0.22097	-0.61276
pH	0.13974	0.79552	0.27676
Mg	0.22834	-0.76209	0.45370
m	0.30255	0.61047	0.37184

d) Ladungsklassen der Faktoren

	Faktor1	Faktor2	Faktor3
stark (1.0 - 0.8)	Na, Cl, K		
mittel (0.8 - 0.5)	Ca, SO ₄	pH, m	
schwach (0.5 - 0.3)	m	K	Mg, m
unbedeutend (0.3 - 0.0)	pH, Mg	SO ₄	Na, Cl, K, pH
unbedeutend (0.0 - -0.3)		Na, Cl	Ca
schwach (-0.3 - -0.5)		Ca	
mittel (-0.5 - -0.8)		Mg	SO ₄

Tabelle 12a:
NAGRA-Programm
Modellierung des Karbonatsystems

			Temperatur °C	"Total Inorganic Carbon" (Molalität)				pH		Totale Alkalinität (Molalität)	
				analysiert		berechnet					
				Fresenius	PSI	A/C	B	A/C	B	A/B	C
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER											
42	Schwarzenberg	OSM	7,40	6,171E-03	6,120E-03	6,791E-03		7,20		5,796E-03	5,233E-03
135	Stallikon Quelle	OSM	* 8,00	7,025E-03		7,040E-03	7,709E-03	7,45	7,13	6,458E-03	
137	Stallikon	OSM	* 8,00	5,938E-03		5,931E-04		7,85		5,803E-04	
130	Gränichen	USM	13,70	4,967E-03	4,680E-03	4,690E-03	4,912E-03	7,51	7,29	4,384E-03	4,382E-03
33	Fulenbach	USM	13,40	4,248E-03	4,490E-03	4,837E-03		7,00		3,890E-03	3,616E-03
32	Attisholz	USM	14,60	5,747E-03	7,680E-03	5,702E-03		7,15		4,893E-03	6,607E-03
7	Malleray	MALM	9,70	3,202E-03	3,010E-03	3,201E-03		7,38		2,887E-03	2,718E-03
99	Welschingen	MALM	10,30	6,384E-03	6,770E-03	6,666E-03	7,366E-03	7,35	7,04	6,007E-03	6,111E-03
80	Durlinsdorf	MALM	16,20	6,863E-03	6,940E-03	7,210E-03		6,98		5,839E-03	5,622E-03
30	Wildegg	MISCHWASSER	12,20	7,430E-03	7,890E-03	1,064E-02		6,67		7,010E-03	5,201E-03
85	Steinenstadt	MISCHWASSER	13,80	7,919E-03	7,460E-03	7,261E-03	7,982E-03	7,29	7,00	6,570E-03	6,765E-03
501B	Reichenau	MISCHWASSER	12,80	4,949E-03		4,917E-03	5,050E-03	7,90	7,64	4,802E-03	
ERDALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER											
96	Oberbergen Quelle	VULKANIT	19,90	4,596E-03	4,550E-03	4,590E-03	4,730E-03	7,47	7,32	4,295E-03	4,266E-03
181	Oberbergen (T)	VULKANIT	19,50	5,227E-03		5,222E-03	5,614E-03	7,60	7,22	5,003E-03	
170	Dettenberg	OMM	13,00	6,778E-03		6,562E-03	7,310E-03	7,80	7,21	6,404E-03	
502B	Sauldorf	OMM	7,90	5,145E-03		5,324E-03	5,423E-03	7,50	7,41	4,922E-03	
5	Schönenbuch	USM	12,70	8,392E-03	8,090E-03	8,343E-03	8,489E-03	7,25	7,19	7,364E-03	7,145E-03
149	Beuren	MALM	12,70	6,599E-03	6,620E-03	6,645E-03	7,033E-03	7,37	7,16	6,039E-03	7,145E-03
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER											
98	Konstanz	OMM	26,10	5,803E-03	6,600E-03	6,541E-03	6,664E-03	8,88	8,71	6,915E-03	6,987E-03
98B	Konstanz	OMM	25,50	5,339E-03		5,123E-03	5,237E-03	8,82	8,56	5,347E-03	
128	Mainau	OMM	* 26,00	8,598E-03	8,740E-03	8,700E-03	8,949E-03	8,95	8,62	9,216E-03	9,501E-03
128B	Mainau	OMM	* 26,00	5,680E-03		5,533E-03	6,536E-03	8,50	8,38	5,689E-03	
508B	Birnu	OMM	15,80	3,420E-03		3,303E-03	3,365E-03	8,87	8,63	3,424E-03	
509B	Ravensburg	OMM	27,00	7,129E-03		6,361E-03	7,079E-03	9,26	8,34	7,139E-03	
1	Aqui	OMM	23,00	5,903E-03	6,680E-03	6,815E-03	6,892E-03	8,76	8,64	7,117E-03	6,989E-03
97	Singen	MALM	* 30,00	6,942E-03	6,670E-03	7,768E-03		7,13		6,861E-03	5,898E-03
97B	Singen	MALM	* 30,00	5,480E-03	5,468E-03	5,593E-03	8,110E+00	7,81		5,487E-03	
127	Lottstetten	MALM	20,30	9,250E-03	9,010E-03	9,108E-03	9,210E-03	7,82	7,70	8,882E-03	8,804E-03
77	Neuwiller	DOGGER	36,70	8,019E-03	7,600E-03	7,977E-03		7,20		7,192E-03	6,866E-03
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGUNDWÄSSER											
2	Tiefenbrunnen	OMM	24,60	5,159E-03	4,830E-03	4,923E-03	4,989E-03	7,89	7,74	4,886E-03	4,803E-03
141	Eglisau	USM(MALM)	12,30		4,530E-03	4,674E-03	4,773E-03	8,47	8,16	4,762E-03	4,626E-03
142	Eglisau	USM(MALM)	15,30		3,860E-03	4,058E-03	4,152E-03	8,35	8,03	4,123E-03	3,932E-03
143	Eglisau	USM(MALM)	15,90		3,650E-03	3,910E-03	4,015E-03	8,15	7,82	3,933E-03	3,682E-03
144	Eglisau	USM(MALM)	16,70		3,090E-03	3,278E-03	3,364E-03	8,31	7,98	3,341E-03	3,160E-03
304	Schafisheim	USM(MALM)	* 30,00	2,293E-03		2,069E-03	2,295E-03	8,09	7,34	2,226E-03	
302	Weiach 243-267m	MALM	* 19,00	9,398E-03		8,316E-03	8,773E-03	7,26	7,06	7,664E-03	

A: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität
B: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität bei Calcitsättigung
C: berechnete Werte mit gemessenem pH und "Total Inorganic Carbon" bei Calcitsättigung

Tabelle 12b:
NAGRA-Programm
Modellierung des Karbonatsystems

		CO2(aq) (Molalität)				HCO3 (Molalität)					
		analysiert			berechnet		analysiert		berechnet		
		PSI	Fresenius	A	B	C	A	B	C		
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER											
42 Schwarzenberg	OSM	3,860E-04	6,200E-04	1,005E-03		9,086E-04	5,796E-03	5,776E-03		5,215E-03	
135 Stallikon Quelle	OSM	5,680E-04		6,077E-04	1,266E-03		6,458E-03	6,411E-03	6,433E-03		
137 Stallikon	OSM	1,360E-04		2,181E-05			5,803E-04	5,667E-04			
130 Gränichen	USM	5,710E-04	3,700E-04	3,254E-04	5,400E-04	3,252E-04	4,384E-03	4,349E-03	4,362E-03	4,347E-03	
33 Fulenbach	USM	3,640E-04	8,610E-04	9,521E-04		8,856E-04	3,890E-03	3,881E-03		3,608E-03	
32 Attisholz	USM	8,630E-04	7,110E-04	8,180E-04		1,101E-03	4,893E-03	4,876E-03		6,583E-03	
7 Malleray	MALM	3,180E-04	1,910E-04	3,237E-04		3,049E-04	2,887E-03	2,872E-03		2,703E-03	
99 Welschingen	MALM	3,860E-04	9,610E-04	6,770E-04	1,372E-03	6,886E-04	6,007E-03	5,971E-03	5,989E-03	6,075E-03	
80 Durlinsdorf	MALM	1,045E-03	1,379E-03	1,391E-03		1,341E-03	5,829E-03	5,812E-03		5,605E-03	
30 Wildegg	MISCHWASSER	4,320E-04	1,070E-03	3,638E-03		2,706E-03	7,010E-03	7,002E-03		5,195E-03	
85 Steinensdt	MISCHWASSER	1,363E-03		7,410E-04	1,445E-03	7,629E-04	6,570E-03	6,500E-05	6,526E-03	6,692E-03	
501B Reichenau	MISCHWASSER	1,500E-04		1,469E-04	2,665E-04		4,802E-03	4,740E-03	4,767E-03		
ERDALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER											
96 Oberbergen Quelle	VULKANIT	3,180E-04		3,134E-04	4,482E-04	3,114E-04	4,295E-03	4,260E-03	4,271E-03	4,232E-03	
181 Oberbergen (T)	VULKANIT	2,270E-04		2,679E-04	6,414E-04		5,003E-03	4,927E-03	4,961E-03		
170 Dettenberg	OMM	3,860E-04	2,407E-04	9,462E-04	6,404E-03		6,275E-03	6,352E-03			
502B Sauldorf	OMM		4,253E-04	5,223E-04	4,922E-03		4,884E-03	4,889E-03			
5 Schönenbuch	USM	1,045E-03	9,410E-04	9,959E-04	1,140E-03	9,666E-04	7,364E-03	7,331E-03	7,335E-03	7,113E-03	
149 Beuren	MALM	7,270E-04	7,610E-04	6,245E-04	1,006E-03	1,077E-03	6,039E-03	6,003E-03	6,017E-03	7,116E-03	
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER											
98 Konstanz	OMM		3,000E-05	1,634E-05	2,485E-05	1,651E-05	4,711E-03	6,183E-03	6,398E-03	6,248E-03	
98B Konstanz	OMM			1,500E-05	2,823E-05		5,347E-03	4,877E-03	5,076E-03		
128 Mainau	OMM		5,000E-05	2,318E-05	5,152E-05	1,796E-05	8,014E-03	8,288E-03	8,704E-03	8,155E-03	
128B Mainau	OMM			1,742E-05	4,535E-05		5,689E-03	7,906E-03	5,429E-03		
508B Birnau	OMM			1,024E-05	1,858E-05		3,424E-03	3,165E-03	3,271E-03		
509B Ravensburg	OMM			6,140E-06	6,316E-05		7,139E-03	5,602E-03	6,904E-03		
1 Aquí	OMM			2,289E-05	3,041E-05		4,712E-03	6,506E-03	6,637E-03		
97 Singen	MALM	9,100E-05	7,000E-05	9,203E-04		7,921E-04	6,861E-03	6,837E-03		5,878E-03	
97B Singen	MALM	1,820E-04		7,484E-05	1,528E-04		5,487E-03	5,309E-03	5,397E-03		
127 Lottstetten	MALM	3,860E-04		2,815E-04	3,704E-04	2,790E-04	8,882E-03	8,778E-03	8,802E-03	8,701E-03	
77 Neuwiller	DOGGER	8,410E-04	6,000E-04	8,053E-04		7,692E-04	7,192E-03	7,155E-03		6,830E-03	
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGUNDWÄSSER											
2 Tiefenbrunnen	OMM	2,950E-04	1,450E-04	1,085E-04	1,545E-04	1,067E-04	4,886E-03	4,759E-03	4,795E-03	4,678E-03	
141 Eglisau	USM (MALM)		5,000E-05	3,495E-05	7,325E-05	3,395E-05	3,959E-03	4,534E-03	4,647E-03	4,404E-03	
142 Eglisau	USM (MALM)			3,704E-05	7,946E-05	3,532E-05	4,123E-03	3,962E-03	4,031E-03	3,753E-03	
143 Eglisau	USM (MALM)			5,399E-05	1,188E-04	5,054E-05	3,933E-03	3,791E-03	3,865E-03	3,548E-03	
144 Eglisau	USM (MALM)			3,094E-05	6,818E-05	2,926E-05	3,341E-03	3,172E-03	3,260E-03	3,000E-03	
304 Schafisheim	USM (MALM)	2,270E-04		2,299E-05	1,393E-04		2,165E-03	1,954E-03	2,137E-03		
302 Weiach 243-267m	MALM	1,795E-03	8,860E-04	7,240E-04	1,155E-03		7,664E-03	7,561E-03	7,599E-03		

A: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität
B: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität bei Calcitsättigung
C: berechnete Werte mit gemessenem pH und "Total Inorganic Carbon" bei Calcitsättigung

Tabelle 12c:
NAGRA-Programm
Modellierung des Karbonatsystems

		CO3 (Molalität)			OH (Molalität) berechnet			Log pCO2 (bars)		
analysiert		A	B	C	A	B	C	A	B	C
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER										
42	Schwarzenberg	OSM	9,545E-06		8,655E-06	8,372E-07		8,372E-07	-1,77	-1,81
135	Stallikon Quelle	OSM	2,146E-05	1,041E-05		7,666E-06	7,479E-06		-1,97	-1,66
137	Stallikon	OSM	4,548E-06			7,845E-06			-3,42	
130	Gränichen	USM	1,616E-05	9,807E-06	1,615E-05	9,611E-07	8,947E-07	9,612E-07	-2,16	-1,94
33	Fulenbach	USM	4,259E-06		3,968E-06	8,327E-07		8,327E-07	-1,70	-1,73
32	Attisholz	USM	8,680E-06		1,156E-05	7,521E-08		7,537E-08	-1,75	-1,62
7	Malleray	MALM	5,545E-06		5,225E-06	3,752E-06		3,752E-06	-2,22	-2,25
99	Welschingen	MALM	1,756E-05	8,727E-06	1,785E-05	8,848E-07	8,226E-07	8,848E-07	-1,89	-1,59
80	Durlinsdorf	MALM	8,129E-06		7,854E-06	1,634E-06		1,634E-06	-1,50	-1,51
30	Wildegg	MISCHWASSER	3,902E-06		2,931E-06	2,258E-08		2,258E-08	-1,14	-1,26
85	Steinenstadt	MISCHWASSER	2,021E-05	1,046E-05	2,079E-05	2,867E-05	1,763E-05	2,867E-05	-1,80	-1,51
501B	Reichenau	MISCHWASSER	2,994E-05	1,671E-05		1,955E-06	1,569E-06		-2,52	-2,26
ERDALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER										
96	Oberbergen Quelle	VULKANIT	1,648E-05	1,160E-05	1,637E-05	2,573E-07	1,804E-07	2,571E-07	-2,10	-1,94
181	Oberbergen (T)	VULKANIT	2,722E-05	1,155E-05		2,178E-05	1,901E-05		-2,17	-1,79
170	Dettenberg	OMM	4,648E-05	1,216E-05		3,938E-05	3,281E-05		-2,30	-1,71
502B	Sauldorf	OMM	1,436E-05	1,173E-05		9,434E-06	9,055E-06		-2,13	-2,04
5	Schönenbuch	USM	1,623E-05	1,420E-05	1,577E-05	1,059E-07	9,259E-08	1,060E-07	-1,69	-1,63
149	Beuren	MALM	1,727E-05	1,078E-05	1,417E-05	1,208E-07	7,515E-08	9,516E-08	-1,89	-1,69
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER										
98	Konstanz	OMM	1,101E-03	3,422E-04	2,412E-04	3,459E-04	9,216E-06	6,273E-06	9,217E-06	-3,30
98B	Konstanz	OMM		2,307E-04	1,330E-04		8,970E-06	5,517E-06		-3,35
128	Mainau	OMM	6,011E-04	3,887E-04	1,933E-04	5,843E-04	1,069E-04	1,015E-04	1,144E-04	-3,34
128B	Mainau	OMM		5,660E-04	1,062E-04		1,144E-04	4,766E-05		-3,28
508B	Birnau	OMM		1,274E-04	7,522E-05		3,998E-06	2,278E-06		-3,64
509B	Ravensburg	OMM		7,523E-04	1,126E-04		3,205E-05	1,039E-05		-3,72
1	Aqui	OMM	1,202E-03	2,862E-04	2,244E-04		6,496E-06	5,176E-06		-3,19
97	Singen	MALM		1,085E-05		9,321E-06	3,218E-07	3,217E-07		-1,51
97B	Singen	MALM		8,421E-05	4,272E-05		9,543E-06	2,358E-06		-2,60
127	Lottstetten	MALM		4,862E-05	3,718E-05	4,819E-05	7,173E-07	5,459E-07	7,173E-07	-2,14
77	Neuwiller	DOGGER		1,642E-05		1,569E-05	5,661E-07	5,661E-07		-1,50
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGUNDWÄSSER										
2	Tiefenbrunnen	OMM		5,563E-05	3,969E-05	5,470E-05	1,063E-06	7,524E-07	1,063E-06	-2,49
141	Eglisau	USM (MALM)	4,009E-04	1,055E-04	5,296E-05	1,025E-04	1,435E-06	6,981E-07	1,435E-06	-3,15
142	Eglisau	USM (MALM)		8,510E-05	4,167E-05	8,115E-05	1,860E-06	7,332E-07	1,860E-06	-3,08
143	Eglisau	USM (MALM)		6,462E-05	3,056E-05	6,050E-05	1,186E-06	4,828E-07	1,186E-06	-2,91
144	Eglisau	USM (MALM)		7,499E-05	3,598E-05	7,093E-05	1,501E-06	7,000E-07	1,501E-06	-3,14
304	Schafisheim	USM (MALM)	2,512E-05	5,465E-05	1,597E-05		8,356E-05	8,220E-05		-3,16
302	Weiach 243-267m	MALM		3,054E-05	1,935E-05		6,721E-05	5,418E-05		-1,73

A: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität
 B: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität bei Calcitsättigung
 C: berechnete Werte mit gemessenem pH und "Total Inorganic Carbon" bei Calcitsättigung

Tabelle 13a:
NAGRA-Programm
Sättigungsindizes

		Calcit			Dolomit			Gips		Anhydrit	
		A	B	C	A	B	C	A/B	C	A/B	C
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER											
42	Schwarzenberg	OSM	-0,03		-0,07	-0,69	-0,77	-2,12	-2,11	-2,67	-2,66
135	Stallikon Quelle	OSM	0,31	0,00		0,16	-0,47	-1,56		-2,10	
137	Stallikon	OSM	-0,36			-1,19		-1,81		-2,35	
130	Gränichen	USM	0,22	0,00	0,22	-0,37	-0,80	-2,00		-2,48	
33	Fulenbach	USM	-0,37		-0,40	-1,57		-1,63		-2,89	
32	Attisholz	USM	-0,02		0,09	-0,97		-0,74		-2,50	
7	Malleray	MALM	-0,33		-0,36	-1,37		-1,42		-3,67	
99	Welschingen	MALM	0,30	0,00	0,31	-0,28	-0,89	-2,01		-2,52	
80	Durlinsdorf	MALM	-0,01		-0,02	-1,31		-1,34		-2,82	
30	Wildeggen	MISCHWASSER	-0,45		-0,56	-1,42		-1,65		-2,21	-2,19
85	Steinenstadt	MISCHWASSER	0,29	0,00	0,30	0,15	-0,42	0,18		-1,28	
501B	Reichenau	MISCHWASSER	0,25	0,00		0,07	-0,43	-1,89		-2,37	
ERDALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER											
96	Oberbergen Quelle	VULKANIT	0,15	0,00	0,15	-0,06	-0,36	-0,06		-2,03	-2,43
181	Oberbergen (T)	VULKANIT	0,37	0,00		0,46	-0,28			-1,89	-2,30
170	Dettenberg	OMM	0,58	0,00		0,90	-0,27			-1,99	-2,48
502B	Sauldorf	OMM	0,09	0,00		-0,28	-0,46			-2,52	-3,06
5	Schönenbuch	USM	0,06	0,00	0,05	0,09	-0,02	0,07		-2,90	-3,39
149	Beuren	MALM	0,20	0,00	0,20	0,00	-0,41	0,00		-2,48	-2,97
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER											
98	Konstanz	OMM	0,13	0,00	0,13	0,11	-0,15	0,12		-3,50	-3,83
98B	Konstanz	OMM	0,22	0,00		-0,03	-0,47			-3,26	-3,59
128	Mainau	OMM	0,27	0,00		0,24	-0,32	0,74		-2,97	-3,47
128B	Mainau	OMM	0,11	0,00		0,41	0,18			-2,72	-3,05
508B	Birna	OMM	0,22	0,00		0,30	-0,14			-3,41	-3,86
509B	Ravensburg	OMM	0,68	0,00		1,06	-0,36			-3,62	-3,93
1	Aqui	OMM	0,09	0,00	0,09	0,04	-0,16	0,02		-3,03	-3,39
97	Singen	MALM	-0,59		-0,65	-1,46		-1,58		-1,75	-2,03
97B	Singen	MALM	0,29	0,00		0,74	0,15			-1,72	-2,00
127	Lottstetten	MALM	0,12	0,00	0,11	0,22	-0,01	0,21		-2,39	-2,79
77	Neuwiller	DOGGER	-0,10		-0,12	-0,55		0,06		-2,15	-2,36
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGUNDWÄSSER											
2	Tiefenbrunnen	OMM	0,15	0,00	0,14	0,29	0,00	0,28		-1,37	-1,71
141	Eglisau	USM (MALM)	0,30	0,00	0,28	0,50	-0,09	0,47		-1,86	-0,14
142	Eglisau	USM (MALM)	0,31	0,00	0,29	0,47	-0,15	0,43		-2,01	-2,46
143	Eglisau	USM (MALM)	0,32	0,00	0,30	0,50	-0,14	0,45		-1,78	-2,23
144	Eglisau	USM (MALM)	0,32	0,00	0,29	0,52	-0,11	0,47		-1,77	-2,21
304	Schafisheim	USM (MALM)	0,70	0,00		1,28	-0,13			-3,15	-3,43
302	Weiach 243-267m	MALM	0,20	0,00		0,43	0,03			-2,37	-2,78

A: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität

B: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität bei Calcitsättigung

C: berechnete Werte mit gemessenem pH und "Total Inorganic Carbon" bei Calcitsättigung

Tabelle 13b:
NAGRA-Programm
Sättigungsindizes

			Chalcedon	Quarz	Strontianit		Rhodochrosit		Siderit		Witherit	
			A/B/C	A/B/C	A	B	A	B	A	B	A	B
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER												
42	Schwarzenberg	OSM	-0,04	0,44	-1,69	-1,65					-3,40	-3,37
135	Stallikon Quelle	OSM	-0,01	0,47	-1,33	-1,78	-2,20					
137	Stallikon	OSM	-0,14	0,35	-2,10	-1,88						
130	Gränichen	USM	-0,29	0,17	-1,64	-1,86	-1,74				-3,35	-3,56
33	Fulenbach	USM	-0,18	0,28	-2,27	-1,90	-2,33	-1,96			-3,71	-3,35
32	Attisholz	USM	-0,14	0,32	-1,98	-1,95					-3,38	-3,35
7	Malleray	MALM	-0,40	0,08	-2,45	-2,14	-1,63	-1,30	-3,91	-4,40	-3,54	-3,21
99	Welschingen	MALM	-0,11	0,37	-1,72	-2,03					-2,71	-3,01
80	Durlinsdorf	MALM	0,19	0,64							-3,97	-3,96
30	Wildeggen	MISCHWASSER	-0,10	0,37	-1,66	-1,21					-3,74	-3,30
85	Steinenstadt	MISCHWASSER	-0,18	0,29	-1,11	-1,39	-1,95	-2,24	-0,94	-0,79	-3,46	-3,75
501B	Reichenau	MISCHWASSER							-3,31	-2,88		
ERDALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGRUNDWÄSSER												
96	Oberbergen Quelle	VULKANIT	0,28	0,73	-0,73	-0,88					-3,22	-3,37
181	Oberbergen (T)	VULKANIT					-0,67	-1,04	-3,33	-2,83		
170	Dettenberg	OMM	0,22	0,69	-0,63	-1,21	-1,23	-1,82	-2,81	-1,97		
502B	Sauldorf	OMM							-2,52	-2,40		
5	Schönenbuch	USM	0,32	0,79	-1,58	-1,63	-1,33	-1,39			-2,94	-3,00
149	Beuren	MALM	0,04	0,51	-1,49	-1,69					-2,84	-3,04
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGRUNDWÄSSER												
98	Konstanz	OMM	-0,14	0,28	-0,38	-0,52					-1,33	-1,48
98B	Konstanz	OMM							-4,74	-4,01		
128	Mainau	OMM	-0,15	0,32	-0,14	-0,43	-0,11	-0,41	-3,21	-2,26	-1,66	-1,95
128B	Mainau	OMM							-2,24	-2,51		
508B	Birna	OMM										
509B	Ravensburg	OMM							-5,18	-2,50		
1	Aqui	OMM	-0,16	0,27	-0,07	-0,17	-1,04	-1,14			-1,91	-2,01
97	Singen	MALM	-0,30	0,11	-2,07	-1,22	-1,57	-0,72	-0,19	0,65	-3,48	-2,63
97B	Singen	MALM							0,75	0,72		
127	Lottstetten	MALM	-0,13	0,31	-0,77	-0,89	-1,06	-1,18	0,79	0,67	-2,93	-3,04
77	Neuwiller	DOGGER	-0,34	0,05	-1,37	-1,27	-1,68	-1,58	0,42	0,52	-2,83	-2,73
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGRUNDWÄSSER												
2	Tiefenbrunnen	OMM	-0,15	0,28	-0,14	-0,29	-1,77	-1,91			-3,31	-3,46
141	Eglisau	USM(MALM)	-0,14	0,33	-0,36	-0,66	-1,28	-1,58	-0,24	-0,53	-2,27	-2,57
142	Eglisau	USM(MALM)	-0,16	0,30	-0,22	-0,53	-1,08	-1,39	-1,43	-1,44	-2,80	-3,11
143	Eglisau	USM(MALM)	-0,16	0,30	-0,18	-0,50	-1,18	-1,51	-0,58	-0,89	-3,10	-3,43
144	Eglisau	USM(MALM)	-0,17	0,28	-0,19	-0,51	-1,02	-1,34			-3,00	-3,32
304	Schafisheim	USM(MALM)	-0,10	0,32	-0,01	-0,55	-0,40	-0,93	0,45	-0,08	-2,52	-3,06
302	Weiach 243-267m	MALM	-0,28	0,16	-0,72	-0,85	-0,44	-0,57			-2,14	-2,27

A: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität

B: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität bei Calcitsättigung

C: berechnete Werte mit gemessenem pH und "Total Inorganic Carbon" bei Calcitsättigung

Tabelle 13c:
NAGRA-Programm
Sättigungsindizes

			Baryt		Coelestin		Fluorit		Uraninit		Portland-Zement	
			A	B	A	B	A	B	A	B	A	B
OBERFLÄCHENNAHE GRUNDWÄSSER												
42	Schwarzenberg	OSM	-0,03	-0,03	-2,57	-2,57	-2,79	-2,79	-18,05	-18,12	-12,50	-12,43
135	Stallikon Quelle	OSM			-2,13	-2,13	-3,04	-3,04	-19,31	-18,26	-11,17	-12,07
137	Stallikon	OSM			-2,47	-2,47	-3,06	-3,06	-18,13	-18,60	-10,35	-9,90
130	Gränichen	USM	-0,16	-0,16	-2,63	-2,63	-2,76	-2,76	-13,62	-13,11	-11,39	-11,83
33	Fulenbach	USM	-0,35	-0,35	-3,08	-3,08	-3,50	-3,50	-13,06	-13,86	-12,46	-11,72
32	Attisholz	USM	0,00	0,00	-2,76	-2,76	-2,71	-2,71	-15,55	-15,60	-11,98	-11,94
7	Malleray	MALM	-0,93	-0,93	-4,07	-4,07	-3,96	-3,97	-14,01	-14,78	-12,17	-11,50
99	Welschingen	MALM	0,41	0,41	-2,81	-2,81	-2,57	-2,57	-14,20	-13,47	-11,82	-12,43
80	Durlinsdorf	MALM	-0,96	-0,96			-3,38	-3,38	-12,38	-12,41	-12,11	-12,09
30	Wildeggen	MISCHWASSER	0,40	0,40	-1,70	-1,70	-1,32	-1,32	-7,64	-8,63	-13,19	-12,30
85	Steinenstadt	MISCHWASSER	0,85	0,85	-0,97	-0,97	-2,23	-2,23	11,29		-11,68	-12,25
501B	Reichenau	MISCHWASSER									-11,07	-11,58
ERDALKALI-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER												
96	Oberbergen Quelle	VULKANIT	-0,05	-0,05	-1,66	-1,66	-1,62	-1,62	-12,99	-12,64	-11,09	-11,40
181	Oberbergen (T)	VULKANIT									-10,82	-11,58
170	Dettenberg	OMM			-1,98	-1,98	-2,98	-2,98	-14,88	-13,39	-10,94	-12,11
502B	Sauldorf	OMM									-11,97	-12,15
5	Schönenbuch	USM	-0,49	-0,49	-3,31	-3,31	-3,38	-3,38	-10,42	-10,28	-12,10	-12,21
149	Beuren	MALM	-0,11	-0,11	-2,95	-2,95	-2,37	-2,37	-11,64	-11,16	-11,75	-12,15
NATRIUM-HYDROGENKARBONAT-TIEFENGUNDWÄSSER												
98	Konstanz	OMM	0,34	0,35	-2,74	-2,73	-2,71	-2,69	-15,60	-15,16	-9,48	-9,79
98B	Konstanz	OMM									-9,39	-9,88
128	Mainau	OMM	0,51	0,52	-2,16	-2,15	-0,59	-0,56	-15,16	-14,25	-10,32	-10,94
128B	Mainau	OMM									-11,04	-11,85
508B	Birna	OMM									-9,77	-10,25
509B	Ravensburg	OMM									-8,45	-10,15
1	Aqui	OMM	0,29	0,29	-1,94	-1,93	-1,96	-1,94	-16,37	-16,05	-9,84	-10,06
97	Singen	MALM	1,08	1,08	-1,71	-1,71	-0,42	-0,42	-3,21		-13,20	-11,49
97B	Singen	MALM									-11,33	-11,38
127	Lottstetten	MALM	-0,09	-0,09	-2,03	-2,03	-0,43	-0,43			-11,06	-11,29
77	Neuwiller	DOGGER	0,33	0,33	-2,13	-2,13	-0,62	-0,62	-1,30	-1,52	-10,82	-10,63
NATRIUM-CHLORID-TIEFENGUNDWÄSSER												
2	Tiefenbrunnen	OMM	0,48	0,48	-0,39	-0,39	-1,01	-1,01	-1,08	-0,67	-10,38	-10,68
141	Eglisau	USM(MALM)	0,99	0,99	-1,29	-1,29	-1,47	-1,46	-0,67	0,20	-10,43	-11,04
142	Eglisau	USM(MALM)	0,27	0,27	-1,31	-1,31	-1,35	-1,35	-6,81	-5,92	-10,27	-10,91
143	Eglisau	USM(MALM)	0,17	0,17	-1,05	-1,05	-1,37	-1,37	-4,94	-4,02	-10,39	-11,05
144	Eglisau	USM(MALM)	0,29	0,29	-1,05	-1,05	-1,31	-1,31	-5,06	-4,14	-10,11	-10,77
304	Schafisheim	USM(MALM)	-0,79	-0,79	-2,43	-2,43	-0,80	-0,80	1,09	1,65	-9,91	-11,02
302	Weiach 243-267m	MALM	0,78	0,78	-1,97	-1,97	-0,39	-0,45	-5,46	-5,11	-11,87	-12,13

A: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität
B: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität bei Calcitsättigung

Tabelle 14a:
Erdölbohrungen USM
Modellierung des Karbonatsystems

		Temperatur (°C)	"Total Inorganic Carbon" (Molalität)		pH		Totale Alkalinität	CO2(aq) (Molalität)		HCO3	
			A	B	A	B		A	B	A	B
601	1 Berlingen	50	4,657E-03	5,724E-03	7,40	6,73	5,058E-03	2,148E-04	1,070E-03	4,339E-03	4,630E-03
	2 Berlingen	55	1,650E-02	2,831E-02	8,30	6,40	1,846E-02	1,039E-02	1,036E-04	1,840E-02	1,455E-02
602	1 Boswil 1	25	8,861E-03	1,190E-02	9,50	7,82	1,171E-02	3,437E-06	3,072E-04	6,210E-03	1,149E-02
	2 Boswil 1	27	2,597E-03	4,355E-03	9,80	7,73	4,285E-03	2,711E-07	1,230E-04	1,092E-03	4,183E-03
	3 Boswil 1	30	7,590E-03	9,652E-03	7,60	6,68	7,455E-03	2,562E-04	2,211E-03	7,217E-03	7,426E-03
	4 Boswil 1	34	8,332E-03	1,027E-02	7,40	6,69	7,969E-03	4,427E-04	2,332E-03	7,811E-03	7,938E-03
	5 Boswil 1	43	1,851E-02	2,158E-02	7,20	6,75	1,694E-02	1,646E-03	4,667E-03	1,679E-02	1,688E-02
603	1 Hünenberg	64	2,704E-02	2,798E-02	7,70	6,29	4,717E-02	6,749E-04	1,935E-02	2,494E-02	2,776E-02
605	1 Pfaffnau 1	22	3,660E-03	3,691E-03	7,67	7,60	3,659E-03	1,345E-04	1,579E-04	3,498E-03	3,510E-03
606	1 Pfaffnau Süd 1	26	5,877E-03	5,990E-03	7,90	7,87	5,813E-03	1,324E-04	1,413E-04	5,693E-03	5,700E-03
	2 Pfaffnau Süd 1	27	5,690E-03		7,80		5,587E-03	1,538E-04		5,486E-03	
	3 Pfaffnau Süd 1	27	4,648E-03	4,730E-03	7,90	7,71	4,616E-03	1,008E-04	1,583E-04	4,497E-03	4,539E-03
	4 Pfaffnau Süd 1	28	5,311E-03	5,421E-03	7,70	7,51	5,178E-03	1,755E-04	2,716E-04	5,094E-03	5,123E-03
	5 Pfaffnau Süd 1	28	4,240E-03	4,331E-03	7,60	7,44	4,113E-03	1,693E-04	2,473E-04	4,037E-03	4,061E-03
	6 Pfaffnau Süd 1	29	4,781E-03	5,226E-03	7,70	7,14	4,693E-03	1,477E-04	5,500E-04	4,576E-03	4,660E-03
608	1 Pfaffnau Süd 5	22	3,384E-03	6,125E-04	10,90	11,77	7,254E-03	7,620E-09	2,647E-11	3,300E-04	8,628E-06
	2 Pfaffnau Süd 5	25	5,408E-03	9,276E-03	10,40	8,85	1,039E-02	6,523E-08	1,889E-05	1,001E-03	8,224E-03
	3 Pfaffnau Süd 5	28	7,035E-03	8,085E-03	9,10	8,06	8,097E-03	8,619E-06	1,205E-04	6,101E-03	7,853E-03
	4 Pfaffnau Süd 5	28	6,534E-03	1,520E-05	11,70	12,10	2,123E-02	2,184E-10	6,572E-14	6,577E-05	5,123E-08
	5 Pfaffnau Süd 5	29	3,567E-03	4,117E-03	9,10	8,16	4,162E-03	3,994E-06	4,628E-05	2,986E-03	3,982E-03
	6 Pfaffnau Süd 5	30	2,451E-03		7,70		2,409E-03	7,228E-05		2,349E-03	
	7 Pfaffnau Süd 5	33	2,592E-03		7,80		2,569E-03	6,189E-05		2,493E-03	
	8 Pfaffnau Süd 5	34	2,708E-03		6,70		2,130E-03	6,017E-04		2,102E-03	

A: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität

B: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität bei Calcitsättigung

Tabelle 14b:
Erdölbohrungen USM
Modellierung des Karbonatsystems

		CO ₃		OH		Log pCO ₂ bars	
		(Molalität)					
		A	B	A	B	A	B
601	1 Berlingen	1,035E-04	2,366E-05	4,885E-04	3,161E-04	-1,93	-1,24
	2 Berlingen	1,852E-03	3,052E-05	2,426E-05	3,082E-07	-2,22	-0,22
602	1 Boswil 1	2,648E-03	1,031E-04	4,042E-05	8,365E-07	-3,99	-2,04
	2 Boswil 1	1,505E-03	4,920E-05	1,010E-04	8,525E-07	-5,06	
	3 Boswil 1	1,171E-04	1,438E-05	8,472E-07	1,010E-07	-2,04	-1,11
	4 Boswil 1	7,805E-05	1,531E-05	6,911E-07	1,333E-07	-1,77	-1,05
	5 Boswil 1	7,505E-05	2,683E-05	7,197E-07	2,553E-07	-1,12	-0,67
603	1 Hünenberg	1,421E-03	6,196E-05	1,960E-04	5,304E-05	-1,34	1,34
605	1 Pfaffnau 1	2,681E-05	2,300E-05	1,071E-04	1,031E-04	-2,43	-2,36
606	1 Pfaffnau Süd 1	5,154E-05	4,841E-05	1,046E-06	9,815E-07	-2,39	-2,37
	2 Pfaffnau Süd 1	4,977E-05		9,510E-07		-2,32	
	3 Pfaffnau Süd 1	5,044E-05	3,272E-05	1,222E-06	7,851E-07	-2,50	-2,30
	4 Pfaffnau Süd 1	4,143E-05	2,709E-05	8,312E-07	5,403E-07	-2,25	-2,06
	5 Pfaffnau Süd 1	3,297E-05	2,284E-05	7,316E-07	5,038E-07	-2,26	-2,10
	6 Pfaffnau Süd 1	5,807E-05	1,620E-05	9,552E-07	2,613E-07	-2,31	-1,74
608	1 Pfaffnau Süd 5	3,054E-03	6,039E-04	8,004E-04	6,021E-03	-6,68	-9,14
	2 Pfaffnau Süd 5	4,407E-03	1,033E-03	3,373E-04	9,568E-06	-5,70	-3,24
	3 Pfaffnau Süd 5	9,257E-04	1,107E-04	1,927E-05	1,774E-06	-3,56	-2,41
	4 Pfaffnau Süd 5	6,469E-03	1,515E-05	8,176E-03	2,115E-02	-8,15	-11,67
	5 Pfaffnau Süd 5	5,767E-04	8,893E-05	2,243E-05	2,584E-06	-3,88	-2,81
	6 Pfaffnau Süd 5	2,968E-05		1,101E-06		-2,60	
	7 Pfaffnau Süd 5	3,737E-05		1,628E-06		-2,64	
	8 Pfaffnau Süd 5	4,185E-06		1,999E-05		-1,64	

A: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität

B: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität bei Calcitsättigung

Tabelle 15a:
Erdölbohrungen USM
Sättigungsindizes

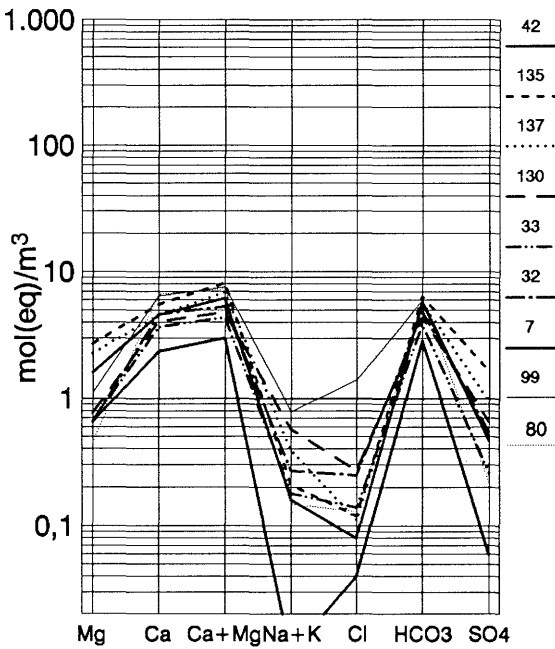
		Calcit		Dolomit		Sättigungsindizes Gips		Anhydrit	
		A	B	A	B	A	B	A	B
601	1 Berlingen	0,64	0,00	1,06	-0,23	-0,93		-0,99	
	2 Berlingen	1,74	0,00	3,22	-0,29	-1,44	-1,38	-1,45	-1,40
602	1 Boswil 1	1,28	0,00			-2,11	-1,97	-2,45	-2,31
	2 Boswil 1	1,45	0,00	1,49	-1,41	-1,39	-1,35	-1,70	-1,67
	3 Boswil 1	0,91	0,00	-0,38	-2,20	-0,56		-0,84	
	4 Boswil 1	0,71	0,00			-0,31		-0,55	
	5 Boswil 1	0,44	0,00	-0,33	-0,78	-2,01		-2,15	
603	1 Hünenberg	0,12	0,00	1,70	-0,99	-1,21	-1,19	-1,13	-1,10
605	1 Pfaffnau 1	0,07	0,00	-0,26	-0,39	-2,77		-3,15	
606	1 Pfaffnau Süd 1	0,03	0,00	-0,62	-0,67	-1,77		-2,10	
	2 Pfaffnau Süd 1	-0,04		0,20		-1,22		-1,54	
	3 Pfaffnau Süd 1	0,19	0,00	0,18	-0,20	-1,24		-1,55	
	4 Pfaffnau Süd 1	0,18	0,00	-0,09	-0,45	-1,09		-1,39	
	5 Pfaffnau Süd 1	0,16	0,00	0,08	-0,23	-1,19		-1,50	
	6 Pfaffnau Süd 1	0,55	0,00	0,37	-0,73	-1,71		-2,01	
608	1 Pfaffnau Süd 5	0,56	0,00			-3,89	-3,73	-4,26	-4,11
	2 Pfaffnau Süd 5	0,51	0,00			-4,02	-3,89	-4,35	-4,23
	3 Pfaffnau Süd 5	0,85	0,00			-2,19	-2,12	-2,49	-2,42
	4 Pfaffnau Süd 5	2,48	0,00	2,93	-2,43	-1,18	-0,98	-1,49	-1,29
	5 Pfaffnau Süd 5	0,79	0,00	1,55	-0,04	-1,56	-1,54	-1,86	-1,83
	6 Pfaffnau Süd 5	0,01		-0,26		-0,77		-1,05	
	7 Pfaffnau Süd 5	-0,09		-0,26					
	8 Pfaffnau Süd 5	-0,66		-1,65					

A: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität

B: berechnete Werte mit gemessenem pH und totaler Alkalinität bei Calcitsättigung

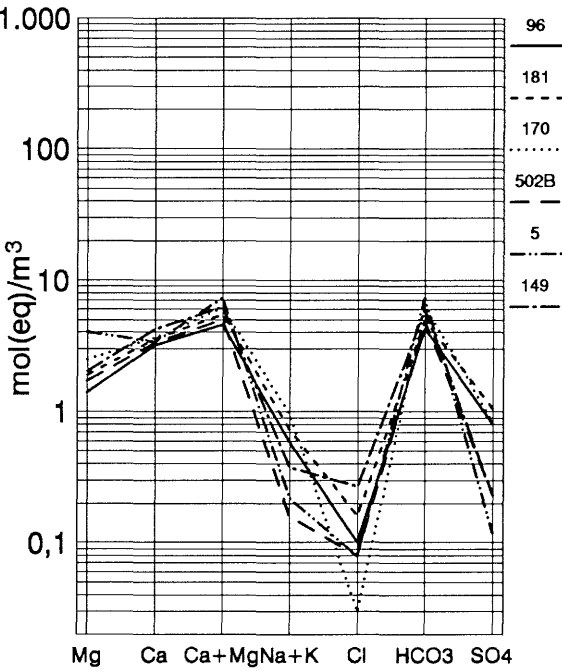
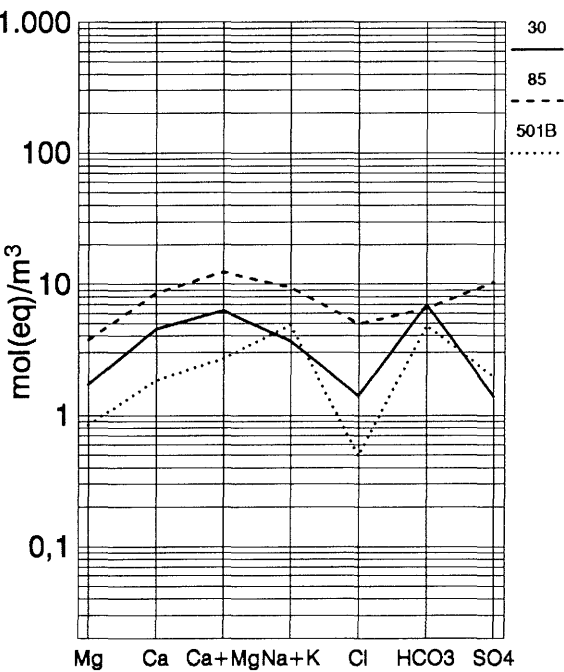
SCHOELLER-DIAGRAMME

Oberflächennahe Grundwasser



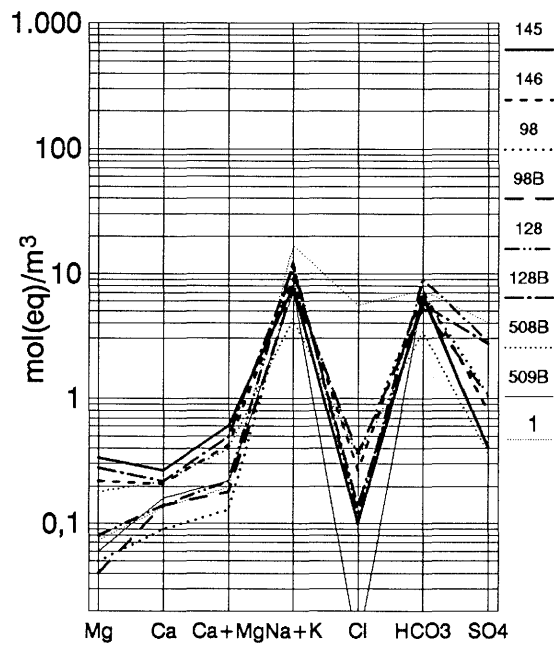
Erdalkali-Hydrogenkarbonat-Tiefengrundwasser

Mischwässer

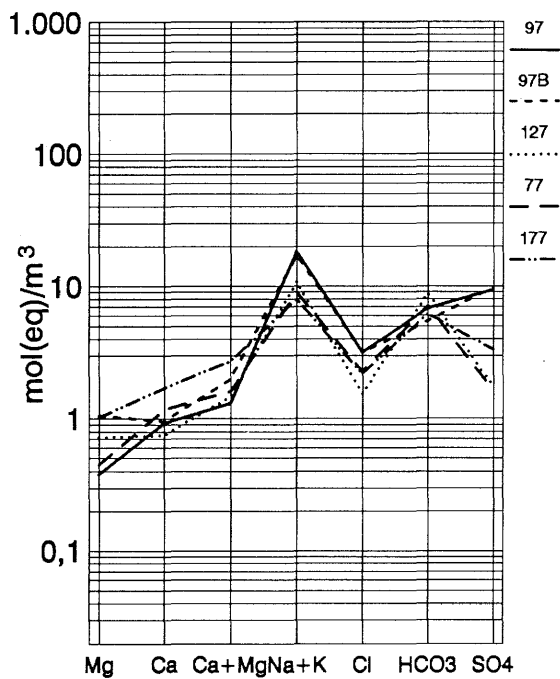


SCHOELLER-
DIAGRAMME

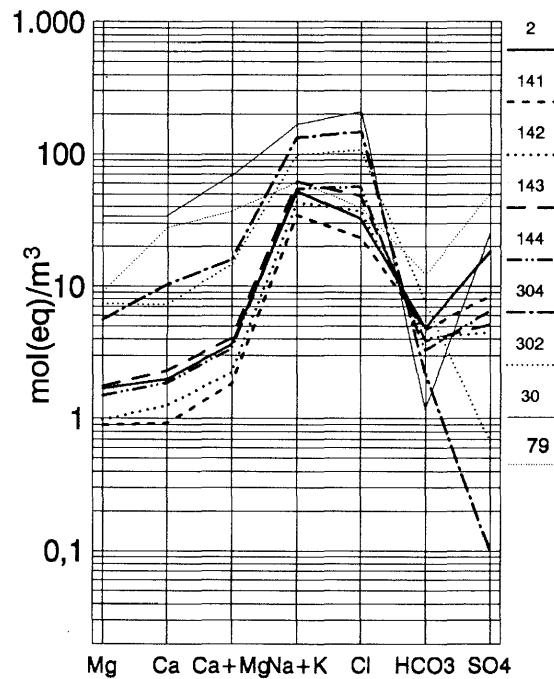
Natrium-Hydrogenkarbonat-
Tiefengrundwasser



Natrium-Hydrogenkarbonat-
Tiefengrundwasser



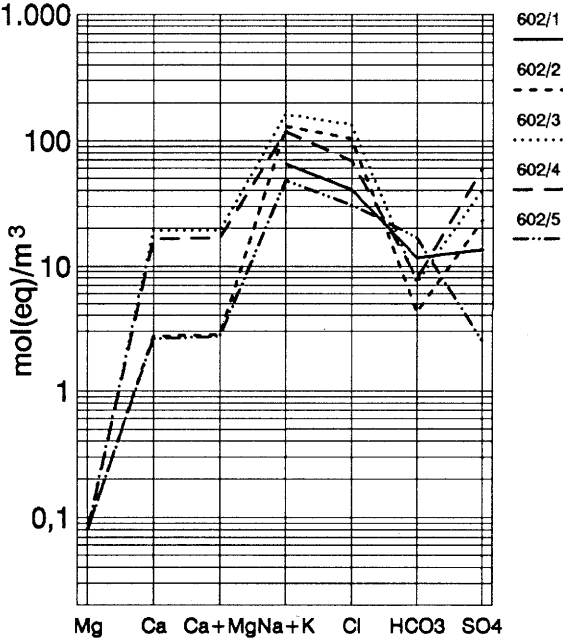
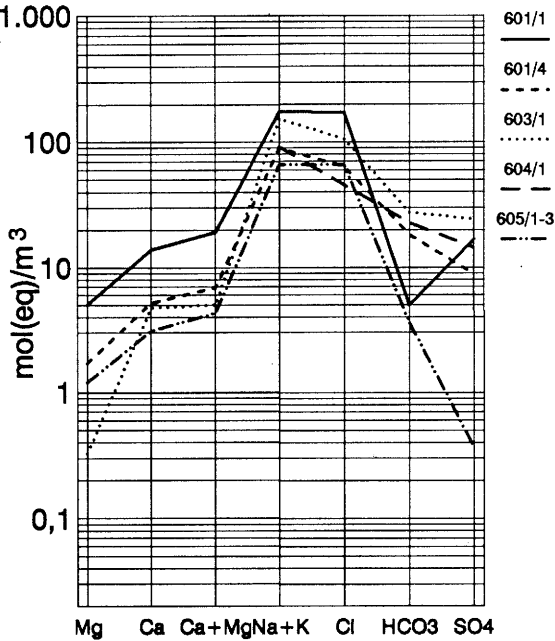
Natrium-Chlorid-
Tiefengrundwasser



SCHOELLER-DIAGRAMME

Berlingen 1
Hünenberg 1
Lindau 1
Pfaffnau 1

Boswil 1



Pfaffnau Süd 1

Pfaffnau Süd 5

