

Hydrochemische und hydraulische Untersuchungen eines gefluteten Bergwerkes

- Thermohydraulische Modellierung zur
geothermischen Nutzung des Grubenwasserpotentials -

Dissertation
zur Erlangung des Grades
„Doktor der Naturwissenschaften“

am Fachbereich Chemie, Pharmazie und Geowissenschaften
der Johannes Gutenberg-Universität Mainz

von Dipl.-Geol. Christiane Streb

geboren in Worms

Mainz 2012

Dekan:

1. Berichterstatter:

2. Berichterstatter:

Tag der mündlichen Prüfung:

„Das Prinzip aller Dinge ist das Wasser,
denn Wasser ist alles
und ins Wasser kehrt alles zurück“

Thales von Milet

I Kurzfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die geflutete Eisenerzgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm im Rheinischen Schiefergebirge untersucht. Der Auslauf der Grube Wolf auf dem Niveau des Neuen Förderstollens stellt die einzige bekannte Entwässerung der Grube dar, über die temperiertes Grubenwasser in freiem Gefälle austritt. Dieses Wasser und die weiteren in die Grube eingestauten Grubenwässer wurden im Hinblick auf ihr geothermisches Potential und als Voraussetzung für die Erstellung eines 2D- und 3D-thermohydraulischen Modells der Grube umfangreich untersucht. Es zeigte sich, dass das frei ausfließende Wasser bei einem Basisabfluss von rund 6 l/s eine stabile Temperatur von 16,9°C aufweist. Die weiteren, in die Grube eingestauten Wässer weisen vergleichbare Temperaturen auf. Aus der Ermittlung der eingestauten Wassermenge von rund 2,43 Mio. m³ Wasser resultiert ein vergleichsweise hohes geothermisches Potential zu Heizzwecken.

Zur Ermittlung, welche Mengen Grubenwasser der Verbundgrube entnommen, und abgekühlt in das Grubengebäude reinfiltiert werden, können, ohne eine Verringerung des geothermischen Potentials am Auslauf der Grube hervorzurufen, wurde eine thermohydraulische Modellierung mit FEFLOW durchgeführt. Im Rahmen von 2D-Szenario-Modellierungen wurde ermittelt, welche Baueinheiten der Grube (Schächte, Sohlen, Erzrollen, verfüllte Abbaubereiche) einen wesentlichen Einfluss auf die gesamthydraulischen Verhältnisse aufweisen. Aus dieser Modellierung zeigte sich, dass die Kenntnis der wesentlichen, die Bergwerke untereinander verbindenden Sohlen notwendig ist, um im Rahmen einer 3D-Übersichtsmodellierung einerseits ausreichend genaue Resultate im Hinblick auf die Fragestellung zu erzielen. Andererseits ist es auf Grund der großen Komplexität der Verbundgrube nicht möglich, alle einzelnen Sohlen, Erzrollen etc. im Modell umzusetzen. Während im unterdevonischen Kluftgrundwasserleiter geringer Ergiebigkeit sich Strömung nach laminaren Gesichtspunkten beschreiben lässt, ist das Strömungsverhalten innerhalb von Schächten und Sohlen eines gefluteten Bergwerkes als turbulent zu betrachten.

Über das 3D-Modell konnte das thermohydraulische Prinzip der gefluteten Grube unter Berücksichtigung von Hauptschächten und Haupt-Sohlen bzw. wesentlichen, an der Hydraulik beteiligten Sohlen nachgebildet werden. Die Szenariomodellierungen (Grubenwasserentnahme am Schacht II von Grube San Fernando und Reinfiltration des abgekühlten Grubenwassers am Schacht II von Grube Friedrich Wilhelm) zeigen, dass mit steigender Fördermenge die am Auslauf der Grube Wolf frei austretende Wassermenge nur in geringem Maße verringert wird, während die Temperatur des Wassers auf einem stabilen Niveau bleibt.

II Abstract

Within this work the flooded iron ore mine San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm located in the Rhenish Massif was investigated. The free discharge of mine Wolf is located on the topographic level of the so called Neuer Förderstollen and is the only known place where warm groundwater is dewatered from the mine. The discharging mine water and the further mine water located in the different parts (e.g. shafts) of the mine was investigated regarding their geothermal potential as precondition for the development of two-dimensional and three-dimensional thermo hydraulic models. It was found that the discharged mine water show a base flow of approximately 6 l/s with a stable temperature of around 16.9°C. The further mine water show comparable temperatures. The calculated overall amount of mine water inside the flooded mine with approximately 2.43 Mio m³ of water shows a high geothermal potential for heating use.

For the determination which amounts of warm mine water can be taken from the mine and can get infiltrated cooled back without any reduction of the geothermal potential at the free discharge a thermo hydraulic model of the mine was set up with FEFLOW. Within the two-dimensional modeling the construction units (shafts, galleries, backfilled areas) of the mine which influence the overall hydraulic conditions are identified. By this modeling it is shown that the knowledge of the interconnecting galleries between the different parts of the flooded mine are necessary on the one hand to have sufficient precise results regarding the problem setting. On the other hand according to the highly complex geometrical structures of the mine not every single gallery or ore roll can be implemented within the model. As the Devonian aquifuge / aquitard with low productivity is described and modeled according to laminar flow the flow regime of shafts and galleries of flooded mines can be described according to turbulent flow law. From the three-dimensional model the thermo hydraulic functions of the flooded mine regarding the main shafts and main galleries could be set up. The scenario modeling (groundwater extraction located at Shaft 2 of mine San Fernando and infiltration of cooled water back at Shaft 2 of mine Friedrich Wilhelm) show that with increasing production rate the discharging amount of water at the free discharge of mine Wolf is decreasing to a lesser extend whereas water temperature remains constantly.

III Danksagung

Für die Betreuung meiner Dissertation und die fachliche wie praktische Unterstützung bedanke ich mich herzlich bei Herrn Prof. Dr. G. Wieber.

Für die Erstellung des Zweitgutachtens und die Abnahme der Prüfung danke ich Herrn Prof. Dr. M. Kersten.

Ein besonderer Dank gilt Herrn Bürgermeister U. Erner (Stadt Herdorf), ohne dessen Engagement und Vertrauen dieses Projekt nicht zustande gekommen wäre. Ebenso möchte ich mich bei Dipl.-Geol. S. Pohl für die tatkräftige Unterstützung bei den Grubenbefahrungen sowie die Bereitstellung von Untertage-Fotographien bedanken.

Vielen Dank auch an Herrn Dr. F. Enzmann für die Bereitstellung entsprechender PC-Hardware sowie die fachliche Diskussion im Rahmen der Modellierung.

Dem Landesamt für Geologie und Bergbau, in besonderem Maße Herrn R. Tschauder sowie Frau S. Kloy danke ich für die Bereitstellung der Grubenrisse sowie für die Unterstützung in bergrechtlichen Fragestellungen.

Bei Frau C. Berg und Frau R. Walter möchte ich mich für die Durchführung der Analytik als auch für die moralische Unterstützung herzlich bedanken.

Allen Kollegen und Kolleginnen des igem, insbesondere Dr. Hagen Deckert und Dr. Melanie Bock danke ich für das entgegengebrachte Vertrauen, Geduld sowie für die moralische Unterstützung.

Einen herzlichen Dank an Dipl.-Geol. Florian Malm für hilfreiche Diskussionen und seine moralische Unterstützung.

Herzlich bedanken möchte ich mich bei Frau Prof. Dr. Kirsten Grimm und Herrn Dr. Matthias Grimm für die hilfreichen, fachlichen Diskussionen sowie das Korrekturlesen. Stephan Porr, Ludwig Simon und Matthias Smolka danke ich für die Begleitung bei den Probenahmen sowohl über als auch unter Tage, sowie im Speziellen Ludwig Simon hinsichtlich aller Fragen rund um Computer Hard- und Software.

Ganz besonderer Dank gilt meinem Ehemann Dipl.-Geol. Alexander Streb. Ohne seine moralische Unterstützung und liebevolle Zuwendung sowie fachlich anregende Diskussionen würde diese Arbeit in dieser Form nicht vorliegen.

IV Inhaltsverzeichnis

	Seite
I. Kurzfassung	01
II. Abstract	02
III. Danksagung	03
IV. Inhaltsverzeichnis	05
1. Einleitung	06
2. Grundlagen	10
2.1. Geothermie allgemein und Geothermie aus Grubenwasser	10
2.2. Wärmetransport im Untergrund	12
2.3. Hydrodynamik allgemein und Hydrodynamik gefluteter Gruben	14
3. Untersuchungsgebiet	21
3.1. Geographischer Überblick	21
3.2. Geologischer Überblick	22
3.3. Hydrologie und Hydrogeologie	27
3.4. Bergbau	32
3.5. Florz-Füsseberger Gangzug	37
3.5.1. Verbundgrube San Fernando-Wolf	41
3.5.2. Verbundgrube Füsseberg-Friedrich Wilhelm	44
4. Untersuchungen	47
4.1. Hydrochemie Grubenwasser	47
4.1.1. Methodik	47
4.1.2. Ergebnisse	49
4.1.3. Hydrochemische Gleichgewichtsmodellierung	56
4.2. Grundwasserneubildung	65
4.3. Abflussmessungen am Tiefen Stollen der Grube Wolf	70
4.4. Hydraulik	77
4.4.1. Tiefenmessungen Schacht Wolf, Grube Wolf	78
4.4.2. Tiefenmessungen Schacht 2, Grube San Fernando	80
4.4.3. Strömungsgeschwindigkeit	81
4.5. Bestimmung der eingestauten Wassermenge	83
4.5.1. Eingestaute Wassermenge in den Abbaubereichen	84
4.5.2. Eingestaute Wassermenge in den Sohlen	87

4.5.3.	Eingestaute Wassermenge in den Schächten	91
5.	Modellierung	95
5.1.	Geologisches Modell	97
5.2.	2D-Szenario-Modelle	100
5.2.1.	Modellaufbau	102
5.2.2.	Szenario-Modelle	107
5.2.2.1.	Szenario 1: tiefe Verbindungssohlen	107
5.2.2.2.	Szenario 2: alle Verbindungssohlen	109
5.2.2.3.	Szenario 3: alle Sohlen	111
5.2.2.4.	Szenario 4: Erzrollen	113
5.2.3.	Auswertung 2D-Szenario-Modellierungen	115
5.3.	3D-Modell der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg Friedrich Wilhelm	120
5.3.1.	Allgemeiner Modellaufbau	120
5.3.2.	3D-Strömungsmodell	135
5.3.3.	3D-Strömungs- und Wärmemodell	144
5.3.4.	3D-Szenariomodellierungen	149
6.	Diskussion	152
7.	Zusammenfassung	157
8.	Literaturverzeichnis	161
9.	Kartenverzeichnis	171
10.	Abbildungsverzeichnis	173
11.	Tabellenverzeichnis	178
12.	Anhang	180
12.1.	Anhang A: Zusammenstellung der Proben am Auslauf der Grube Wolf	180
12.2.	Anhang B: Zusammenstellung der Proben an den Schächten der Grube Wolf und San Fernando	183
12.3.	Anhang C: Hydrochemische Modellierungen mit PhreeqC	187
12.4.	Anhang D: Übersicht über die Position der als DFE modellierten Sohlen auf den verschiedenen Slices	254

1 Einleitung

Das dieser Dissertation zu Grunde liegende Projekt „Geothermische Nutzung von Grubenwasser“ wurde vom Europäischen Fond für regionale Entwicklung EFRE (koordiniert über das Ministerium für Umwelt, Forsten und Verbraucherschutz des Landes Rheinland-Pfalz) sowie der Stadt Herdorf gefördert. Die Stadt Herdorf im Siegerland blickt auf eine Jahrhundert lange bergbauliche Tradition zurück.

Der Bergbau im Rheinischen Schiefergebirge erreichte Teufen von z.T. mehr als 1000 m. Das Abteufen von Schächten und Sohlen in die ansonsten eher gering durchlässigen, schwach metamorph überprägten Gesteine hat zur Folge, dass großmaßstäblich und komplex verzweigte Strukturen den Untergrund durchziehen (STREB & WIEBER 2011). Diese Bereiche weisen gegenüber dem natürlichen Untergrund eine erhöhte Permeabilität auf. Einhergehend mit der Einstellung der Wasserhaltung wurde der Bergbau im Rheinischen Schiefergebirge in den 1960er Jahren eingestellt. Dies führte zur Flutung der Gruben. Das über die Schächte aufsteigende Grundwasser entwässert in der Regel über die Tiefen Stollen (topographisch tiefste Stollen mit übertägigem Kontakt) der Bergwerke (OFNER & WIEBER 2008). Abhängig von der jeweiligen Lokalität sind Schüttungen der Tiefen Stollen zwischen 10 und 35 l/s mit Temperaturen zwischen 17 und 25°C bekannt (STREB & WIEBER 2011). Diese im freien Gefälle austretenden Wässer können mittels Wärmepumpentechnik zum Heizen genutzt werden.

Auch heute noch sind in der Stadt Herdorf und dem Umland zahlreiche Hinweise auf den zurückliegenden Bergbau zu finden. Im Stadtgebiet finden sich verschiedene Lokalitäten mit, aus den gefluteten Gruben ausfließenden Grubenwässern. Eine dieser Lokalitäten, der Auslauf der Grube Wolf, befindet sich auf einem neu zu erschließenden Industriegelände. Im Rahmen einer von WIEBER (2007) durchgeführten Vorstudie zeigte sich, dass die Schüttung von Grubenwasser gegenüber der mittleren Grundwassertemperatur in Deutschland von 8-10°C eine erhöhte Temperatur aufweist. Um die Tradition des Bergbaus zu bewahren und einer erneuten Nutzung zuzuführen, wurde dieses Projekt zur geothermischen Nutzung des Grubenwasserpotentials initiiert. Ziel war es, die Hydrochemie und Hydraulik der gefluteten Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm zu klären bzw. vertiefend zu untersuchen und ein

thermohydraulisches Modell der Verbundgrube aufzustellen. Über die thermohydraulische Modellierung soll geklärt werden, an welchen weiteren Stellen innerhalb der Verbundgrube, z.B. an Schächten, Grubenwasser zu Heizzwecken entnommen werden kann, ohne das Potential am Auslauf der Grube Wolf nachteilig zu verändern. Dies ist sowohl auf die austretende Wassermenge als auch auf die Wassertemperatur bezogen.

Für eine Entnahme an Schächten innerhalb der Verbundgrube muss weiterhin geklärt werden, an welchen Stellen geeigneter Weise das geothermisch genutzte und abgekühlte Grubenwasser in das Bergwerk reinfiltiert werden kann. Die Reinfiltration stellt sicher, dass das hydraulische System der kommunizierenden Röhren nicht gestört wird und sich die Fließbedingungen im Grubengebäude nicht negativ verändern. Das Grubenwasser wird idealerweise in Bereiche infiltriert, von denen ein ausreichend langer Fließweg (= Fließzeit) besteht, damit sich das Wasser wieder erwärmen kann und es zu keiner nachteiligen Veränderung des thermischen Potentials kommt. Über das Modell und die verschiedenen Entnahme- bzw. Reinfiltrationsszenarien ist es möglich festzustellen, in wie weit weitere geothermische Nutzungen, neben der geplanten Nutzung am Auslauf des Neuen Förderstollens der Grube Wolf, realisiert werden können, ohne das vorliegende geothermische Potential am Auslauf der Grube Wolf zu verändern.

Für die Modellierung wurden mit FEFLOW (DHI-Wasy) im ersten Schritt 2D-Szenario-Modelle erstellt. Mittels der verschiedenen Szenarien konnte überprüft werden, welche Bergwerkseinheiten (z.B. tiefe Verbindungssohlen, nicht-durchschlägige Sohlen, Erzrollen) einen wesentlichen Einfluss auf die Hydraulik und Temperaturverteilung im gefluteten Grubengebäude haben. Darauf aufbauend wurde ein thermohydraulisches Finite-Elemente-3D-Modell der Grube erstellt. Die Schächte und Stollen dominieren sowohl in 2D als auch in 3D die hydraulischen Bedingungen der gefluteten Grube und wurden in die jeweiligen Modells als ‚discrete feature elements‘ eingebaut. Die eindimensionalen Strukturen innerhalb des Bergwerkes (Schächte, Stollen, etc.) stellen im Hinblick auf den Wärmetransport überdimensionale Wärmetauscher dar. Verfüllte Abbaubereiche weisen normalerweise sehr hohe Durchlässigkeiten und eine große Speicherkapazität auf. Sie werden als Bereiche mit höherer Permeabilität gegenüber dem umgebenden Gestein in das Modell integriert. Bei der Erstellung des thermohydraulischen Modells

der Verbundgrube müssen die verschiedenen Maßstäbe der unterschiedlichen Bergwerks-Baueinheiten berücksichtigt werden.

Die komplexen Geometrien, die Kombination aus Schächten, Sohlen und Abbaubereichen, müssen für die 3D-Modellierung der gesamten Verbundgrube in so fern vereinfacht werden, dass sich daraus eine Modellgeometrie ergibt, welche auf der einen Seite sinnvoll diskretisiert und modelliert werden kann, und unter Berücksichtigung der Fragestellung aussagekräftige Ergebnisse liefert.

Um die Informationen aus den Grubenrissen über die Position und Ausdehnung von Schächten, Sohlen und Abbaubereichen in FEFLOW verwenden zu können, wurden die Karten in ARGGIS georeferenziert, es wurden daraus Shape-Files zur Verwendung in FEFLOW erstellt.

Über das Modell können verschiedene Nutzungs- und Entnahmeszenarien simuliert werden. Dadurch ist es möglich, größere Wasser- bzw. Wärmemengen aus dem eingestauten Grubenwasserreservoir geothermisch zu erschließen. Da das Wasser nach der Abkühlung in das Bergwerk reinfiltiert wird, kann über das Modell eine möglichst optimale Position zur Versickerung gefunden werden.

Zur Erstellung des thermohydraulischen Modells sind zahlreiche Kenntnisse über die Hydrochemie und Hydraulik der gefluteten Grube notwendig. Die hydrogeologischen Untersuchungen an gefluteten Tiefschächten verschiedener Lokalitäten im Rheinsichen Schiefergebirge zeigen, dass es zwei grundsätzliche unterschiedliche hydraulische Situationen gibt. Zum Einen können nur sehr geringe Unterschiede in den Temperaturverhältnissen und der hydrochemischen Zusammensetzung der Grubenwässer über die gesamte Teufe vorhanden sein. In solchen Fällen ist es durch das Vorhandensein turbulenter Strömungsverhältnisse zur Durchmischung der Wässer gekommen (WOLKERSDORFER 2008). Das Vorhandensein von hohen Gehalten an Kohlensäure, einhergehend mit Druckentlastung, hat die Entstehung von Gaslift in den Schächten zur Folge. Dadurch kann ebenso eine Durchmischung der Grubenwässer, verbunden mit einem schnellen Aufstieg, resultieren. Hydraulisch sind die gefluteten Bergwerksteile in diesem Fall als System kommunizierender Röhren zu verstehen. Zum Anderen weisen Wässer, welche nur unzureichend an Tiefschächte oder durchschlägige Tiefbausohlen angeschlossen sind deutliche Unterschiede in der Temperatur und geochemischer Beschaffenheit auf. In Bergwerken ohne Gaslift kann es zur Ausbildung von geschichteten Wasserhorizonten kommen (WIEBER et al. 2011). Man

unterscheidet sogenannte Stagnations- und Zirkulationswässer, wobei die Zirkulationswässer am Wasserkreislauf beteiligt sind und die Stagnationswässer in der Tiefe der Schächte bzw. des Grubengebäudes verbleiben. Ob in den gefluteten Gruben des Bewilligungsfeldes eine Durchmischung der Wässer durch turbulente Fließbedingungen und/oder Gaslift vorliegt, soll im Rahmen der tiefenorientierten Untersuchungen geklärt werden.

2 Grundlagen

2.1 Geothermie allgemein und Geothermie aus Grubenwasser

Geothermische Energie ist die in Form von Wärme gespeicherte Energie unterhalb der Oberfläche der festen Erde (Erdwärme) (VDI 4640 Blatt 1). Bei Geothermie handelt es sich um eine regenerative Energiequelle, da die abfließende und entnommene Wärme kontinuierlich nachproduziert wird.

Die Wärmeenergie stammt nach (GANDO et al. 2011) zu etwa 50% aus dem radioaktiven Zerfall der in der Erdkruste befindlichen Elemente Uran, Thorium und Kalium. Erdkern und Erdmantel liefern somit weitere 50% der Gesamtwärmeenergie, diese stammt nach HERZOG (2005) noch aus der Zeit der Erdentstehung. Der mittlere geothermische Gradient liegt in Mitteleuropa bei 2,8 bis 3°C/100 m Tiefe im Bereich der Erdkruste (STOBER 2007).

Für Deutschland ergeben sich mittlere geothermische Wärmeflüsse von 82,9 mW/m² (CERMAK & RYBACH 1979) bzw. zwischen 60 und 80 mW/m² (HURTER & HAENEL 2002). Lokal können auch deutlich höhere Gradienten angetroffen werden, wie z.B. im Oberrheingraben (STOBER 2007). Parameter wie Geodynamik, Gesteinseigenschaften und Tektonik bestimmen die regionale Temperaturverteilung im Untergrund. Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität und Dichte des Untergrundes beeinflussen das Verhalten des Untergrundes nach BAUMANN et al. (2007) ebenso wie der Wassergehalt. In wassergesättigten Böden liegt eine deutlich höhere Wärmeleitfähigkeit vor, da die Wärmeleitfähigkeit des Wassers deutlich über der von Gestein/Boden liegt.

Je nach Tiefe der Wärme in der Erde wird zwischen oberflächennaher und tiefer Geothermie unterschieden. Eine scharfe Abgrenzung beider Arten ist nicht möglich, in der Praxis wurde eine Trennung bei rund 400 m eingeführt. Für jede geothermische Nutzung in einer Tiefe von mehr als 100 m ist eine bergrechtliche Bewilligung nach § 8 Bundesberggesetz erforderlich. Daher werden oberflächennahe Geothermieranlagen häufig nicht tiefer konzipiert. Die Gewinnung von Erdwärme bei den oberflächennahen Geothermieranlagen kann z.B. über Erdwärmesonden und Erdwärmekollektoren realisiert werden.

Für die tiefe Geothermie stehen größere Ausgangstemperaturen zur Verfügung. Bei Temperaturen von über 100°C und einer entsprechenden Förderrate kann neben Wärme zu Heizzwecken auch Strom über ein Geothermiekraftwerk produziert werden.

Nach BANKS et al. (1997) kann Grubenwasser als regenerative Energiequelle betrachtet werden. Die geothermische Nutzung von Grubenwässern aus gefluteten Bergwerken kann allerdings nicht eindeutig einer Form der Geothermie zugeordnet werden. Die Wässer treten in der Regel oberflächennah aus, sind aber durch den Bergbau in größerer Tiefe erschlossen und steigen auch von dort auf (OFNER & WIEBER 2008).

Tiefe geflutete Bergwerke verfügen über ein erhebliches geothermisches Potential, welches zur Energiespeicherung und Energiegewinnung mittels Wärmepumpentechnik genutzt werden kann (HUTTRER 1997). Durch den intensiven Bergbau sind stark vernetzte, tiefreichende Hohlräume und Auflockerungsbereich im ansonsten eher gering durchlässigen Gebirge entstanden. Diese hochpermeablen Bereiche (RAYMOND & THERRIEN 2008) durchziehen das gesamte Untersuchungsgebiet und stellen bevorzugte Fließpfade (STREB & WIEBER 2011) im ansonsten eher gering durchlässigen Gebirge dar.

Für die geothermische Grubenwassernutzung stehen zwei grundsätzliche Methoden zur Verfügung (HALL et al. 2011). Zum einen kann Grubenwasser im geschlossenen Kreislauf mittels Wärmepumpentechnik genutzt werden. Dazu wird der Wärmetauscher direkt in den Schacht eingebaut. Dies stellt nach HAEHNLEIN et al. (2010) die häufigste Variante dar und wird u.a. bei hydrochemisch belasteten Wässern und geringen Wassermengen verwendet (HALL et al. 2011). Zum anderen kann, bei ausreichender Wassermenge und hydrochemisch unproblematischen Wässern ein offener Kreislauf gewählt werden. Dabei kann beispielsweise Grubenwasser über einen Schacht gefördert, geothermisch genutzt und entweder über den gleichen Schacht in z.B. größerer Tiefe oder einen anderen Schacht reinfiltiert werden.

Mittels Wärmepumpentechnik kann dem Grubenwasser in Wintermonaten Energie/Wärme entzogen werden und in den Sommermonaten kann anfallende überschüssige Energie/Wärme (beispielsweise aus Kühlprozessen) in das Grubenwasser eingespeichert werden (HALL et al. 2011, MALOLEPSZY 2003). Wenn

das Grubenwasser nur zu Heizzwecken entnommen, und anschließend abgekühlt reinfiltiert wird, ist zu beachten, dass sich möglicherweise das geothermische Potential auf Grund einer sukzessiven Verringerung der Temperatur des Wassers verringert (HALL et al. 2011). Außerdem muss auf die Einhaltung eines gleichmäßigen Wasserspiegels innerhalb des Grubengebäudes geachtet werden, um weitere Erzauslaugungen und nachteilig schädliche Veränderungen der hydrochemischen Bedingungen des Grubenwassers zu unterbinden (WOLKERSDORFER 2008).

Es gibt eine Reihe nationaler und internationaler geothermischer Grubenwassernutzungen, die sich entweder in der Pilotphase befinden (z.B. Aachener Revier; HEITFELD et al. 2006, CLAUSER et al. 2005) oder seit mehreren Jahrzehnten in Betrieb sind. Das Grubenwasser der Zeche Zollverein in Essen-Heisingen beheizt seit 1984 ein Altenheim, die ehemalige Zinngrube in Ehrenfriedersdorf in Sachsen stellt die Beheizung einer Mittelschule (seit ca. 1994) sowie des Besucherbergwerks (seit etwa 1997) sicher (WIEBER & POHL 2008). Bei einer geothermischen Grubenwasseranlage in Springhill, Nova Scotia, Kanada, wird bereits seit 1989 über eine 140 m tiefe Bohrung Grubenwasser mit einer Pumprate von 240 l/min und einer durchschnittlichen Temperatur von 18°C gefördert (WATZLAF & ACKMAN 2006).

2.2 Wärmetransport im Untergrund

Der Wärmefluss in der oberen Erdkruste ist nach KALTSCHMIDT et al. (1999) definiert als Wärmemenge, welche in der Zeiteinheit t durch die Flächeneinheit A strömt. Wärme kann sowohl über das feste Gestein als konduktiver Anteil (Wärmeleitung) des Wärmestroms als auch durch massegestützter Transport in und über Flüssigkeiten als konvektiver Anteil (Konvektion) des Wärmestroms geleitet werden (KALTSCHMIDT et al. 1999).

Die Wärmeleitung stellt nach BAEHR & STEPHAN (2006) einen Energietransport zwischen benachbarten Molekülen auf Grund eines im Material vorhandenen Temperaturunterschiedes dar. In Festkörpern ist Wärmeleitung der einzige Energietransport, während es bei Gasen und Flüssigkeiten noch zu Konvektion und Wärmestrahlung kommen kann BAEHR & STEPHAN (2006).

Die terrestrische Wärmestromdichte setzt sich aus einem konduktiven und einem konvektiven Anteil des Wärmestroms sowie der entlang der Tiefe aufsummierten Wärmeproduktion zusammen. In der kontinentalen Kruste dominiert der konduktive Anteil der Wärmestromdichte (KALTSCHMIDT et al. 1999 & CLAUSER 2009) und ergibt sich aus Gleichung 2-1:

$$q_{\text{kond}} = -\lambda \cdot \frac{\Delta T}{\Delta z} \quad (2-1)$$

mit

q_{kond} konduktiver Anteil des Wärmestroms [W/m²]

λ Wärmeleitfähigkeit [W/mK]

ΔT Temperaturgradient [K]

Δz Schichtmächtigkeit [m]

Die Wärmeleitfähigkeit λ ist eine spezifische Materialeigenschaft. Für ausgewählte Stoffe ist sie in Tabelle 2-1 zusammengestellt:

Tabelle 2-1 Wärmeleitfähigkeiten ausgewählter Materialien (bei 20°C und 100kPa)

Stoff	Wärmeleitfähigkeit λ [W/mK]
Wasser	0,598*
Luft	0,0257*
Sandstein	2,3**
Siltstein	2,4**
Tonstein	2,2**

* nach BAEHR & STEPHAN (2006) ** nach VDI 4640 Datenblatt

Durch die makroskopische Bewegung von Fluiden kann Energie transportiert werden. Auf Grund eines Temperaturgradienten fließen Wärme und Energie als Enthalpie und kinetische Energie des Fluids und durchströmen eine (gedachte) Fläche. Dieser Prozess wird als Konvektion bezeichnet und kann nach dem Gesetz von FOURIER für den Grenzübergang zwischen Wand und Fluid (Gleichung 2-2) beschrieben werden:

$$q_{\text{konv}} = -\lambda \cdot \left(\frac{\Delta T}{\Delta y} \right)_w \quad (2-2)$$

mit

q_{konv} konvektiver Anteil des Wärmestroms [W/m²]

$\lambda = \lambda_{\Delta T}$ Wärmeleitfähigkeit Fluid bei Wandtemperatur [W/mK]

ΔT Temperaturgradient [K]

Δy Wandabstand [m]

w bezogen auf Wand

2.3 Hydrodynamik allgemein und Hydrodynamik gefluteter Gruben

Unter der Annahme einer im Wesentlichen horizontalen Strömung und einer konstanten Dichte des Grundwassers über den gesamten Aquifer (KINZELBACH & RAUSCH 1995) lässt sich die Strömungsgleichung aus der Kontinuitätsgleichung (Erhaltung der Masse) und dem Gesetz von DARCY (Gleichung 2-3) herleiten

$$v = -k_f \nabla h \quad (2-3)$$

mit

v Filtergeschwindigkeit [m/s]

k_f Durchlässigkeitsbeiwert [m/s]

∇ Gradient der Piezometerhöhen [-]

Die partielle Differentialgleichung für die horizontal ebene Grundwasserströmung eines gespannten Aquifers erhält man aus der Betrachtung eines repräsentativen Kontrollvolumen über die gesamte Aquifermächtigkeit mit bilanzierten Zu- und Abflüssen über die Zeit (Gleichung 2-4), wobei der Speicherkoeffizient S des Aquifers eine Funktion der Kompressibilität ist (KINZELBACH & RAUSCH 1995)

$$S \frac{\delta h}{\delta t} = \nabla(m \cdot K \cdot \Delta h) + q \quad (2-4)$$

mit

S spezifischer Speicherkoeffizient des Aquifers

m Aquifermächtigkeit

h Piezometerhöhe

K hydraulischer Durchlässigkeitstensor

(mit $m \cdot K = T =$ Transmissivität und $K = k_f$ bei isotropen Medien)

q Zugabe-/Entnahmerate

Für den ungespannten Aquifer ändert sich die Transmissivität mit der Wasserspiegelhöhe, so dass nach Gleichung 2-5 gilt:

$$m = h - b \quad (2-5)$$

mit

m = Aquifermächtigkeit

h = Piezometerhöhe

b = Höhenlage Aquifersohle

Da im ungespannten Aquifer Wasser durch die Bewegung des Wasserspiegels gespeichert wird (KINZELBACH & RAUSCH 1995), muss der Speicherkoeffizient S durch die strömungswirksame Porosität n_c ersetzt werden. Demnach ist die partielle Strömungsgleichung für ungespannte, anisotrope Aquifere (Gleichung 2-6):

$$n_c \frac{\delta h}{\delta t} = \nabla((h - b) \cdot K \cdot \nabla h) + q \quad (2-6)$$

Nach KINZELBACH & RAUSCH (1995) sind die Gleichungen mit Einschränkung auch auf Kluftaquifere übertragbar, da das repräsentative Elementarvolumen, bzw. analog dazu die typische Kluftlänge des betrachteten Aquifers sehr viel kleiner als der für die Modellierung betrachtete Bereich ist und sich damit die Filtergeschwindigkeiten noch innerhalb des Gültigkeitsbereiches für das Gesetz nach DARCY befinden.

Für die Strömungsvorgänge in gefluteten Gruben ist nach WOLKERSDORFER (2008) die DARCY-Strömung nur von untergeordneter Wichtigkeit. Laminare Strömung nach DARCY tritt im Wesentlichen in den rückverfüllten Abbaubereichen auf. Die Strömung nach DARCY ist definiert als laminare Strömung für viskose Fluide durch isotrope poröse Medien (HÖLTING & COLDEWEY 2008). Nicht-lineare oder turbulente Strömungen können nicht mehr nach DARCY beschrieben werden.

In offenen Hohlräumen gefluteter Gruben (Schächte, Sohlen) können nach WOLKERSDORFER (2008) im Wesentlichen drei Arten von Strömung oder auch Kombinationen dieser drei Arten auftreten, welche nicht mehr mit dem Gesetz von Darcy beschrieben werden können:

- laminare oder turbulente Poiseuille-Strömung
- laminare oder turbulente Konvektion
- freie oder erzwungene Strömung

Für Poiseuille-Strömung beschreibt die dimensionslose Reynolds-Zahl Re den Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung (Gleichung 2-7):

$$Re = \frac{d \cdot v \cdot \rho}{\mu} \quad (2-7)$$

mit

- | | |
|--------|--|
| d | char. Länge [m] (hier: Innendurchmesser Schacht) |
| v | Strömungsgeschwindigkeit Fluid [m/s] |
| ρ | Dichte des Fluids [kg/m ³] |
| μ | kin. Viskosität [m ² /s] |

Unterhalb der kritischen Reynolds-Zahl bewegen sich die Fluidteilchen auf vorgegebenen Strombahnen (laminare Strömung) und eventuell auftretende Störungen der Geschwindigkeit können schnell ausgeglichen werden. Oberhalb der kritischen Reynolds-Zahl werden diese Schwankungen nicht gedämpft, sondern verstärkt (BAEHR & STEPHAN 2006).

Die Rayleigh-Zahl Ra beschreibt den Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung bei konvektiven Strömungen (Gleichung 2-8):

$$Ra = \frac{d^3 \cdot \rho^2 \cdot g \cdot \beta \cdot \Delta T \cdot C_p}{\mu \cdot k} \quad (2-8)$$

mit

g	Gravitationskonstante [m·s ⁻²]
β	thermischer Expansionskoeffizient [1/K]
ΔT	Temperaturdifferenz [K]
C _p	spezifische Wärmekapazität Fluid [(kJ)/(kg·K)]
k	thermale Diffusivität [-]

Nach LANDAU & LIFSCHITZ (1991 in WOLKERSDORFER 2008) liegt der Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung in den, innerhalb eines Bergwerkes anzutreffenden möglichen, Hohlräumen (Stollen, Sohlen, offene Abbaubereiche) bei einer kritischen Reynolds-Zahl (Re_{krit}) zwischen 10 und 100. Aus der Literatur sind Re_{krit} für poröse Aquifere zwischen 6 und 10 bekannt (z.B. LANGGUTH & VOIGT 2004). Da eine Vielzahl von Variablen in die kritische Reynolds-Zahl mit einfließen, kann eine absolute Zahl nicht sicher angegeben werden (WOLKERSDORFER 2008). Aus Experimenten für Strömung in einer horizontalen zylindrischen Röhre ohne Rohrreibung ist Re_{krit} mit etwa 2000 ermittelt worden (SHARP & ADRIAN 2004 in WOLKERSDORFER 2008), kann aber auch Werte in der Größenordnung von 10^5 annehmen (LANDAU & LIFSCHITZ 1991 in WOLKERSDORFER 2008).

Freie Konvektion in vertikalen Hohlräumen (Schächten) tritt nur auf, wenn die kritische Rayleigh-Zahl (Ra_{krit}) größer als die kritische Reynolds-Zahl ist (LANDAU & LIFSCHITZ 1991 in WOLKERSDORFER 2008). Innerhalb eines Bergwerkes macht sich Konvektion damit bemerkbar, dass Wasser an Schachtoberkanten nicht ausfließt (WOLKERSDORFER 2008).

Weitere Arten der auftretenden Strömungen können freie und erzwungene Strömungen sein. Freie Strömung entwickelt sich, wenn Dichteunterschiede der Fluide die einzige antreibende Kraft darstellen, gezwungene Strömung tritt auf, wenn externe Kräfte das Strömungsverhalten antreiben (WOLKERSDORFER 2008).

In gefluteten Gruben können alle Arten von Strömungen und alle Mischungen von Strömungen auftreten. Das Strömungsverhalten kann sich auf kurzen Abschnitten und in kurzen Zeiträumen ändern (WOLKERSDORFER 2008).

Um das Strömungsverhalten gefluteter Hohlräume zu beschreiben, wird die NAVIER-STOKES-Differentialgleichung für inkompressible Fluide verwendet. Die Lösung dieser Differentialgleichung erfolgt über hydraulische Modelle. Die gefluteten

Schächte und Sohlen repräsentieren dabei Strömung auf vorgegebenen Fließpfaden, während sich die Strömung in der Gesteinsmatrix als eine Kombination von Kluft- und Poren-Strömung beschreiben lässt (WOLKERSDORFER 2008). Die Kluftbereiche sind lediglich für die chemische Zusammensetzung des Grubenwassers von Bedeutung, sie haben hingegen für das Strömungsverhalten der gefluteten Hohlräume nur eine untergeordnete Bedeutung (WOLKERSDORFER 2008). Grundsätzlich stellen über Sohlen verbundene Schächte ein System kommunizierender Röhren dar und weisen einen gleichen Wasserstand auf. Lediglich bei großen Dichteunterschieden zwischen den Wässern in den Schächten können größere Unterschiede auftreten (WOLKERSDORFER 2008). Turbulente Strömungsbedingungen innerhalb einer gefluteten Grube zeigen sich daran, dass tiefenaufgelöste Temperatur- und Leitfähigkeitsmessungen konstante Temperaturen und Leitfähigkeiten über die Tiefe liefern und das ebenso nahezu die gleiche physikochemische Beschaffenheit der Wässer mit der Tiefe anzutreffen ist (WOLKERSDORFER 2008). Nach WOLKERSDORFER (2008) ist die Strömung in gefluteten Hohlräumen nahezu immer als turbulent anzusehen.

In Abbildung 2-1 ist exemplarisch das Temperatur- und Leitfähigkeitsprofil des Fluor-Schachtes der Grube Straßberg im Harz (aus WOLKERSDORFER 2008) dargestellt. Es zeigt exemplarisch die Situation ohne erkennbare Schichtung, also turbulente Strömungsbedingungen, lediglich auf Sohle 5 ist ein geringer Zufluss zu erkennen.

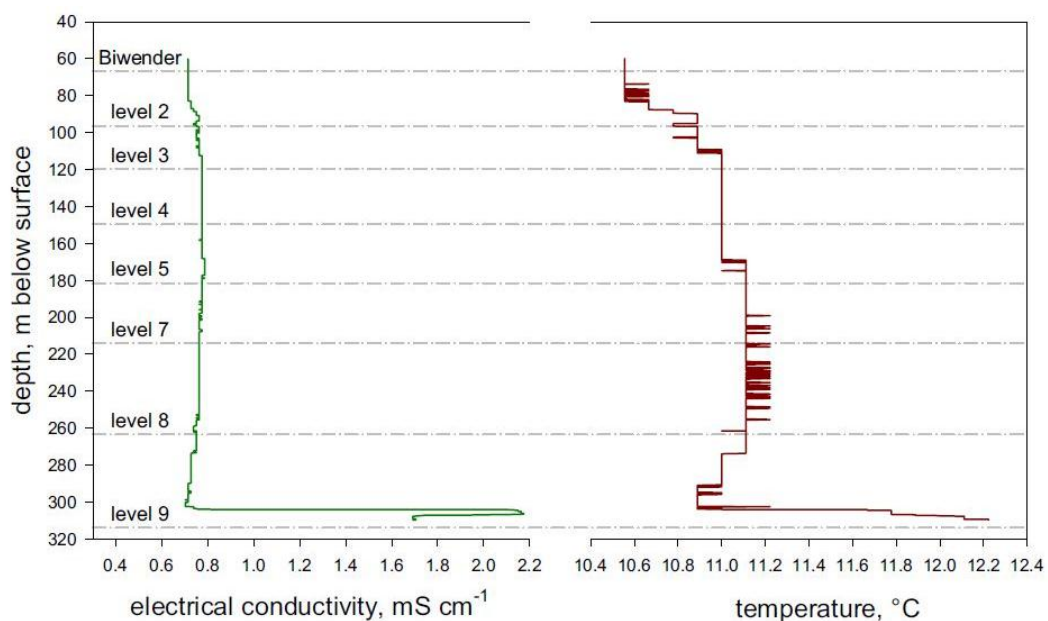


Abbildung 2-1 Leitfähigkeits- und Temperaturprofil des Fluor-Schachtes der Grube Straßberg/Harz (bearbeitet aus WOLKERSDORFER 2008)

Aus einer Studie von ALDOUS & SMART (1988) gehen Fließgeschwindigkeiten von 16 km/d über dem Wasserspiegel gefluteter Gruben und auf Strecken im gefluteten Bereich von 0,5 km/d hervor. Aus der Tatsache, dass Strecken üblicherweise einen Querschnitt im Meter-Bereich (YOUNGER & LAPIERRE 2000) haben, resultiert, dass die Strömung unterhalb des gefluteten Wasserniveaus trotz geringer hydraulischer Gradienten turbulent ist.

Die beschriebenen Prozesse beziehen sich im Wesentlichen die wassergesättigte Zone. Der Auslauf des Grubenwassers nach Übertage markiert jedoch die Grenze von ungesättigter zu gesättigter Zone und stellt eine überdimensionale Drainage dar. Die darüber befindlichen geologischen Schichten und Bergwerkssohlen sind also nicht oder nicht vollständig wassergesättigt. Unterhalb des in freiem Gefälle austretenden Grubenwasser wird zwar eine mehr oder weniger vollständige Wassersättigung aller Hohlräume angenommen, ob und wie weit dies aber, gerade im Hinblick auf den, das Bergwerk umgebenden Grundwasseraquifer ebenfalls gilt, ist nicht eindeutig zu sagen. Für ungesättigte Bereiche gelten weitere Gesetzmäßigkeiten.

Bei Vorhandensein von gelöstem CO₂ im Grubenwasser kann es zusätzlich zu Gaslift kommen. Gaslift ist ein hydromechanisch als Mehrphasenströmung zu verstehen. Das im Wasser gelöste Gas verändert das Strömungsverhalten des Wassers. Durch das im Wasser gelöste Gas wird die Dichte des Fluids verringert, dadurch wird ebenfalls der Gravitationsdruck im Schacht verringert (DESCAMPS et al. 2007). Bei einem gleichbleibenden hydraulischen Druckspiegel am oberen Ende des Schachtes (Überlauf) hat dies eine Vergrößerung der Strömungsgeschwindigkeit zur Folge (GUET & OOMS 2006).

Ein Auftreten von Gaslift ist mit turbulenten Strömungsbedingungen und somit dem Überschreiten der kritischen Reynoldszahl verbunden. Einhergehend mit einer Druckentlastung durch den Aufstieg des Wassers im Schacht kommt es zur Entgasung und zur Bildung von Gasblasen (DESCAMPS et al. 2007).

Nach DESCAMPS et al. (2007) nimmt das Druckgefälle für Wasser-Gas-Mischungen mit abnehmendem Wassergehalt der Mischung bis zu einem Wasseranteil von 37% (=63% Gasanteil) ab. Danach steigt das Druckgefälle mit weiter abnehmendem Wassergehalt (inverser Prozess) wieder an.

Das Gesamt-Druckgefälle ist charakterisiert als die Summe aus einer gravitativen Komponente und einer Reibungskomponente. Während in einer vertikalen Rohrströmung (= Schacht) der gravitative Anteil maßgeblich das Gesamt-Druckgefälle bestimmt, wird durch die Erhöhung der Strömungsgeschwindigkeit über einen höheren Gas-Anteil im Wasser-Gas-Mischungsverhältnis jedoch der Reibungsanteil zunehmend wichtiger (DESCAMPS et al. 2007).

Ausgehend von hohen Wasseranteilen wird der Gravitationsdruck mit abnehmenden Wassergehalten kleiner, da die reduzierte Mischung eine geringere Dichte aufweist (DESCAMPS et al. 2007), dadurch erhöht sich wiederum die Strömungsgeschwindigkeit.

3 Untersuchungsgebiet

3.1 Geographischer Überblick

Das Untersuchungsgebiet (Abbildung 3-1) befindet sich im rechtsrheinischen Teil des Rheinischen Schiefergebirges. Es umfasst das Gebiet der Stadt Herdorf sowie angrenzend das Gebiet der Ortschaft Daaden im Landkreis Altenkirchen im Norden von Rheinland-Pfalz an der Grenze zu Nordrhein-Westfalen und wird dem Siegerland zugeordnet.

Naturräumlich wird das Siegerland im Süden durch den Hohen Westerwald, im Osten und Nordosten durch das Rothaargebirge, im Norden durch das Südsauerländer Bergland (BÜRGENER 1969) und im Westen durch das Mittelsiegbergland begrenzt (FISCHER 1972). Nach THÜNKER (2008) ist die Grenze im Westen weniger gut fassbar. Die geologischen Strukturen des Siegerlandes dehnen sich jedoch über die naturräumlichen Grenzen hinaus aus (THÜNKER 2008).

Das Siegerland ist stark vom Bergbau der vergangenen Jahrhunderte geprägt, in vielen Teilen der Landschaft sind Hinterlassenschaften der Bergbautradition in Form von z.B. austretenden Grubenwässern, Haldenlandschaften und Gebäuden zu erkennen.

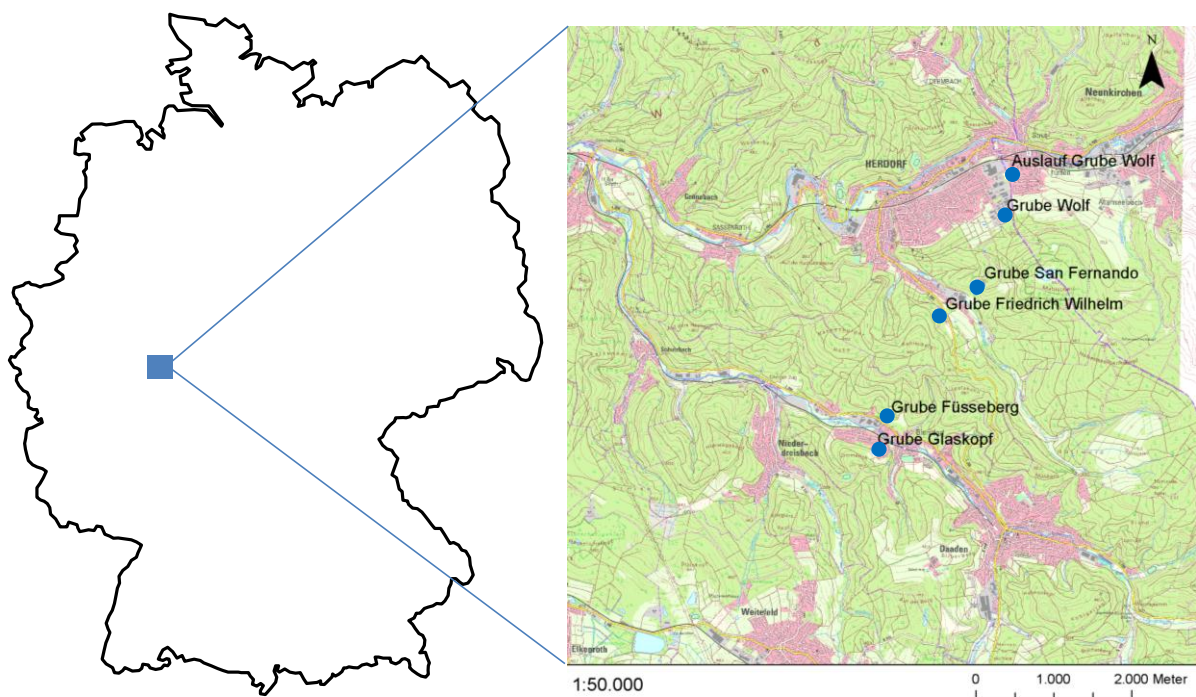


Abbildung 3-1 Lage des Untersuchungsgebiets sowie Position der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (blaue Punkte) (Karte LVG RLP)

3.2 Geologischer Überblick

Das Siegerland gehört zum rechtsrheinischen Teil des Rheinischen Schiefergebirges und wird der rhenoharzynischen Zone zugeordnet. Die in einem Meeresbecken abgelagerten devonischen Sedimente wurden im Zuge der variscischen Orogenese verfaltet, metamorph überprägt und überschoben.

Das sich von Mittelrhein bis SE-Sauerland erstreckende Siegener Antiklinorium stellt die zentrale geologische Struktur des Siegerlandes (Abbildung 3-2) dar. Im zentralen Bereich des östlichen Antiklinoriums, zwischen der verhältnismäßig breiten SE-Flanke und der schmäleren NW-Flanke, befindet sich der Siegener Schuppensattel.

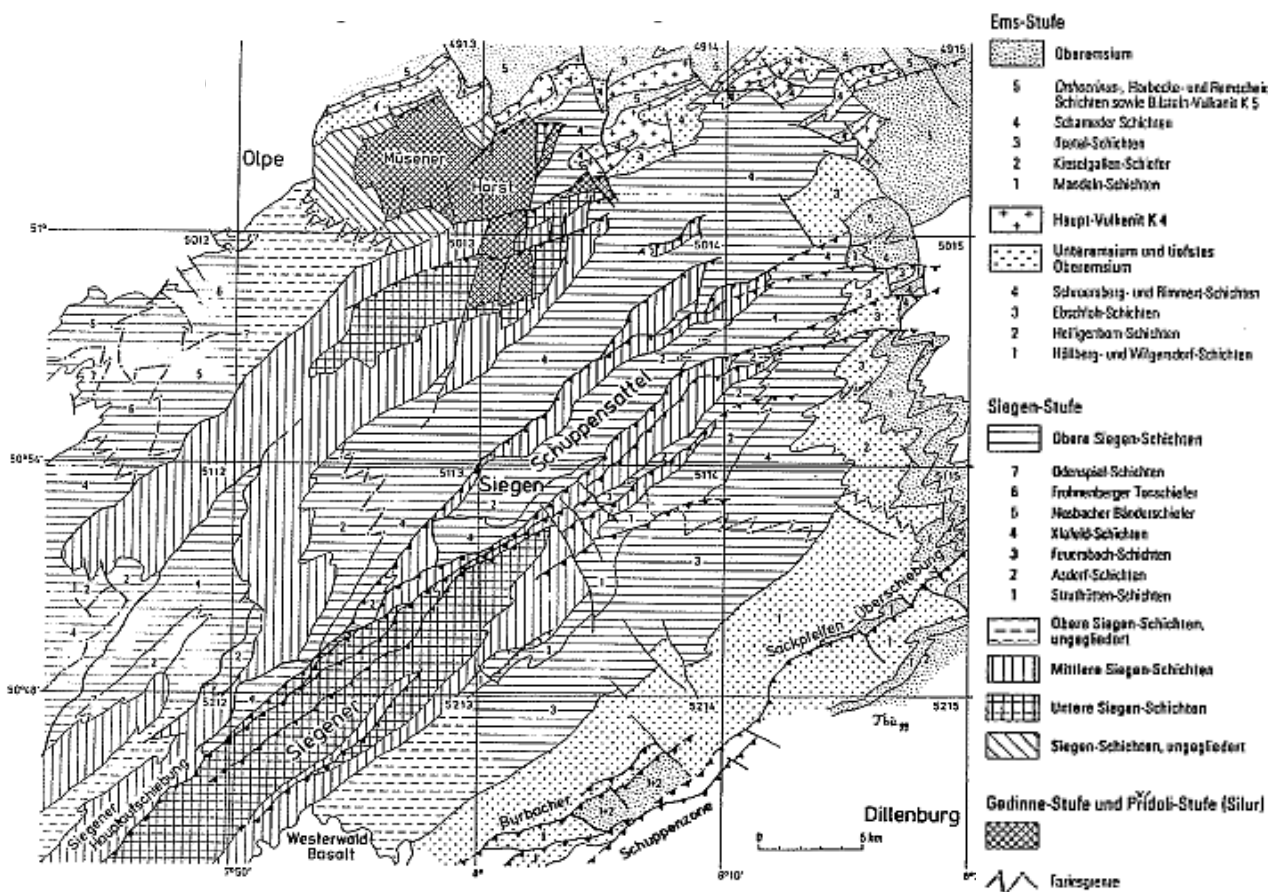


Abbildung 3-2 Geologische Übersicht über das Siegerland (THÜNKER 2008)

Auf der NW-Flanke treten im Müsener Horst mit den Silber-Schichten die ältesten Gesteine des Siegerlandes zu Tage (THÜNKER 2008). Das Siegerland und seine Randgebiete befinden sich im nordöstlichen Teil des Siegener Antiklinoriums. Dessen geologischer Bau wird durch den südöstlich liegenden Siegener Schuppensattel und durch die nordöstlich anschließende Betzdorf-Weidenauer

Schuppenzone geprägt. Diese beiden Strukturen werden durch die Siegener Hauptaufschiebung (LUSZNAT 1968) getrennt. Diese Störung weist ein Einfallen zwischen 50 und 70° nach SE auf (FENCHEL et al. 1985). Der Siegener Schuppensattel kennzeichnet den rechtsrheinischen Anteil vom Rhein bis in den Raum E von Siegen, wo er ausklingt. Die Schichten der einzelnen Baueinheiten sind teilweise stark gefaltet.

Im Allgemeinen werden im Siegerland-Wied-Distrikt zwei Faltentypen mit Übergängen zueinander unterschieden. Die gleich- bis ungleichschenkligen Falten mit senkrecht stehender Achsenfläche sowie die Falten mit geneigter Achsenfläche und einer hauptsächlichigen Vergenz nach Nordwesten können gleich- oder ungleichschenklig ausgebildet sein (FENCHEL et al. 1985). Der geologische Aufbau des Siegerlandes und die stratigraphische Einteilung (nach THÜNKER 2008) ist Tabelle 3-1 zu entnehmen.

Der geologische Untergrund besteht überwiegend aus klastischen paläozoischen Sedimentgesteinen. Nur lokal sind Keratophyre, deren Tuffe, sowie intrusive Diabase eingeschaltet (FENCHEL et al. 1985). Die ältesten unterdevonischen Ablagerungen lassen sich in das Gedinium einordnen. Darüber folgen Ablagerungen des Siegenium und Emsium, jeweils ohne erkennbare Schichtlücke. Das Mitteldevon ist durch Gesteine des Eifelium repräsentiert.

Das Gedinium findet sich im Siegerland vor allem in der Gegend um Müsen (Müsen-Schichten) und erreicht eine Mächtigkeit von > 1.000 m. Bei den anstehenden Gesteinen handelt es sich um rote Tonschiefer und Siltsteine, welche von weißgrauen bis hellgrauen, z.T. grobkörnigen bis feinkonglomeratischen, Quarziten begleitet werden (FENCHEL et al. 1985).

Das Siegenium wird aus den so genannten Siegen-Schichten aufgebaut. Diese werden nach petrographischen Gesichtspunkten und speziellen Lagerungsverhältnissen in Untere-, Mittlere- und Obere Siegen-Schichten aufgeteilt. Insgesamt gesehen haben die Siegen-Schichten flächenmäßig den größten Anteil am Aufbau des Siegerlandes und erreichen Mächtigkeiten zwischen 3.700 bis 5.000 m (THÜNKER 2008).

Tabelle 3-1 Stratigraphische Gliederung
(zusammengestellt aus FENCHEL et al. 1985 und THÜNKER 2008)

Zeit [Ma]	Serie	Stufe	Regionale Stufe	Lokale Bezeichnung	Mächtigkeit [m]
392,0 395 400 405 410 415 417,5	Unterdevon	Emsium	Emsium	Oberems	~ 1200
				Unterems	
		Pragium	Siegenium	Obere Siegen-Schichten (Herdorf-Schichten)	1200-2000
				Mittlere Siegen-Schichten (Rauhflaser-Schichten)	1000-2000
				Untere Siegen-Schichten (Tonschiefer-Schichten)	450-1000
		Lochkovium	Gedinnium	Müsen-Schichten	> 1250

Die Unteren Siegen-Schichten haben im Gegensatz zu den Mittleren- und Oberen Siegen-Schichten keinen marinen Charakter, dieser tritt erst in Form mariner Schalenfauna in den hangenden Schichten auf. Die Tonschiefer-Schichten der Unteren Siegen-Schichten werden, gerade im Bereich des Siegener Schuppensattels, dominiert von pflanzenführenden Tonschiefern, in die dunkelgraue, relativ silt- und sandarme Schichten eingelagert sind. Daneben treten mehr oder weniger siltige, z.T. auch gebänderte Tonschiefer und Sandsteine mit vorwiegend guter Sortierung auf. Gebankte fein- bis mittelkörnige Sandsteine sind untergeordnet anzutreffen (THÜNKER 2008).

Auf die Unteren Siegen-Schichten folgen im Hangenden die Mittleren Siegen-Schichten. Diese sind blaugraue Flasertonschiefer- und sandsteine (Rauhflaser-Schichten) (THÜNKER 2008).

Die betrachtete Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm erschließt geologisch betrachtet überwiegend devonische (braune Farbgebung) Obere Siegen-Schichten (Abbildung 3-3), welche lokal als Herdorf-

Schichten bezeichnet wurden. Dabei handelt es sich um schluffige bis feinsandige Tonsteine und -schiefer und tonige Sandsteine (THÜNKER 2008).



Abbildung 3-3 Geologische Lage der untersuchten Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (blaue Punkte)
(Ausschnitt aus der Geologischen Karte 1:25.000 Blatt Betzdorf, 1929)

Die stratigraphische Einteilung der Oberen Siegen-Schichten (aus KRAH 2005) ist in Tabelle 3-2 dargestellt. Durch den intensiven und tief reichenden Bergbau sind in diesen Gebieten geologische Informationen im Untergrund zusammengetragen worden, ein schematischer, stark vereinfachter Schnitt durch die Gesteine des Siegerlandes ist in Abbildung 3-4 dargestellt. Er dient lediglich zur Übersicht über die grundsätzlichen geologischen Verhältnisse.

Tabelle 3-2 Schichtenfolge der Oberen Siegen Schichten (bearbeitet aus KRAH 2005, zusammengestellt nach DENKMANN, HENKE, QUIRING, PILGERT & DAPPERT)

Obere Siegen-Schichten (Herdorf-Schichten)	Obere Herdorf-Schichten		Quarzit Zone Zwischenschiefer Sandstein Zone
	Mittlere Herdorf-Schichten		Zwischenschiefer 4 Sandstein 4 Zwischenschiefer 3 Sandstein 3 Zwischenschiefer 2 Sandstein 2 Zwischenschiefer 1 Sandstein 1
	Untere Herdorf-Schichten	Obersdorfer Sandstein	Schiefer B Oberer Sandstein Schiefer A Unterer Sandstein
		Ahe Schiefer	Ahe Schiefer 2 Ahe Sandstein Ahe Schiefer 1

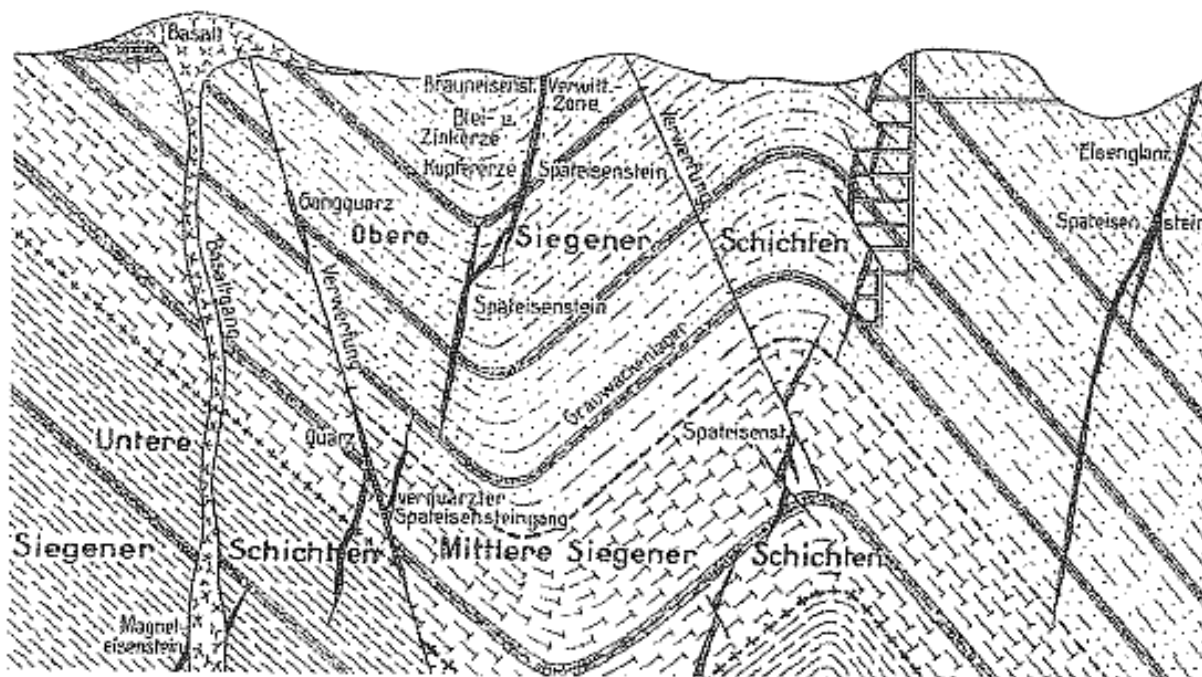


Abbildung 3-4 Schematischer Schnitt ohne Maßstab durch die gefalteten Schichten des Siegerlandes und den Sideriterzgängen (aus KRAH 2005 [umgezeichnet nach Dr. Henke])

3.3 Hydrologie und Hydrogeologie

Bei den im Untersuchungsgebiet anstehenden Gesteinen handelt es sich nach dem Hydrogeologischen Atlas Rheinland-Pfalz, Blatt 22/23 (2005) um silikatische Kluftgrundwasserleiter (devonische Grauwacken und Schiefer) mit geringer Ergiebigkeit (Abbildung 3-5). Die Hydrogeologische Übersichtskarte 1:500.000 (Blatt Köln, 1955) gibt für das Untersuchungsgebiet sehr geringe Grundwassermengen und daraus resultierend eine täglich gewinnbare Wassermenge von $< 100 \text{ m}^3$ an.

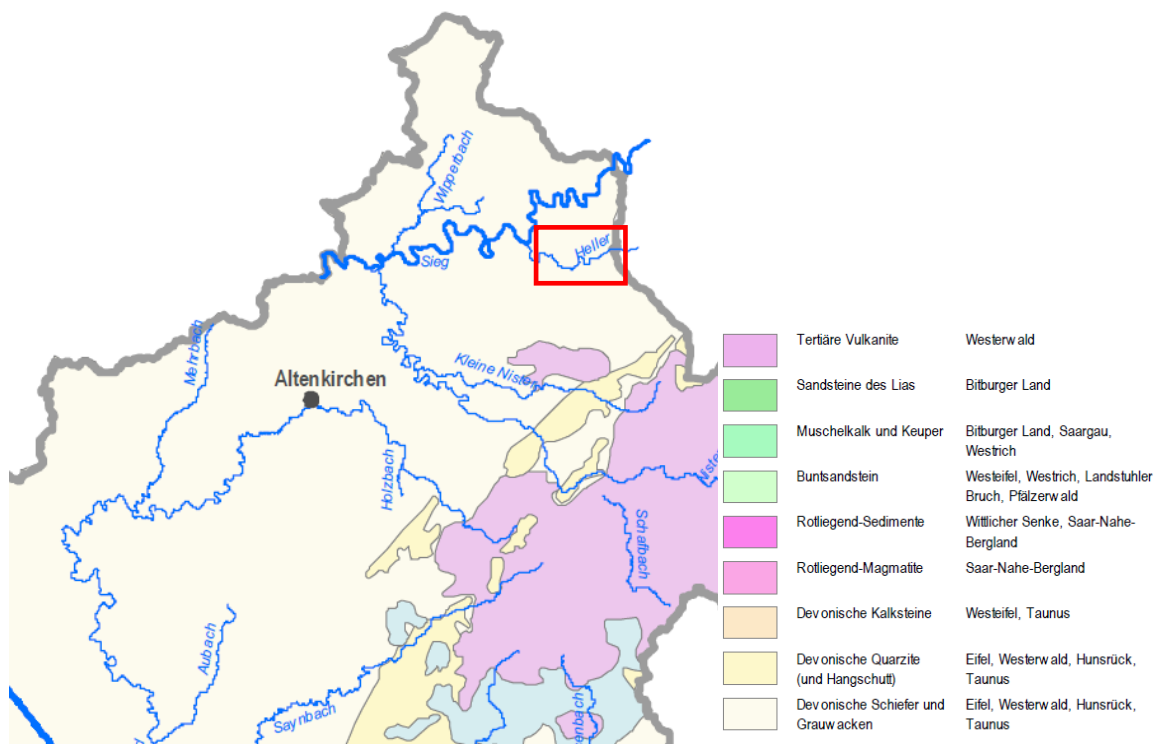


Abbildung 3-5 Grundwasserlandschaften im nördlichen Rheinland-Pfalz, roter Kasten: Untersuchungsgebiet (bearbeitet aus: Hydrogeologischer Atlas Rheinland-Pfalz 2005)

Der Porenraum der ursprünglich als klastische Sedimente abgelagerten Gesteine ist durch Orogenese und Faltung diagenetisch stark verringert worden. Daher beschränkt sich die Durchlässigkeit im Wesentlichen auf die, durch im Rahmen von tektonischen Prozessen entstandene, Klüftung.

Grundsätzlich ist zwischen Gesteins- und Gebirgsdurchlässigkeit zu unterscheiden. Die anstehenden Sand- und Tonsteine weisen schwache bis sehr schwache Gesteinsdurchlässigkeiten im Bereich von 10^{-6} bis $< 10^{-9} \text{ m/s}$ auf (HÖLTING & COLDEWEY 2008). Diese können durch Klüftung verbessert sein, wodurch

die Gebirgsdurchlässigkeit der anstehenden Gesteine gegenüber der Gesteinsdurchlässigkeit erhöht ist.

Bei einem durchschnittlichen jährlichen Niederschlag von 1094 mm (für den Zeitraum 2004-2010 der DWD Klimastation Bad Marienberg) resultiert ein Jahresgang der Temperatur entsprechend Abbildung 3-6:

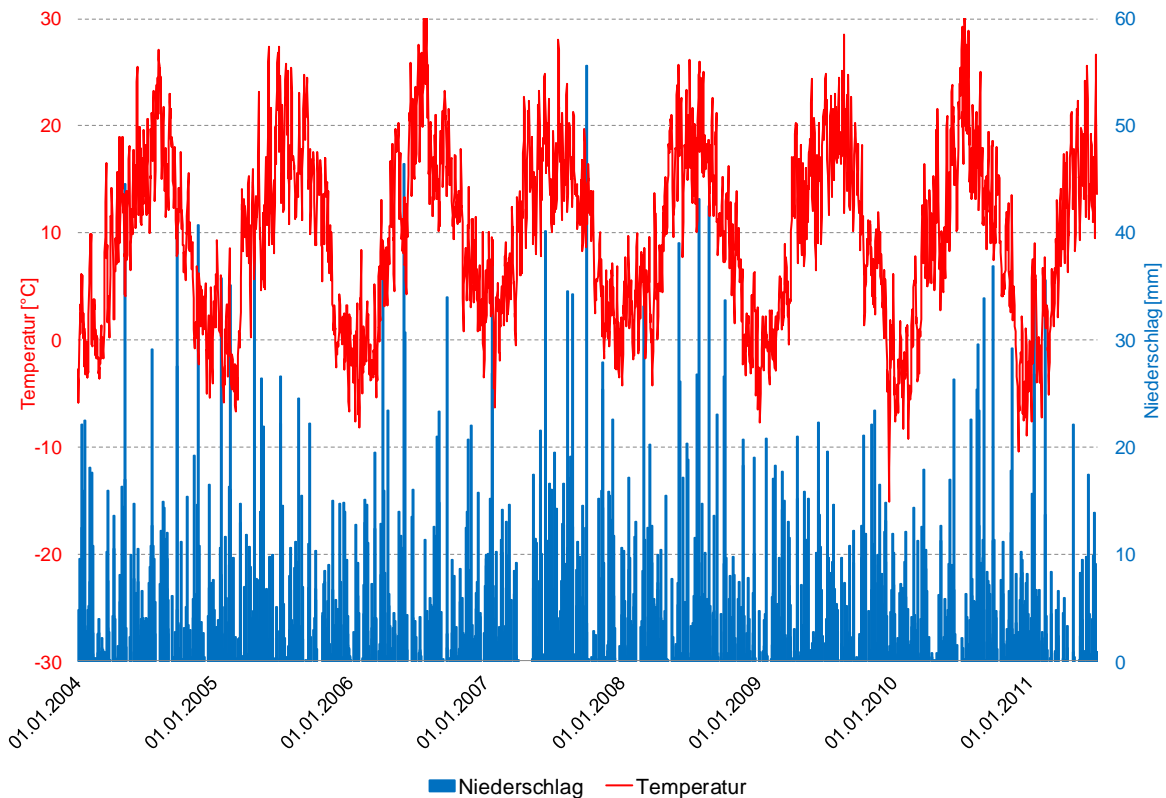


Abbildung 3-6 Temperatur und Niederschlag (tägliche Werte) der
DWD Klimastation Bad Marienberg

Der Hydrogeologische Atlas Rheinland-Pfalz gibt Werte für die Grundwasserneubildung von > 25 bis 50 mm/Jahr (Abbildung 3-7) an. Über das Geoportal Wasser des MUFV RLP ist eine Grundwasserneubildung über langjährige Mittel für das Untersuchungsgebiet von 83 mm/Jahr angegeben.

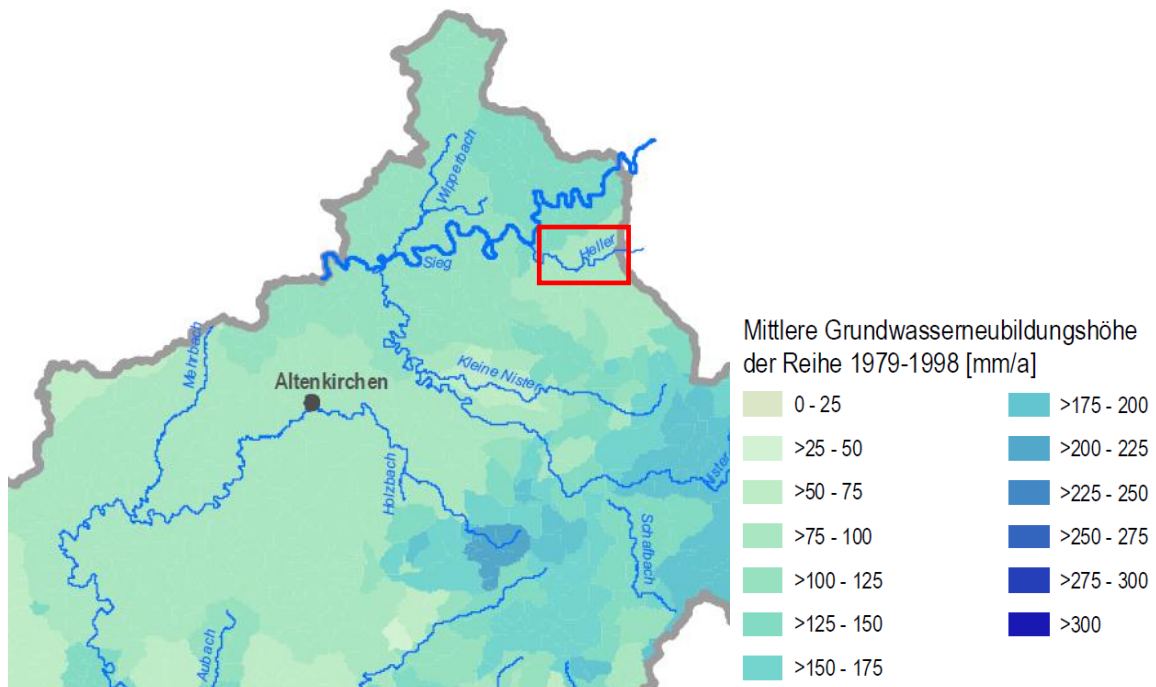


Abbildung 3-7 mittlere Grundwasserneubildungshöhe im nördlichen Rheinland-Pfalz, roter Kasten: Untersuchungsgebiet (bearbeitet aus: Hydrogeologischer Atlas Rheinland-Pfalz 2005)

Der Bergbau im Siegerland hat die lokalen hydrogeologischen Bedingungen stark beeinflusst. Der Abbau von Erz begann an den obertägig aufsetzenden Erzgängen. Diese bergmännischen Pingen-Bereiche haben über Tage aufgelockerte Bereiche hinterlassen. An diesen Stellen kann bevorzugt Sickerwasser in das Grubengebäude zutreten, die Grundwasserneubildung an diesen Bereichen ist gegenüber der Umgebung erhöht. Um den Bergbau auch bis in größere Tiefe vorantreiben zu können, musste Wasserhaltung betrieben werden (WIEBER 1999). In den oberen Teufen wird das zutretende Wasser (Tagwasser) über Stollen mit Röschen nach außen geleitet. Dazu wurde, meist auf Vorfluterniveau, ein Wasserlosungs- bzw. Erbstollen (stellt die Entwässerung mehrerer, miteinander verbundener Gruben sicher) angelegt. Über diese ‚Tiefe Stollen‘ wurde das Grubenwasser in der Regel im freien Gefälle abgeleitet. Mit dem tiefer gehenden Bergbau musste das Wasser mittels Pumpen gefördert werden. Da die Gruben des Siegerlandes bis in Tiefen von über tausend Meter unter Geländeoberkante (FENCHEL et al. 1985) reichen, war der Grundwasserspiegel während des aktiven Bergbaus gegenüber dem natürlichen Niveau deutlich unter Vorfluterhöhe abgesenkt.

In Tabelle 3-3 sind die Wasserzuflussmengen während des aktiven Bergbaus für die Einzelgruben der heutigen Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm aufgeführt (aus FENCHEL et al. 1985).

Tabelle 3-3 Wasserzuflussmengen während des aktiven Bergbaus um 1910 und 1953
(aus FENCHEL et al. 1985, Daten von BORNHARDT 1910 und HEYL 1953)

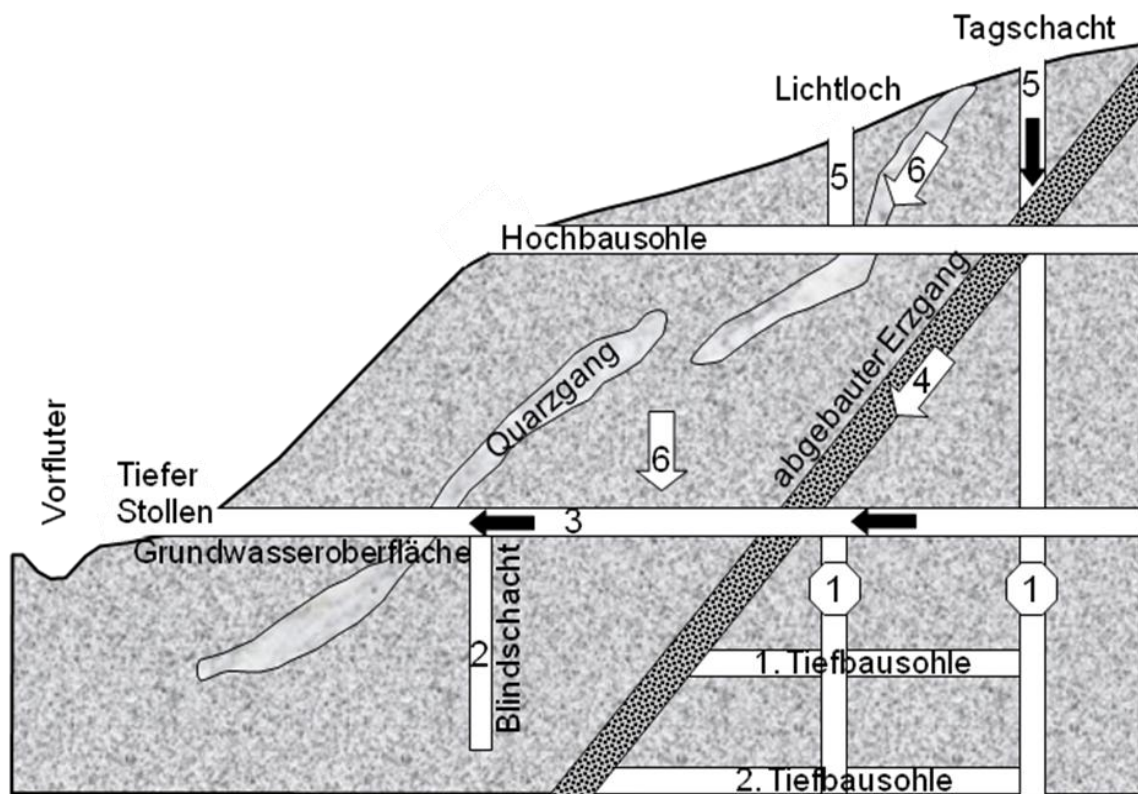
Grube	Tiefste Sohle ~ 1910 [m]	nach		nach	Tiefste Sohle ~ 1953 [m]
		BORNHARDT (1910)		HEYL (1953)	
		mittlere	höchste	mittlere	
		Wasserzufluss [l/s]			
Wolf	200	-	1,7	(25)	550
San Fernando	480	10	12,5	21,7	930
Füsseberg	160	16,7	35	26,7	825
und Fr. Wilhelm	494				845

Nach FENCHEL et al. (1985) fielen auf der gesamten Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm nach Auffahren der tiefsten Sohlen 6.000 bis 9.000 m³ Grubenwasser pro Tag an.

Diese Zuflüsse erfolgten über bevorzugte Fließpfade in Form von Klüften und Störungen in den bergmännisch geöffneten Hohlraum unter Tage auf Grund des bestehenden hydraulischen Gradienten. Ob und wie weit diese Zuflussmengen nach Flutung der Grube noch vorhanden sind, kann nicht abschließend geklärt werden. Durch die Flutung der Gruben besteht der hydraulische Gradient nicht mehr bzw. nicht mehr wie im vorherigen Maße, daher ist es wahrscheinlich, dass die Zuflüsse über Klüfte versiegt sind oder nur in deutlich geringerer Menge auftreten.

Nach HEYL (1954) machten sich Niederschlagsereignisse mit 4-5 monatiger Verzögerung in den Zuflussmengen der Grube Eupel während des aktiven Bergbaus bemerkbar. Dies erscheint nach FENCHEL et al. (1985) jedoch ein deutlich zu großer Zeitraum, da sich starke Niederschlagsereignisse bereits nach etwa 2 Wochen auf den oberen Sohlen abgezeichnet haben. Ob und wie weit diese zeitlichen Angaben auch auf weitere Gruben des Siegerlandes und im Speziellen auf die bearbeitete und geflutete Grube übertragbar sind, muss durch die Ermittlung des Einflusses der Niederschlagsmenge auf die Abflussmenge ermittelt werden.

Mit der Einstellung des Bergbaus der Verbundgrube im Jahr 1965 wurde auch die Wasserhaltung eingestellt und die Gruben wurden im Laufe der Zeit durch zufließendes Grund- und Sickerwasser geflutet. Der Grundwasserspiegel stellte sich auf Erbstollen- bzw. Vorfluterniveau ein, da die Wasserlosungsstollen weiterhin die Grubenbaue entwässern. Gegenüber der ursprünglichen hydrogeologischen Situation vor Beginn der bergbaulichen Tätigkeit ist der Grundwasserspiegel bis über 100 m abgesenkt (OFNER & WIEBER 2008). Das gesamte Bergwerk stellt vereinfacht eine überdimensionale Dränage mit dem Tiefen Stollen als Auslauf am tiefsten Punkt dar. Die hydrogeologischen Verhältnisse ehemaliger untertägiger Bergwerksanlagen sind in Abbildung 3-8 schematisch dargestellt. Die Unterscheidung der Wässer erfolgt auf Grundlage der hydrogeologischen Kriterien und der Lage der Grubenwasserzutritte bzw. des Grundwassers zur Vererzung.



Legende:

Grundwässer:

1. Schachtwässer: in gefluteten Stollen und Schächten zirkulierende Grundwässer
2. In Blindschächten eingestaute Grundwässer
3. Über Röschen gefasste Grundwässer [mit (geringem) Tagwasseranteil], die über Röschen nach außen geführt werden

Tagwässer:

4. Sickerwässer aus Abbaubereichen (ungesättigte Zone)
5. Freie Wasserzutritte aus Schächten und Erzrollen (ungesättigte Zone)
6. Sickerwässer außerhalb der Abbaubereiche (ungesättigte Zone)

Abbildung 3-8 Schematischer Überblick Grubenwässer (bearbeitet nach WIEBER 1999)

3.4 Bergbau

Bergbaulich wird das Gebiet um die Stadt Herdorf und die Gemeinde Daaden dem Siegerland-Wied-Distrikt zugeordnet. Die ansässigen Gruben saßen auf dem Florz-Füsseberger Gangzug auf. Der Bergbaubezirk Siegen (Abbildung 3-9 grüner Kasten) umfasst die Ortschaften Siegen, Burbach und Betzdorf sowie die Stadt Herdorf und die Ortschaften Daaden und Bad Marienberg. Westlich setzt er sich in das Mittelsiegbergland mit den Orten Weyerbusch, Wissen und Morsbach fort. Der Wied-Bezirk (Abbildung 3-9 roter Kasten) bildet die südwestliche Fortsetzung und reicht von Rheinbreitbach und Bendorf im Westen sowie Altenkirchen bis Dierdorf im Osten.

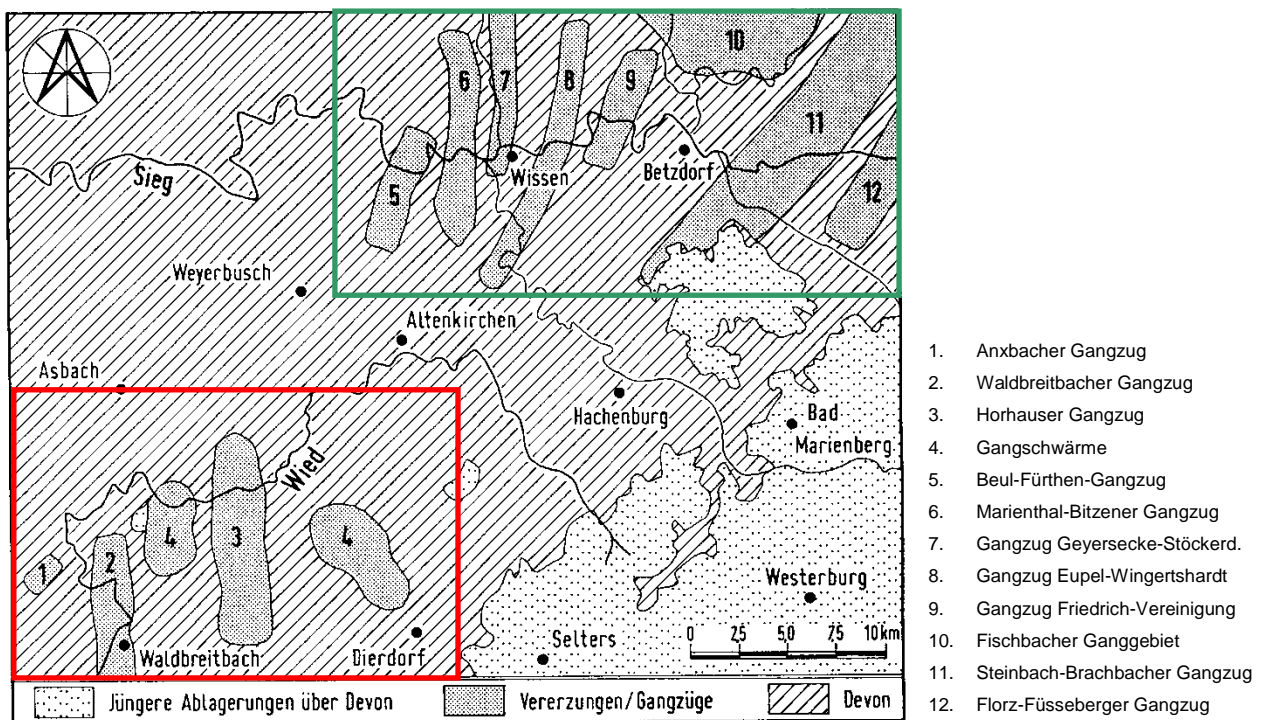


Abbildung 3-9 Übersichtskarte des Siegerland-Wied-Distriktes (bearbeitet nach HOFFMANN 1964)

Der Bergbau im Siegerland-Wied-Distrikt bestand nach KIRNBAUER et al (1998) vermutlich mit Unterbrechungen über 2000 Jahre hinweg und gelangte seit Beginn des 18. Jahrhunderts zur größten Blüte. Er wurde mit Schließung der letzten Grube, der Grube Georg bei Horhausen, im Jahr 1965 beendet. Nach PRETOR & RINN (1964) wurde im ehemaligen Siegerland-Wied-Distrikt bereits in der Frühlatène-Zeit (jüngere römische Eisenzeit, etwa 4.-5. Jahrhundert v. Chr.) Bergbau betrieben. Die erste dokumentierte Erwähnung des Bergbaus stammt nach SLOTTA (1983) aus dem

Jahr 1298. Nach HOFFMANN (1964) kann das Alter des im Raum Daaden betriebenen Bergbaues nicht mehr rekonstruiert werden. Bekannt ist allerdings, dass seit 1723 die Aufsuchung durch einheimische Betriebe erfolgte.

Bergmännisch wird im Siegerland bei den Erzvorkommen zwischen Morgen- (W-E) und Mittags-(N-S) Gängen unterschieden. Weitere Gangrichtungen sind, abgesehen von NW-SE-streichenden Quergängen, selten (BORNHARDT 1910). Die bauwürdig bedeutendsten Gänge des Siegerlandes sind Gänge mit N-S-Streichrichtungen (FENCHEL et al. 1985).

Bei der Festlegung von Gangrichtungen wird zwischen primären und sekundärem Gangstreichen unterschieden. Die primär N-S-streichenden Gänge des Florz-Füsseberger Gangzuges weisen durch eine Zerschierung an Diagonal-Seitenverschiebungen (und Aufschiebungen) eine sekundäre NNE-SSW-Gesamtstreichrichtung auf. Primär E-W-streichende Gänge sind entsprechend durch versetzende Scherstörungen sekundär häufig WSW-ENE-streichend (FENCHEL et al. 1985).

Viele Gänge sind an Falten und deren Flanken gebunden, andere, wie z.B. der Florz-Füsseberger-Gangzug, sind eher in ruhig gelagerten, überwiegend nach SE einfallenden Schichten eingebunden (FENCHEL et al. 1985).

Die Faltung und schwache Metamorphisierung der Gesteine des Siegener Antiklinoriums fand im Oberkarbon, etwa zwischen ausgehendem Unterkarbon und Westfal, statt (FENCHEL et al. 1985). Damit übereinstimmend sind auch absolute Altersdatierungen von AHRENDT, HUNZINGER & WEBER 1978 (in FENCHEL et al. 1985), welche ein Alter von ca. 320 ± 10 Ma angeben.

Die einzelnen Gänge des Florz-Füsseberger Gangzuges setzen über Tage in den Oberen Siegen-Schichten (Unterdevon) auf. Diese Schichten sind schwach gefaltet und weisen ein überwiegend nach SE orientiertes Einfallen auf (FENCHEL et al. 1985). In Abbildung 3-10 sind schematisch und vereinfacht die wesentlichen abgebauten Gänge im anstehenden unterdevonischen Gebirge dargestellt.

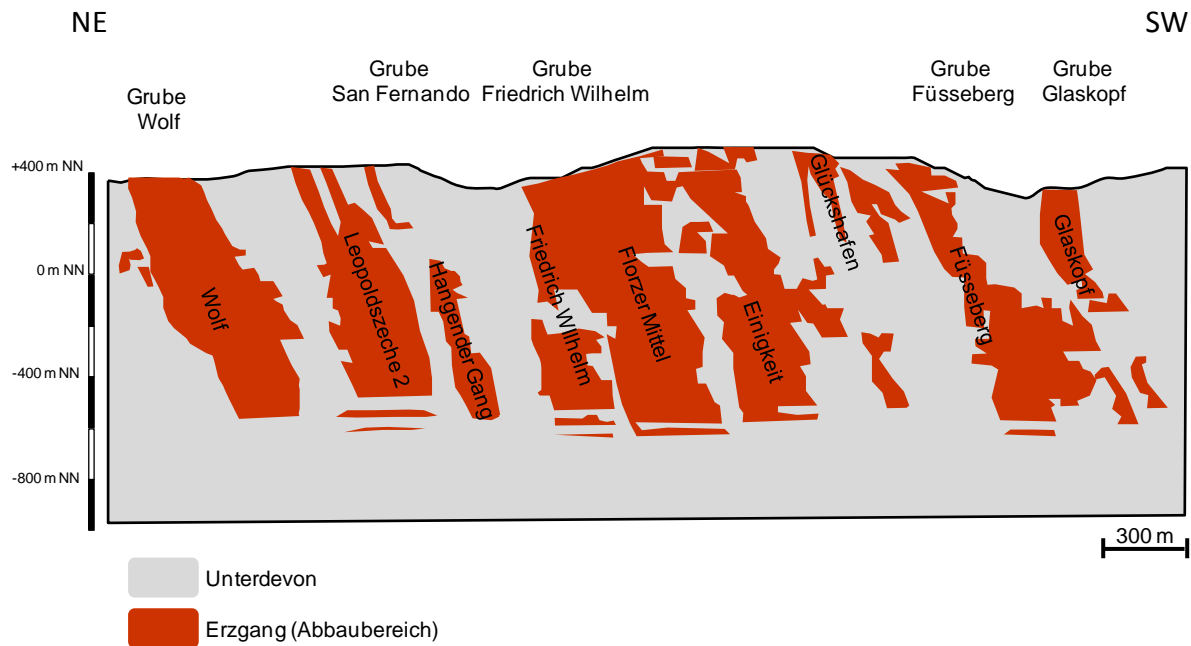


Abbildung 3-10 schematische Darstellung der abgebauten Erzmittel der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (ergänzt und bearbeitet nach WIEBER 2007, Grundlage nach FENCHEL et al. 1985)

Von NE nach SW baute die Verbundgrube auf dem Hauptgang (*Wolf*), den Gängen *Bernhard*, *Leopoldszeche I* und *II*, *Ziegenberg* und auf dem *Hangenden* und *Liegenden Gang* auf. Die einzelnen Gangmittel waren vom Tiefen Stollen Wolf, dem Tiefen Stollen San Fernando sowie dem Schacht Wolf, Schacht 1 San Fernando bis zur 600-m-Sohle und Schacht 2 erschlossen. Über einen Blindschacht auf der 600-m-Sohle wurden die tiefsten Sohlen bis zur 930-m-Sohle (FENCHEL et al. 1985) aufgefahren. Im Bereich der Grube Wolf, zwischen der 450- und 500-m-Sohle von Schacht Wolf, werden der Hauptgang und seine Paralleltrümer durch eine WSW-ENE-streichende und mit 60° bis 80° nach SSW einfallende Seitenverschiebung tektonisch versetzt. Auf der 600-m-Sohle, einige Meter vom Schacht entfernt, verursacht die so genannte Wasserkluft mit einem Streichen von 100°E und einem Einfallen von 87°S einen Verschiebungsbetrag von 15 bis 20 m (FENCHEL et al. 1985). Diese nach der Erzmineralisation entstandenen Störungen haben das sekundäre Streichen des Gangzuges von SSW nach NNE verursacht (FENCHEL et al. 1985).

Auf der Grube Friedrich Wilhelm wurden die Mittel *Friedrich Wilhelm* und das *Florzer Mittel* abgebaut, durch Anschluss der Grube Einigkeit ebenfalls die Mittel *Einigkeit* und *Unterste Einigkeit*. Die Grube Füsseberg baute das 1., 2., und 3. Gangstück sowie das *Füsseberger Mittel* ab.

Die Sideriterzgänge des Siegerland-Wied-Distriktes hatten die größte wirtschaftliche Bedeutung aller Sideriterzgänge des Rheinischen Schiefergebirges. Sie wurden als manganreiche Eisenerzvorkommen bergmännisch gewonnen und bildeten eine der bedeutendsten Lagerstätten des 19. Jahrhunderts (KIRNBAUER et al. 1998).

Nach FRIEDRICH & JOCHUM (1997) handelt es sich bei den Erzvorkommen des Siegerlandes um Intraformale Lagerstätten. Die Bildung der gangförmigen Erzlagerstätten geschah unter hydrothermalen Bedingungen durch Auslaugung des Nebengesteins. Für die Erzentstehung wurde ein Alter von 400 ± 20 Ma ermittelt KIRNBAUER et al. (1998). Damit muss die Erzentstehung prävariscisch kurz nach der Diagenese der Sedimente erfolgt sein.

Der Hauptteil der ehemals bauwürdigen Mineralisation der Erzgänge des Siegerland-Wied-Distriktes entfiel mit mehr als 45% auf Siderit. Daneben gab es untergeordnet Vorkommen von Blei-Zink-Erz sowie Kobalt-, Nickel- und Kupfer-Erz in bestimmten Bereichen des Erzbergbaubesgebietes (GIES, HÜTTENHAIN & RAO mit STADLER & WALTHER in FENCHEL et al. 1985). Der reine Siderit der Hauptphase hat nach HÜTTENHAIN (1962) eine mineralogische Zusammensetzung von 77,2 Mol% FeCO_3 , 15,7 Mol% MnCO_3 , 5,9 Mol% MgCO_3 und 1,2 Mol% CaCO_3 . Die auf der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm abgebauten Erze weisen nach HOFFMANN (1964) einen Eisengehalt von 33,5% und einen Mangangehalt von rund 6,6% auf.

Die oxidative Umwandlung von Siderit in Limonit ($\text{FeOOH} \cdot n\text{H}_2\text{O}$) durch Sauerstoff- und Wasserzutritt hat die Entstehung einer obertägigen Oxidationszone, den so genannten Eisernen Hut, zur Folge. Dadurch wird das Erz obertägig aufgelockert und ermöglicht Wasser entlang von Störungen und Klüften in den Untergrund einzudringen. Die Tiefenlage, bzw. Reichweite dieser Oxidationszone, ist von Grube zu Grube unterschiedlich, so reicht beispielsweise der Eiserne Hut der Grube San Fernando-Wolf auf dem Hauptgang und Gang Bernhard noch bis in eine Tiefe von 400 m (FENCHEL 1985). Im Gegensatz dazu wurde die Oxidationszone der Grube Füsseberg-Friedrich Wilhelm nur bis in eine Tiefe von etwa 20 bis 40 m festgestellt (FENCHEL et al. 1985, HOFFMANN 1964). Die tiefreichende Verwitterung wird insbesondere dort erreicht, wo durch Störungen und Klüftung bedingte Auflockerungszonen den Zutritt von Tagwasser in größere Tiefen ermöglichen (HOFFMANN 1964).

Die Mineralisation des Siegerland-Wied-Distriktes erfolgte in vier Phasen (HEIN 1993). Dabei wird die Phase der Hauptmineralisation ihrerseits unterteilt in Vorphase, Hauptphase und Sulfidphase (Abbildung 3-11). Während der Vorphase werden sulfidische Minerale wie Pyrit, Pyrrhotin und Arsenopyrit gebildet. Sie endet mit der Ausscheidung von Quarz. In der Hauptphase wird überwiegend Siderit, begleitend von Quarz, gebildet. Die Sulfidphase ist für die Entstehung der Buntmetallsulfide wie Sphalerit und Galenit verantwortlich. Nach Abschluss der Hauptmineralisation kommt es in der vierten Phase zur Umwandlung und Remobilisierung durch hydrothermale Lösungen. Dies stellt nach HEIN (1993) den Grund für die lokale Differenzierung der Erze dar.

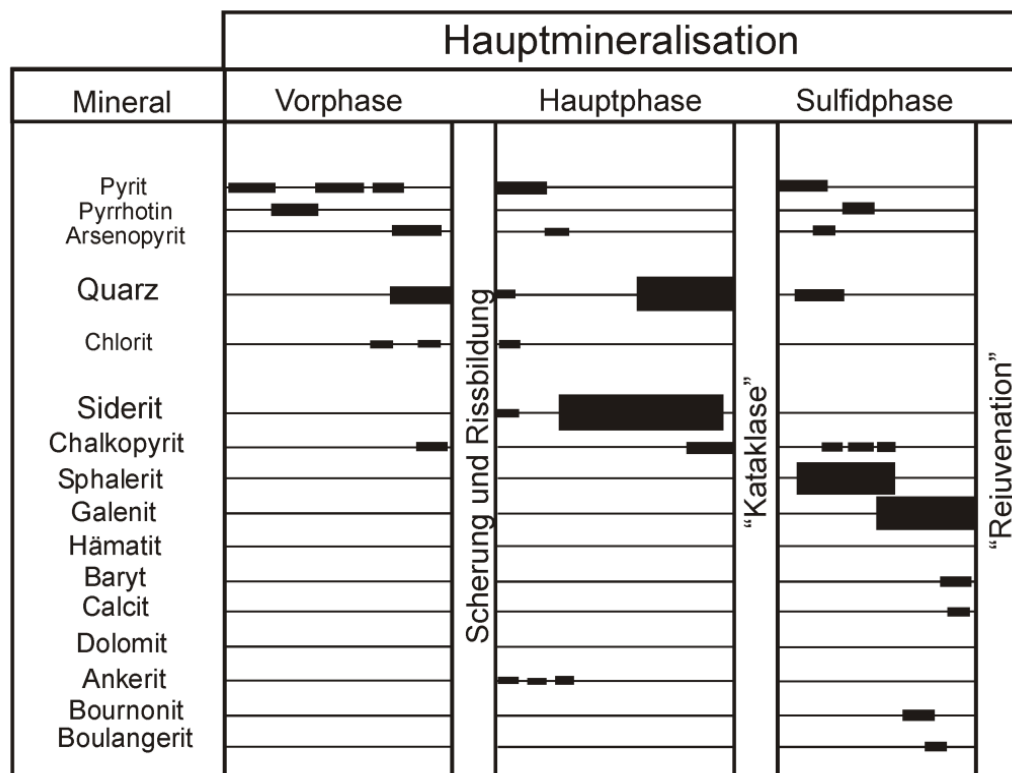


Abbildung 3-11 Hauptmineralisation im Siegerland-Wied-Distrikt (aus Landschreiber 2010, nach WETTIG (1974) und HEIN (1993))

3.5 Florz-Füsseberger Gangzug

Die Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm baute auf dem Florz-Füsseberger Gangzug auf.

Die einzelnen Gänge der Verbundgrube wurden zu Beginn der bergbaulichen Tätigkeit einzeln abgebaut, sind jedoch in der Folgezeit durch einzelne Sohlen auf verschiedenen Teufen miteinander verbunden worden. Die Grube San Fernando-Wolf ist mit der Grube Füsseberg-Friedrich Wilhelm lediglich durch die 830-m-Sohle (17.Sohle) verbunden. Hydrostatisch stellen die Gruben mit ihren Schächten ein System kommunizierender Röhren dar. In Abbildung 3-12 ist die bearbeitete Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm schematisch dargestellt. Die blaue Linie bezeichnet den ‚Grubenwasserspiegel‘ (GWS). Die Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm wurde 1965 stillgelegt.

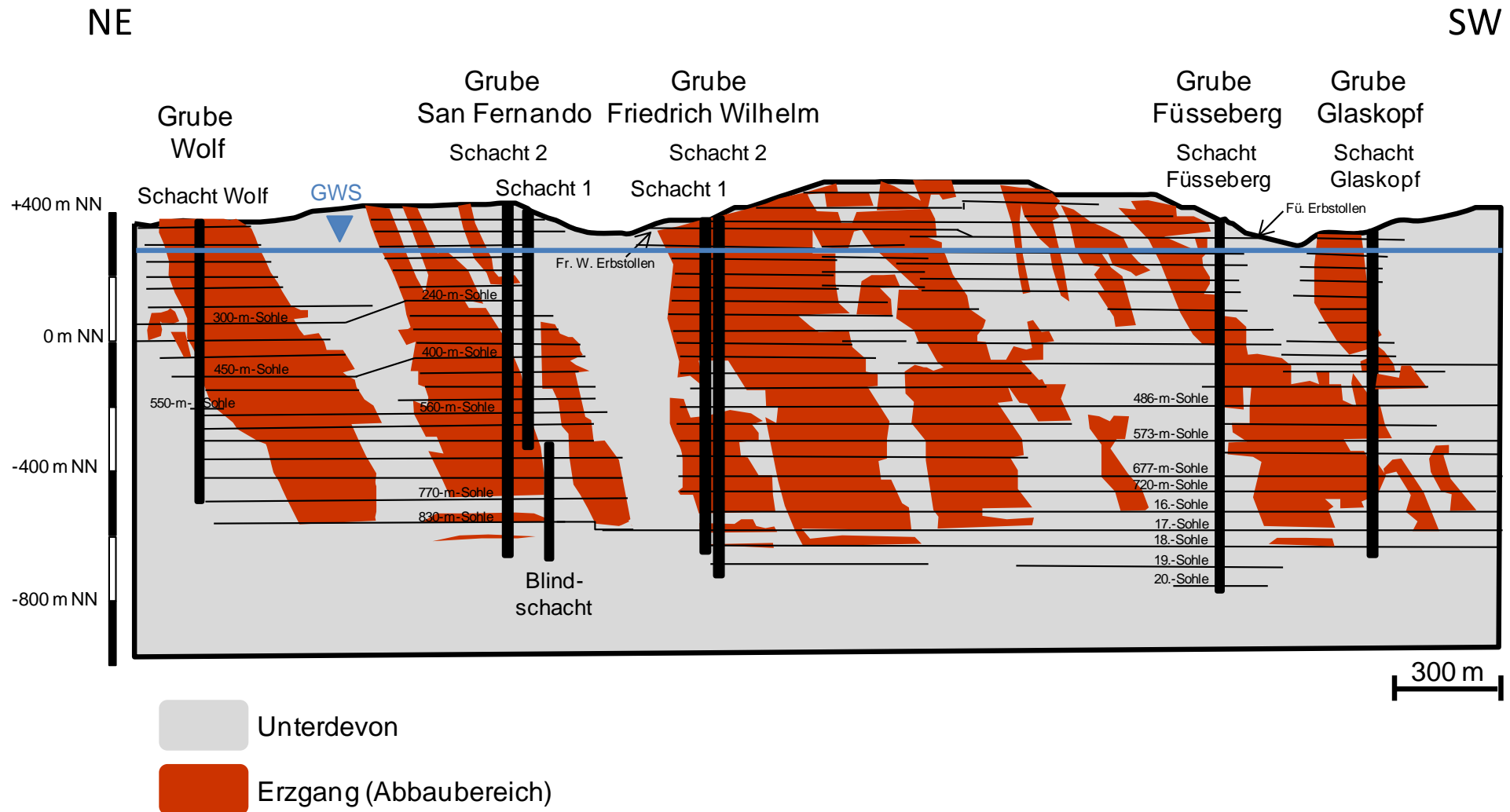


Abbildung 3-12 schematischer Überblick über die Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (ergänzt und bearbeitet nach WIEBER 2007, Grundlage nach FENCHEL et al. 1985)

Aus der Gegenüberstellung der hydrochemischen Beschaffenheit der Grubenwässer während des aktiven Bergbaus (Abbildung 3-13) ist ersichtlich, dass sich die meisten, auf den verschiedenen Gruben anfallenden Wässer hinsichtlich ihrer Mineralisation deutlich voneinander unterscheiden haben. Dies ist unter anderem auf eine unterschiedliche Erzmineralisation und damit einhergehend unterschiedliche Lösungsprozesse, unterschiedliche Verweildauern des Wassers und unterschiedliche Zutritte von Niederschlagswasser zurückzuführen. Der pH-Wert der Wässer liegt im neutralen bis leicht sauren Bereich, die Temperaturen zwischen 17 und 26°C in Abhängigkeit von der jeweiligen Tiefe. Es liegen keine Unterlagen zur Flutung der Grube vor, es ist z.B. nicht bekannt, wann es am Auslauf der Grube Wolf zum ersten Mal zum Austritt von Grubenwasser kam und in wie weit sich die hydrochemischen Bedingungen des Wassers im Verlauf der Flutung verändert haben.

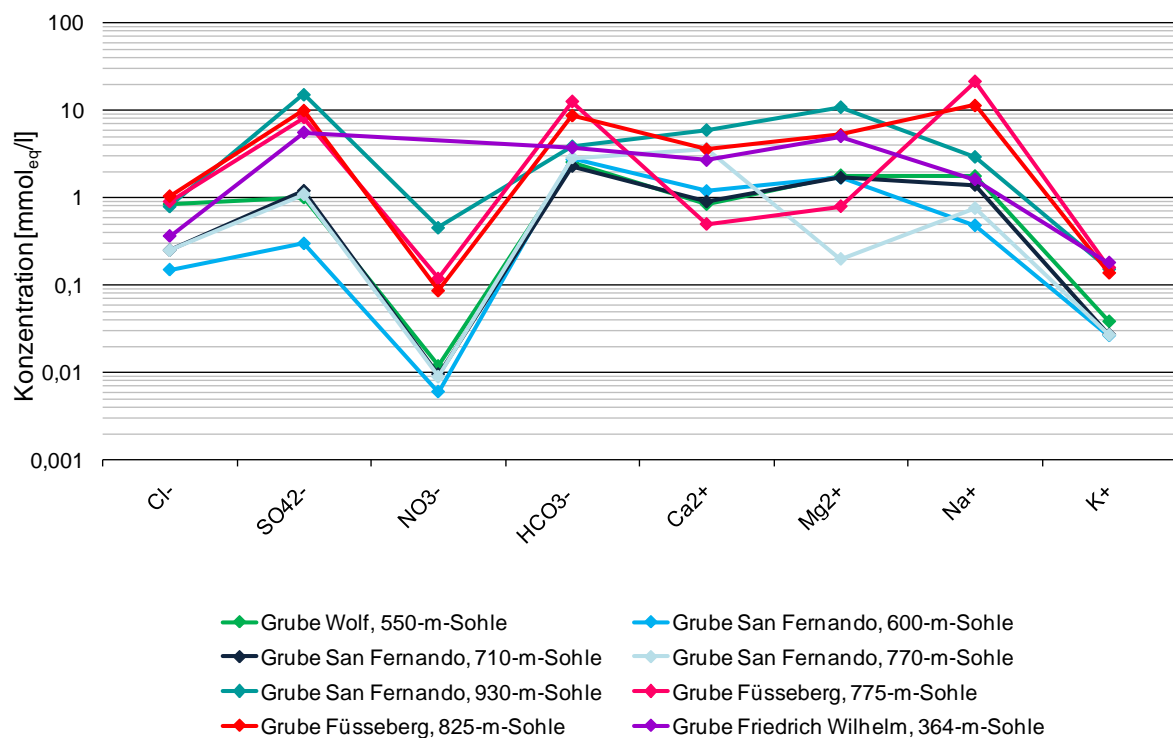


Abbildung 3-13 hydrochemische Beschaffenheit der Grubenwässer der verschiedenen Gruben in unterschiedlichen Teufen während des aktiven Bergbaus
(zusammengestellt aus FENCHEL et al. 1985, Analysen überwiegend nach HEYL 1954)

Die Temperaturen auf verschieden tiefen Sohlen während des aktiven Bergbaus sind in Abbildung 3-14 dargestellt. Soweit vorliegend, wurden die Temperaturen der Wässer der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm den Temperaturen des Grubenwassers der Grube Eupel im Rheinischen Schiefergebirge gegenübergestellt. Es zeigt sich, dass die Temperaturen der Grube Eupel im Wesentlichen gemäß dem natürlichem geothermischen Gradienten von Mitteleuropa um $3^{\circ}\text{C}/100\text{ m}$ zunehmen. Die Grubenwässer der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm weisen durchschnittlich leicht höhere Temperaturen auf, dies ist nach FENCHEL et al. (1985) und KRAH (2005) auf einen lokal erhöhten geothermischen Gradienten zurückzuführen.

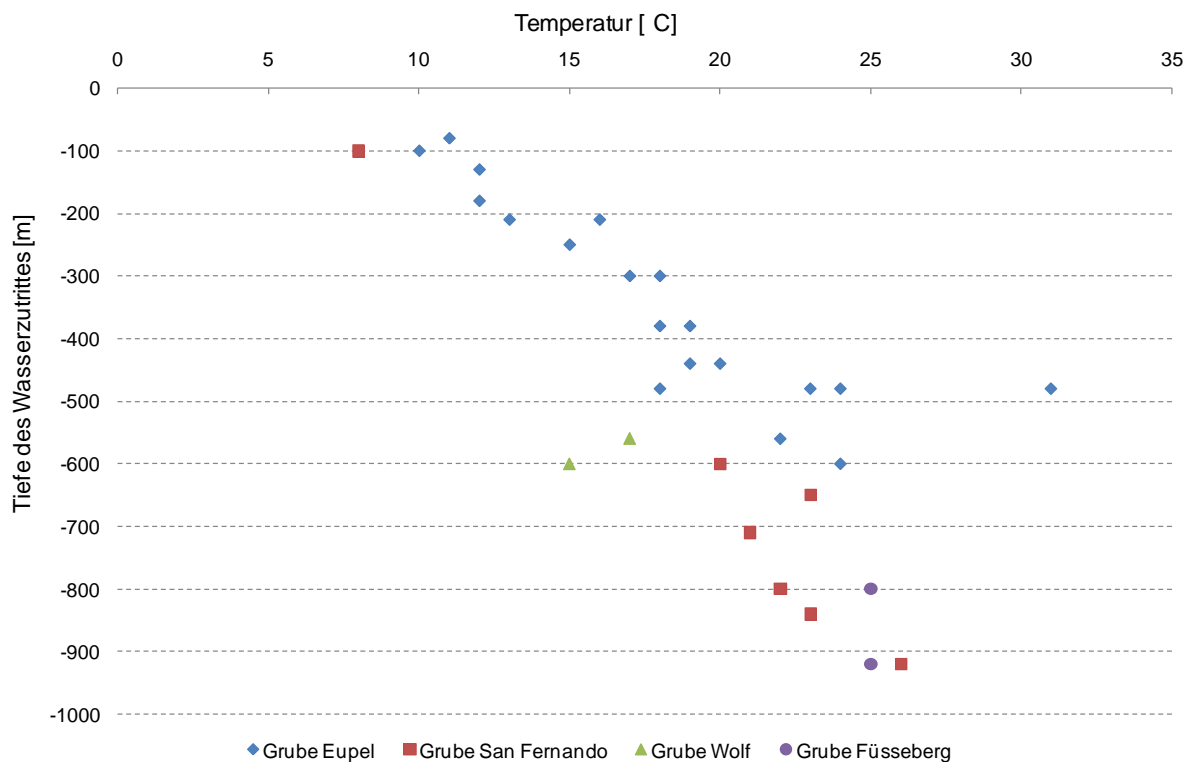


Abbildung 3-14 Temperaturen von Grubenwässern im Siegerland während des aktiven Bergbaus (bearbeitet nach FENCHEL et al. 1985)

aufstiegen. Daraufhin wurde die Wasserhaltung der Grube Wolf erneut in Betrieb genommen. Der erhöhte Wasserzutritt in der Grube San Fernando über das Vorhandensein von kluftbedingten Wasserwegsamkeiten zeigt die hydraulischen Verbindungen der Gruben untereinander, noch bevor über Sohlen künstliche Verbindungen erzeugt worden sind. Selbst unter der Annahme, dass nach der Flutung die Verbindungssohlen eingestürzt sein könnten und damit die künstlichen hydraulischen Verbindungen keinen Bestand mehr hätten, kann davon ausgegangen werden, dass hydraulische Verbindungen über die Geologie bzw. natürliche Klüftung, mindestens im Bereich der Gruben Wolf und San Fernando bestehen.

Ab etwa 1950 wurde damit begonnen, die Erze der Grube Wolf von der Grube San Fernando (Abbildung 3-16) aus abzubauen. Es wurde eine Verbindungssohle von der 600-m-Sohle San Fernando in das Grubenfeld Wolf vorgetrieben und der eigentliche Schacht Wolf wurde unterfahren.

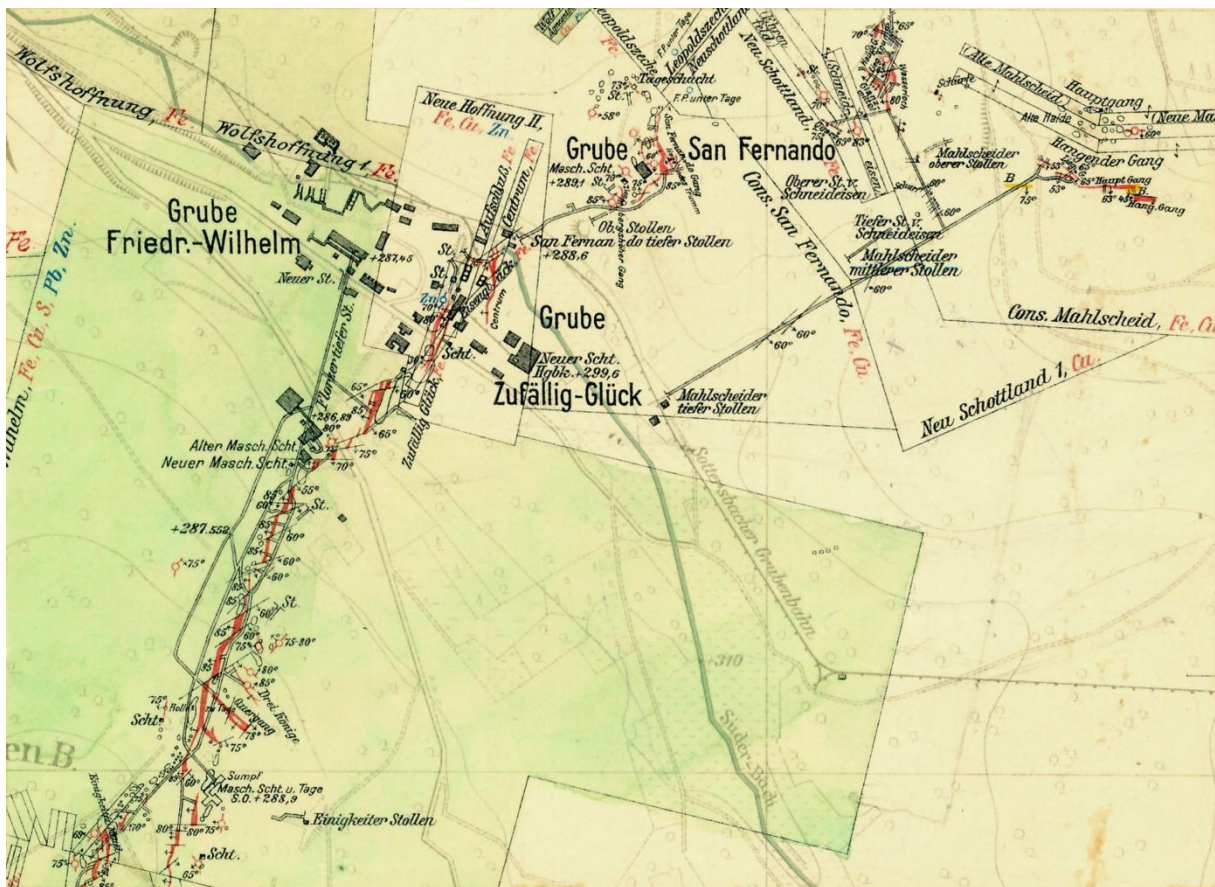


Abbildung 3-16 Gangkarte 1:10.000 (Ausschnitt) der Grube San Fernando (einschließlich der im Weiteren angeschlossenen Grube Friedrich Wilhelm sowie Grube Zufälligglück (nicht hydraulisch angeschlossen) (1906-1923)

Die 520-m-Sohle San Fernando wurde mit der 550-m-Sohle Wolf verbunden. Ab 1952 wurde die Grube als San Fernando-Wolf geführt, alle Bezeichnungen unterhalb der 500-m-Sohle Wolf Sohlen wurden von San Fernando übernommen (FENCHEL et al.1985).

Die in der Grube San Fernando abgebauten Erze wurden erst relativ spät entdeckt. Zudem fand in den ersten etwa 10 Jahren nur eine eher geringe Förderung statt. Schacht 1 wurde 1881 zunächst als Blindschacht abgeteuft. Bis 1902 wurde die 280-m-Sohle aufgefahren. Im Rahmen der steigenden Förderung wurde nach dem 1. Weltkrieg mit dem Abteufen eines zweiten Tagschachtes (Schacht 2) begonnen, welcher zuletzt die 930-m-Sohle erreichte (FENCHEL et al. 1985).

Grube Wolf wurde nach Ende des 2. Weltkrieges nicht mehr als unabhängige Grube direkt in Betrieb genommen, sondern erst wieder im Verbund mit San Fernando im Jahr 1953.

Da aus Untersuchungen zu befürchten war, dass die aufsteigenden Grubenwässer der stillgelegten Grube San Fernando-Wolf über bestehende Gangspalten in die Grube Füsseberg durchgedrungen wären, wurde die Wasserhaltung San Fernando-Wolf beibehalten, um die Erzvorräte Füsseberg weiter gewinnen zu können. Dazu wurden beide Gruben auf der 17. Sohle (830-m-Sohle) mittels Bremsberg und Übergabebunker verbunden (FENCHEL et al. 1985).

Die Verbundanlage San Fernando-Wolf wurde auf Grund von Absatzschwierigkeiten 1962 stillgelegt.

3.5.2 Verbundgrube Füsseberg-Friedrich Wilhelm

Die Verbundgrube Füsseberg-Friedrich Wilhelm schließt südlich an das Grubenfeld San Fernando-Wolf an und ist durch den Zusammenschluss verschiedener, ursprünglich unabhängiger, Gruben zu unterschiedlichen Zeitpunkten entstanden.

Die Erze der Grube Friedrich Wilhelm wurden bereits durch Stollen erschlossen, bevor das Abteufen von Schacht 1 den Übergang zum Tiefbau darstellte. Im Jahr 1906 wurde die Grube Einigkeit mit der Grube Friedrich Wilhelm zusammengeschlossen (FENCHEL et al. 1985). Der alte Erzbergbau der Grube Einigkeit ist durch noch vorhandene große Pingen obertägig gut erkennbar. Grube Einigkeit setzte im Bereich des Florzer Erbstollens mit einem Blindschacht auf und erreichte die 200-m-Sohle, bevor sie mit der Grube Friedrich Wilhelm zusammengeschlossen wurde.

Der Abbau der Erze im Bereich der Grube Friedrich Wilhelm begann im Bereich des Friedrich Wilhelm Erbstollens, von wo aus die Grube über einen Blindschacht im Tiefbau erschlossen war und bis zur 320-m-Sohle reichte. Von Grube Friedrich Wilhelm erreichte der erste Maschinenschacht im Jahr 1878 die 84-m-Sohle. Beim Zusammenschluss von Grube Friedrich Wilhelm mit Grube Füsseberg im Jahr 1937 hatte Schacht 1 der Grube Friedrich Wilhelm die 494-m-Sohle erreicht (FENCHEL et al. 1985). Schacht 2 von Grube Friedrich Wilhelm unterstützte ab 1942 die Förderung über den Füsseberger Schacht durch Übernahme eines Teils der Förderung und über einen neu fertig gestellten Förderstollen.

Das Grubenfeld Füsseberg wurde durch Zusammenschluss verschiedener Einzelfelder gebildet, welche durch das Auffahren verschiedener Stollen auf verschiedenen Ebenen entstanden sind. Der Füsseberger Erbstollen wurde nachträglich angelegt. Bis zum Zusammenschluss mit der Grube Friedrich Wilhelm wurde die Grube Füsseberg über einen Schacht bis zur 486-m-Sohle und über zwei Blindschächte jeweils bis zur 360-m-Sohle erschlossen (FENCHEL et al. 1985).

Die Grube Glaskopf im Süden von Füsseberg war bis zu ihrer vorübergehenden Stilllegung im Jahr 1907 über den Schacht Glaskopf bis zur 480-m-Sohle erschlossen. Anfang der 1930er Jahre wurde die Grube Füsseberg über die 486-m-Sohle mit dem Schacht Glaskopf der Grube Glaskopf verbunden. Dieser

wurde darüber hinaus lediglich als Wetterschacht genutzt und bis zur 17. Sohle weiter abgeteuft (FENCHEL et al. 1985).

Grube Zufälligglück bildet die Fortsetzung der Lagerstätte Friedrich Wilhelm und war die erste Grube des Gangzuges, welche bereits einen 78 m tiefen Maschinenschacht hatte, während die anderen Gruben noch reine Stollenbetriebe waren. Diese Grube wurde lediglich über einen Entwässerungsstollen mit der Grube Friedrich Wilhelm verbunden und weist daher für die hydraulischen Verhältnisse der Verbundgrube keine Bedeutung auf.

Die Gruben Salomé und Glaskopf wurden im Jahr 1900 zur Grube Glaskopf zusammengeschlossen. Zu diesem Zeitpunkt waren die Gruben bis zur 310-m-Sohle vorgedrungen. In den 1930er Jahren wurden die aufgeführten Gruben zur Verbundgrube Füsseberg-Friedrich Wilhelm zusammengeschlossen.

Die Stilllegung der gesamten Verbundanlage Füsseberg-Friedrich Wilhelm-San Fernando-Wolf erfolgte am 31.3.1965. Das gesamte Grubengebäude umfasst ein Streckennetz von über 35 km (FENCHEL et al. 1985).

Die gesamte Verbundgrube ist heute geflutet. Als einzige identifizierte Entwässerung dient der Neue Förderstollen der Grube Wolf auf einer topographischen Höhe von 256 m NN. In Abbildung 3-17 ist dieser Auslauf (mit dem installierten Messwehr), sowie der Neue Förderstollen selbst dargestellt.

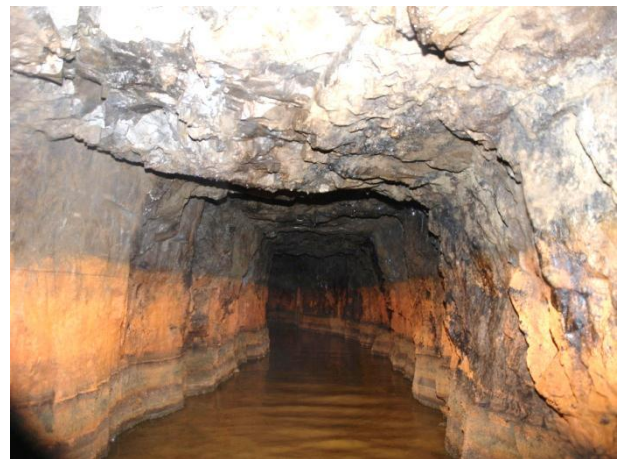


Abbildung 3-17 links: Entwässerung der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm über den Neuen Förderstollen der Grube Wolf (Auslauf mit Messwehr), rechts: Neuer Förderstollen Wolf mit Eisenhydroxid-Ablagerungen, welche auf unterschiedliche Wasserstände hinweisen (Fotos: POHL 2011)

Der Zugang zur Grube Wolf ist über die an den Neuen Förderstollen angebrachte Betonröhre gewährleistet, der Zugang zur Grube San Fernando ist in Abbildung 3-18 zu sehen:

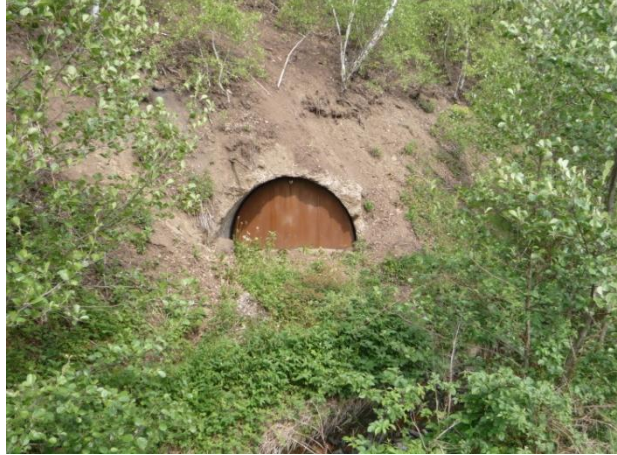


Abbildung 3-18 Zugang zur Grube San Fernando (Foto: PORR 2011)

Abbildung 3-19 liefert einen Blick auf Schacht Wolf der Grube Wolf sowie einen Blick in Schacht 2 der Grube San Fernando



Abbildung 3-19 links: Blick auf/in Schacht Wolf von Grube Wolf (Foto: POHL 2011),
rechts: Blick in Schacht 2 von Grube San Fernando (Foto: PORR 2011)

Die weiteren Schächte bzw. Bergwerksteile der Verbundgrube stehen für hydrochemische oder hydraulische Untersuchungen auf Grund der Flutung und der Versiegelung der Schächte im Rahmen von Standsicherheitsmaßnahmen nicht zur Verfügung.

4 Untersuchungen

4.1 Hydrochemie Grubenwasser

4.1.1 Methodik

Für die hydrochemische Charakterisierung der Grubenwässer wurden an den zugänglichen Schächten der Verbundgrube sowie am Auslauf der Grube Wolf wiederholend Wasserproben entnommen. Neben den Vor-Ort-Parametern Temperatur, elektrische Leitfähigkeit, Redoxvermögen, Sauerstoffgehalt und pH-Wert wurden die Säurekapazität bis pH-Wert 4,3 und die Basenkapazität bis pH-Wert 8,2 bestimmt. Da die hydrochemische Beschaffenheit des Grubenwassers am Auslauf der Grube Wolf im Rahmen der regelmäßige Überprüfung als im Wesentlichen stabil charakterisiert werden konnte, wurde teilweise am Auslauf der Grube Wolf auf eine Probenahme zur Anionen- und Kationenanalytik verzichtet, sondern lediglich die Vor-Ort-Parameter bestimmt.

Für die Proben wurden 100 ml PE-Flaschen (Kationen, Schwer- und Halbmetalle) bzw. 50 ml PE-Flaschen (Anionen) verwendet. Um eine Ausfällung und Adsorption der Kationen an die Gefäßwand zu verhindern wurden die Probenflaschen für die Kationen-, Schwer- und Halbmetallproben mit 200 µl 65%-iger Salpetersäure angesäuert. Das Grubenwasser wurde für die Schwer- und Halbmetallanalytik sowohl gefiltert (Filtration mit 0,45 µm Membranfiltern) als auch ungefiltert entnommen. Die Filtration trennt die abfiltrierbaren und absetzbaren Stoffe des Wassers vom Lösungsinhalt, bei diesen Proben sind also in den ungefilterten Proben alle Komponenten des Wassers, absetzbare, abfiltrierbare als auch gelöste, vorhanden. Bei gefilterten Proben wird hingegen lediglich der gelöste Anteil untersucht. Im Hinblick auf die Fragestellung wurde nicht in allen Fällen sowohl die gefilterte als auch die ungefilterte Probe analysiert. Die ungefilterten Proben weisen die größeren Gesamtkonzentrationen auf, diese Angaben sind im Hinblick auf die geothermische Verwendung des Grubenwassers mittels Wärmetauscher von größerem Interesse als die gefilterte, geringer konzentrierte Probe. Die Anionen- und Kationenproben wurden grundsätzlich gefiltert (Filtration mit 0,45 µm Membranfilter) entnommen. Alle Proben wurden im Kühlschrank aufbewahrt und zeitnah analysiert.

Die Anionen- und Kationenanalytik erfolgte im Hydrochemischen Labor der Universität Mainz, Institut für Geowissenschaften. Für die Bestimmung der Anionen F^- , Cl^- und SO_4^{2-} wurde der Ionenchromatograph 761 Compact IC der Firma Metrohm verwendet. Für die Kationen Na^+ , K^+ und Ca^{2+} wurde bis zum 09.07.2009 das Flammenphotometer Elex 6361 der Firma Eppendorf benutzt. Die Bestimmung von Mg^{2+} erfolgte im Geomorphologischen Labor der Universität Mainz und wurde mit dem Atomabsorptionsspektroskop (AAS) Varian AA240FS durchgeführt. Seit dem 09.07.2009 wurden auch die Kationen Na^+ , K^+ und Ca^{2+} mittels AAS bestimmt. Die Schwer- und Halbmetalle As, Pb, Fe, Mn, Ni und Zn wurden von der CAU Analytik Dreieich, Dr. Graner und Partner GmbH analysiert. Die Bestimmung erfolgte mittels ICP-MS, wobei die ungefilterten Proben mittels Königswasseraufschluss behandelt wurden. Dies stellt sicher, dass die gegebenenfalls im Wasser befindliche Schwebfracht in Lösung gebracht und analysiert werden kann.

Die Bestimmungsgrenzen der Analytik setzen sich wie folgt zusammen (Tabelle 4-1):

Tabelle 4-1 Bestimmungsgrenzen der einzelnen Elemente

	Bestimmungsgrenze [mg/l]	
	bis 09.07.2009	ab 09.07.2009
Ca^{2+}	0,2	0,015
Mg^{2+}	0,004	0,004
Na^+	1,7	0,003
K^+	0,3	0,0047
	bis 22.04.2009	ab 22.04.2009*
F^-	0,1	0,15
Cl^-	0,6	0,97
SO_4^{2-}	0,2	0,5
As	0,0025	
Pb	0,0025	
Fe	0,03	
Mn	0,01	
Ni	0,015	
Zn	0,01	

* Austausch der Chromatographie-Säule

4.1.2 Ergebnisse

Für eine aussagekräftige Darstellung der hydrochemischen Beschaffenheit der untersuchten Wässer wurden exemplarisch Proben ausgewählt. Da sich die Ergebnisse an den gleichen Probenlokalitäten zu den unterschiedlichen Zeitpunkten der Probenahme nicht wesentlich voneinander unterscheiden, wurde zu jeder Probenlokalität eine weitest möglich vollständig vorliegende Analyse (Tabelle 4-2 und Tabelle 4-3) ausgewählt. Die Ergebnisse aller durchgeführten Probenahmen im Rahmen des Projektes an allen Lokalitäten sind dem Anhang 12.1 und 12.2 zu entnehmen.

Tabelle 4-2 Ergebnisse der ausgewählten Wasserproben an Lokalitäten der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (Teil 1)

	11.05.2011 Auslauf TS Wolf	12.09.2010 Schacht Wolf 0,5 m u WOF	05.09.2010 Schacht Wolf 195 m u WOF	12.09.2010 Blindschacht Wolf 0,5 m u WOF
Temperatur [°C]	16,8	17,6	18,0	17,5
el. Leitfähigkeit [$\mu\text{S}/\text{cm}$]	1049	1059	1080	1059
pH-Wert	7,51	7,09	7,14	7,09
Redoxvermögen [mV]	365	107	185	230
Sauerstoff [mg/l]	3,63	n.b.	2,46	n.b.
$\text{K}_{\text{S4,3}}$ [mmol/l]	7,25	7,90	8,00	8,05
$\text{K}_{\text{B8,2}}$ [mmol/l]	0,35	1,25	1,00	1,20
CO_2 [mg/l] *	15,4	55,0	44,0	52,8
Ca^{2+} [mg/l]	67,6	67,3	67,7	66,4
Mg^{2+} [mg/l]	81,3	84,5	86,9	85,4
Na^+ [mg/l]	31,7	31,2	33,9	33,0
K^+ [mg/l]	7,83	7,60	7,90	7,20
F^- [mg/l]	0,22	0,24	0,09	0,26
Cl^- [mg/l]	12,2	12,1	11,2	13,6
SO_4^{2-} [mg/l]	201	157	210	193
HCO_3^{2-} [mg/l]	442	482	488	491
As [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b./0,006	0,0008/n.b.	n.b./0,011
Pb [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b./u.d.B.	u.d.B./n.b.	n.b./0,032
Fe [mg/l] gef./ungef.	0,042/0,270	n.b./0,67	0,45/n.b.	n.b./9,50
Mn [mg/l] gef./ungef.	2,20/2,40	n.b./2,50	2,20/n.b.	n.b./4,40
Ni [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b./u.d.B.	0,096/n.b.	n.b./0,015
Zn [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b./0,029	0,05/n.b.	n.b./0,15
Σ Kationen [mmol(eq)/l]	11,6	11,9	12,5	12,0
Σ Anionen [mmol(eq)/l]	11,8	11,5	12,7	12,5
relativer Fehler %	-1,36	2,87	-3,98	-4,13

n.b. nicht bestimmt u.d.B. unter der Bestimmungsgrenze
 WOF: Wasseroberfläche * gelöst

Tabelle 4-3 Ergebnisse der ausgewählten Wasserproben an Lokaltäten der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (Teil 2)

	12.09.2010 Alter Schacht Wolf 0,5 m u WOF	04.07.2009 Schacht San Fernando	11.05.2011 Schacht San Fernando 55 m u WOF	12.09.2010 Schacht San Fernando 77 m u WOF
Temperatur [°C]	14,5	16,4	15,8	16,9
el. Leitfähigkeit [$\mu\text{S}/\text{cm}$]	922	1041	1073	1061
pH-Wert	6,92	7,12	7,11	7,10
Redoxvermögen [mV]	260	351	290	224
Sauerstoff [mg/l]	n.b.	1,17	1,29	n.b.
$\text{K}_{\text{S4,3}}$ [mmol/l]	6,15	8,40	7,30	7,50
$\text{K}_{\text{B8,2}}$ [mmol/l]	1,30	0,60	1,20	1,25
CO_2 [mg/l] *	57,2	26,4	52,8	55,0
Ca^{2+} [mg/l]	60,6	74,4	67,0	67,0
Mg^{2+} [mg/l]	68,1	89,2	81,9	85,6
Na^+ [mg/l]	26,4	29,4	30,8	32,9
K^+ [mg/l]	7,29	7,20	7,34	7,30
F^- [mg/l]	0,25	0,09	0,20	0,24
Cl^- [mg/l]	16,4	13,8	12,1	12,8
SO_4^{2-} [mg/l]	195	201	203	169
HCO_3^{2-} [mg/l]	375	512	445	458
As [mg/l] gef./ungef.	n.b./u.d.B.	n.b.	n.b.	n.b./0,003
Pb [mg/l] gef./ungef.	n.b./u.d.B.	n.b.	n.b.	n.b./u.d.B.
Fe [mg/l] gef./ungef.	n.b./0,32	n.b.	n.b./0,630	n.b./0,51
Mn [mg/l] gef./ungef.	n.b./2,20	n.b.	n.b./2,70	n.b./2,10
Ni [mg/l] gef./ungef.	n.b./0,028	n.b.	n.b.	n.b./0,042
Zn [mg/l] gef./ungef.	n.b./0,15	n.b.	n.b.	n.b./0,054
Σ Kationen [mmol(eq)/l]	9,95	12,5	11,6	12,0
Σ Anionen [mmol(eq)/l]	10,7	13,0	11,9	11,4
relativer Fehler %	-7,14	-3,60	-2,27	5,12

n.b. nicht bestimmt
WOF: Wasseroberfläche

u.d.B. unter der Bestimmungsgrenze
* gelöst

Der Ionenbilanzfehler (relativer Fehler) wurde nach DEV (2011) gemäß Gleichung 4-1 berechnet.

$$\text{rel. Fehler} = \frac{\Sigma \text{Kationen} - \Sigma \text{Anionen}}{0,5 \cdot (\Sigma \text{Kationen} + \Sigma \text{Anionen})} \cdot 100 \quad (4-1)$$

Dabei ist nach DEV (2011) bei der Summe der Äquivalentkonzentrationen von Anionen und Kationen von 2 bis 4 mmol(eq)/l ein relativer Fehler von maximal 10% und bei Äquivalentkonzentrationen > 4 mmol(eq)/l von 5% zulässig. Die Ionenbilanzfehler der Proben liegen im Wesentlichen im zulässigen Bereich, die

Analysen können damit als plausibel betrachtet werden. Lediglich bei der Probe des Alten Schachtes liegt der Ionenbilanzfehler leicht über der Zulässigkeit, die Probe wird dennoch verwendet, da sich die Überschreitung der Zulässigkeit noch im tolerierbaren Bereich bewegt.

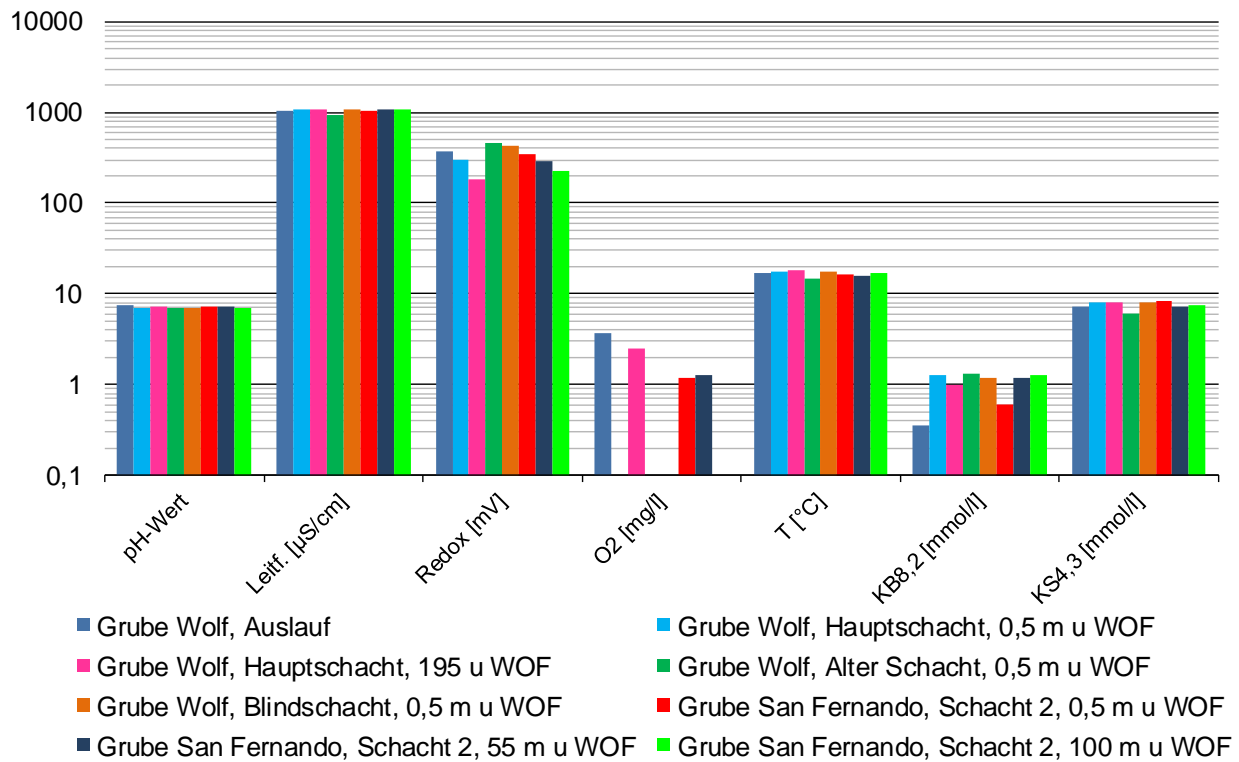


Abbildung 4-1 Gegenüberstellung der Vor-Ort-Parameter der Grubenwässer an den unterschiedlichen Probenlokalitäten

Eine Gegenüberstellung der Vor-Ort-Parameter der Proben an den unterschiedlichen Probenlokalitäten ist in Abbildung 4-1 dargestellt. Es zeigt sich, dass die Vor-Ort-Parameter an den unterschiedlichen Grubenwasserlokalitäten nur einer geringen Schwankungsbreite unterliegen und insgesamt eine sehr ähnliche hydrochemische Beschaffenheit aufweisen. Die Temperaturen der Wässer liegen zwischen 15,8 und 18,0°C, die elektrischen Leitfähigkeiten im Bereich von 1049 bis 1080 µS/cm, der pH-Wert im neutralen bis schwach alkalischen Milieu zwischen 7,09 und 7,51. Die Sauerstoffgehalte konnten nicht bei allen Probenahmen bestimmt werden, die vorliegenden Sauerstoffgehalte liegen zwischen 1,17 und 3,63 mg/l, wobei die Wässer des Auslaufes Wolf auf Grund ihres Kontaktes zur Atmosphäre grundsätzlich höhere Sauerstoffgehalte aufweisen als die Schacht-Wässer. Lediglich das Grubenwasser des Alten Schachtes der Grube Wolf ist durch eine geringere Wassertemperatur und eine niedrigere elektrische Leitfähigkeit gekennzeichnet.

Bei den Schacht-Wässern deutet das Redoxvermögen ($E_h < 400 \text{ mV}$) in Kombination mit den geringen Sauerstoffgehalten der Schacht-Wässer auf reduzierende Bedingungen (Mangan- und Eisenreduktion) hin (OTTOW 1981).

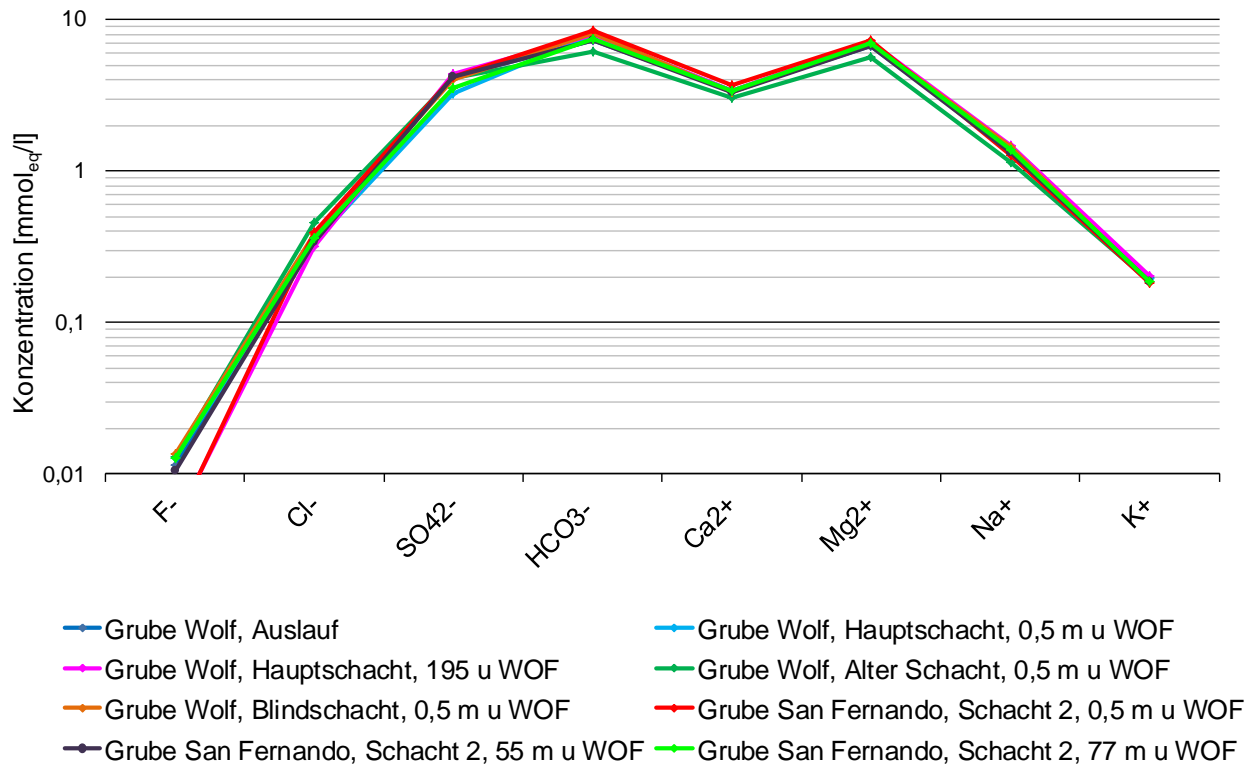


Abbildung 4-2 Schöller-Diagramm der chemischen Zusammensetzung (Hauptanionen und -kationen) der ausgewählten Grubenwasser-Proben

Das Schöller-Diagramm der Grubenwässer ist in Abbildung 4-2 dargestellt. Auch an den Anionen- und Kationenkonzentrationen der Grubenwässer zeigt sich, dass die Grubenwässer eine sehr ähnliche chemische Zusammensetzung aufweisen. Gegenüber der chemischen Beschaffenheit der Grubenwässer vor der Flutung (Kapitel 3, Abbildung 3-13) lassen sich keine signifikanten hydrochemischen Unterschiede der Grubenwässer untereinander an den untersuchten Lokalitäten der Verbundgrube erkennen. Geringe Unterschiede resultieren möglicherweise aus unterschiedlichen Anteilen von Frischwasser (aus versickerndem Niederschlag). Dies zeigt, dass seit Flutung der Grube eine durch Konvektion und Gaslift gesteuerte Durchmischung und damit einhergehend Angleichung des Chemismus stattgefunden haben muss. Über die Schächte und Sohlen der Verbundgrube bestehen hydraulische Verbindungen, welche für ein kontinuierliches Nachströmen von Grubenwasser sorgen.

Ebenfalls zu erkennen ist, dass sich die Anionen- und Kationenkonzentrationen des Wassers des Alten Schachtes leicht von den restlichen Proben unterscheiden. Die Kationenkonzentrationen sind geringer, während die Anionenkonzentrationen im gleichen Bereich oder leicht über denen der anderen Grubenwässer liegen. Dies zeigt, dass der Alte Schacht der Grube Wolf (grüne Linie) hydraulisch entweder nicht oder nicht vollständig an das System der Kommunizierenden Röhren der Verbundgrube San Fernando-Wolf angeschlossen ist. Das Grubenwasser des Alten Schachtes ist kühler und geringer mineralisiert. Dies kann auch ein Hinweis auf einen stärkeren Zufluss von Sickerwasser sein.

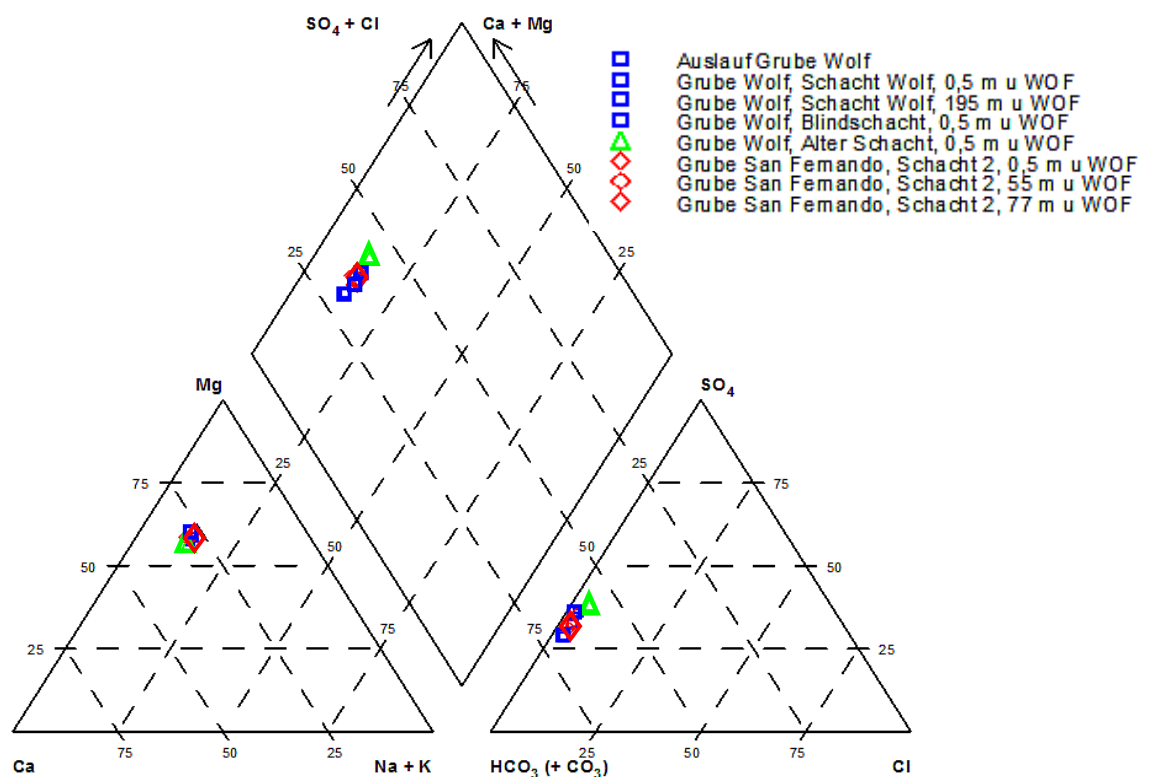


Abbildung 4-3 Piper-Diagramm der chemischen Zusammensetzung (Hauptanionen und -kationen) der ausgewählten Grubenwasser-Proben

An Hand des Piper-Diagramms der ausgewählten Proben (Abbildung 4-3) lassen sich die Grubenwässer nach FURTAK & LANGGUTH (1978) als überwiegend hydrogencarbonatische, erdalkalische Wässer charakterisieren. Auffällig ist auch an dieser Stelle wieder, dass das Grubenwasser des Alten Schachtes zwar grundsätzlich mit in diese Charakterisierung fällt, sich jedoch von den weiteren Proben der Grube Wolf leicht unterscheidet.

Bei allen Probenahmen war das Wasser klar und ohne Trübung. Stellenweise war ein schwacher Geruch nach fauligen Eiern (Hinweis auf H_2S) wahrzunehmen.

Am Auslauf der Grube Wolf wurden wiederholt Proben genommen bzw. die Vor-Ort-Parameter (Abbildung 4-4) erfasst.



Abbildung 4-4 Probenahme (Titration) am Auslauf der Grube Wolf (Foto: PORR 2011)

In Abbildung 4-5 ist der zeitliche Verlauf der Parameter Temperatur, pH-Wert und elektrische Leitfähigkeit, in Abbildung 4-6 sind Sauerstoffgehalt und Redoxvermögen des Grubenwassers am Auslauf der Grube Wolf dargestellt.

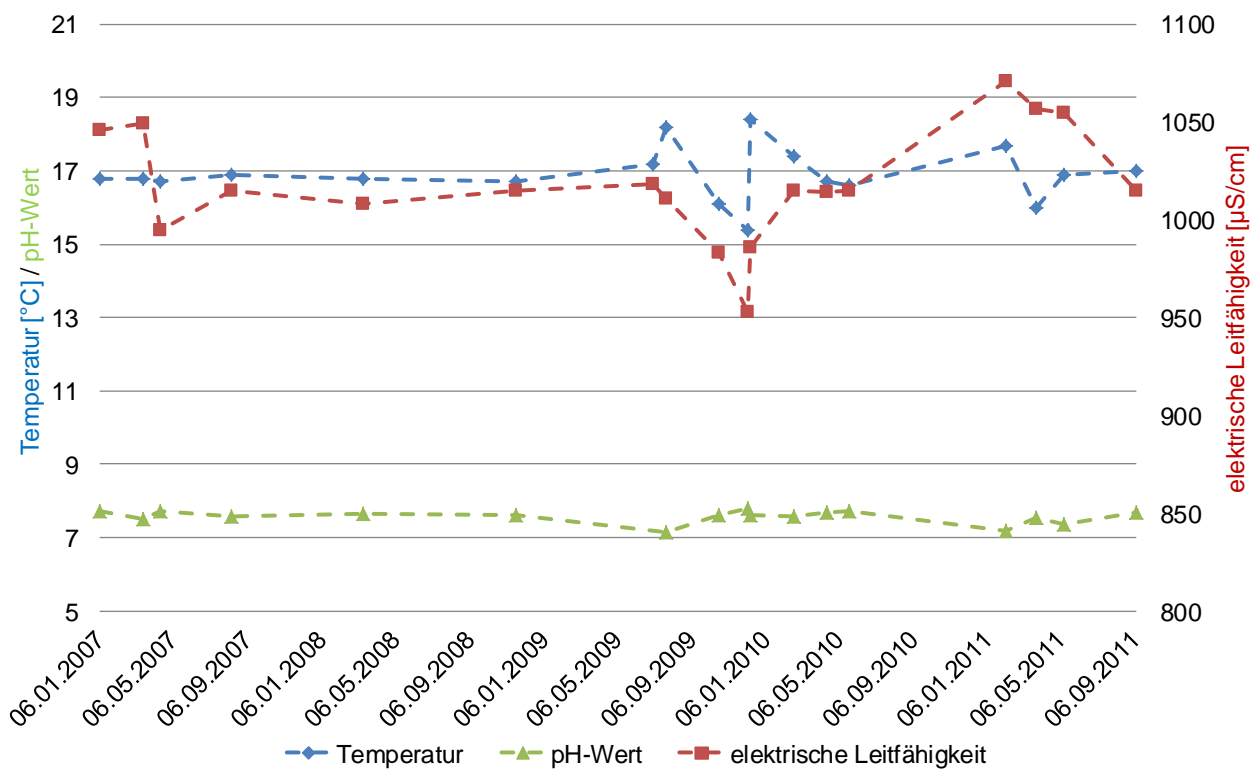


Abbildung 4-5 zeitlicher Verlauf der Vor-Ort-Parameter Temperatur, pH-Wert und elektrischer Leitfähigkeit am Auslauf der Grube Wolf

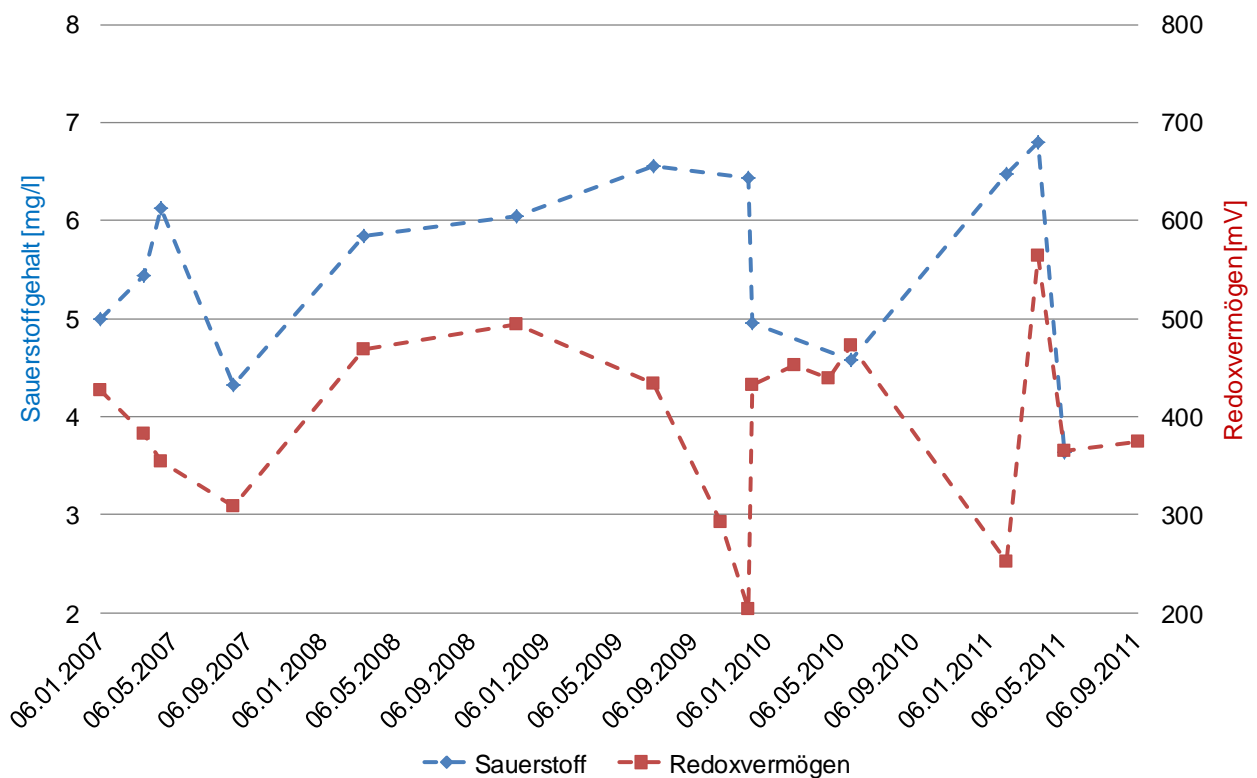


Abbildung 4-6 zeitlicher Verlauf der Vor-Ort-Parameter Sauerstoffgehalt und Redoxvermögen am Auslauf der Grube Wolf

Die elektrische Leitfähigkeit des Wassers schwankt zwischen 950 und rund 1050 $\mu\text{S}/\text{cm}$ und der pH-Wert liegt im neutralen bis schwach basischen Bereich zwischen 7,14 und 7,70. Die Temperatur des Grubenwassers liegt zwischen 15,4 und 18,4°C, wobei die mittlere Temperatur bei 16,9°C liegt und die Abweichungen auf Messungenauigkeiten zurückzuführen sind. Dass es sich bei diesen Abweichungen um Ungenauigkeiten (auf Grund von z.B. eventuell zu langen Standzeiten der Wasserprobe) handeln muss ist damit zu belegen, dass die kontinuierliche Aufzeichnung von Wassermenge und -temperatur am Auslauf Wolf seit Juli 2009 existiert und zum Zeitpunkt der jeweiligen Probenahmen eine Temperatur von rund 16,9°C aufgezeichnet wurde.

Das Redoxvermögen des am Auslauf der Grube Wolf austretenden Grubenwassers liegt in der Regel knapp unterhalb 400 mV oder > 400 mV und weist somit, auch in Kombination mit den verhältnismäßig hohen Sauerstoffgehalten, auf oxidierende Bedingungen hin (OTTOW 1981 in HÖLTING & COLDEWEY 2005).

Das am Auslauf der Grube Wolf austretende Wasser weist im zeitlichen Verlauf betrachtet eine stabile hydrochemische Zusammensetzung und sehr ähnliche Vor-Ort-Parameter auf

4.1.3 Hydrochemische Gleichgewichtsmodellierung

An Hand der in Tabellen 4-2 und 4-3 aufgeführten Proben wurden die Sättigungsverhältnisse und Spezieszusammensetzungen der Grubenwässer mittels PhreeqC berechnet. Mit PhreeqC können chemische Reaktionen und Transportprozesse von Wässern simuliert werden. Die Berechnungen mit PhreeqC beruhen darauf, dass Gleichgewichtsreaktionen wässriger Lösungen mit Mineralen, Gasphasen, Feststoffen bzw. sorptiven Oberflächen berechnet werden. Für die vorliegenden Berechnungen wurde der WatEq-Datensatz der PHREEQC-Version 2.17.1 (PARKURST & APPELO 1999) verwendet.

Die Grubenwässer der Schächte wurden jeweils als geschlossenes System ohne Kontakt zur Atmosphäre modelliert. Der Auslauf der Grube Wolf hingegen befindet sich im Kontakt zur Atmosphäre, daher wurde das Wasser in Gleichgewicht zu CO_2 und O_2 gebracht. Da es in PhreeqC nicht möglich ist, Wasser gleichzeitig zu mehreren Gasphasen ins Gleichgewicht zu setzen, wurde dies in zwei Schritten

durchgeführt. Die kompletten Modellierungen aller ausgewählten Proben sind in Anhang 12.3 aufgeführt.

Der Sättigungsindex ist nach HÖLTING & COLDEWEY (2005) ein Maß für die thermodynamische Aktivität eines Systems und nach Gleichung 4-1 definiert als Quotient aus Ionenaktivitätsprodukt und Löslichkeitsprodukt:

$$SI = \log \frac{I_{AP}}{L_{AB}} \quad (4-1)$$

mit

SI Sättigungsindex

I_{AP} Ionenaktivitätsprodukt der Aktivitäten der gelösten Ionen

L_{AB} Löslichkeitsprodukt

Ein positiver Sättigungsindex bedeutet, dass das Ionenaktivitätsprodukt der untersuchten Mineralphase größer als das zugehörige Löslichkeitsprodukt ist, entsprechend liegt eine Übersättigung hinsichtlich dieser Phase vor. Um das thermodynamische Gleichgewicht herzustellen oder sich in Richtung des Gleichgewichtszustandes zu bewegen, kann es somit zu Ausfällungen dieser Mineralphase kommen. Ob es bei positiven Übersättigungen auch tatsächlich zur Ausfällung kommt, hängt von der jeweiligen thermodynamischen Reaktionsgeschwindigkeit ab. Bei verschiedenen Phasen in Übersättigung wird beispielsweise diejenige Phase zuerst ausgefällt, welche kinetisch die schnellste Reaktionsgeschwindigkeit aufweist. Sind z.B. dadurch bereits die vorhandenen Eisen-Kationen zur Bildung von im Wesentlichen einer Phase aufgebraucht, können auch die weiteren in Übersättigung befindlichen Eisenphasen nicht bzw. nicht mehr ausgefällt werden. Bei einem negativen Sättigungsindex ist das Ionenaktivitätsprodukt kleiner als das Löslichkeitsprodukt und es liegt somit eine Untersättigung vor. Um das thermodynamische Gleichgewicht des Systems zu erreichen bzw. sich in Richtung Gleichgewicht zu bewegen, kann es bei Kontakt des Wassers mit der in Untersättigung befindlichen Phase zu Lösungsreaktionen kommen.

In Tabelle 4-4 sind ausgewählte Mineralphasen und deren berechnete Sättigungsindizes dargestellt. In Tabelle 4-5 sind ausgewählte Spezieskonzentrationen der berechneten Wässer dargestellt.

Tabelle 4-4 berechnete Sättigungsindizes der ausgewählten Proben

		11.05.2011	12.09.2010	05.09.2010	12.09.2010	12.09.2010	04.07.2009	11.05.2011	12.09.2010
		Auslauf TS	Schacht	Schacht	Blindschacht	Alter Schacht	Schacht	Schacht San	Schacht San
		Wolf	Wolf	Wolf	Wolf	Wolf	San Fernando	Fernando	Fernando
			0,5 m u WOF	195 m u WOF	0,5 m u WOF	0,5 m u WOF		55 m u WOF	77 m u WOF
Mineralphase		Sättigungsindex SI							
Oxide / Hydroxide	Eisenhydroxide (amorph) Fe(OH) ₃	2,73	-0,36	0,91	2,86	1,35	n.b	2,54	-1,72
	Goethit FeOOH	8,31	5,26	6,55	8,47	6,85	n.b	8,10	3,87
	Hämatit Fe ₂ O ₃	18,6	12,5	15,1	18,9	15,7	n.b	18,2	9,72
	Hausmannit Mn ₃ O ₄	-5,21	-16,9	-14,0	-12,0	-13,9	n.b	-10,9	-19,7
	Manganit MnOOH	-1,44	-7,04	-5,66	-4,71	-4,96	n.b	-3,85	-8,34
	Pyrolusit MnO ₂	-5,17	-15,41	-12,6	-11,0	-11,4	n.b	-9,39	-18,1
	Pyrochroit Mn(OH) ₂	-5,01	-5,79	-5,76	-5,56	-6,14	n.b	-5,72	-5,84
	Zn(OH) ₂ (e) Zn(OH) ₂	n.b.	-4,22	-3,90	-3,51	-3,77	n.b	n.b.	-3,92
Sulfate	Anhydrit CaSO ₄	-1,72	-1,83	-1,72	-1,76	-1,75	-1,70	-1,72	-1,80
	Gips CaSO ₄ ·2H ₂ O	-1,48	-1,58	-1,47	-1,51	-1,50	-1,45	-1,47	-1,55
	Melanterit FeSO ₄ ·7H ₂ O	-8,57	-6,16	-6,23	-4,95	-6,30	n.b	-6,23	-7,21
Carbonate	Aragonit CaCO ₃	0,12	-0,24	-0,19	-0,25	-0,60	-0,20	-0,28	-0,26
	Calcit CaCO ₃	0,27	-0,09	-0,04	-0,10	-0,44	-0,05	-0,13	-0,11
	Dolomit CaMg(CO ₃) ₂	0,86	0,18	0,28	0,15	-0,64	0,22	0,04	0,13
	Siderit FeCO ₃	-2,16	0,02	-0,11	1,14	-0,61	n.b	-0,23	-0,11
	Rhodochrosit MnCO ₃	1,15	0,84	0,83	1,08	0,52	n.b	0,85	0,75

Tabelle 4-5 berechnete Spezies der ausgewählten Proben

	11.05.2011 Auslauf TS Wolf	12.09.2010 Schacht Wolf 0,5 m u WOF	05.09.2010 Schacht Wolf 195 m u WOF	12.09.2010 Blindschacht Wolf 0,5 m u WOF	12.09.2010 Alter Schacht Wolf 0,5 m u WOF	04.07.2009 Schacht San Fernando	11.05.2011 Schacht San Fernando 55 m u WOF	12.09.2010 Schacht San Fernando 100 m u WOF
Spezies	[mol/kg]							
C	HCO ₃ ⁻	6,89e-3	7,50e-3	7,53e-3	7,56e-3	5,95e-3	7,47e-3	7,02e-3
	CO ₂	4,79e-4	1,35e-3	1,20e-3	1,36e-3	1,68e-3	1,28e-3	1,28e-3
	CaCO ₃	9,90e-6	4,35e-6	4,81e-6	4,19e-6	1,90e-6	4,74e-6	3,89e-6
	MgCO ₃	1,14e-5	5,23e-6	5,91e-6	5,15e-6	2,02e-6	5,44e-6	4,53e-6
	MnCO ₃	8,88e-6	4,36e-6	4,19e-6	7,53e-6	2,13e-6	n.b.	4,44e-6
	CO ₃ ²⁻	1,24e-5	5,30e-6	6,05e-6	5,35e-6	2,57e-6	5,52e-6	4,95e-6
S	Ca ²⁺	1,45e-3	1,47e-3	1,45e-3	1,43e-3	1,31e-3	1,60e-3	1,44e-3
	CaSO ₄	1,60e-4	1,26e-4	1,64e-4	1,48e-4	1,49e-4	1,70e-4	1,60e-4
	CaCO ₃	9,90e-6	4,35e-6	4,81e-6	4,20e-6	1,90e-6	4,74e-6	3,89e-6
Fe ⁰	Fe (II)	3,48e-8	1,20e-5	7,95e-6	1,60e-4	5,46e-6	n.b.	7,27e-6
	Fe ²⁺	2,13e-8	7,61e-6	4,97e-6	1,01e-4	3,67e-6	n.b.	4,66e-6
	FeCO ₃	2,41e-9	3,59e-7	2,62e-7	4,70e-6	8,83e-8	n.b.	2,05e-7
	Fe(III)	4,80e-6	6,47e-9	1,20e-7	1,05e-5	2,78e-7	n.b.	4,02e-6
	Fe(OH) ₃	3,38e-6	3,22e-9	6,35e-8	5,20e-6	1,03e-7	n.b.	1,96e-6
	Fe ³⁺	3,27e-15	5,68e-17	7,67e-16	9,51e-14	8,82e-15	n.b.	2,95e-14

Tabelle 4-5 berechnete Spezies der ausgewählten Proben (Fortsetzung)

		11.05.2011	12.09.2010	05.09.2010	12.09.2010	12.09.2010	04.07.2009	11.05.2011	12.09.2010
		Auslauf TS	Schacht	Schacht	Blindschacht	Alter Schacht	Schacht	Schacht San	Schacht San
		Wolf	Wolf	Wolf	Wolf	Wolf	San Fernando	Fernando	Fernando
			0,5 m u WOF	195 m u WOF	0,5 m u WOF	0,5 m u WOF	San Fernando	55 m u WOF	100 m u WOF
Spezies		[mol/kg]							
Mg	Mg ²⁺	3,35e-3	3,04e-3	3,05e-3	3,02e-3	2,42e-3	3,16e-3	3,37e-3	3,07e-3
	MgSO ₄	3,26e-4	2,73e-4	2,21e-6	3,27e-4	2,73e-4	3,43e-4	2,90e-3	2,91e-4
	MgCO ₃	1,14e-5	5,23e-6	5,91e-6	5,15e-5	2,03e-6	5,44e-6	4,53e-6	2,01e-6
Mn	Mn(II)	4,37e-5	4,56e-5	4,00e-5	8,02e-5	4,00e-5	n.b.	4,92e-5	3,87e-5
	MnCO ₃	8,89e-6	4,35e-6	4,19e-6	7,53e-6	2,13e-6	n.b.	4,44e-6	2,37e-5
	Mn ²⁺	2,36e-5	2,79e-5	2,40e-5	4,87e-5	2,67e-5	n.b.	3,01e-5	3,56e-6
	Mn(III)	6,22e-25	3,36e-29	6,23e-28	7,39e-27	7,69e-27	n.b.	3,51e-26	1,41e-30
	Mn ³⁺	6,22e-25	3,36e-29	6,23e-28	7,39e-27	7,69e-27	n.b.	3,51e-26	1,41e-30
S	SO ₄ ²⁻	1,60e-3	1,23e-3	1,65e-3	1,51e-3	1,60e-3	1,57e-3	1,62e-3	1,33e-3
	MgSO ₄	3,26e-4	2,73e-4	3,64e-4	3,27e-4	2,73e-4	3,43e-4	3,26e-4	2,91e-4
	CaSO ₄	1,60e-4	1,26e-4	1,64e-4	1,48e-4	1,50e-4	1,70e-4	1,60e-4	1,34e-4
As	As (III)	n.b.	6,50e-11	1,34e-14	7,61e-15	n.b.	n.b.	n.b.	1,12e-8
	As (IV)	n.b.	8,00e-8	1,07e-8	1,47e-7	n.b.	n.b.	n.b.	4,18e-8

Für die meisten modellierten Proben liegen im Wesentlichen Eisenoxide und Eisenhydroxide in Übersättigung vor. Dies stellt einen Hinweis für die theoretisch bevorzugte Ausfällung von eisenhaltigen Verbindungen dar. Im Rahmen einer Diplomarbeit wurden die Schlamm-Ausfällungen der Grube Wolf mittels Röntgen-Fluoreszenzanalyse (RFA) analysiert. Eisen bildet mit durchschnittlich 30% den Hauptbestandteil der Schlämme (PORR 2011), wobei die Schwankung je nach Probenlokalität zwischen 8,03 und 37,2% liegt.

Die Ausfällungen von Mangan, welche über die Schlammuntersuchungen bestätigt sind, und je nach Probenlokalität stark schwankend zwischen 1,33 und 38,5% liegen, werden gemäß der Modellierung über die Ausfällung des in Übersättigung vorliegenden Rhodochrosit MnCO_3 gesteuert. Nach MERKEL & SPERLING (1996) ist die Ausfällung von Mangan hingegen sehr komplex und in der Regel werden die Manganausfällungen als Manganoxide/hydroxide zusammengefasst. Die stark unterschiedlichen Konzentrationen von Eisen und Mangan der Schlammproben sind auf unterschiedlich schnelle Reaktionsprozesse bei der Ausfällung der unterschiedlichen Eisen- und Manganphasen zurückzuführen, wobei die niedrigste Mangan-Konzentration mit der höchsten Eisen-Konzentration (und umgekehrt) zusammenfällt.

In allen Proben liegen Aragonit und Calcit im Bereich des Gleichgewichts oder leicht untersättigt vor, lediglich für den Auslauf Wolf liegt eine leichte Übersättigung vor. Dies ist darauf zurückzuführen, dass durch den verhältnismäßig langen Fließweg des Grubenwassers vom Schacht bis zum Auslauf am Tiefen Stollen das Grubenwasser in Kontakt zur Atmosphäre steht, dass Grubenwasser gegenüber der Atmosphäre an CO_2 angereichert wird und sich darüber das Carbonat-Gleichgewicht einstellt bzw. sich in Richtung Übersättigung verschiebt. Kinetisch ist die Ausfällung von Calcit als eher reaktionsträge anzusehen (MERKEL & SPERLING 1996), zur Ausfällung von Calcit sind deutlich erhöhte Sauerstoffgehalte (wie z.B. am Auslauf der Grube Wolf) und turbulente Fließbedingungen (z.B. kaskadenförmig über Verrieselungstreppen) notwendig. Daher beträgt der Calcium-Gehalt der Schlammprobe in der Nähe des Auslaufes der Grube Wolf lediglich rund 3,7% (PORR 2011)

Die berechneten Konzentrationen für HCO_3^- stimmen entweder mit den im Gelände ermittelten Werten überein oder liegen nur unwesentlich darunter. Für CO_2 stimmen die berechneten mit den gemessenen Werten auch gut überein bzw. die berechneten Werte liegen nur leicht über den, durch Titration ermittelten Werte. Dies lässt darauf schließen, dass sich die beprobten Wässer jeweils im hydrochemischen Gleichgewicht befinden. Die Abweichungen liegen im Bereich des, durch die Geländebestimmung mittels Titration verursachten, analytischen Messfehlers. Lediglich für die oberflächennahe Probe von Schacht 2, Grube San Fernando liegt der berechnete Wert für CO_2 deutlich über dem im Gelände bestimmten. Da aber die Werte für HCO_3^- dieser Probe gut übereinstimmen, kann hier von einem Fehler bei der Titration ausgegangen werden. Im Vergleich zu den weiteren Probenahmen an der gleichen Lokalität fällt die titrierte Konzentration von CO_2 deutlich zu gering aus.

Bei der Betrachtung der modellierten Konzentrationen von HCO_3^- und CO_2 mit den im Gelände bestimmten Werten ist zu beachten, dass die Titration nach DIN 38409-7 darauf beruht, dass die Zugabe von Säure und Lauge nur das Calciumcarbonat-Gleichgewicht beeinflusst. Bei Vorhandensein größerer Mengen weiterer Puffersubstanzen im Wasser wie z.B. Ammoniak, Boraten, Phosphaten, Anionen von Huminsäuren oder auch andere organische Säuren ist die Titration damit fehlerbehaftet, jedoch die einzige Möglichkeit, die Konzentrationen von HCO_3^- und CO_2 im Gelände zu bestimmen.

Für den Auslauf der Grube Wolf liegt Eisen oxidiert als Fe(III) in Form des gelösten Eisenhydroxid $\text{Fe}(\text{OH})_3$ vor. Für alle weiteren Proben sind die Konzentrationen von Fe(II) und Fe(III) entweder in etwa auf dem gleichen Niveau (Schacht San Fernando, 55 m u WOF) oder Eisen liegt überwiegend als Fe(II) in Form des gelösten Fe^{2+} vor. Dies ist damit zu erklären, dass sich die Wässer im reduzierenden Milieu befinden und lediglich der Auslauf der Grube Wolf auf Grund seines Kontaktes zur Atmosphäre oxidierenden Bedingungen unterliegt. Mangan liegt ebenfalls als Mn(II) überwiegend in Form von Mangan-Carbonaten und Mangan-Sulfaten vor. Arsen liegt in allen analysierten Proben als As(III) vor.

Zur Feststellung ob und in wie weit das Grubenwasser des Alten Schachtes durch zutretenden Niederschlag beeinflusst und verdünnt worden ist, wurde eine orientierende Verdünnungsmodellierung mit PhreeqC durchgeführt. Das Grubenwasser des Alten Schachtes der Grube Wolf weist eine geringe Mineralisierung, niedrigere Temperatur und Leitfähigkeit als die übrigen Wässer der Grube Wolf auf. Die inverse Modellierung verwendet die oberflächennahe Probe des Schachtes Wolf als Ausgangszusammensetzung. Die Wässer der Grube Wolf insgesamt unterscheiden sich nur gering voneinander und die hydrochemische Charakterisierung dieses Wassers konnte daher als repräsentative Ausgangszusammensetzung für eine Verdünnung herangezogen werden konnte.

Zur Darstellung des Niederschlags wurde vereinfacht Wasser mit einer Temperatur von 7°C in Gleichgewicht zu CO₂ gesetzt. Dies repräsentiert ein saures Niederschlagswasser, weitere Konzentrationen von Anionen und Kationen wurden nicht berücksichtigt. Auch eine Anreicherung des Sickerwassers gegenüber CO₂ im Rahmen der Bodenpassage wurde nicht berücksichtigt. Als Resultat wird die modellierte Grubenwasserzusammensetzung mit der tatsächlichen Zusammensetzung des Grubenwassers des Alten Schachtes verglichen.

Die Modellierung zeigt, dass bei einer Mischung von rund 70% Grubenwasser und 30% Niederschlag in etwa die Temperatur des Grubenwassers am Alten Schacht und eine ähnliche Konzentration (Verdünnung) hinsichtlich der Anionen und Kationen erreicht werden kann. In Tabelle 4-6 sind einige exemplarische Konzentrationen der Verdünnungsmodellierung aufgeführt.

Tabelle 4-6 Verdünnungsmodellierung (70% Grubenwasser Schacht Wolf, 30% Niederschlag)

	Ausgangs- zusammensetzung	Modellierte Zusammensetzung	Zielzusammen- setzung
	12.09.2010 Schacht Wolf 0,5 m u WOF	Verdünnungs- modellierung	12.09.2010 Alter Schacht Wolf 0,5 m u WOF
Temperatur [°C]	17,6	14,4	14,5
Ca ²⁺ [mg/l]	67,3	47,1	60,6
Mg ²⁺ [mg/l]	84,5	59,0	68,1
HCO ₃ ²⁻ [mg/l]	482	324	375

Die Verdünnung im Verhältnis 70:30 zeigt, dass die errechneten Konzentrationen der Anionen und Kationen geringer sind als in der ursprünglichen Probe des Alten Schachtes, die Temperatur hingegen stimmt gut überein. Bei geringeren Verdünnungen (beispielsweise 85:15) stimmen die Konzentrationen besser überein, die errechnete Temperatur ist allerdings zu hoch. Dies zeigt, dass neben einer Verdünnung durch Niederschlagswasser weitere Prozesse die hydrochemische Beschaffenheit des Grubenwassers beeinflussen. Unter Berücksichtigung, dass bei der Verdünnungsmodellierung keine weiteren Einflussparameter auf das Grubenwasser und gegebenenfalls dessen Wechselwirkungen mit dem Niederschlags- bzw. Sickerwasser (und dessen hydrochemischer Beschaffenheit) berücksichtigt wurden und die Modellierung damit nur der orientierenden Darstellung dient, zeigt sich, dass das Grubenwasser des Alten Schachtes tatsächlich durch zutretendes Sickerwasser verdünnt wird und wurde. Dies ist ein Hinweis darauf, dass das Wasser des Alten Schachtes und damit der Alte Schacht selbst hydraulisch nicht oder nur unvollständig an die Hydraulik der Verbundgrube angeschlossen ist. Die durch Niederschlags- bzw. Sickerwasser verursachte Verdünnung des Grubenwassers kann nicht durch aufsteigendes, nachströmendes Grubenwasser ausgeglichen werden, wie es bei den anderen Grubenwässern der Fall ist.

4.2 Grundwasserneubildung

Die großräumig im Untersuchungsgebiet befindlichen Vorfluter sind Sieg, Heller, Daadenbach und Sotterbach. Dabei existieren durch die Pegel Betzdorf an der Sieg und Alsdorf an der Heller kontinuierliche Aufzeichnungen der Wasserstände, welche über das Geoportal Wasser des Ministeriums für Umwelt, Landwirtschaft, Ernährung, Weinbau und Forsten Rheinland-Pfalz (MUFV-RLP) bezogen werden können. Für die anderen Vorfluter liegen keine kontinuierlichen Abflussmessungen vor. Abbildung 4-7 zeigt die Abflussganglinien der Vorfluter Sieg und Heller.

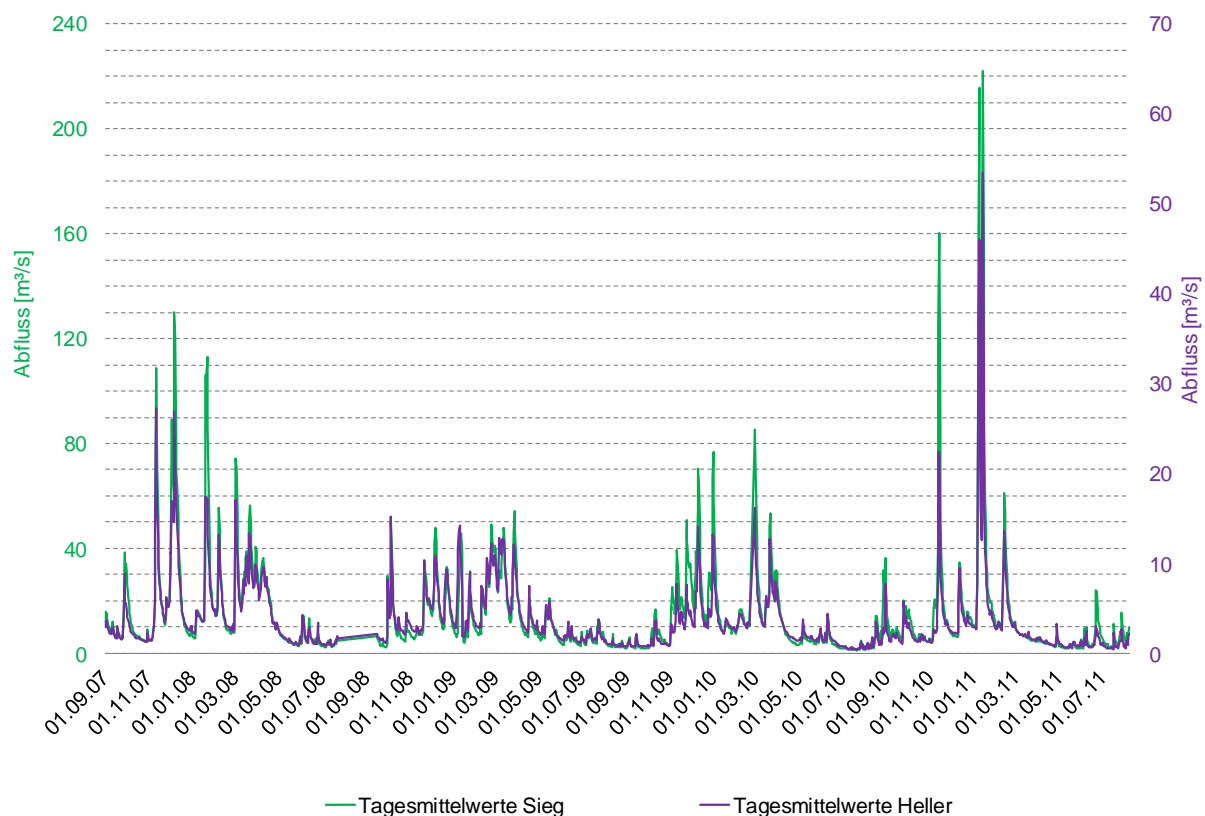


Abbildung 4-7 Abflussganglinien (basierend auf Tagesmittelwerten) der Vorfluter Sieg und Heller (Datenquelle Geoportal Wasser des MUFV RLP)

Aus den parallel verlaufenden Ganglinien zeigt sich, dass beide Vorfluter den gleichen Einflüssen durch Niederschlag, Abfluss (oberirdischer Abfluss, Interflow) und gegebenenfalls grundwasserbürtigem Zufluss in niederschlagsarmen Zeiten unterliegen. Lediglich die absolute Abflussmenge ist auf Grund der Größe des dazugehörigen Einzugsgebietes von 754 km² für die Sieg und 196 km² für die Heller

(DEUTSCHES GEWÄSSERKUNDLICHES JAHRBUCH 2007) unterschiedlich. Aus den Klimadaten der Klimastation Bad Marienberg und den Abflussmengen der Heller wurde der unterirdische Abfluss ermittelt.

Dabei gilt nach der hydrologischen Grundgleichung (Gleichung 4-2) (HÖLTING & COLDEWEY 2005)

$$N = ET + A_o + A_u \quad (4-2)$$

mit

N Niederschlag [mm/a]

ET Evapotranspiration

A_o oberirdischer Abfluss

A_u unterirdischer Abfluss und Interflow

Bei dieser Gleichung werden Schwankungen des Grundwasservorrates nicht berücksichtigt, es wird also von stationären hydrologischen Verhältnissen ausgegangen. Damit stellt A_u die Gesamtsumme des dem Untergrund zufließenden Wassers dar. Da es sehr schwierig ist eine Abschätzung zu treffen, wie hoch der Anteil des Interflow ist, d.h. des Wassers, welches mit zeitlicher Verzögerung dem oberirdischen Abfluss zuläuft und nicht zur Grundwasserneubildung beiträgt, umfasst die berechnete Größe für A_u auch den Anteil des Interflow. Auf Grund der Morphologie des Untersuchungsgebietes ist jedoch damit zu rechnen, dass ein großer Anteil des unterirdischen Abflusses aus Interflow besteht. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass dem berechneten Wert von A_u 50% dem Interflow zugerechnet werden und damit 50% zur Grundwasserneubildung beitragen.

Für die Berechnung der Grundwasserneubildung werden neben Niederschlag und oberirdischem Abfluss noch Werte für die Evapotranspiration benötigt. Die Evapotranspiration setzt sich aus Evaporation, Transpiration und Interzeption zusammen. Die Evapotranspiration kann nicht direkt gemessen, sondern nur mit Hilfe verschiedener Methoden abgeschätzt werden. Für die hier vorliegende Berechnung wurde die Methode nach HAUDE (1955 zitiert in HÖLTING & COLDEWEY 2005) verwendet (Gleichung 4-3):

$$ET_{\text{pot}} = \chi \cdot P_{14} \left(1 - \frac{F_{14}}{100} \right) \quad (4-3)$$

mit

ET_{pot} potentielle Evapotranspiration [mm/d]

χ Monatskoeffizient (HAUDE-Faktoren)

P_{14} Sättigungsdampfdruck der Luft um 14 Uhr [mbar]

F_{14} relative Luftfeuchte um 14 Uhr [%]

Der Sättigungsdampfdruck P_{14} errechnet sich nach Gleichung 4-4:

$$P_{14} = 4,58 \cdot 10^{\frac{7,45 \cdot t}{235+t}} \quad (4-4)$$

mit

t: Lufttemperatur um 14 Uhr [°C]

In Tabelle 4-7 sind die für die Berechnung erforderlichen Klimadaten, die nach HAUDE (1955) berechneten Werte für die Evapotranspiration, der oberirdische Abfluss sowie die aus diesen Werten errechnete Grundwasserneubildung aufgelistet. Die graphische Darstellung der monatlichen Niederschläge und berechneten Evapotranspirationsmengen sowie die daraus berechnete Grundwasserneubildung ist exemplarisch für die Klimastation Bad Marienberg dargestellt (Abbildung 4-8).

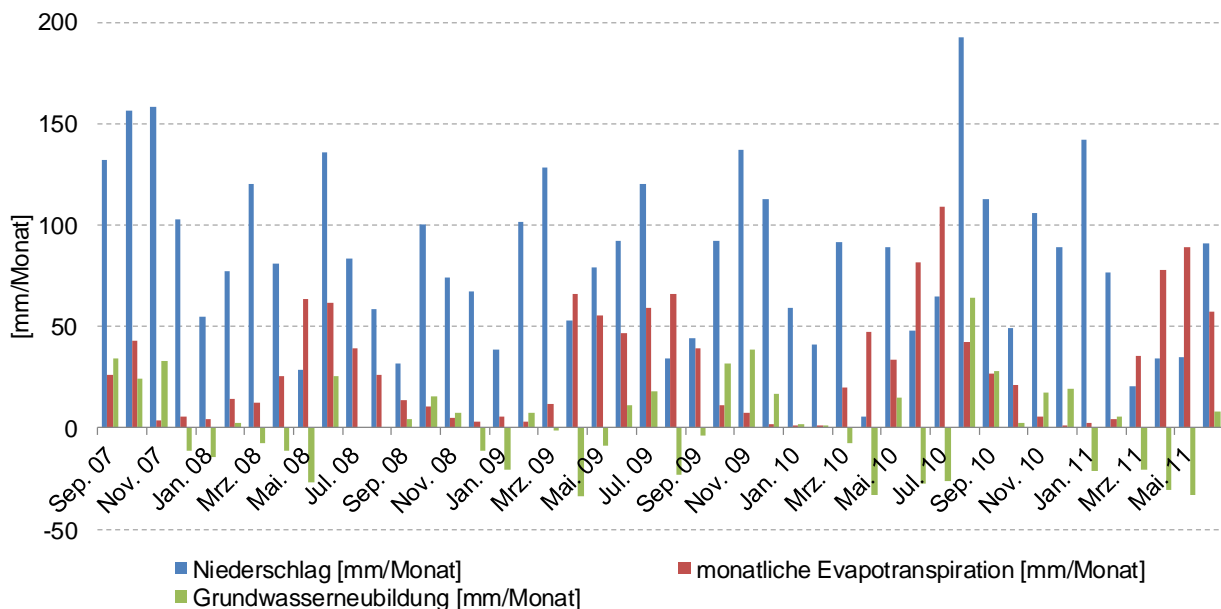


Abbildung 4-8 Niederschlag, Evapotranspiration und Grundwasserneubildung

Tabelle 4-7 Grundwasserneubildung für das Einzugsgebiet der Heller aus den Klimadaten der Wetterstation Bad Marienberg, Größe Einzugsgebiet 196 km²

Datum	DWD Bad Marienberg		Abfluss Heller		A _u	GWN
	N [mm/Monat]	Epot. [mm/Monat]	Abflussspende [m ³ /Monat]	[mm/Monat]		
September 07	132,0	26,2	7.308.464	37,3	68,6	34,3
Oktober 07	156,3	42,7	12.803.098	65,3	48,3	24,1
November 07	158,3	3,47	17.347.046	88,5	66,3	33,2
Dezember 07	102,5	5,54	23.413.821	119,5	-22,5	-11,3
Januar 08	54,6	4,04	15.516.835	79,2	-28,6	-14,3
Februar 08	77,0	14,6	11.298.502	57,7	4,74	2,37
März 08	120,4	12,2	24.101.582	123,0	-14,8	-7,39
April 08	81,2	25,4	15.405.612	78,6	-22,8	-11,4
Mai 08	28,8	63,4	3.617.309	18,6	-53,1	-26,6
Juni 08	135,8	61,4	4.687.753	23,9	50,4	25,2
Juli 08	83,3	39,2	Datenlücke			
August 08	58,5	26,2				
September 08	32,0	13,5	2.034.564	10,4	8,10	4,05
Oktober 08	100,4	10,4	11.495.779	58,7	31,4	15,7
November 08	74,0	4,88	10.599.405	54,1	15,1	7,52
Dezember 08	67,1	2,81	16.923.540	86,3	-22,1	-11,0
Januar 09	38,7	5,50	14.618.638	74,6	-41,4	-20,7
Februar 09	101,6	2,85	16.399.066	83,7	15,1	7,54
März 09	128,5	11,54	23.365.912	119,2	-2,25	-1,13
April 09	52,8	65,9	10.627.736	54,2	-67,4	-33,7
Mai 09	79,0	55,4	7.969.380	40,7	-17,1	-8,55
Juni 09	92,3	46,8	4.555.457	23,2	22,3	11,1
Juli 09	120,2	59,2	4.970.039	25,3	35,7	17,8
August 09	34,2	66,3	2.689.459	13,7	-45,8	-22,9
September 09	44,5	39,5	2.405.998	12,3	-7,32	-3,66
Oktober 09	92,3	11,0	3.488.607	17,8	63,5	31,7
November 09	137,1	7,16	10.309.827	52,6	77,3	38,7
Dezember 09	112,7	1,95	15.056.081	76,8	34,0	17,0
Januar 10	59,4	1,12	10.574.608	54,0	4,32	2,16
Februar 10	41,1	1,43	7.264.590	37,1	2,61	1,30
März 10	91,6	19,7	17.134.908	87,4	-15,5	-7,76
April 10	5,8	47,6	4.783.812	24,4	-66,2	-33,1
Mai 10	89,2	33,7	5.068.812	25,9	29,7	14,8
Juni 10	47,7	81,3	4.120.813	21,0	-54,7	-27,3
Juli 10	64,8	109,1	1.688.342	8,61	-52,9	-26,4
August 10	192,8	42,5	4.429.521	22,6	127,7	63,9
September 10	112,5	26,6	5.914.253	30,2	55,8	27,9
Oktober 10	49,5	21,0	4.624.033	23,6	4,94	2,47
November 10	105,7	5,41	12.850.911	65,6	34,7	17,4
Dezember 10	89,0	0,92	9.806.080	50,0	38,1	19,0
Januar 11	142,3	2,76	35.746.574	182,4	-42,8	-21,4
Februar 11	76,7	4,25	12.040.307	61,4	11,02	5,51
März 11	20,3	35,2	5.171.351	26,4	-41,3	-20,7
April 11	34,2	77,7	3.385.212	17,3	-60,7	-30,4
Mai 11	34,6	89,2	2.240.585	11,4	-66,1	-33,0
Juni 11	90,8	57,4	3.277.454	16,7	16,7	8,33

Die ausgewerteten Daten zeigen, dass Grundwasserneubildung im Wesentlichen im ersten Halbjahr (November - April) eines hydrologischen Jahres stattfindet und es im zweiten Halbjahr (Mai - Oktober) überwiegend zur Verringerung des Grundwasservorrates kommt. Dieser Wechsel von Rücklage und Aufbrauch ist nach HÖLTING & COLDEWEY (2005) typisch für das insgesamt humide Klima Deutschlands und ist auch im Untersuchungsgebiet so festzustellen.

Aus der Berechnung der Grundwasserneubildung zeigt sich, dass sich für die Jahre 2009 und 2010 eine jährliche Grundwasserneubildung von 33,3 bzw. 54,3 mm ergibt. Diese Werte stimmen gut mit den im Hydrogeologischen Atlas Rheinland-Pfalz angegebenen Werten von > 25 bis 50 mm/Jahr (Kapitel 3 Untersuchungsgebiet) überein. Über das Geoportal Wasser des MUFV RLP ist eine Grundwasserneubildung über langjährige Mittel für das Untersuchungsgebiet von 83 mm/Jahr angegeben.

Für den Zeitraum von 1. September 2007 bis 30. Juni 2011 wurden Korrelationsanalysen nach PEARSON für die Niederschläge der Klimastation Bad Marienberg sowie der Abflüsse von Heller und Sieg durchgeführt. Der Korrelationskoeffizient zwischen den Abflüsse von Sieg und Heller liegt bei 0,96. Dies bestätigt die parallel zueinander verlaufenden Abflussganglinien gemäß Abbildung 4-7 und zeigt eine nahezu lineare Korrelation an. Die Korrelationskoeffizienten zwischen Niederschlag und Abfluss Heller liegen bei 0,19 bzw. zwischen Niederschlag und Abfluss Sieg bei 0,16. Dies stellt einen Hinweis auf eine eher schwache Korrelation dar. Auf Grund der hydrogeologischen Situation entfällt nur ein Teil des Niederschlages auf den oberirdischen Abfluss, ein Teil des Niederschlages wird hingegen als Interflow mit einer zeitlichen Verzögerung dem Vorfluter zufließen. Bei einer direkten Korrelation zwischen Niederschlag und Abfluss kann somit kein höherer Korrelationskoeffizient erzielt werden. Eine zeitliche Verschiebung der Daten zueinander hat keinen relevanten Einfluss auf die Korrelation, da die weiteren, die Abflussmenge beeinflussenden, Parameter nicht berücksichtigt werden können.

4.3 Abflussmessungen am Tiefen Stollen der Grube Wolf

Im Hinblick auf eine geothermische Nutzung des Grubenwassers werden am Auslauf der Grube Wolf seit dem 25. Juli 2009 kontinuierlich die auslaufende Grubenwassermenge und die dazugehörige Temperatur gemessen. Damit kann das geothermisch vorhandene Potential, also die Kombination aus Schüttung und Temperatur, über einen längeren Zeitraum betrachtet werden und eventuell beeinflussende Parameter ermittelt werden.

Hierzu wurde am mit einer Betonröhre versehenen Auslauf der Grube ein Dreiecks-Überfallmesswehr installiert (Abbildung 4-9).

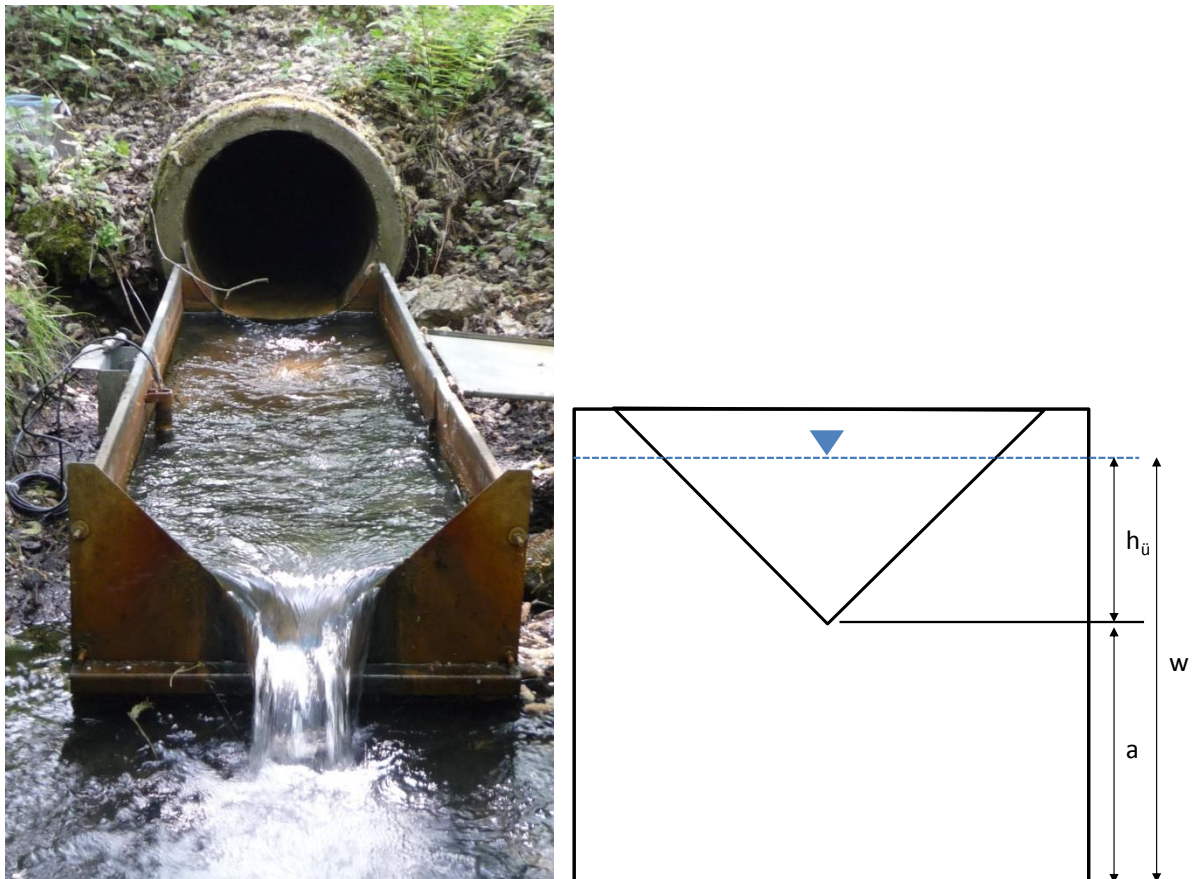


Abbildung 4-9 Dreiecksüberfallmesswehr am Auslauf der Grube Wolf (Foto: PORR 2011) und Schemaskizze des Dreiecks-Überfallmesswehres mit zugehörigen Kennzahlen (w : gemessener Wasserstand, a : Abstand Sohle-Scheitel, $h_{\bar{u}}$: eingestaute Wasserhöhe)

Eine Rinne mit einer Gesamtbreite von 0,58 m und einer Länge von 2 m stellt sicher, dass das ausfließende Grubenwasser bis zum Erreichen des dreieckigen Kontrollquerschnitts ohne größere Turbulenzen fließt. Durch die Verengung des Durchflussquerschnitts wird eine Wasserstandsanhhebung verursacht (MATTHEß & UBELL 2003). Das Wasser wird im Messwehr zu einem gewissen Teil aufgestaut. Diese Aufstauhöhe $h_{\bar{u}}$ und die Temperatur des Grubenwassers wird mittels des Datenloggers DL/N 70 der Firma STS (Sensoren Transmitter Systeme) in einem 15-Minuten-Intervall aufgezeichnet.

Der Durchfluss errechnet sich nach WOLKERSDORFER (2008) gemäß Gleichung 4-5 und 4-6. Die Berechnung ist eine auf die Geometrie des Messwehres (gleichschenkelig rechtwinkliges Dreieck mit nach unten gerichteter Spitze) angepasste und empirisch angepasste Gleichung für diese Bauart von Messwehren.

$$Q = 1,369 \cdot h_{\bar{u}}^{2,5} \quad (4-5)$$

und

$$h_{\bar{u}} = w - a \quad (4-6)$$

mit

$h_{\bar{u}}$ Überfallhöhe [m]

w Wasserhöhe [m]

a Abstand Sohle-Scheitel [m]

Die gemessenen Temperaturen und die errechneten Abflussmengen am Auslauf der Grube Wolf sind in Abbildung 4-10 dargestellt.

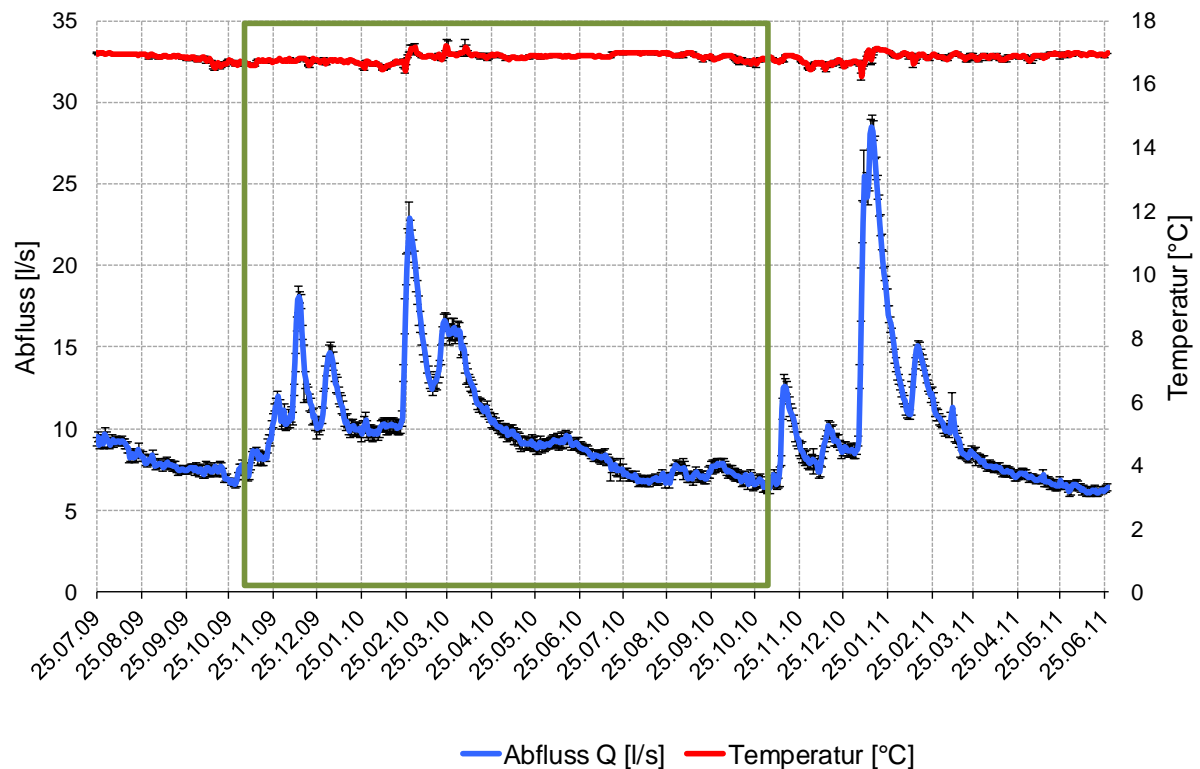


Abbildung 4-10 Temperatur und Abflussmenge am Auslauf des Neuen Förderstollens der Grube Wolf (grüner Kasten: hydrologisches Jahr 2010)

Aus dieser kontinuierlichen Aufzeichnung ergibt sich, dass die Temperatur des Grubenwassers im wesentlichen über die Zeit stabil bei 16,9°C liegt. Es treten in der Regel nur kleinere Schwankungen im Bereich von $\pm 0,2^\circ\text{C}$ auf. Grundsätzlich fällt die auslaufende Wassermenge nicht unter eine Menge von rund 6 l/s und liegt im Mittel bei 9,7 l/s. Aus der zeitlichen Gegenüberstellung von Abfluss und Temperatur erscheint die Gegenüberstellung und Korrelation dieser Daten zu Niederschlags- und Umgebungstemperaturen notwendig.

In Abbildung 4-11 sind der Abfluss am Auslauf der Grube Wolf und die Grubenwassertemperatur der aufgezeichneten Temperatur und Niederschlagsmenge an der Klimastation Bad Marienberg des Deutschen Wetterdienstes gegenübergestellt.

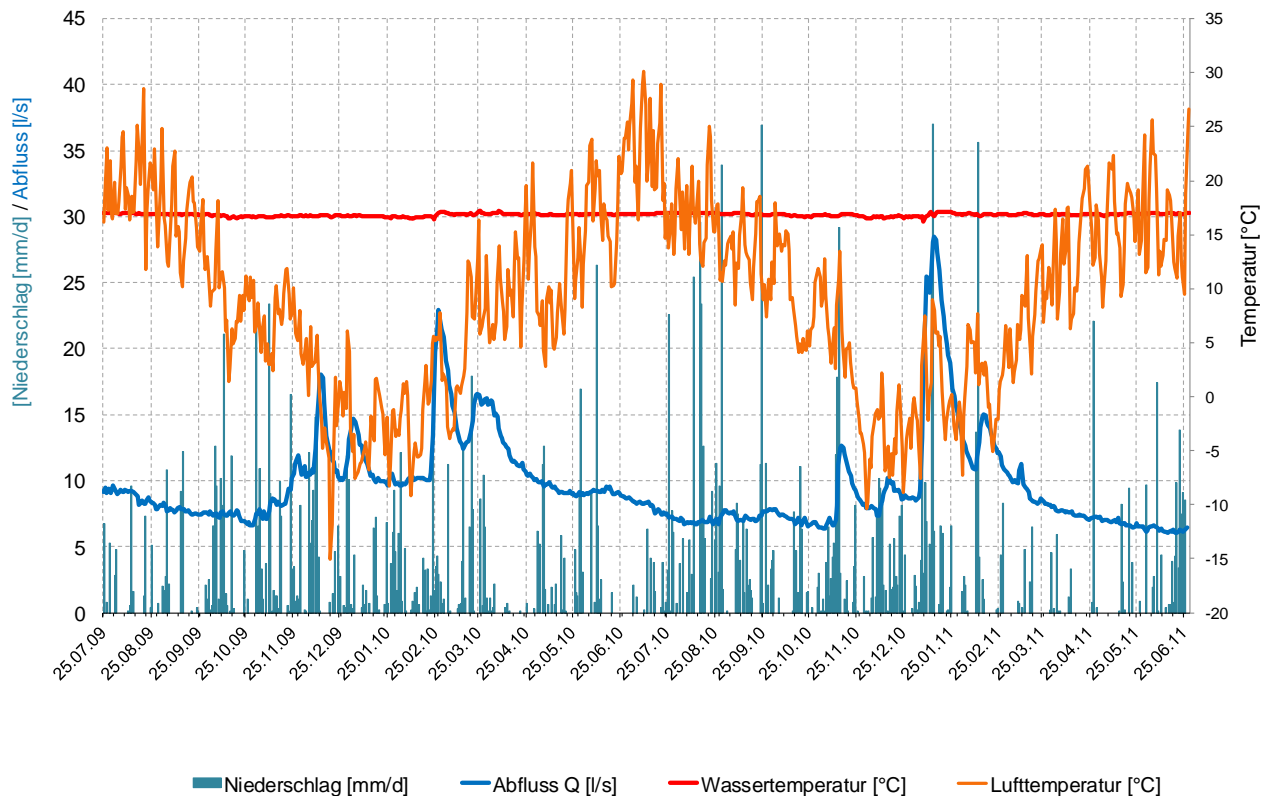


Abbildung 4-11 Abflussmenge und Temperatur am Neuen Förderstollen der Grube Wolf, Temperatur und Niederschlag an der Wetterstation des DWD in Bad Marienberg

Es zeigt sich, dass lediglich zum Zeitpunkt der Schneeschmelze am 6./7. Januar 2011 die Grubenwassertemperatur um $0,7^{\circ}\text{C}$ auf rund $16,2^{\circ}\text{C}$ abgesunken ist. Dies ist darauf zurückzuführen, dass ein geringer Anteil des Schmelzwasser des abschmelzenden Schnees oberhalb des Messwehres von den umliegenden Hängen direkt in die Messvorrichtung abgelaufen ist und dadurch für einen begrenzten Zeitraum nicht nur Grubenwasser, sondern zusätzlich ein oberirdischer Zulauf im Messwehr zu verzeichnen ist. Für die auslaufende Grubenwassermenge ist der Einfluss der Schneeschmelze ebenfalls zu beobachten. Zum Zeitpunkt der Schneeschmelze ist ein Abflussmaximum von über 30 l/s zu verzeichnen. Dieses Maximum wird dadurch erzielt, dass durch den abschmelzenden Schnee erhöhte Sickerwassermengen dem Grubengebäude bzw. dem obertägig aufgelockertem Gebirge zufließen. Dadurch, dass das Schmelzwasser großflächig zuerst versickert und erst sekundär über das Grubengebäude entwässert wird erklärt sich, dass die Schneeschmelze nur einen begrenzten Einfluss auf die Grubenwassertemperatur, aber deutlich auf die austretende Wassermenge, hat.

Für das Abflussmaximum Ende Februar 2010 sind die gleichen Effekte zu beobachten. Daher werden dieses Abflussmaximum und die damit einhergehende minimal größere Temperaturabnahme ebenfalls der Schneeschmelze zugeordnet.

Ebenfalls zu beobachten ist, dass im hydrologischen Winterhalbjahr die Abflussmengen deutlich größer sind als im hydrologischen Sommerhalbjahr. Dies ist darauf zurückzuführen, dass im Allgemeinen die Niederschlagshäufigkeit und Niederschlagsmenge im Winter größer ist, während im Sommer vereinzelt Starkniederschläge aber auch Phasen mit geringen Niederschlagsmengen bis hin zu trockenen Phasen auftreten. Der Auslauf des Grubenwassers versiegt jedoch auch in längeren Trockenperioden nicht, da er über die Anbindung an das Grundwasser mit Wasser gespeist wird, dies spiegelt sich im Basisabfluss (entspricht für die weitere Betrachtung dem niedrigsten bekannten bzw. zu erwartenden Abfluss) von rund 6 l/s wider. Die Anbindung von Fließgewässern an das Grundwasser ist auch in der Umgebung zu beobachten, da selbst kleine Fließgewässer auch in den Sommermonaten wasserführend sind.

Nach FENCHEL et al. (1985) beeinflusst der Niederschlag bzw. die Niederschlagsmenge die während des aktiven Bergbaus erfassten Wasserzulaufmengen. Auf den oberen Sohlen macht sich Niederschlag bereits nach etwa 2 Wochen bemerkbar, während HEYL (1954) einen Zeitraum von 4-5 Monaten für die tieferen Bereiche angibt.

Aus der Korrelationsanalyse des Niederschlages sowohl der Klimastation Bad Marienberg als auch der Klimastation Siegen mit dem Abfluss am Tiefen Stollen lässt sich keine direkte Korrelation (Korrelationskoeffizient von 0,02 bzw. 0,00) ermitteln. Vergleicht man jedoch die Abflussganglinien der Vorfluter Sieg und Heller mit dem Abfluss am Tiefen Stollen der Grube Wolf (Abbildung 4-12) lässt sich ein synchroner Verlauf erkennen. Dies bestätigt auch die Korrelationsanalyse.

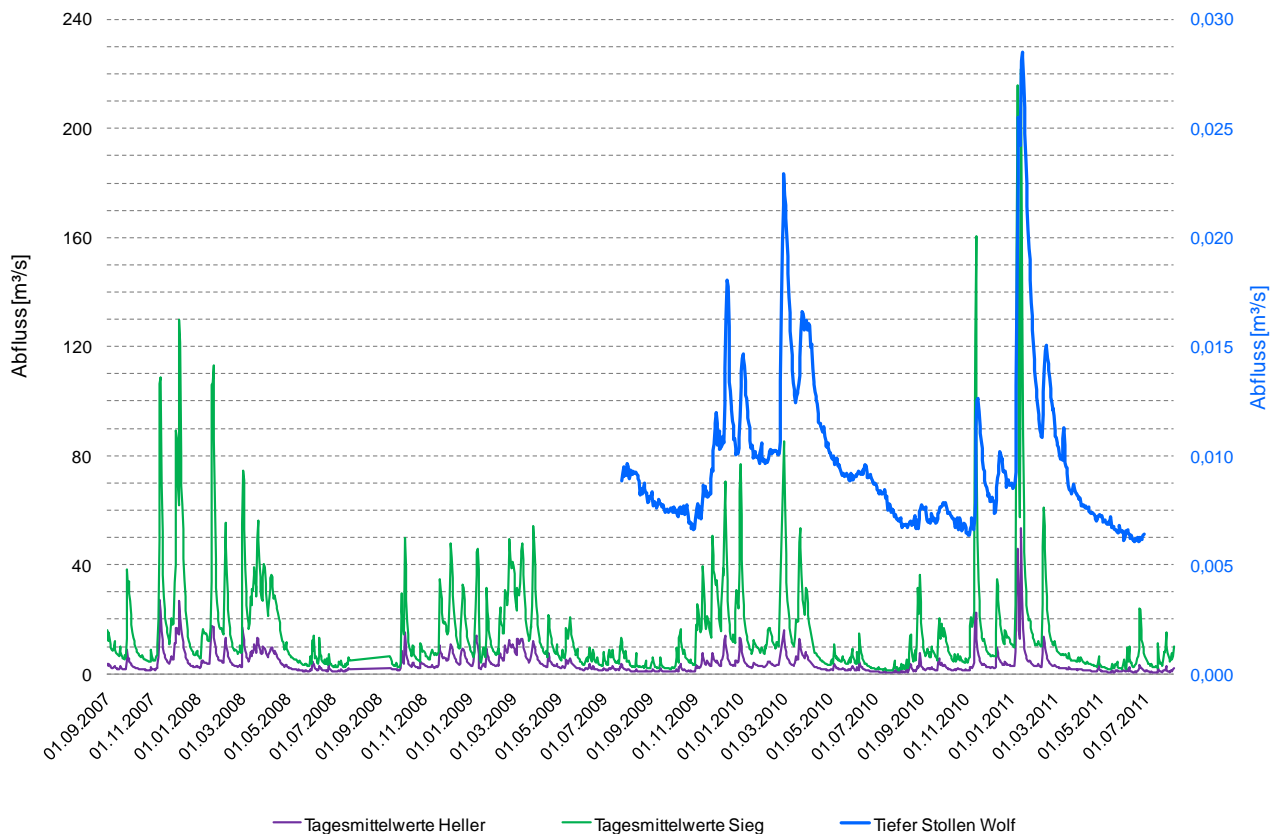


Abbildung 4-12 Verlauf der Abflussganglinien der Vorfluter Heller und Sieg sowie der Abflussmenge am Tiefen Stollen der Grube Wolf

Der Korrelationskoeffizient zwischen dem Abfluss der Sieg mit dem Auslauf am Tiefen Stollen liegt bei 0,63; der Korrelationskoeffizient zwischen dem Abfluss der Heller und dem Auslauf am Tiefen Stollen bei 0,65. Da sowohl die Sieg als auch die Heller eine, wenn auch schwache Korrelation mit dem Niederschlag aufweisen (Korrelationskoeffizient von 0,16 bzw. 0,19) und der Abfluss am Tiefen Stollen Wolf wiederum mit den Vorflutern korreliert, ist auch hier von einer schwachen Korrelation zwischen Niederschlag und Abfluss Wolf auszugehen. Daraus zeigt sich zum Einen, dass die Abflussmenge am Tiefen Stollen Wolf bis zu einem gewissen Grad von den gleichen Prozessen beeinflusst wird, welche auch an den Vorflutern eine Rolle spielen. Dass die Korrelation zwischen dem Abfluss Wolf und den Vorflutern nicht so

hoch ist, wie z.B. bei den Vorflutern untereinander, deutet darauf hin, dass noch weitere Prozesse auf Grund der speziellen hydrologischen Situation des Bergwerkes die Abflussmenge beeinflussen (Verweildauer, Zuflüsse etc.). Insgesamt betrachtet haben sehr viele unterschiedliche Prozesse einen Einfluss auf die Abflussmenge am Tiefen Stollen Wolf, so dass z.B. eine einfache Korrelation mit dem Niederschlag nicht zu einem signifikanten Ergebnis führt. Der Abfluss am Tiefen Stollen Wolf ist auf jeden Fall zeitlich versetzt zu Niederschlagsereignissen einzuordnen.

In PORR (2011) wurden die Jungwasseranteile (rezentes Niederschlagswasser), d.h. der Anteil des Wassers < 50 Jahre der Grubenwässer Wolf und San Fernando an Hand Tritium-Isotopenmessungen nach dem Mischungsmodell gemäß Mibus et al. (2002) berechnet. Demnach ergeben sich für die untersuchten Schachtwässer der Grube Wolf durchschnittliche Jungwasseranteile von 59 bis 79% und für die Schachtwässer der Grube San Fernando von 64 bis 80%. Die bereits bei den vorangegangenen Untersuchungen festgestellten Unterschiede des Wassers des Alten Schachts von Grube Wolf lassen sich auch bei den Isotopenanalysen feststellen. Nach PORR (2011) beträgt der Jungwasseranteil des Alten Schachtes durchschnittlich 79-63%. Damit ist der Niederschlags-Anteil des Wassers im Alten Schacht durchschnittlich betrachtet am höchsten und bestätigt die Annahme, dass der Alte Schacht nicht oder nur unvollständig an die allgemeine Hydraulik der Schächte angeschlossen ist. Ausgehend von einem durchschnittlichen Jungwasseranteil von 70% gegenüber einem Anteil älteren Grundwassers von 30% setzt sich die am Auslauf der Grube Wolf durchschnittlich austretende Wassermenge von 9,7 l/s (838,1 m³/d) damit etwa aus 6,79 l/s (586,7 m³/d) rezentem Niederschlagswasser und 2,91 l/s (251,4 m³/d) älterem Grundwasser (> 50 Jahre) zusammen.

4.4 Hydraulik

An den zugänglichen Schächten Wolf (Grube Wolf) und Schacht 2 (Grube San Fernando) wurden Temperatur-Leitfähigkeits-Tiefenprofile mit der Speichersonde CTD48M von Sea & Sun Technology aufgenommen. Dabei wurden die Messungen von Schacht Wolf ausgehend vom Niveau des Neuen Förderstollens von 256 m NN durchgeführt, während Schacht 2 der Grube San Fernando über das Niveau des Tiefen Stollens von 288,93 m NN erreicht werden konnte. Das Grubenwasser steht in Schacht 2 von Grube San Fernando rund 32,5 m unterhalb der Schachtoberkante an und liegt damit auf einem Niveau von etwa 256 m NN.

Aus ergänzenden Messungen des Grubenwasserspiegels im Schacht Füsseberg (mündliche Mitteilung POHL 2009) bestätigt sich, dass im gesamten gefluteten Grubengebäude ein einheitlicher Grund- bzw. Grubenwasserspiegel auf einem Niveau von rund 256 m NN vorliegt. Dabei sind geringfügige Schwankungen des Grundwasserspiegels z.B. auf unterschiedliche hydrostatische Drücke (WOLKERSDORFER 2008) zurückzuführen.

Schacht Wolf der Grube Wolf konnte bis in eine Tiefe von mehr als 500 m untersucht werden, während sich in Schacht 2 der Grube San Fernando nach rund 70 m ein Hindernis befand, welches eine tiefer gehende Divermessung unmöglich machte. In Abbildung 4-13 sind Schacht Wolf sowie im Detail eine Aufnahme der durch Gaslift entstandenen CO₂-Blasen an der Oberfläche von Blindschacht Wolf erkennbar.



Abbildung 4-13 links: Blick in/auf Blindschacht Wolf,; rechts: Gasblasen auf Wasseroberfläche von Blindschacht Wolf (Fotos: POHL 2011)

4.4.1 Tiefenmessung Schacht Wolf, Grube Wolf

Die Ergebnisse der Tiefenmessungen in Schacht Wolf sind den Abbildungen 4-14 und 4-15 zu entnehmen.

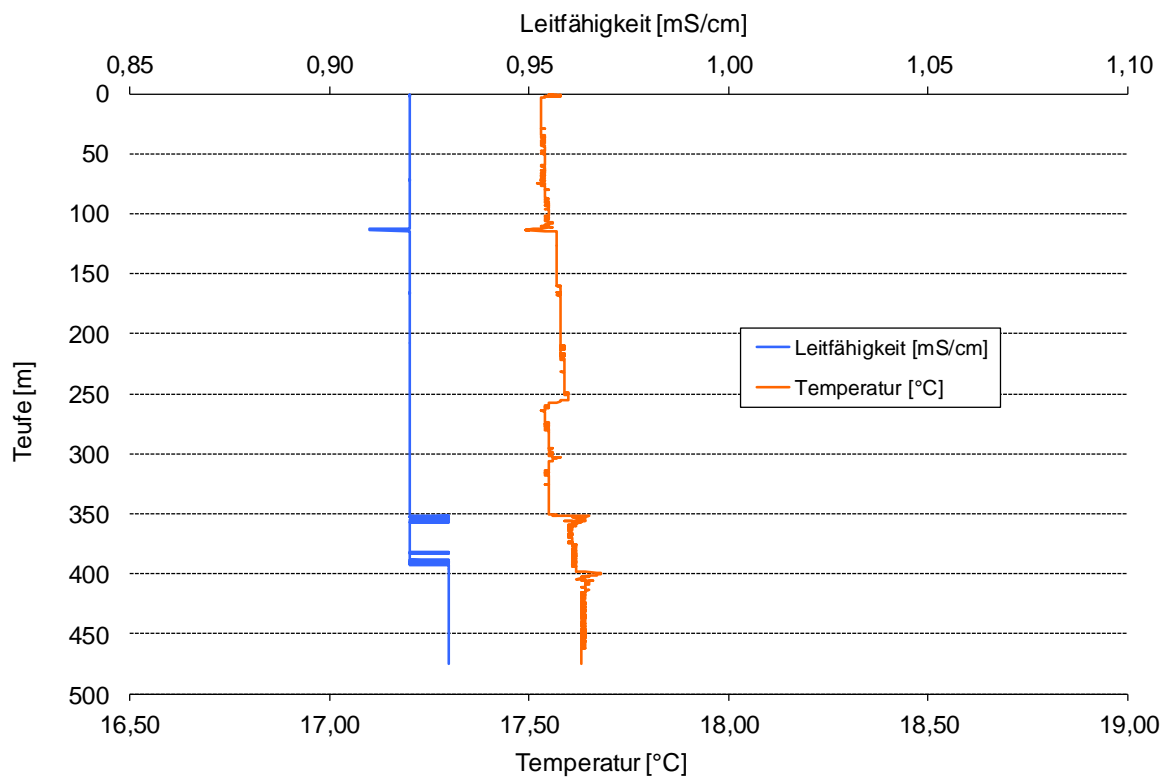


Abbildung 4-14 Tiefenmessung Schacht Wolf, Grube Wolf, 10.03.2009

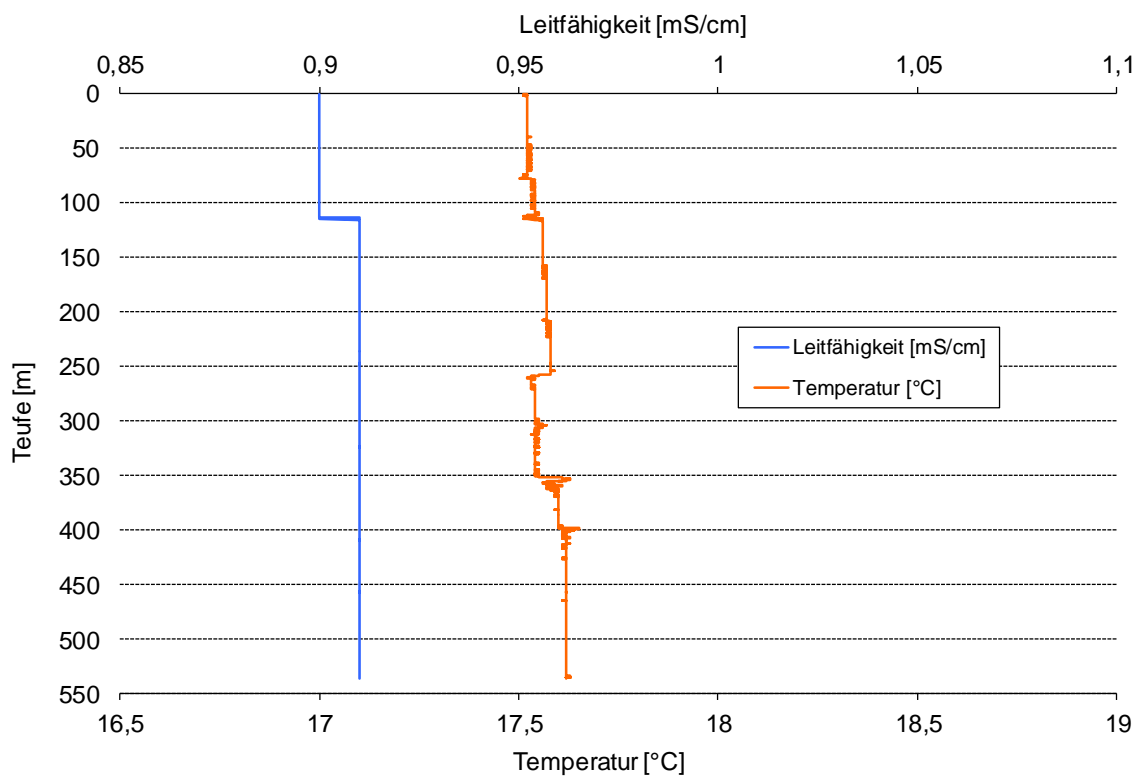


Abbildung 4-15 Tiefenmessung Schacht Wolf, Grube Wolf, 17.07.2010

Es zeigt sich, dass über die erfasste Tiefe von rund 500 m keine kontinuierliche Zunahme von Temperatur und Leitfähigkeit mit der Tiefe auftreten. Es gibt jedoch über das Tiefenprofil in einer Tiefe von rund 360 m und bei etwa 400 m eine geringe Zunahme der Leitfähigkeit, verbunden mit einer minimalen Temperaturzunahme. Dies stellt einen Hinweis auf eine bestehende und intakte Verbindung zur Grube San Fernando (Abbildung 4-16) dar.

Eine Wassertiefe von rund 360 m ab einer topographischen Höhe von +256 m NN (Neuer Förderstollen Wolf) entspricht einer topographischen Höhe von rund -104 m NN. Dies entspricht etwa dem Bereich zwischen der 400- und 450-m-Sohle Wolf. Eine Wassertiefe von 400 m entspricht einer topographischen Höhe von etwa -144 m NN und damit dem Niveau der 450-m-Sohle Wolf. Über diese Sohle ist aus verschiedenen Grubenrissen eine hydraulische Verbindung zur 400-m-Sohle der Grube San Fernando bekannt. Ein leichter Anstieg der elektrischen Leitfähigkeit des Grubenwassers kann somit als Hinweis auf eine intakte hydraulische Verbindung betrachtet werden.

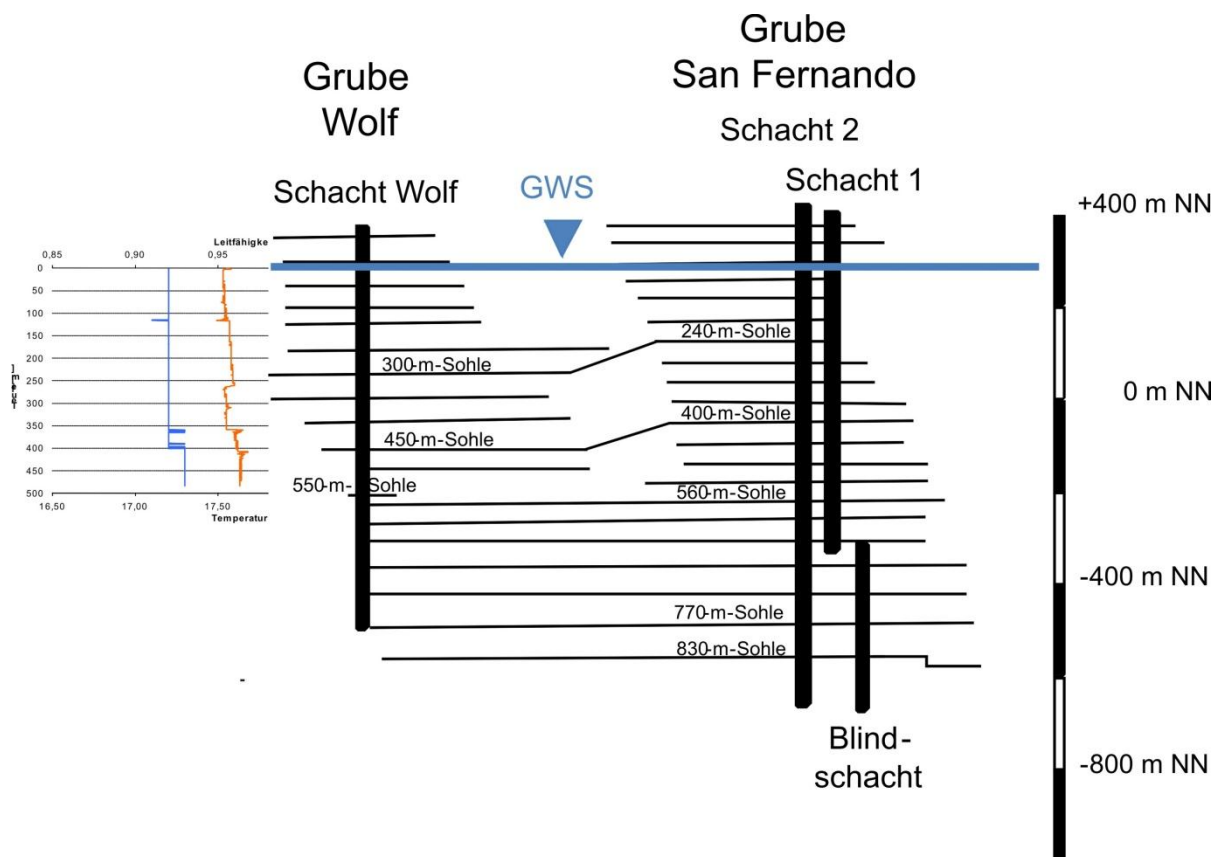


Abbildung 4-16 Tiefenmessung 10.03.2009 und Schachtschnitt Grube San Fernando-Wolf (Grundlage Schachtschnitt 1:2000, 1959, bearbeitet)

Die leichte Zunahme der elektrischen Leitfähigkeit in einer Tiefe von rund 120 m kann nicht auf eine Verbindung mittels Sohle zu Grube San Fernando bestätigt werden. Möglicherweise existieren jedoch in dieser Tiefe wasserführende Klüfte, welche bereits im Rahmen des aktiven Bergbaus (Kapitel 3 Untersuchungsgebiet) festgestellt werden konnten.

4.4.2 Tiefenmessungen Schacht 2 Grube San Fernando

Auf Grund eines Hindernisses im Schacht war eine Messung unterhalb eines Wasserspiegels von 85 m nicht möglich. Das Auftreten von Gaslift in diesem Schacht und die damit einhergehende Verringerung der Dichte des Wassers konnte bei der Auswertung nicht berücksichtigt werden, da keine Detailkenntnisse vorliegen. Über die gemessene Wasserteufe sind im Grubenwasser des Schachtes 2 von Grube San Fernando keine wesentlichen Änderungen der Temperatur und elektrischen Leitfähigkeit festzustellen (Abbildung 4-17). Die Endtiefe von rund 85 m entspricht ausgehend von einem Niveau des Tiefen Stollens von 288,93 m NN einer topographischen Höhe von rund 203 m NN und damit etwa dem Niveau zwischen der 74-m-Sohle und der 114-m-Sohle. In diesen Bereichen sind keine hydraulischen Verbindungen zu Grube Wolf oder der weiter südwestlich anschließenden Verbundgrube Füsseberg-Friedrich Wilhelm bekannt.

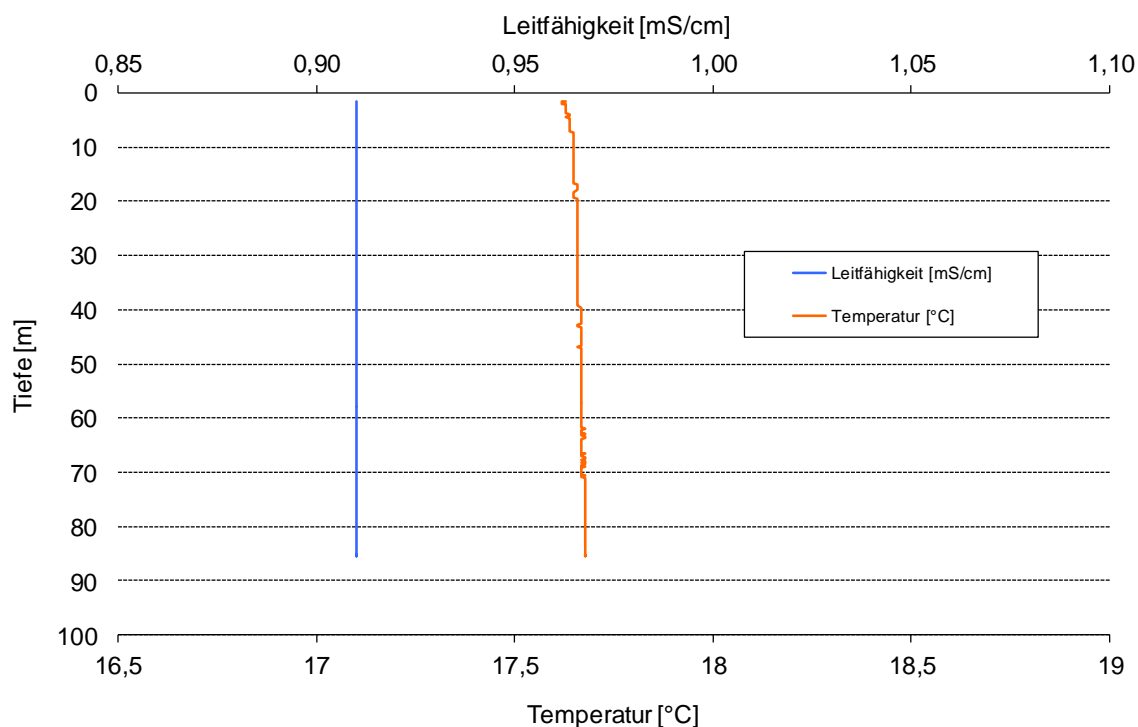


Abbildung 4-17 Tiefenmessung Schacht 2, Grube San Fernando, 25.09.2010

Die gemessenen Temperatur- und Leitfähigkeitsprofile im Schacht Wolf und Schacht 2 (soweit dieser gemessen werden konnte) bestätigen die hydrochemischen Untersuchungen. Seit der Flutung der Grube hat sich auf Grund von Konvektion und Gaslift ein einheitlicher Chemismus des Grubenwassers in allen Bereichen der Grube eingestellt. Es liegen turbulente Strömungsbedingungen vor, da keine Schichtung bzw. kein Stagnationswasser festgestellt werden konnte. Zudem befindet sich der Grundwasserspiegel innerhalb der gefluteten Grube auf einem einheitlichen Niveau von rund 256 m NN.

4.4.3 Strömungsgeschwindigkeit

In Schacht Wolf sowie dem Blindschacht der Grube Wolf wurde mittels des magnetisch-induktivem Strömungssensors Nautilus C 2000 der Firma Ott die vertikale Aufstiegsgeschwindigkeit des Grubenwassers gemessen. Aus den gemessenen Werten wurde die kritische Reynoldszahl (Kapitel 2) berechnet. Damit kann festgestellt werden, ob turbulente oder laminare Strömungsbedingungen vorliegen.

In Tabelle 4-8 sind die berechneten Reynoldszahlen für die gemessenen Geschwindigkeiten sowie die der Berechnung zu Grunde liegenden Parameter aufgeführt.

Tabelle 4-8 berechnete Reynoldszahlen für Grube Wolf, Schacht Wolf und Blindschacht

Schacht	Strömungs- geschwindigkeit Fluid v [m/s]	charakteristische Länge d [m]	kin. Viskosität Fluid ν [m ² /s]	dyn. Viskosität Fluid η [kg/s·m]	Reynoldszahl Re [-]
Wolf	0,004	3,65	0,000001	0,001	14.600
	0,011	3,65	0,000001	0,001	40.150
Blindschacht	0,001	2,50	0,000001	0,001	2.500
	0,005	2,50	0,000001	0,001	12.500

Die berechneten Reynoldszahlen für den Blindschacht und den Schacht Wolf der Grube Wolf liegen nach Vergleichen mit der Literatur (Kapitel 2 Grundlagen) deutlich über den Angaben für Re_{krit} für den Übergang von laminarem zu turbulentem Fließen. Für die untersuchten Schächte kann demnach von einem turbulenten Aufstieg des Grubenwassers ausgegangen werden.

Es ist dabei zu berücksichtigen, dass für den Blindschacht sehr viel geringere Strömungsgeschwindigkeiten vorliegen. Dies deutet darauf hin, dass über diesen Schacht nur eine geringere Menge Grubenwasser ausläuft, was zusätzlich einen Hinweis auf turbulente Strömung darstellt WOLKERSDORFER (2008). Eine grundsätzliche hydraulische Verbindung zu der weiteren Verbundgrube wird durch die hydrochemische Charakterisierung des Grubenwassers bestätigt.

Für den Alten Schacht der Grube Wolf wurden keine Messungen der Strömungsgeschwindigkeit durchgeführt, da das Grubenwasser nahezu keine Strömung aufweist. Es wurden über den Alten Schacht austretende Grubenwassermengen zwischen 0,5 und 0,7 l/s (PORR 2011) bestimmt. Dies bestätigt in Kombination mit der hydrochemischen Charakterisierung (geringer mineralisiert, kühler) und Tritium-Isotopenanalytik (PORR 2011) des Grubenwassers, dass der Alte Schacht nicht oder nur unvollständig an die Gesamt-Hydraulik der Verbundgrube angeschlossen ist und es sich hierbei um nahezu stehendes, überwiegend junges Wasser im Alten Schacht handelt.

4.5 Bestimmung der eingestauten Wassermenge

Zur Ermittlung der gesamten in die Verbundgrube eingestaute Wasservolumen müssen verschiedene Bereiche berücksichtigt werden. Zum Einen befindet sich der größte Anteil der Wassermenge in den Hohlräumen der versetzten und nunmehr gefluteten Abbaubereiche, zum anderen ist in den zahlreichen Sohlen und den abgeteuften Schächten Wasser eingestaut. Für die Gesamtwassermenge wurden daher drei voneinander unabhängige Berechnungen durchgeführt:

- Eingestaute Wassermenge in den Abbaubereichen
- Eingestaute Wassermenge in den Sohlen
- Eingestaute Wassermenge in den Schächten

4.5.1 Eingestaute Wassermenge in den Abbaubereichen

Nach HOFFMANN (1964) und FENCHEL et al. (1985) stellt sich die Gangflächenentwicklung der Grube San Fernando-Wolf wie in Abbildung 4-18 aufgeführt dar. Unter der Annahme, dass die gesamte erkundete und bauwürdige Gangfläche tatsächlich abgebaut wurde, resultiert daraus das gesamte bergmännisch abgebaute Gesteinsvolumen (Abbildung 4-18).

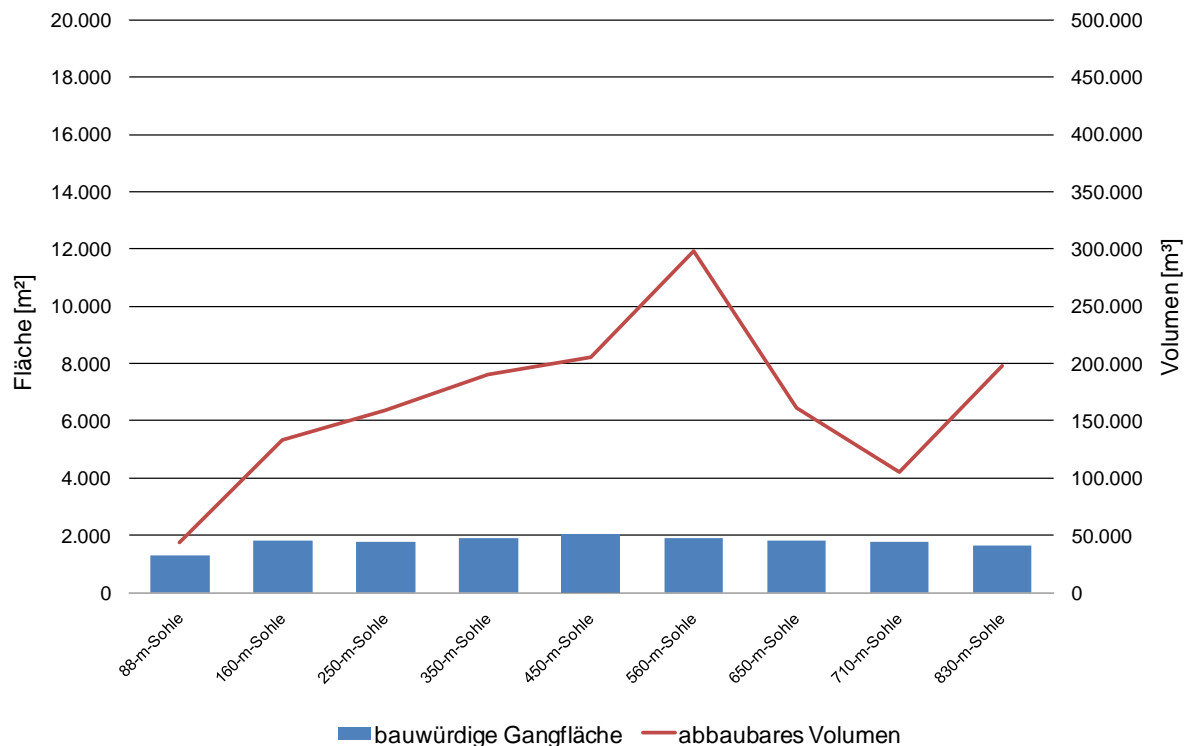


Abbildung 4-18 Gangflächenentwicklung der Grube San Fernando-Wolf (zusammengestellt aus FENCHEL ET AL., 1985 und HOFFMANN, 1964)

Bei den Berechnungen des abgebauten Volumens wurde angenommen, dass das gesamte, zwischen den Sohlen befindliche Gesteinsmaterial ausgeräumt wurde. Da dieses potentielle Hohlraumvolumen unter Tage jedoch verfüllt wurde, steht damit nicht das gesamte abgebaute Volumen als potentiell wassererfüllter Hohlraum zur Verfügung. Nach YOUNGER (zitiert in WOLKERSDORDER 2008) weisen verfüllte Abbaubereiche eine Porosität von 0,55 bis 0,60 auf. Für die Ermittlung der eingestauten Wassermenge wurde entsprechend mit einem Wert von 0,55 gearbeitet.

Für die Grube San Fernando-Wolf liegen nur Angaben der Gangflächen solcher Sohlen vor, welche sich tatsächlich in der gesättigten Zone (unterhalb

256 m NN) befinden. Die Abbaumengen und der daraus resultierende wassererfüllte Hohlraum setzen sich nach Tabelle 4-9 zusammen:

Tabelle 4-9 Eingestaute Wassermenge in den Abbaubereichen
(blau hinterlegt: gesättigte Zone)

Höhe [m NN]	Sohle	Mächtigkeit Abbau [m]	bauwürdige Gangfläche [m ²]	Wasservolumen [m ³]
249,49	88-m-Sohle	34	1.280	24.189
175,28	160-m-Sohle	74	1.800	73.468
85,6	250-m-Sohle	90	1.770	87.303
-13,32	350-m-Sohle	99	1.920	104.460
-114,02	450-m-Sohle	101	2.040	112.985
-271,19	560-m-Sohle	157	1.900	164.243
-360,99	650-m-Sohle	90	1.800	88.902
-420,99	710-m-Sohle	60	1.750	57.750
-541,2	830-m-Sohle	120	1.650	109.091
Summe ges. Zone		825	15.910	822.391

Für die Grube Füsseberg-Friedrich Wilhelm ist die Gangflächenentwicklung nach Hoffmann, 1964 und Fenchel, 1985 in Abbildung 4-19 dargestellt.

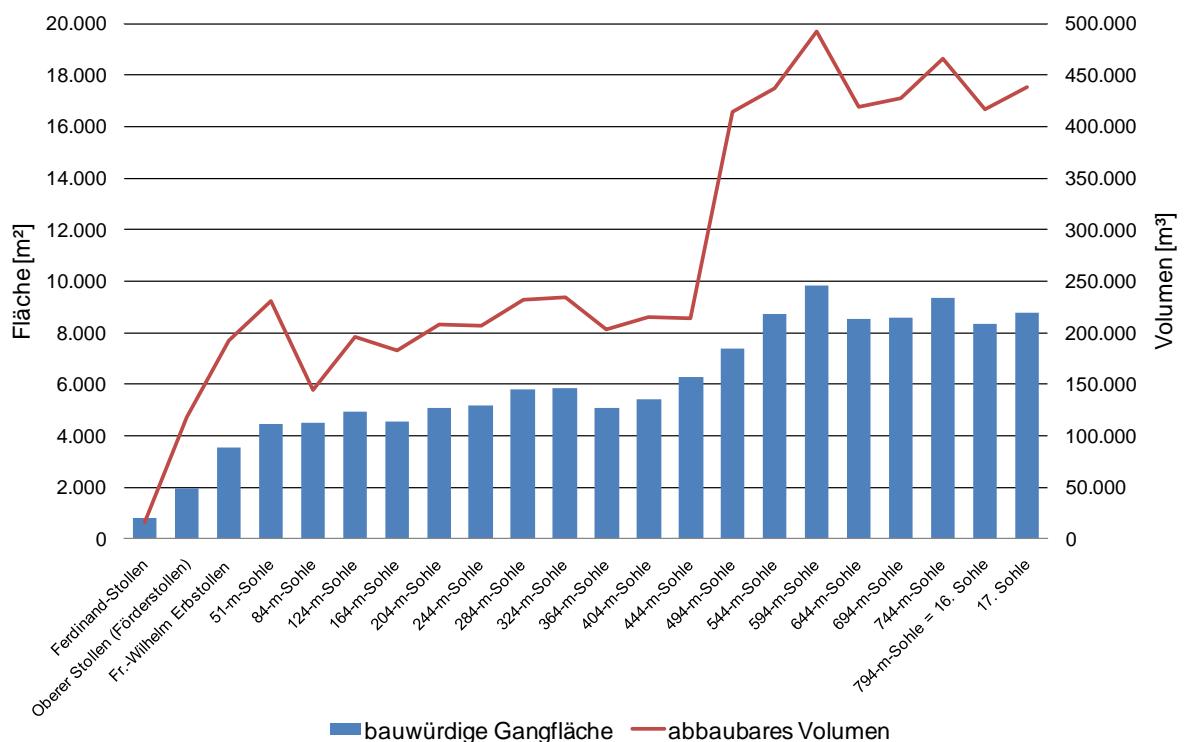


Abbildung 4-19 Gangflächenentwicklung der Grube Füsseberg – Friedrich Wilhelm
(zusammengestellt aus FENCHEL et al. 1985 und HOFFMANN 1964)

Auf Grund des Zusammenschlusses der Grube Füsseberg-Friedrich Wilhelm mit der Grube Glaskopf ist davon auszugehen, dass bei den angegebenen Zahlen die bauwürdigen Gangflächen auf Grube Glaskopf mit berücksichtigt wurden. Da sich auf Grund der Flutung der Grube auf das Niveau des Tiefen Stollens der Grube Wolf bei 256 m NN nicht alle abgebauten Bereiche auch in der wassergesättigten Zone befinden, ergibt sich für den Verbund der Gruben Füsseberg-Friedrich Wilhelm folgende Situation (Tabelle 4-10):

Tabelle 4-10 Eingestaute Wassermenge in den Abbaubereichen (blau hinterlegt: gesättigte Zone, rot: geschätzt)

Höhe [m NN]	Sohlen (bezogen auf Friedrich Wilhelm)	Mächtigkeit Abbau [m]	bauwürdige Gangfläche [m ²]	Wassermenge [m ³]
403	Ferdinand-Stollen	20	780	8.580
342	Oberer Stollen (Förderstollen)	61	1.930	64.725
288	Fr.-Wilhelm Erbstollen	54	3.560	105.732
236	51-m-Sohle	52	4.430	126.698
204	84-m-Sohle	32	4.510	79.376
164	124-m-Sohle	40	4.910	108.020
124	164-m-Sohle	40	4.560	100.320
83	204-m-Sohle	41	5.080	114.554
43	244-m-Sohle	40	5.160	113.520
3	284-m-Sohle	40	5.810	127.820
-37	324-m-Sohle	40	5.850	128.700
-77	364-m-Sohle	40	5.090	111.980
-117	404-m-Sohle	40	5.390	118.580
-151	444-m-Sohle	34	6.290	117.623
-207	494-m-Sohle	56	7.390	227.612
-257	544-m-Sohle	50	8.740	240.350
-307	594-m-Sohle	50	9.840	270.600
-356	644-m-Sohle	49	8.550	230.423
-406	694-m-Sohle	50	8.560	235.400
-456	744-m-Sohle	50	9.330	256.575
-506	794-m-Sohle = 16. Sohle	50	8.330	229.075
-556	17. Sohle	50	8.771	241.203
Summe ges. Zone		844	126.591	3.178.428

Für die gesamte Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm ergibt sich somit eine eingestaute Wassermenge in den verfüllten Abbaubereichen von rund 4 Mio. m³.

4.5.2 Eingestaute Wassermenge in den Sohlen

Zur Ermittlung der in den Sohlen eingespeicherten Wassermenge wurden diejenigen Tiefbausohlen der Gruben in die Berechnung mit einbezogen, welche sich unterhalb des Niveaus des Grubenwasserspiegels von 256 m NN befinden und somit in der wassergesättigten Zone liegen. Zusätzlich wurde aus FENCHEL (1985) rekonstruiert, in welchem Jahr die Sohlen abgeteuft wurden. Nach GLEICHMANN (1990) ergeben sich für das Auffahren von Sohlen auf Grund der fortschreitenden Entwicklung des Bergbaus im Siegerland unterschiedliche Sohlen-Querschnitte (Abbildung 4-20)

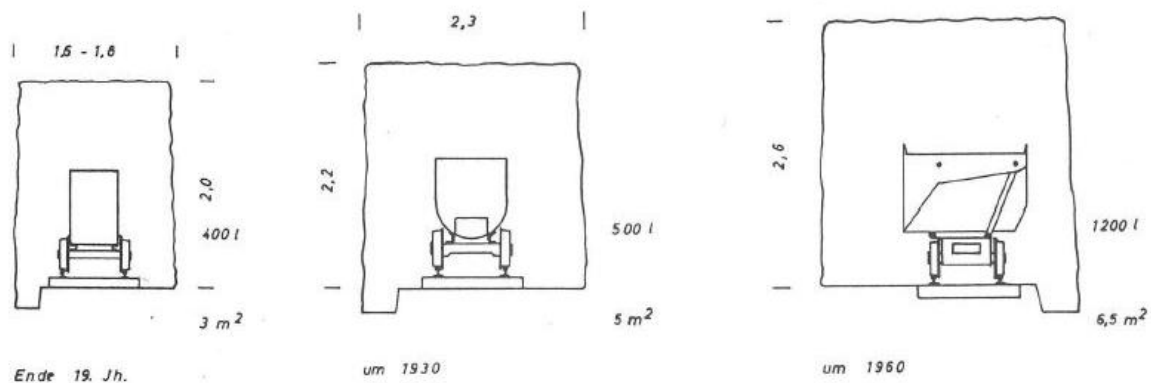


Abbildung 4-20 Streckenquerschnitte im Siegerländer Bergbau im Verlaufe der Jahrhunderte (GLEICHMANN 1990)

Die Länge der Sohlen wurde dabei für die Gruben Wolf und San Fernando aus der Militärperspektive 1:2.000 ermittelt. Für die Grube Füsseberg-Friedrich Wilhelm wurde der Abstand der Schächte Friedrich Wilhelm zu Füsseberg als orientierende Längenabschätzung (aus dem Übersichtsriß der Verbundgrube 1:4.000) verwendet. Daher weisen alle Sohlen Friedrich Wilhelm bis Füsseberg eine einheitliche Länge auf, lediglich die 16. bis 18. Sohlen sind länger, da sie das Grubenfeld Glaskopf miteinschließen. Diese Längenvereinfachung wurde gewählt, da insbesondere die tieferen Sohlen entweder direkt durchschlägig von den Schächten Friedrich Wilhelm bis zu den Schächten Füsseberg verlaufen oder zwar selbstständig abgeteufte Sohlen auftreten, welche aber bis auf wenige 10er Meter aneinander heranreichen.

Die Sohlen der Grube Glaskopf wurden ebenfalls aus dem Übersichtsriß der Verbundgrube (1:4000) rekonstruiert, wobei die tieferen Sohlen mit einer mittleren

durchschnittlichen Länge angenommen wurden. Die eingestauten Wasservolumina für die verschiedenen Bergwerke sind den Tabellen 4-11 bis 4-14 zu entnehmen.

Tabelle 4-11 In Sohlen der Grube Wolf eingestautes Wasservolumen

Tiefbausohle	Streckenlänge [m]	Abbauquerschnitt [m ²]	Volumen [m ³]
88	251	5	1.254
120	584	5	2.918
160	504	5	2.519
200	789	5	3.946
250	950	5	4.749
300	898	5	4.491
350	969	5	4.846
400	823	5	4.116
450	795	5	3.975
500	668	5	3.342
550	162	5	810
Summe			36.966

Tabelle 4-12 In Sohlen der Grube San Fernando eingestautes Wasservolumen

Tiefbausohle	Streckenlänge [m]	Abbauquerschnitt [m ²]	Volumen [m ³]
40	292	3	876
74	209	3	627
114	244	3	732
155	227	3	682
198	216	3	648
240	287	3	862
280	240	3	721
320	195	5	976
360	201	5	1.005
400	236	5	1.178
440	232	5	1.162
480	241	5	1.206
520	1.072	5	5.360
560	1.134	5	5.668
600	1.174	6,5	7.631
650	932	6,5	6.061
710	952	6,5	6.188
770	1.281	6,5	8.324
830	1.034	6,5	6.720
880	634	6,5	4.124
930	240	6,5	1.563
Summe			62.312

Tabelle 4-13 In Sohlen der Grube Füsseberg-Friedrich Wilhelm (einschließlich Grube Einigkeit) eingestautes Wasservolumen

Tiefbausohle	Streckenlänge	Abbauquerschnitt	Volumen
	[m]	[m ²]	[m ³]
40	1.816	3	5.449
84	1.816	3	5.449
123,5	1.816	3	5.449
163,8	1.816	3	5.449
203,7	1.816	3	5.449
244	1.816	3	5.449
284	1.816	3	5.449
324	1.816	3	5.449
264	1.816	3	5.449
404	1.816	3	5.449
444	1.816	5	9.082
494	1.816	5	9.082
544	1.816	5	9.082
594	1.816	5	9.082
644	1.816	5	9.082
694	1.816	5	9.082
744	1.816	5	9.082
16.	2.600	6,5	16.900
17.	2.600	6,5	16.900
18.	2.600	6,5	16.900
19.	600	6,5	3.900
Summe			172.666

Tabelle 4-14 In Sohlen der Grube Glaskopf eingestautes Wasservolumen

Tiefbausohle	Streckenlänge	Abbauquerschnitt	Volumen
	[m]	[m ²]	[m ³]
85	200	3	600
120	280	3	840
162	240	3	720
198	160	3	480
238	160	3	480
263	160	3	480
297	320	3	960
339	320	3	960
360	800	3	2.400
377	800	3	2.400
423	800	3	2.400
486	800	3	2.400
533	800	3	2.400
573	800	3	2.400
610	800	3	2.400
672	800	3	2.400
728	800	3	2.400
Summe			27.120

Insgesamt ergibt sich für die in der wassergesättigten Zone befindlichen Sohlen der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm eine eingestaute Wassermenge von rund 300.000 m³.

4.5.3 Eingestaute Wassermenge in den Schächten

Für die Bestimmung der Wassermenge in den Schächten wurden die Hauptschächte der einzelnen Gruben berücksichtigt. Die Wassermengen setzen sich gemäß Tabelle 4-15 zusammen.

Wie aus den Grubenrissen ersichtlich, sind bis auf Schacht 1 und den Blindschacht der Grube San Fernando alle Schächte mit rundem bzw. ovalen Querschnitt abgeteuft worden. Aus KRAH (2005) und vorliegenden Unterlagen zu den Schachtausbauten von Füsseberg und Glaskopf (Schachtschnitte 1:2.000, Schachtscheiben, 1969) wurden die nachfolgenden Abmessungen der Schächte zusammengestellt. Schacht Wolf wurde oval angelegt, die Abmessungen wurden vereinfacht für die Abschätzung und darauf aufbauende Modellierung als runder Querschnitt mit einem Durchmesser von 3,65 m angenommen. Diese Maße haben sich über die Teufe nicht verändert. Schacht 2 der Grube San Fernando weist über die gesamte Teufe einen Durchmesser von 5 m auf, während Schacht 1 und der Blindschacht rechteckig mit einer Abmessung von 2 zu 5 m abgeteuft wurden. Auch hier hat sich, resultierend aus den Ausbaubeschreibungen nach KRAH (2005), keine Verbreiterung des Durchmessers mit der Tiefe ergeben. Nach mündlicher Mitteilung von POHL (2012) weist Schacht 2 der Grube Friedrich Wilhelm einen eckigen (bis schwach ovalen) Querschnitt bei einer Länge von 4,7 m und einer Breite von 2,7 m auf. Für die Schächte Füsseberg und Glaskopf ergibt sich aus den Schachtschnitten eine Vergrößerung des Durchmessers bei einer Teufe von etwa -214 m NN. Der Durchmesser des Schachtes Füsseberg nimmt von 3,8 m (gemittelte Werte für einzelne kürzere Schachtabsnitte) auf 4,64 m zu. Der Durchmesser des Schachtes Glaskopf nimmt von 3,1 m NN auf 4,00 m NN zu. Diese Verbreiterung wurde auch auf Schacht 1 von Grube Friedrich Wilhelm übertragen. Da für diesen Schacht sowie für die mit dieser Grube Einigkeit keine exakteren Daten vorliegen, wurden Durchmesser von 3 bzw. 4 m angenommen.

Tabelle 4-15 In die Schächte eingestaute Wassermenge der Schächte der Verbundgrube

		Oberkante Schacht	Teufe Schacht- /bereich	Länge Schacht	Wasser- oberfläche	wasser- erfüllter Bereich	Querschnitts- fläche	Wasser- volumen
		[m NN]	[m]	[m]	[m NN]	[m]	[m²]	[m³]
Wolf	Schacht	337,5	-478,1	815,6	256,0	734,1	10,5	7.723
San Fernando	Schacht 1	358,4	-316,4	674,8	256,0	572,4	10,0	5.724
	Schacht 2	374,7	-627,3	1002,0	256,0	883,3	19,6	17.344
	Blindschacht	-310,9	-651,0	340,1	256,0	907,0	10,0	9.070
Friedrich Wilhelm	Schacht 1 oben	334,6	-214,0	548,6	256,0	470,0	7,07	3.322
	Schacht 1 unten	334,6	-618,8	953,4	256,0	874,8	12,6	10.993
	Schacht 2	337,7	-714,4	1052,1	256,0	970,4	12,7	12.324
Einigkeit	Schacht oben	288,9	-214,0	502,9	256,0	470,0	7,07	3.322
	Schacht unten	288,9	-31,3	320,2	256,0	287,3	12,6	3.610
Füsseberg	Schacht oben	304,0	-214,0	518,0	256,0	470,0	11,3*	5.330
	Schacht unten	304,0	-741,8	1045,8	256,0	997,8	16,9	16.872
Glaskopf	Schacht oben	313,4	-214,0	527,4	256,0	470,0	7,5	3.547
	Schacht unten	313,4	-556,6	870,0	256,0	812,6	12,6	10.212
Summe								109.394

*mittlere Annahme aus Werten zwischen 3,90 und 4,04 m, grau hinterlegt: rechteckige Schachtquerschnitte

Aus den drei unterschiedlichen Bereichen des Grubengebäudes ergibt sich somit insgesamt betrachtet eine bilanzierte Wassermenge für die Verbundgrube nach Tabelle 4-16:

Tabelle 4-16 Gesamtwassermenge für die einzelnen Bergwerksbereiche und bilanzierte Wassermenge für die Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm unter Annahmen verschiedener Versatzhohlraumanteile

Bergwerksbereich	eingestaute Wassermenge [m ³]	
verfüllte Abbaubereiche	4.000.819*	2.022.636**
Sohlen	299.064	299.064
Schächte	109.393	109.393
Summe	4.409.278	2.431.095

* bei Versatzhohlraum von 0,55 ** bei Versatzhohlraum von 0,35

Die Ermittlung der eingestauten Wassermengen zeigt, dass sich der größte Anteil Wasser in den rückverfüllten Abbaubereichen befindet. Dadurch spielt die Größenordnung der für die Berechnung verwendeten Porosität bzw. die Größenordnung des Hohlraumanteils eine wesentliche Rolle.

Da die Angabe einer Porosität von 0,55-0,6 nach YOUNGER (zitiert in WOLKERSDORFER, 2008) aus Kenntnissen des Kohlebergbaus stammt, ist die Übertragbarkeit dieses Wertes für den Erzbergbau schwierig. Die Abbau- und Versatzmethoden sind unterschiedlich und schwer vergleichbar. Da keine weitere Literatur zur Porosität verfüllter Abbaubereiche, gerade im Erzbergbau, bekannt ist, wurden verschiedene, noch zugängliche Abbaubereiche der untersuchten Verbundgrube begutachtet. Dabei zeigt sich, dass das für den Versatz verwendete Material, welches aus der Aufbereitung der Erze stammt, stark in der Korngrößenzusammensetzung variiert. Es sind Bereiche mit tonigem Material, aber auch mit Material der Stein-Fraktion angetroffen worden (Abbildung 4-21)



Abbildung 4-21 Versatz (rückverfüllter Abbaubereich, Grube San Fernando
(Foto: POHL 2011)

Generell ist zu sagen, dass die Ausführung des Versatzes und die aus der Erzaufbereitung anfallenden Materialien einen Einfluss auf die Porosität und damit auch auf die Durchlässigkeit des rückverfüllten Abbaus aufweisen.

Die zur Bestimmung der eingestauten Wassermenge verwendete Porosität von 0,55 stellt eher eine optimistische Abschätzung dar, die tatsächliche Wassermenge kann auf Grund einer geringeren Porosität auch geringer ausfallen. Unter der Annahme eines Hohlraumanteils der versetzten Bereiche von beispielsweise 0,35 (WIEBER et al. 2011) ergibt sich eine gesamte eingestaute Wassermenge von rund 2,43 Mio. m³ (Tabelle 4-16).

5 Modellierung

Die Lösung der partiellen Strömungsdifferentialgleichung (Kapitel 2 Grundlagen) erfolgt numerisch. Für die thermohydraulischen Modellierungen wurde die Software FEFLOW 6.0 zur Berechnung von Wasserströmung, Massen- und Wärmetransport in porösen Medien nach der Finiten-Elemente-Methode von DHI-WASY verwendet. Die mathematischen Grundlagen der Software sind dokumentiert und als Standard wissenschaftlich eingeführt (FEFLOW White Papers 2006) sowie deren grundsätzliche Anwendbarkeit auf Bergwerke dokumentiert (z.B. DIERSCH 1997). Die Verwendung von Finiten Elementen ermöglicht im Gegensatz zu Finiten Differenzen die Eingabe und Berücksichtigung komplexer Modellgeometrien.

Mittels FEFLOW wird die Strömung unter laminaren Gesichtspunkten nach dem Gesetz von Darcy (Kapitel 2 Grundlagen) betrachtet. Da wie bereits beschrieben das Strömungsverhalten in Schächten und Sohlen in der Regel turbulent ist, besteht in FEFLOW die Möglichkeit, so genannte Discrete Feature Elements (DFE) zu verwenden. Diese eindimensionalen Elemente können sowohl horizontal also Sohle als auch vertikal als Schacht in die Modellgeometrie eingebaut werden. Der Berechnung der DFE können eigenständige Gesetzmäßigkeiten (Darcy, Poiseuille, Manning-Strickler) zu Grunde gelegt werden, des Weiteren kann durch Verwendung der DFE die Geometrie der Schächte und Sohlen in das Modell eingefügt werden. Dabei werden die 1D-DFE für jeden Knoten, mit dem sie mit dem Gesamt-Gitter verbunden sind, berechnet und die berechneten Informationen werden an diesen Knoten zur Weiterverarbeitung des Gesamtmodells durch FEFLOW eingearbeitet. Mit Hilfe dieser Elemente ist eine Modellierung von turbulenten Strömungsbedingungen in Schächten und Sohlen im umgebenden, von Darcy-Fluss dominierten Gestein möglich. Die DFE sind in Abhängigkeit der Gesteinsdurchlässigkeit an das Gebirge angeschlossen, d.h. bei höheren Durchlässigkeiten stehen die DFE in stärkerem hydraulischen Kontakt zu dem umgebenden Gebirge, bei geringeren Durchlässigkeiten ist der hydraulische Kontakt zum umgebenden Gebirge geringer.

Zur numerischen Lösung der Grundwasserströmungsgleichung sind Anfangs- und Randbedingungen notwendig. Unter Anfangsbedingungen versteht man eine vorgegebene Piezometerhöhenverteilung vor Beginn der Simulation. Eine Definition

von Anfangsbedingungen ist in der Regel nur unter instationären Bedingungen notwendig (KINZELBACH & RAUSCH 1995).

Es gibt drei Arten von Randbedingungen. Die Randbedingung 1. Art (Dirichlet-Randbedingung) legt die Piezometerhöhen $h = f(t)$ am Rand (des Modellgebietes) fest (KINZELBACH & RAUSCH 1995). Randbedingungen 2. Art (Neumann-Bedingungen) definieren den Zu- oder Abfluss an einem Rand (des Modellgebietes), d.h. sie legen den Gradienten von h senkrecht zum Rand ($\partial h / \partial n = f(t)$) fest (KINZELBACH & RAUSCH 1995). Die 3. Art von Randbedingung (Cauchy-Randbedingung) stellt eine Kombination aus einer Randbedingung 1. und 2. Art dar und ist als Linearkombination ($\alpha h + \beta \partial h / \partial n = f(t)$) definiert (KINZELBACH & RAUSCH 1995).

Speziell in FEFLOW gibt es eine Randbedingung 4. Art, über die die Zugabe bzw. Entnahme von Wasser aus dem Modell mittels Brunnen modelliert werden kann.

Wie bereits beschrieben wurde die Eingabe der Geometrie von Schächten und Sohlen in FEFLOW mittels Discrete Feature-Element (DFE) realisiert. Dabei wurden die Strömung in den Schächten und Sohlen nach Hagen-Poiseuille (Kapitel 2 Grundlagen) berechnet. Für die Eingabe der Parameter wurde die Geometrie der Schächte (rund oder eckig) und die Sohlen mit einem rechteckigen Querschnitt angenommen. Dabei ist in FEFLOW die Eingabe eines korrigierten hydraulischen Radius notwendig. Der hydraulische Radius r_{Hydr} ist definiert als die durchströmte Fläche bezogen auf die benetzte Fläche (FEFLOW White Papers Vol. 1, 2006) und errechnet sich für eckige bzw. runde Querschnitte nach Gleichung 5-1 und 5-2:

Eckige Querschnitte:

$$r_{\text{Hydr.}} = \frac{a \cdot b}{2 \cdot (a+b)} \quad (5-1)$$

Runde Querschnitte:

$$r_{\text{Hydr.}} = \frac{\pi R^2}{2 \pi R} = \frac{R}{2} \quad (5-2)$$

mit:

a	Länge [m]	b	Breite [m]
R	Radius [m]		

Die korrigierten hydraulischen Radien $r_{\text{kor.}}$ errechnen sich für rechteckige Querschnitte nach Gleichung 5-3 und für runde Querschnitte nach Gleichung 5-4 (FEFLOW WHITE PAPERS VOL. 1):

Eckige Querschnitte:

$$r_{\text{kor.}} = \frac{2 \cdot \sqrt{3}}{\sqrt{c}} \cdot r_{\text{Hydr.}} = \frac{2 \cdot \sqrt{3}}{\sqrt{3}} \cdot \frac{a \cdot b}{2 \cdot (a+b)} = \frac{a \cdot b}{a+b} \quad (5-3)$$

Runde Querschnitte

$$r_{\text{kor.}} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \cdot R \quad (5-4)$$

mit

a	Länge [m]	b	Breite [m]
R	Radius [m]	c	3 (für planare Geometrien)

5.1 Geologisches Modell

Die in den vorangegangenen Kapiteln dargestellten geologischen, hydrologischen und hydrochemischen Verhältnisse im Untersuchungsgebiet sind notwendig für die Konzeptionierung des Geologischen Modells. Für die Übertragung der Verhältnisse vor Ort auf ein thermohydraulisches Modell sind eine Reihe von Vereinfachungen, Anpassungen und Annäherungen der tatsächlichen Gegebenheiten notwendig. Ein Modell muss zum einen so komplex sein, um ein aussagekräftiges Ergebnis im Hinblick auf die Fragestellung zu ermöglichen, aber auch so einfach wie möglich, um die Handhabung und Umsetzung zu gewährleisten. So können für die Umsetzung der tatsächlichen Verhältnisse im Untersuchungsgebiet z.B. nicht lokale, kleinräumige geologische Differenzierungen oder im Hinblick auf ein Grubengebäude nicht jede vereinzelte Sohle oder Schacht ohne hydraulische Bedeutung im Modell berücksichtigt werden. Daher wurden im Vorfeld der Modellerstellung aus dem vorliegenden Karten- und Literaturmaterial die hydraulisch wirksamen Sohlen und Schächte identifiziert.

Den Modellierungen liegt zu Grunde, dass das Grubengebäude in einem schlecht durchlässigen Kluftgrundwasserleiter mit geringer Wasserführung abgeteuft wurde. Die devonischen Gesteine setzen sich aus schluffigen bis feinsandige Tonsteinen und -schiefern sowie tonigen Sandsteine (THÜNKER 2008) zusammen.

Da es für die direkt im Untersuchungsgebiet anstehenden Gesteine keine Angaben zu Gesteins- bzw. Gebirgsdurchlässigkeiten gibt, wurden diese aus der Literatur recherchiert. Nach KRAPP (1979) weisen Sandsteine und Tonsteine Durchlässigkeiten im Bereich von 10^{-7} m/s bis 10^{-9} m/s auf. Nach HART (2006) liegt die Durchlässigkeit des devonischen Grundgebirges im nördlichen Rheinischen Schiefergebirge (Gemeinde Fernthal, Westerwald) im Bereich von $8 \cdot 10^{-7}$ m/s. Es wurden keine relevanten Anisotropien festgestellt, jedoch eine Verringerung der Durchlässigkeit des Gebirges mit der Tiefe. Nach Mitteilung des GEOLOGISCHEN LANDESAMTES RGB-RLP (2010) weisen die Gesteine im Untersuchungsgebiet Durchlässigkeiten im Bereich von 10^{-8} m/s auf. Die anstehenden Gesteine weisen nur eine sehr geringe primäre Porosität auf, nach SPITZ & MORENO (1996) sowie KRAPP (1979) liegt die nutzbare Porosität bei feinkörnigen Sandsteinen bis Tonsteinen im Bereich von 0,005 (0,5%) bis 0,02 (2%). In diesem schlecht durchlässigen Kluftgrundwasserleiter stellen die Schächte und Sohlen der Gruben bevorzugte Fließpfade dar, welche zu einer sekundären Auflockerung des Gebirges beitragen.

Da die Abbaubereiche mittels Handversatz verfüllt wurden, stellen auch diese gegenüber dem ursprünglichen anstehenden Gebirge stark aufgelockerte Bereiche bevorzugter Wasserwegsamkeit dar. Da die Abbaubereiche mittels Handversatz rückverfüllt wurden, können diese in Annäherung als Lockersediment-Bereiche angesehen werden. HELMBOLD (1988 in LANGGUTH & VOIGT 2005) hat an Sanden des Mitteldeutschen Braunkohlenreviers Zusammenhänge zwischen nutzbarer Porosität und Durchlässigkeitsbeiwert ermittelt. Überträgt man dies auf eine angenommene Hohlraumporosität des Abbaubereiches von 0,35 (WIEBER et al. 2011), welche als nutzbare Porosität angesehen wird, ergibt sich ein kf-Wert im Bereich von $1 \cdot 10^{-3}$ m/s. Dieser Wert dient lediglich der orientierenden Abschätzung. Zum einen wurde der Zusammenhang exemplarisch an ausgewählten Sedimenten ermittelt, so dass die Werte nicht direkt anwendbar auf versetzte Abbaubereiche des Erzbergbaus sind, zum anderen wurde bereits der Hohlraumanteil des verfüllten Abbaubereiches lediglich abgeschätzt. In Ermangelung einer konkreteren Datenlage ist dieser

ermittelte Zusammenhang jedoch zur größenordnungsmäßigen Orientierung der Durchlässigkeit des verfüllten Abbaubereiches geeignet. Sowohl Durchlässigkeit als auch Porosität der Abbaubereiche sind im Hinblick auf Grund der Variation der versetzten Korngrößen und der unterschiedlichen Ausbildung der verschiedenen Abbaubereiche stark variierend und können in einzelnen Abschnitten größer als auch kleiner ausfallen.

Die Schächte und Sohlen stellten die wesentlichen Wasserwegsamkeiten im schlecht durchlässigen Untergrund dar. Durch die Wasserhaltung während des aktiven Bergbaus wurde der natürliche Grundwasserspiegel abgesenkt (WIEBER 1999). Da sich der Grundwasserspiegel nach Einstellung der Wasserhaltung auf Niveau des Vorfluters einstellt, ist dieser gegenüber der ursprünglichen Situation niedrigerem Niveau. Das Bergwerk stellt somit eine überdimensionale Drainage dar und die Wässer in der näheren Umgebung fließen dieser Drainage zu. Auf Grund der Isotopen-Untersuchungen von PORR (2011) sowie den durchgeführten Abflussmessungen konnte festgestellt werden, dass die am Auslauf der Grube Wolf austretende Wassermenge zu einem großen Anteil durch Sicker-/Niederschlagswasser beeinflusst wird (etwa 70%). Durch die Erschließung des schlecht durchlässigen Gebirges über Schächte und Sohlen in der Tiefe werden warme Bereiche erschlossen. Dieses warme Wasser kann, bevorzugt über die Schächte in höher gelegene Grubenbereiche transportiert werden, so dass am Auslauf der Grube Wolf ein, gegenüber der durchschnittlichen Grundwassertemperatur in Mitteleuropa von 8°C bis 10°C (HÖLTING & COLDEWEY 2005) erhöhte Temperatur anzutreffen ist. Die am Auslauf der Grube Wolf austretenden Wassermengen sind nicht nur vom Niederschlag / Sickerwasser beeinflusst, sondern zu einem Anteil von rund 30% auch Grundwasser-gespeist. Auf Grund historischer Untersuchungen in FENCHEL et. al. (1985) sowie nach KRAH (2005) konnte bereits festgestellt werden, dass der geothermische Gradient des Untersuchungsgebietes leicht oberhalb des geothermischen Gradienten von Mitteleuropa von 3°/100 m liegt.

5.2 2D-Szenario-Modelle

Mittels FEFLOW 6.0 wurden zweidimensionale Szenario-Modelle aufgestellt. Dabei wurde mit der Verbundgrube San Fernando-Wolf ein Ausschnitt aus der gesamten Verbundgrube gewählt. Die Szenario-Modelle sollen eine Aussage darüber liefern, welche Sohlen und Schächte der Grube für die allgemeine Hydraulik des Bergwerkes eine wichtige Größe darstellen, bzw. im Rahmen einer Übertragung und Vereinfachung für das 3D-Modell gegebenenfalls vernachlässigt werden können. Der Modellausschnitt wurde wie unten dargestellt gewählt, da sich zum Einen am Auslauf der Grube Wolf die Entwässerung der gesamten Verbundgrube befindet und zum anderen die Verbundgrube San Fernando-Wolf lediglich über die 830-m-Sohle mit den weiteren gefluteten Grubenabschnitten der Verbundgrube verbunden sind. Daher bietet dieser Ausschnitt optimale Voraussetzungen für ein selbstständiges Modellgebiet und daran angepasste hydraulische Parameter.

Für die Ermittlung der Bergwerksgeometrie wurde der Schachtschnitt San Fernando-Wolf 1:5.000 verwendet und mit den aus weiteren Grubenrissen bekannten, höher gelegenen Verbindungssohlen ergänzt. Die geometrische Grundlage für das Modell unterscheidet sich daher in Details vom schematischen Übersichtsriß der Grube gemäß Abbildung 3-12 (Kapitel 3 Untersuchungsgebiet).

Im **ersten Szenario** wurden lediglich die tiefen Schächte (Schacht Wolf, Schacht San Fernando 1, 2, Blindschacht) und die tiefen Verbindungssohlen berücksichtigt. Im **zweiten Szenario** wurden zusätzlich die höher gelegenen Verbindungssohlen (300-m-Sohle Wolf als Verbindung zu 240-m-Sohle San Fernando und 450-m-Sohle Wolf als Verbindung zu 400-m-Sohle San Fernando) modelliert. Im **dritten Szenario** sind alle höher gelegenen und nicht-durchschlägigen Sohlen berücksichtigt. Das **vierte Szenario** berücksichtigt schließlich noch Erzrollen im oberen Abschnitt der Grube Wolf und stellt Verbindungen unter den nicht-durchschlägigen Sohlen dar. Dabei wurde ein mittlerer Abstand der Erzrollen zueinander von 10 m angesetzt. Dieser Abstand wurde aus der Begutachtung verschiedener Profilschnitte von höher gelegenen Sohlen der Verbundgrube San Fernando-Wolf zusammengestellt. Die Erzrollen können jedoch nach lokaler Gegebenheit allerdings auch näher beieinander oder weiter voneinander entfernt angeordnet sein.

Bei allen Modellen wurden Materialparameter wie Durchlässigkeitsbeiwert und Porosität von anstehendem Gebirge und versetzten Abbaubereichen, geothermaler Wärmefluss etc. untereinander nicht variiert, um eine direkte Aussage über die hydraulische Wirksamkeit der verschiedenen Bergwerkskomponenten zu erzielen.

Dieser Szenario-Entwurf dient der Darstellung und Überprüfung von grundlegenden Modellparametern und der Anpassung auf das weitere Vorgehen. Über die 2D-Szenarien kann die Verwendung und Anwendung verschiedener Elemente in FEFLOW getestet und auf Grund der starken Abstrahierung des Gebietes sowie der Parameter leicht auf Konsistenz überprüft werden.

5.2.1 Modellaufbau

Für die 2D-Szenario-Modellierung wurde ein Strömungs- und Wärmetransportmodell mit FEFLOW aufgebaut. Dafür wurde ein Superelemente-Gitter mit den Abmessungen von 2000m auf 2000 m mit einer Schichtdicke von 1 m erstellt. In diesem Gitter wurden alle, für die unterschiedlichen Szenarien benötigten Superelemente-Linien und -Punkte, an denen sich das Finite Elemente-Gitter ausrichtet, bereits vorangelegt. Diese Linien und Punkte sind notwendig, da sich das Finite Elemente-Gitter an ihnen ausrichtet und so eine spätere Eingabe der Schächte und Sohlen an deren genauer Position ermöglicht. In Abbildung 5-1 ist das verwendete Superelemente-Gitter basierend auf der Bergwerksgeometrie dargestellt.

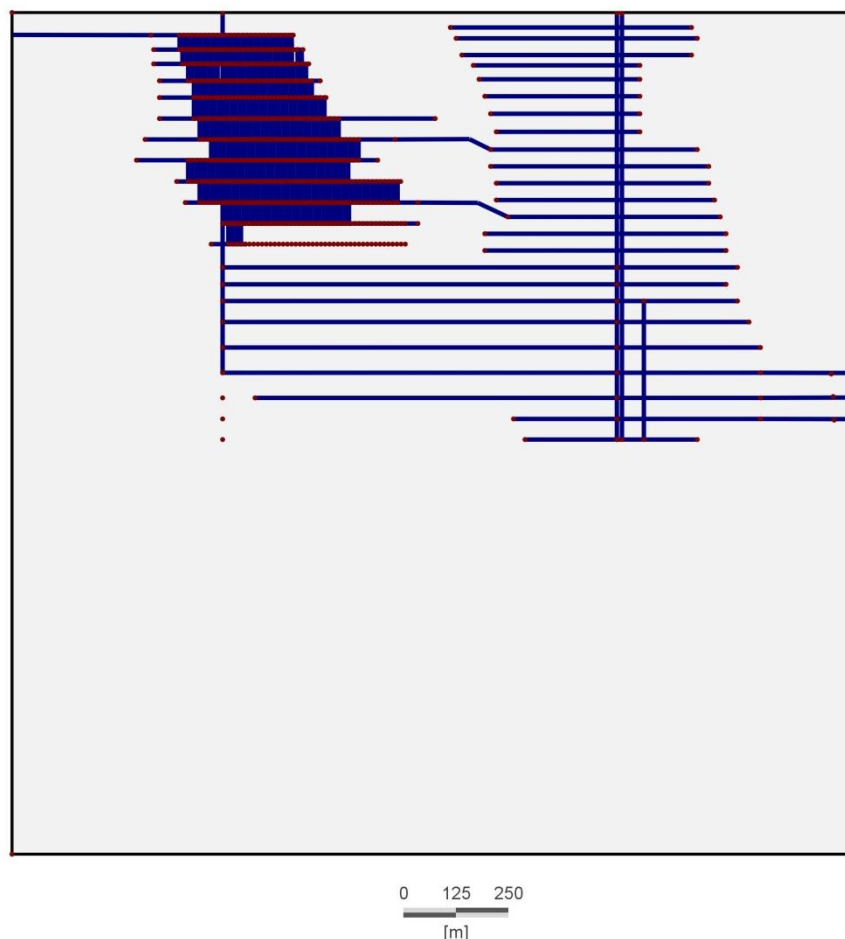


Abbildung 5-1 Superelemente-Gitter als Grundlage für die Szenario-Modellierung
(rot: vorangelegte Punktelemente, blau: vorangelegte Linienelemente)

Für die Erstellung des Finite-Elemente-Gitters wurde der Triangle Mesh Generator (Version 1.6, SHEWCHUK, 2005) verwendet. Das FE-Gitter umfasst rund 41.000 Finite Elemente und rund 21.200 Knoten (Abbildung 5-2).

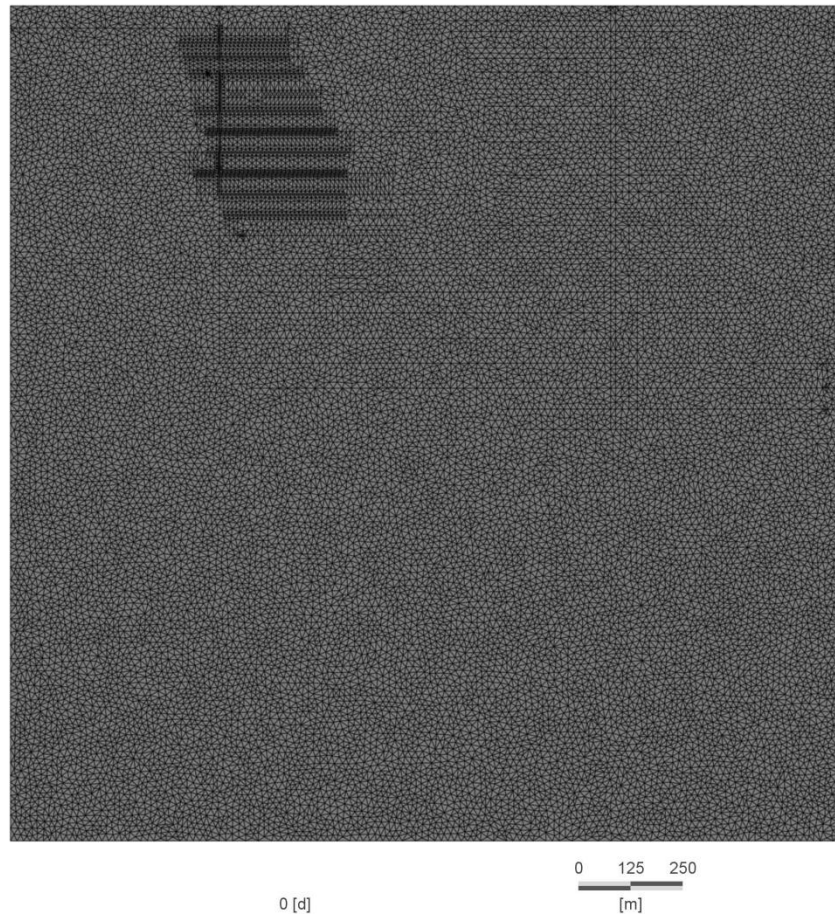


Abbildung 5-2 Finite Elemente-Gitter als Grundlage für die Szenario-Modellierung

Die 2D-Szenarien sind als vertikale Projektion mit einer senkrecht nach unten gerichteten Gravitation aufgebaut. Unter der Annahme von gesättigten Verhältnissen wird Strömung und Wärmetransport unter stationären, ungespannten Bedingungen modelliert.

Für alle 2D-Szenarien wurde mit den nachfolgenden Randbedingungen gearbeitet, wobei bei den Randbedingungen 2. und 4. Art (FEFLOW-Definition von Brunnen) negative Werte jeweils Zufluss/Eintrag in das Modellgebiet und positive Werte einen Abfluss/Austrag aus dem Modellgebiet darstellen:

Strömungsrandbedingungen

<u>1. Art</u>	Untere Modellgrenze:	1 [m]
	Tiefer Stollen Auslauf Grube Wolf	0 [m]
<u>2. Art</u>	Obere Modellgrenze:	$-1,22 \cdot 10^{-6}$ [m/d]
<u>4. Art</u>	Verbindung Grube San Fernando-Wolf zu Friedrich Wilhelm-Füsseberg auf der 830-m-Sohle (Brunnen)	-691 [m ³ /d]

Wärmerandbedingung

<u>1. Art</u>	Obere Modellgrenze:	8 [°C]
<u>2. Art</u>	Untere Modellgrenze:	-7162 [J/m ² d]
<u>4. Art</u>	Verbindung Grube San Fernando-Wolf zu Friedrich Wilhelm-Füsseberg auf der 830-m-Sohle	18 [°C]

Dabei stellt der Auslauf der Grube Wolf mit einem hydraulischen Druck von 0 m den Punkt mit dem niedrigsten Gradienten dar. Dadurch ist gewährleistet, dass die Entwässerung des gesamten Modells an diesem Punkt stattfindet. Mit einem hydraulischen Gradienten von 1 m wird auf der unteren Modellgrenze die vertikal nach oben verlaufende Strömungsrichtung über die Schächte nachgebildet. Die Grundwasserneubildung wird aus dem berechneten Jahresmittel der Jahre 2009 und 2010 mit 43,9 mm/a (Kapitel 4 Untersuchungen) für das Untersuchungsgebiet, bezogen auf die Modellgröße von 2 km² mit $1,22 \cdot 10^{-6}$ m/d angenommen. Der Brunnen mit einem Zufluss von 691 m³/d (8 l/s) stellt auf der 830-m-Sohle, der einzigen hydraulischen Verbindung zur angeschlossenen Grube Füsseberg-Friedrich Wilhelm, den Zulauf von Grubenwasser aus den weiteren Bergwerksbereichen sicher. Die Temperatur von 8°C am oberen Rand des Modells entspricht einer durchschnittlichen Grundwassertemperatur in Deutschland. Die untere Modellgrenze wird durch den geothermischen Wärmefluss mit 82,6 mW/m² (7162 J/m²d)

(CERMAK & RYBACH 1979) festgelegt, wodurch sich ein natürlicher geothermischer Gradient mit im Modell entwickelt.

Der Infiltrations-Verbindungsbrunnen ist mit einer Temperatur von 18°C festgelegt, davon ausgehend, dass auf Grund eigener Untersuchungen (OFNER & WIEBER 2008) und aus bekannter Literatur (u.a. WOLKERSDORFER 2008) sich bei turbulenten Strömungsbedingungen eine einheitliche Temperaturverteilung über die Tiefe im Bergwerk einstellt.

Eine Übersicht über die eingegebenen Parameter für die Discrete Feature Elements, welche Sohlen und Schächte des Bergwerkes repräsentieren, liefert Tabelle 5-1. Eine Differenzierung in die verschiedenen abgeteuften Durchmesser der Schächte erfolgte im Rahmen der 2D-Szenario-Modellierung nicht. Alle Schächte und Sohlen wurden vereinfacht mit einem runden Querschnitt betrachtet.

Tabelle 5-1 Eingabeparameter für die Modellierung der Schächte und Sohlen als DFE

Bergwerks-einheit	Fläche [m ²]	korr. hydr. Radius [m]	Wärmeleitfähigkeit Fluid [W/mK]	Wärmekapazität Fluid [10 ⁶ J/m ³ /K]
Schächte	7,07	1,83	0,65	4,20
Sohlen SF 40-280	3,0	0,87	0,65	4,20
Sohlen Wolf, SF ab 360	5,0	1,12	0,65	4,20
Sohlen SF ab 600	6,5	1,27	0,65	4,20
Erzrollen	1,0	0,50	0,65	4,20

Die Materialparameter wurden wie folgt gewählt (Tab. 5-2):

Tabelle 5-2 Materialparameter

Bergwerks-bereich	Durchlässigkeit [m/s]	Porosität [-]	Wärmeleitfähigkeit Gestein [W/mK]	Wärmekapazität Gestein [10 ⁶ J/m ³ /K]
anstehendes Gestein	$1 \cdot 10^{-7}$	0,05	3,0	2,52
versetzter Abbaubereich	$1 \cdot 10^{-4}$	0,35	3,0	2,52
obertägig aufgelockerte Zone	$1 \cdot 10^{-4}$	0,35	3,0	2,52

Der rückverfüllte Abbaubereich hat mit einer Durchlässigkeit von $1 \cdot 10^{-4}$ m/s eine gegenüber dem umgebenden Gebiet ($1 \cdot 10^{-7}$ m/s) deutlich erhöhte

Durchlässigkeit. Die Porosität des nicht-aufgelockerten Gebirges wurde im Rahmen der 2D-Modellierung mit 0,05 abgeschätzt (in Anlehnung an SPITZ & MORENO 1996), die Porosität des rückverfüllten Abbaubereiches wurde mit 0,35 (WIEBER et al. 2011) angenommen.

In Abbildung 5-3 ist die Verteilung der gut durchlässigen, versetzten Abbaubereiche zur schlecht durchlässigen Gesteinsmatrix dargestellt. Um eine Versickerung des Niederschlages in den Untergrund zu ermöglichen und die durch den Bergbau hervorgerufene, obertägige Auflockerung des anstehenden Gesteins darzustellen, wurden die am oberen Rand des Modells liegenden Elemente ebenfalls mit einer erhöhten Durchlässigkeit und Porosität versehen. Dabei wurden zur Vereinfachung die Werte für die versetzten Abbaubereiche verwendet.

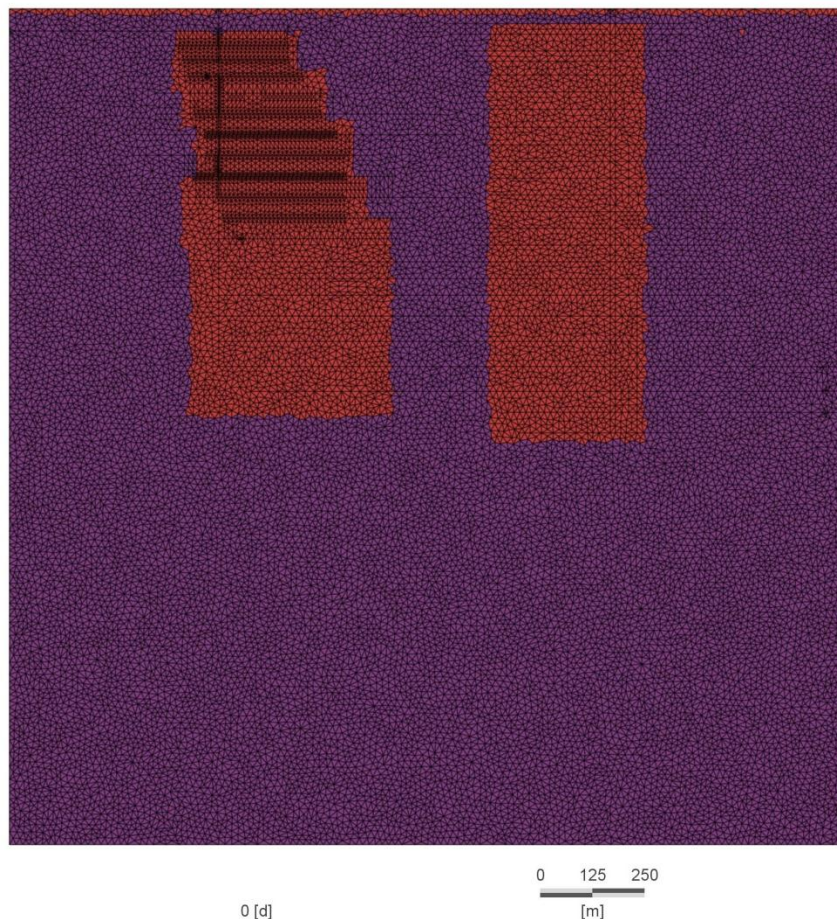


Abbildung 5-3 Position der rückversetzten Abbaubereiche und obertägigen Auflockerungszone (rot) mit, gegenüber der Matrix (violett), erhöhter Durchlässigkeit

5.2.2 Szenario-Modelle

5.2.2.1 Szenario 1: tiefe Verbindungssohlen

In Abbildung 5-4 ist die Position der als Discrete Feature Elements modellierten Schächte und Sohlen dargestellt.

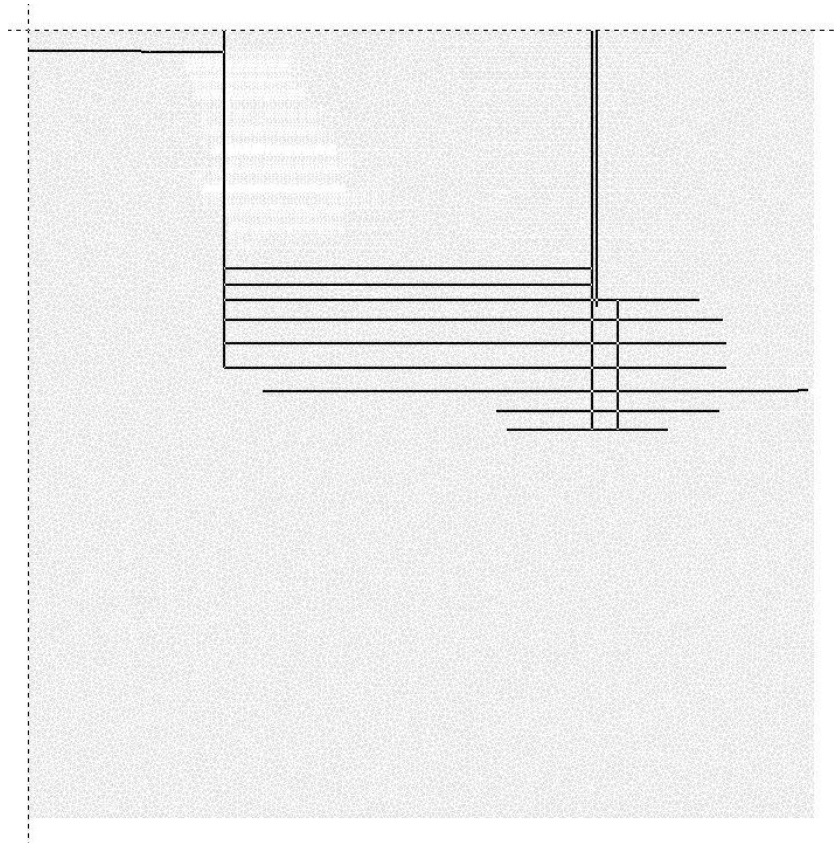


Abbildung 5-4 Position der verwendeten DFE in Szenario 1

Die daraus resultierende hydraulische Druckspiegelhöhe und Temperaturverteilung im Grubengebäude geben Abbildung 5-5 und 5-6 wieder.

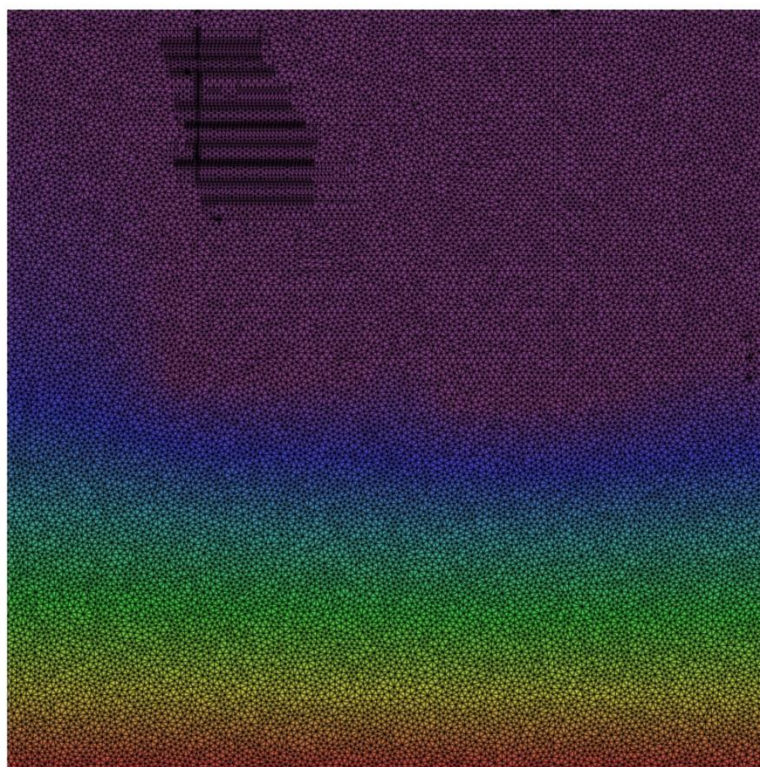
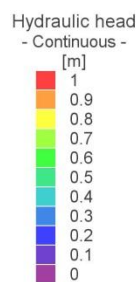


Abbildung 5-5 hydraulische Druckspiegelhöhenverteilung (hydraulic head) in Szenario 1

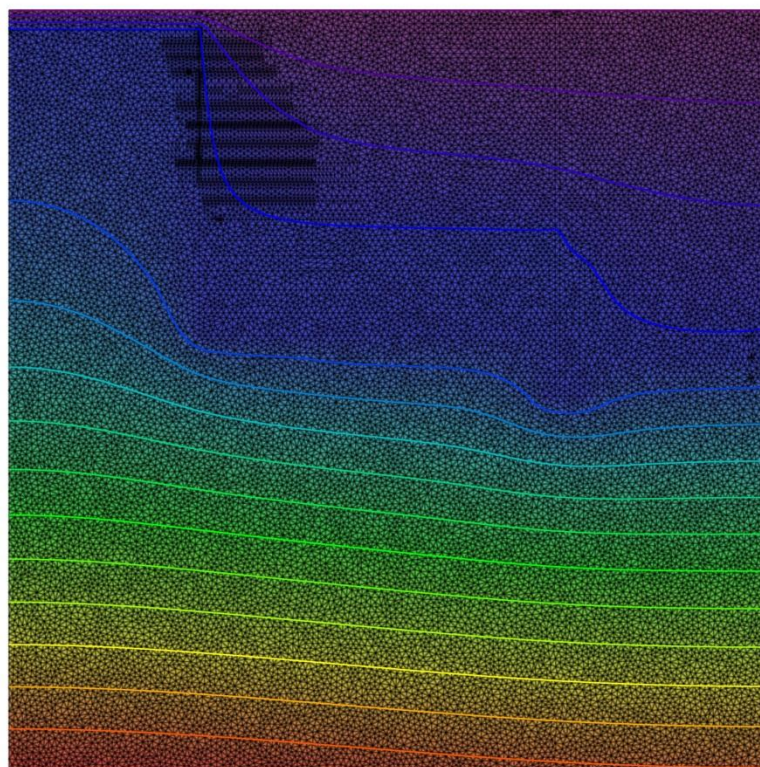
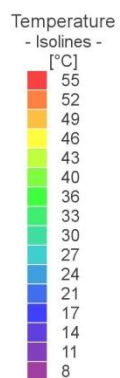


Abbildung 5-6 Temperaturverteilung in Szenario 1

5.2.2.2 Szenario 2: alle Verbindungssohlen

In Abbildung 5-7 ist die Position der als Discrete Feature Elements modellierten Schächte und Sohlen dargestellt.

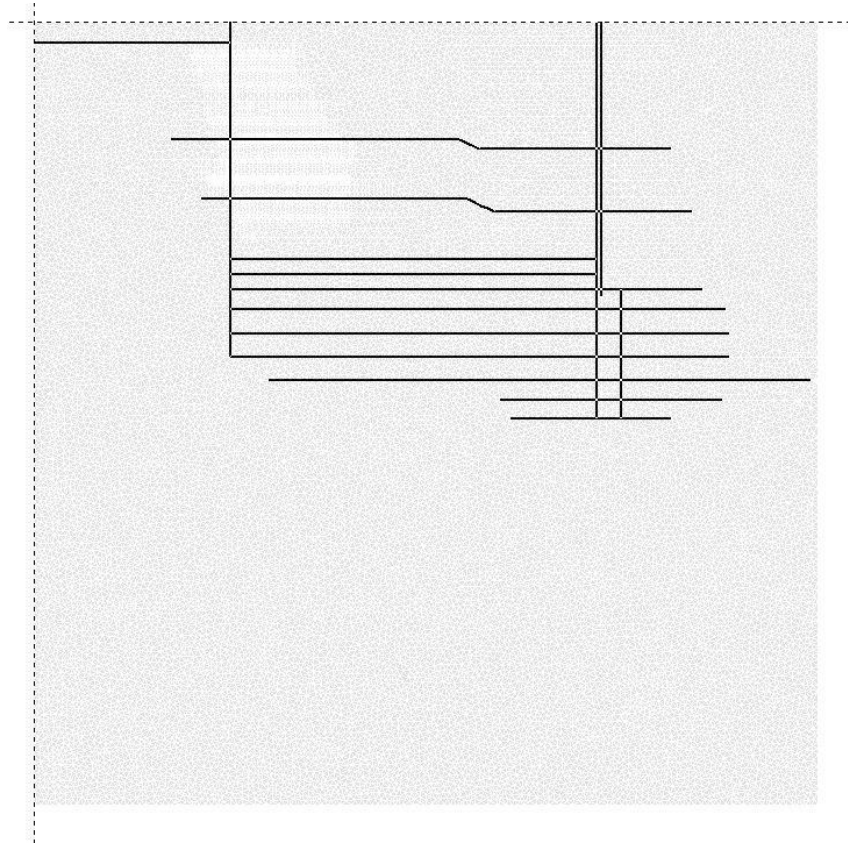


Abbildung 5-7 Position der verwendeten DFE in Szenario 2

Die daraus resultierende hydraulische Druckspiegelhöhe und Temperaturverteilung im Grubengebäude geben Abbildung 5-8 und 5-9 wieder.

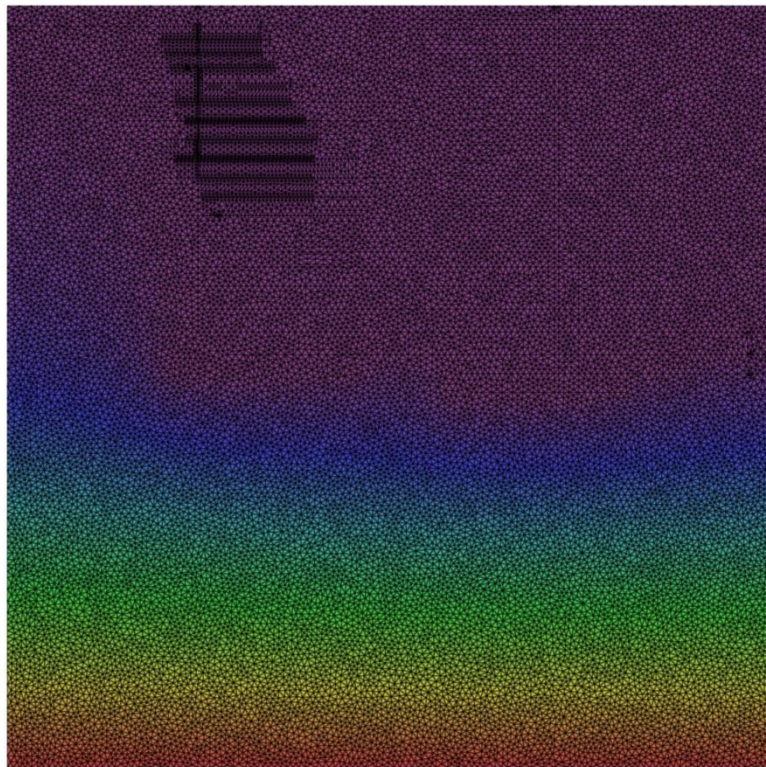
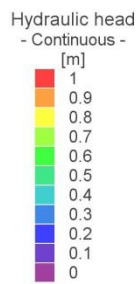


Abbildung 5-8 hydraulische Druckspiegelhöhenverteilung (hydraulic head) in Szenario 2

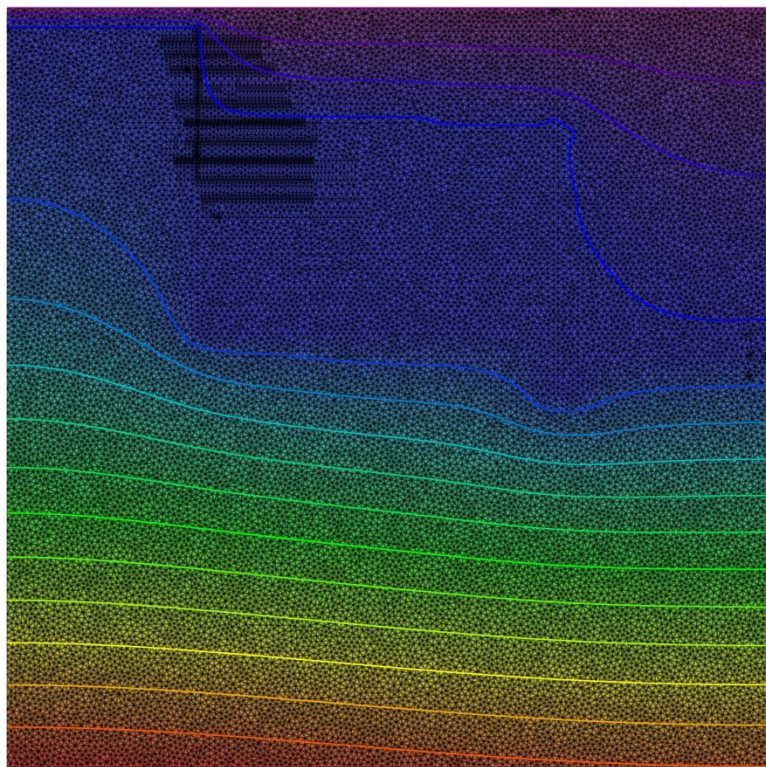
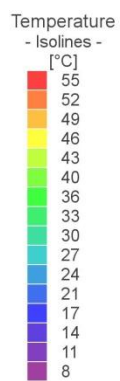


Abbildung 5-9 Temperaturverteilung in Szenario 2

5.2.2.3 Szenario 3: alle Sohlen

In Abbildung 5-10 ist die Position der als Discrete Feature Elements modellierten Schächte und Sohlen dargestellt.

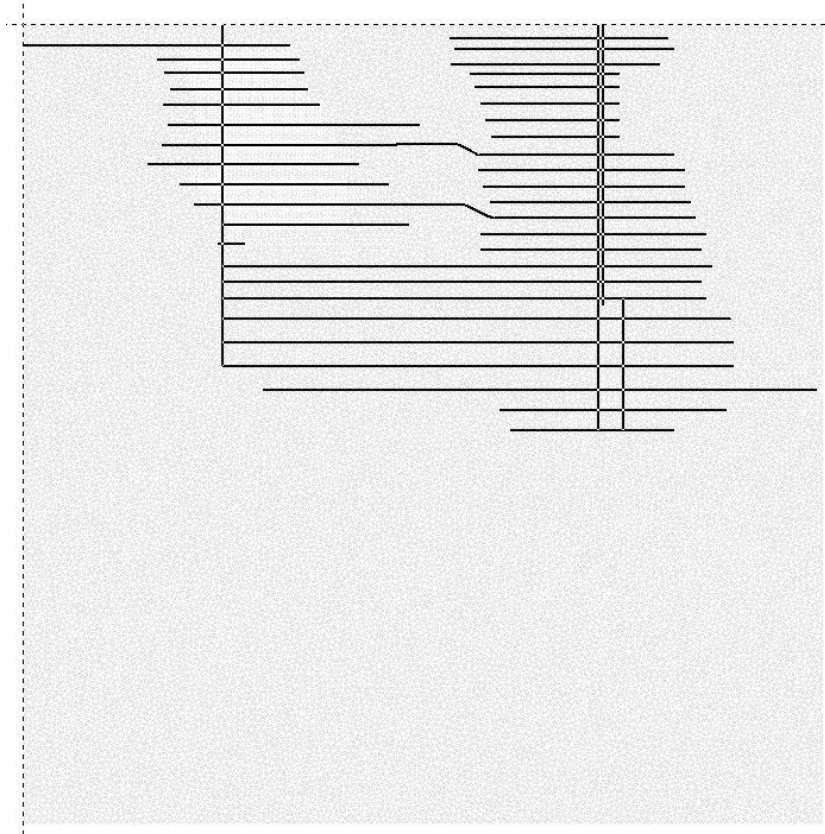


Abbildung 5-10 Position der verwendeten DFE in Szenario 3

Die daraus resultierende hydraulische Druckspiegelhöhe und Temperaturverteilung im Grubengebäude geben Abbildung 5-11 und 5-12 wieder.

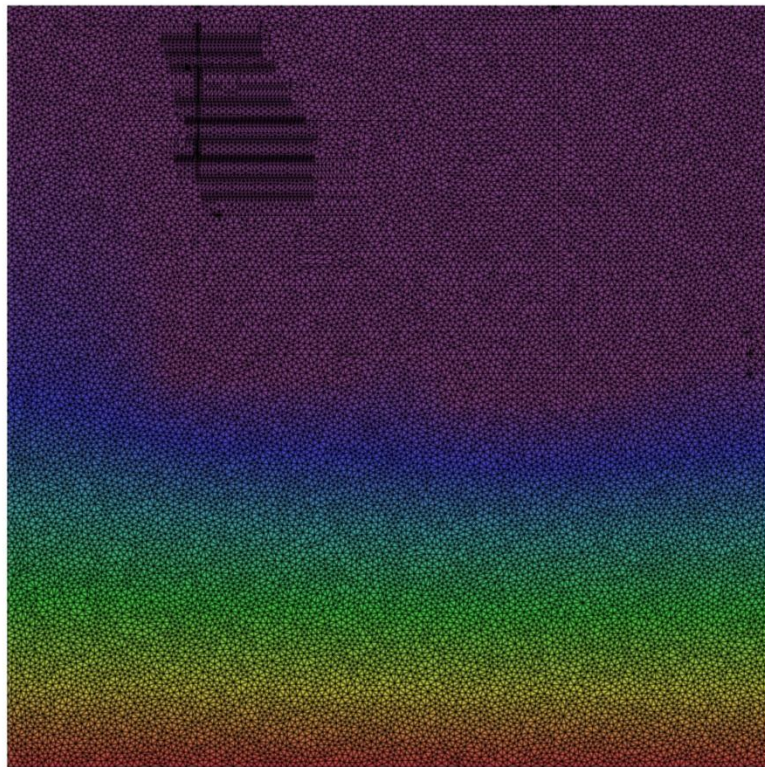
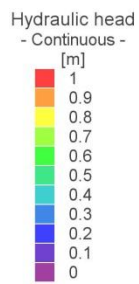


Abbildung 5-11 hydraulische Druckspiegelhöhenverteilung (hydraulic head) in Szenario 3

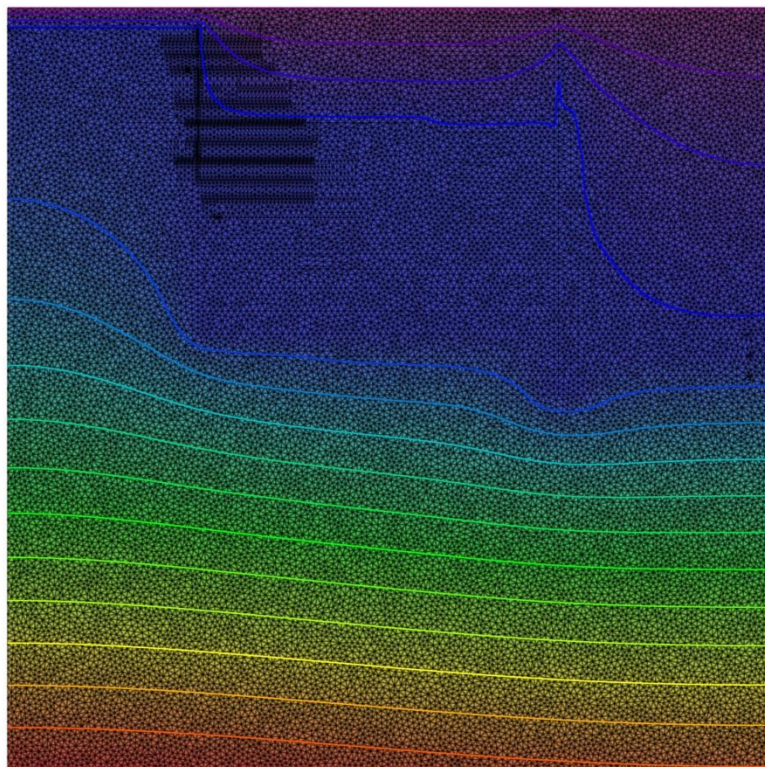
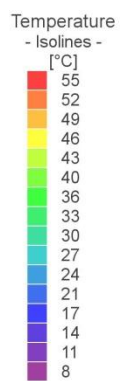


Abbildung 5-12 Temperaturverteilung in Szenario 3

5.2.2.4 Szenario 4: Erzrollen

In Abbildung 5-13 ist die Position der als Discrete Feature Elements modellierten Schächte und Sohlen dargestellt.

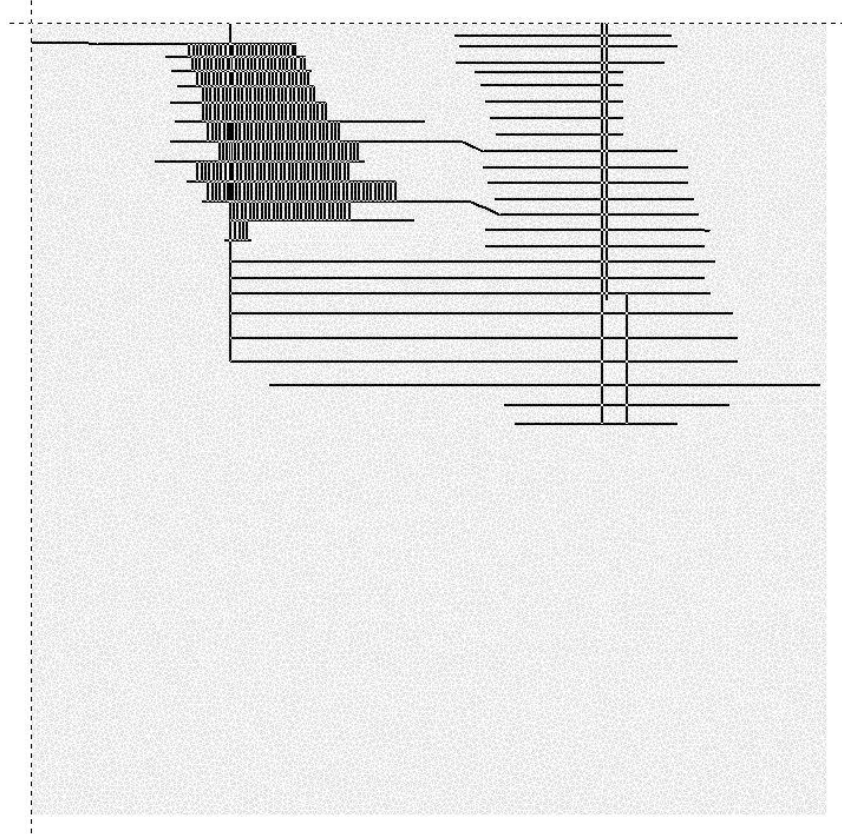


Abbildung 5-13 Position der verwendeten DFE in Szenario 4

Die daraus resultierende hydraulische Druckspiegelhöhe und Temperaturverteilung im Grubengebäude geben Abbildung 5-14 und 5-15 wieder.

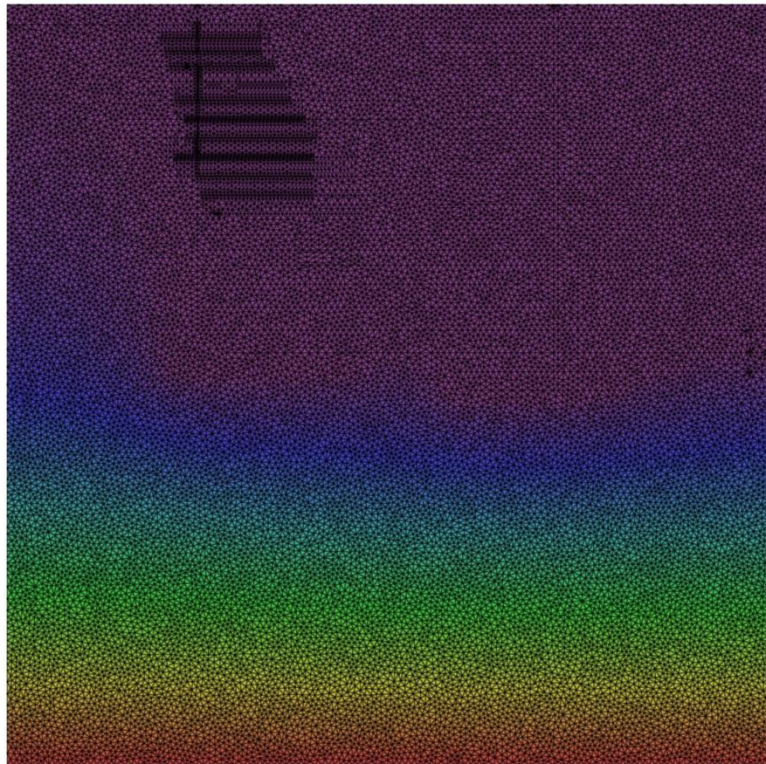
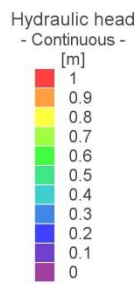


Abbildung 5-14 hydraulische Druckspiegelhöhenverteilung (hydraulic head) in Szenario 4

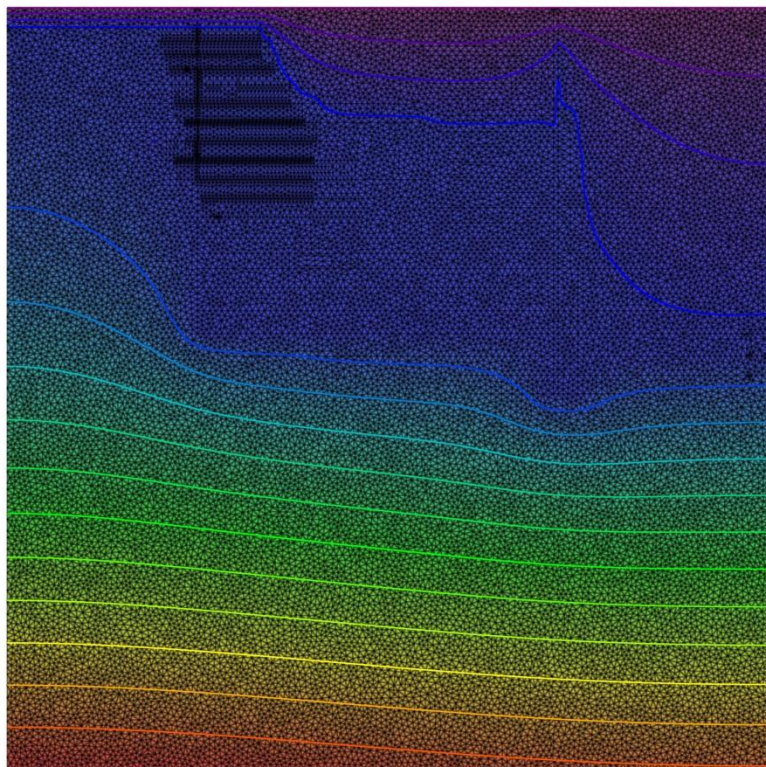
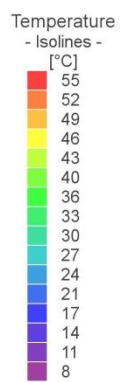


Abbildung 5-15 Temperaturverteilung in Szenario 4

5.2.3 Auswertung 2D-Szenario-Modellierungen

Aus den in Kapitel 5.1.2 dargestellten Ergebnissen der Szenario-Modellierungen zeigt sich, dass bei den verwendeten Randbedingungen in allen Modellen eine einheitliche Verteilung der hydraulischen Druckspiegelhöhe vorliegt. Im gesamten, hydraulisch miteinander verbundenen Abschnitt des Grubengebäudes hat sich die am Auslauf der Grube Wolf angesetzte Druckspiegelhöhe von 0 m ausgebildet.

Die Temperatur im Grubengebäude ist in allen Szenarien im Wesentlichen auf einem Niveau von 18°C eingestellt. Hier zeigt sich jedoch, dass im Vergleich der Szenarien 1 und 2 beispielsweise die Verwendung aller hydraulischen Verbindungssohlen einen deutlichen Unterschied zur Folge hat. In Szenario 1 hat die an der Oberfläche des Modells angesetzte Temperatur von 8°C im Bereich der Grube San Fernando auf Grund der obertägigen Auflockerungszone und den relativ dicht und nahe beieinander angesiedelten Schächten (große Zutrittsflächen) einen relativ großen Einfluss auf die Temperatur in den Schächten San Fernando. Dieser Einfluss wird erst ab der obersten verbindenden Sohle ausgeglichen. Für die Übertragung in ein 3D-Modell der Grube bedeutet dies, dass nach die Wichtigsten, in der gesättigten Zone (unterhalb des Niveaus des Neuen Förderstollens Grube Wolf, 256 m NN) befindlichen Verbindungssohlen in das Modell eingebaut werden sollten.

Ein Vergleich der Szenarien 3 und 4 mit Szenario 2 zeigt, dass die Verwendung der oberen, nicht durchschlägigen Verbindungssohlen die Temperaturverteilung im Bergwerk lediglich verfeinert, bzw. vervollständigt. Mit der Verwendung der oberen Sohlen ist gewährleistet, dass über die gesamte in der gesättigten Zone befindliche Länge der Schächte die gleiche Temperaturverteilung vorliegt. Dies zeigt, dass mit Hilfe der 2D-Szenarien die im Gelände gemessenen und aus der Literatur bekannten charakteristischen Temperaturprofile der Schächte (Kapitel 4, Untersuchungen) unter turbulenten Strömungsbedingungen wiedergegeben werden können. Für die Übertragung in das 3D-Modell bedeutet dies, dass zu Gunsten einer Vereinfachung der Geometrie auf diese Sohlen verzichtet werden kann, da auch ohne deren Eingabe eine plausible Modellierung möglich ist.

Die Modellierung der Erzrollen, welche hydraulische Verbindungen unter den nicht-durchschlägigen Sohlen untereinander herstellen, ist bei Betrachtung der

Szenarien 3 und 4 hingegen nicht notwendig. Die Sohlen sind über die Schächte miteinander verbunden. Dies hat die daraus resultierenden hydraulischen Bedingungen zur Folge und die Erzrollen liefern keine zusätzlich notwendige Information.

Die Verteilung der Temperatur und der Druckspiegelhöhen in den Modellen belegt, dass die der Modellierung zu Grunde liegende Annahme von turbulenten Strömungsbedingungen im Grubengebäude zutreffend ist und über die Verwendung von DFE nachgebildet werden kann. Dies ist ebenso ein Hinweis darauf, dass die Hydraulik der DFE als kommunizierende Röhren funktioniert.

Die Wasserbilanz aller Modelle ist ausgeglichen, am Auslauf der Grube Wolf, dem Punkt mit dem niedrigsten hydraulischen Druckspiegel im Modell entwässert der gesamte modellierte Grubenausschnitt. Aus der zulaufenden Wassermenge über die Verbindungssohle nach Friedrich Wilhelm und einem gewissen Anteil von Niederschlag erhöht sich die auslaufende Wassermenge. Dies zeigt, dass das System zu einem gewissen Teil von Niederschlag beeinflusst ist und entspricht den am Messwehr der Grube Wolf aufgezeichneten Daten (ohne Berücksichtigung der zeitlichen Verzögerung).

Grundsätzlich ist festzustellen, dass Strömung- und Wärmetransport im Wesentlichen auf bzw. innerhalb der Sohlen und Schächte stattfindet. Die an der Verbindung zu Grube Friedrich-Wilhelm-Füsseberg mit einer Temperatur von 18°C zulaufende Wassermenge trifft am Blindschacht auf die erste hydraulische Verbindung in Grube San Fernando-Wolf. Von dort verteilen sich Temperatur und Strömung auf die benachbarten Schächte 1 und 2. Von dort ausgehend wiederum findet eine Verteilung auf alle Verbindungssohlen statt. Gemäß dem Gesetz von DARCY findet eine Strömung von hohem zu niedrigem Gradienten statt, so dass Strömung und Temperatur über Schacht Wolf aufsteigen und die Grube am Auslauf Wolf verlassen.

In den Bereichen zwischen den Sohlen und zwischen den Schächten ist die Strömungsgeschwindigkeit nahezu Null, die Temperatur hingegen verteilt sich auch in diesen Bereichen auf Grund der Wärmeleitfähigkeit des Gesteins bis zu einer gewissen Ausdehnung (dm bis m-Bereich) innerhalb des Gebirges. Da die Sohlen sehr dicht aufeinander folgen hat sich im gesamten zwischen den Sohlen befindlichen Gestein bzw. rückverfülltem Abbaubereich eine gleichmäßige

Temperaturverteilung ausgebildet. Hierbei spielen die höhere Porosität und bessere Durchlässigkeit dieser rückverfüllten Abbaubereiche eine wichtige Rolle. Die Tatsache, dass sich unterhalb des durch den Bergbau beeinflussten Gebirges gemäß dem natürlichen geothermischen Gradienten, der entsprechenden Wärmeleitfähigkeit und Durchlässigkeit des Gebirges eine mit der Tiefe zunehmende Temperaturverteilung ausbildet, zeigt, dass die thermohydraulischen Bedingungen des Grubengebäudes bis zu einem gewissen Maße unabhängig von Strömungs- und Wärmetransport im umgebenden Kluftgrundwasserleiter sind. Die thermohydraulischen Verhältnisse des gefluteten Bergwerkes können als mehr oder weniger eigenständiges hydraulisches System mit Berührungspunkten zum umgebenden Gestein durch z.B. Wasserzutritt über Klüftung, Grundwasserneubildung etc. verstanden werden kann.

Für die Übertragung in ein 3D-Modell bedeutet das, dass der devonische Kluftgrundwasserleiter weitgehend unabhängig von der Bergwerkshydraulik fungiert und daher als Ausschnitt mit verallgemeinerten Parametern angesetzt werden kann. Die Haupt-Hydraulik des Systems wird über die nach dem Prinzip der kommunizierenden Röhren funktionierenden Schächte und Sohlen aufgebaut.

In Tabelle 5-3 sind die modellierten Strömungsgeschwindigkeiten in verschiedenen Bereichen des Grubengebäudes zusammengestellt.

Tabelle 5-3 Zusammenstellung der modellierten Strömungsgeschwindigkeiten in verschiedenen Bereichen des Grubengebäudes

	Szenario 1		Szenario 2		Szenario 3		Szenario 4	
	m/d	mm/s	m/d	mm/s	m/d	mm/s	m/d	mm/s
Wolf, Neuer Förderstollen	106,38	1,23	106,38	1,23	106,38	1,23	106,38	1,23
Wolf Schacht	97,77	1,13	97,77	1,13	97,77	1,13	59,30	0,69
Erzrolle							5,01	0,06
Sohle Wolf oben					2,5E-06	2,9E-08	14,30	0,17
Wolf 300-m- Verbindungssohle			14,34	0,17	15,60	0,18	13,20	0,15
Sohle San Fernando oben			2,8E-09	3,2E-11	1,5E-06	1,7E-08	1,6E-06	1,9E-08
Schacht 2	37,80	0,44	37,70	0,44	38,70	0,45	38,60	0,45
Zulauf 830mSohle	106,30	1,23	106,31	1,23	106,30	1,23	106,30	1,23

grau hinterlegt: im jeweiligen Szenario nicht verwendet

Es zeigt sich, dass die über die 830-m-Verbindungssohle zur Grube Friedrich Wilhelm-Füsseberg modellierte und in das Grubengebäude gerichtete Strömungsgeschwindigkeit zum einen in allen Szenarien gleich groß ist und zum anderen auch auf Niveau des Auslaufes, des Neuen Förderstollens der Grube Wolf erzielt wird.

Ebenso nahezu identisch ist die vertikale Aufstiegsgeschwindigkeit des Grubenwassers in Schacht 2 für alle Szenarien. Danach tritt eine Differenzierung je nach gewähltem Szenario ein. Für die Szenarien 1 bis 3 ist die vertikal nach oben gerichtete Strömungsgeschwindigkeit in Schacht Wolf nahezu gleich groß. Der Wert wurde im Modell unwesentlich unterhalb des Niveaus des Neuen Förderstollens bestimmt und entspricht damit in etwa der im Gelände gemessenen Lokation. Die modellierte Geschwindigkeit korrespondiert gut mit der gemessenen Geschwindigkeit (Kapitel 4 Untersuchungen). Unter Berücksichtigung der bei der Geländemessung auftretenden Problematik (Orientierung der Messung zur Schachtinnenseite etc.) passen diese Ergebnisse gut zueinander. Lediglich in Szenario 4 ist die vertikale Geschwindigkeit in Schacht Wolf geringer als in den weiteren Szenarien, dafür findet auf Grund der zusätzlich modellierten Fließwege über die Erzrollen eine stärkere Geschwindigkeitsverteilung statt. Auf dem Niveau des Neuen Förderstollens sind hier jedoch auch die modellierten Geschwindigkeiten verglichen mit den anderen Szenarien identisch.

Es ist deutlich zu erkennen, dass bei Berücksichtigung der oberen Sohlen der Grube San Fernando (oberhalb der ersten hydraulischen Verbindung) nahezu keine Strömung stattfindet, denn diese Sohlen sind auf Grund fehlender Verbindungen nicht in die Gesamthydraulik eingebunden. Für die oberen Sohlen der Grube Wolf ist dies in Szenario 3 der Fall, jedoch werden diese Sohlen hydraulisch in das Modell eingebunden, wenn Kontakte über die Erzrollen zwischen den Sohlen hergestellt werden. Für die Gesamthydraulik hat diese Geschwindigkeitsaufteilung jedoch keine Relevanz, da die modellierten Gesamt-Ergebnisse aller Szenarien übereinstimmen.

Für die Übertragung in das 3D-Modell bedeutet dies, dass unter Berücksichtigung des gewählten Maßstabes des Modells beispielsweise Erzrollen nicht berücksichtigt werden müssen bzw. können. Sie verändern die Gesamthydraulik nicht und würden lediglich bei einer kleinmaßstäblichen Betrachtung, beispielsweise innerhalb eines gewählten Ausschnittes aus der Verbundgrube, relevant werden.

5.3 3D-Modell der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm

5.3.1 Allgemeiner Modellaufbau

Für die Erstellung des dreidimensionalen thermohydraulischen Modells wurde die Geometrie der Bergwerke miteinander in Übereinstimmung gebracht. Da ein wesentlicher Betrachtungspunkt des Modells der Auslauf der Grube Wolf mit einer Höhe von 256 m NN darstellt, wurden alle topographischen Höhen ausgehend von den Rissen der Grube Wolf übernommen.

Die Modellierung in FEFLOW erfolgt über die Erstellung von Slices und daraus resultierenden Layern (Abbildung 5-16). Auf den Slices erfolgt z.B. die Definition von Randbedingungen, während die Layer u.a. mit Materialeigenschaften belegt werden.

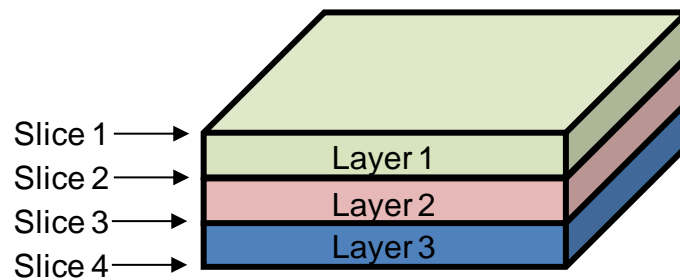


Abbildung 5-16 Aufteilung eines 3D-Modells in Layer und Slices

Die Aufteilung des Modells in Slices erfolgte an Hand der Höhenangaben aus dem Schachtschnitt 1:5.000 für das Bergwerk San Fernando-Wolf aus dem Jahr 1959 (nachgearbeitet bis 1963) und ist in Tabelle 5-4 dargestellt. Auf den Slices des 3D-Modells sind jeweils die wichtigsten hydraulisch wirksamen Bergwerkssohlen dargestellt, der Bereich zwischen den Slices (somit die Layermächtigkeit) stellt den Abstand der Sohlen untereinander dar.

Für eine vereinfachte, aber dennoch möglichst präzise und aussagekräftige Geometrie wurden Sohlen mit gleichen oder ähnlichen topographischen Höhen auf einem Slice zusammengefasst. Sohlen, welche von einer Grube zur anderen durchschlägig sind, aber nicht auf einem Höhenniveau angesiedelt sind (und z.B. über einen Bremsberg verbunden sind) wurden vereinfacht auf einem Slice zusammengefasst. Dabei handelt es sich bei Grube Wolf um die Stollensohle bis zur

300-m-Sohle und analog bei Grube San Fernando um den Tiefen Stollen bis zur 240-m-Sohle. Des Weiteren wurde die 400-m-Sohle der Grube Wolf auf einem Slice mit der 450-m-Sohle der Grube San Fernando modelliert. Für die Grube Friedrich Wilhelm-Füsseberg wurden der Friedrich Wilhelm Erbstollen und der Füsseberger Erbstollen zusammengelegt.

Um höhenkonsistent zu bleiben und z.B. den Grubenwasserspiegel in allen Gruben auf dem gleichen Höhenniveau realisieren zu können, wurden auch für die anschließenden Gruben Friedrich Wilhelm und Füsseberg die topographischen Höhen der Grube Wolf verwendet. So beginnt beispielsweise die als einzige Verbindung der Verbundgrube Wolf-San Fernando zur Grube Friedrich Wilhelm-Füsseberg durchschlagende 830-m-Sohle (Bezeichnung für die Grube San Fernando) auf einer topographischen Höhe von -541 m NN und erreicht die Schächte Friedrich Wilhelm als 17.Sohle mit einer Höhe von -555 m NN. Diese Höhe wurde für das Modell um 14 m auf nun -541 m NN korrigiert. Damit die Abstände der weiteren Sohlen der Grube Friedrich Wilhelm-Füsseberg konstant zueinander sind und der Realität entsprechen, wurden alle Höhenangaben ebenfalls um den Betrag von 14 m korrigiert.

Für die Darstellung und Ermittlung der räumlichen Lage der Sohlen wurden folgende Übersichtsriss im Maßstab 1:2.000 verwendet:

Eisenerzbergwerk San Fernando-Wolf

- 1960 Neunkirchen 8
- 1961 Neunkirchen 7, 12

Eisenerzbergwerk Füsseberg-Friedrich Wilhelm

- 1959 Neunkirchen 1, 2
- Daaden 16, 21
- Elkenroth 14, 20
- 1960 Daaden 11
- Elkenroth 25
- Betzdorf 5
- 1961 Elkenroth 15

Die Übersichtsriss wurden zusammengefügt und auf die TK 1:25.000 Blatt 5213 Betzdorf (2008) georeferenziert. Damit der Verlauf der Sohlen in FEFLOW

eingefügt werden kann, wurden in ArcGIS shape-files mit den zugehörigen, auf die einzelnen Slices bezogenen Informationen der Sohlen erstellt. Da nicht alle tiefen Sohlen auf den Übersichtsrisen dargestellt werden, sondern nur für relevante Sohlen der exakte Verlauf dargestellt wird, wurden die fehlenden Informationen aus den Militärperspektiven 1:2.000 der jeweiligen Gruben ergänzt. Es zeigt sich, dass der Verlauf der tiefen Sohlen im Wesentlichen parallel zueinander angeordnet ist.

Da auf den Übersichtsrisen die höher gelegenen Sohlen, wie z.B. der Neue Förderstollen Grube Wolf und der Erbstollen Füsseberg-Friedrich Wilhelm, nicht dargestellt werden, wurden diese aus der Militärperspektive San Fernando-Wolf 1:2.000 sowie der Militärperspektive Füsseberg-Friedrich Wilhelm-Glaskopf rekonstruiert und in ArcGIS als shape-file erstellt und eingefügt.

Tabelle 5-4 Aufteilung des Modells in Slices an Hand der Bergwerksgeometrie, sowie die Position der Bergwerkssohlen auf den Slices

Slice	Layer- mächtigkeit [m]	Tiefe [m NN]	Wolf Sohle	San Fernando Sohle	Friedrich Wilhelm Sohle	Füsseberg Sohle	Glaskopf Sohle
1	-	256	Neuer Förderst.				
2	16	240					
3	204	36	300	240			
4	150	-114	450	400			
5	88	-202			494	486	486
6	29	-231		520			
7	40	-271		560			
8	19	-290			594	573	573
9	29	-319		600			
10	42	-361		650			
11	35	-396			694	672	672
12	25	-421		710			
13	21	-442			744	728	728
14	39	-481		770	16.	16.	16.
15	60	-541		830	17.	17.	17.
16	50	-591		880	18.	18.	
17	49	-640			19.	19.	
18	60	-700					
19	300	-1000					
20	500	-1500					

Modellbasis

grau hinterlegt: Sohle auf diesem Slice nicht existent

Für die Erstellung des 3D-Modells der gesamten Verbundgrube wurden nur die wesentlich zur Hydraulik beitragenden Schächte verwendet. Für die Grube Wolf wurde nur der Schacht Wolf in das Modell eingefügt, da sich aus der hydrochemischen Charakterisierung und Modellierung gezeigt hat, dass der Alte Schacht nicht oder nur unvollständig an die Hydraulik der Verbundgrube angeschlossen ist. Für den Blindschacht zeigt sich, dass nur sehr geringe vertikale Fließgeschwindigkeiten vorliegen und dieser Schacht daher auch kein wesentlicher Bestandteil der Gesamthydraulik ist. Für die Grube San Fernando wurden sowohl Schacht 1 als auch der Blindschacht verwendet. Letzterer stellt lediglich die in der räumlichen Lage versetzte Fortsetzung von Schacht 1 dar. Zusätzlich wurde der, die gesamte Tiefe des Bergwerkes erfassenden Schacht 2 in das Modell eingefügt. Für Grube Friedrich Wilhelm wurden die beiden Hauptschächte Schacht 1 und Schacht 2 verwendet, für Grube Füsseberg lediglich der Hauptschacht Füsseberg und für Grube Glaskopf der Hauptschacht Glaskopf.

In Tabelle 5-5 sind die im Modell verwendeten Schächte sowie deren Reichweite in der Tiefe dargestellt.

Tabelle 5-5 Aufteilung des Modells in Slices an Hand der Bergwerksgeometrie, Reichweite der Schächte

Slice	Layer- mächtigkeit [m]	Tiefe [m NN]	Wolf	San Fernando			Friedrich Wilhelm		Füsseberg	Glaskopf
			Schacht	Schacht 1	Schacht 2	Blind- schacht	Schacht 1	Schacht 2	Schacht	Schacht
1	16	256								
2	16	240								
3	204	36								
4	150	-114								
5	88	-202								
6	29	-231								
7	40	-271								
8	19	-290								
9	29	-319								
10	42	-361								
11	35	-396								
12	25	-421								
13	21	-442								
14	39	-481								
15	60	-541								
16	50	-591								
17	49	-640								
18	60	-700								
19	300	-1000								
20	500	-1500								

grau hinterlegt: Schacht in dieser Teufe nicht/nicht mehr vorhanden

Für die allgemeine Ermittlung von Position und Größe der Abbaubereiche wurden Informationen aus den Übersichtsrisen 1:2.000 zusammengestellt. Auf diesen Rissen sind nicht alle Sohlen und somit auch nicht alle Abbaubereiche eingetragen. In 2D-Schachtschnitten hingegen ist der Abbaubereich vollständig im vertikalen Schnitt dargestellt. Darauf ist ersichtlich, dass sich die Größe des Abbaubereichs, gerade auf den tieferen Bergwerkssohlen nicht wesentlich voneinander unterscheidet. Die in diesen Übersichtsrisen ebenfalls nicht dargestellten höher liegenden Abbaubereiche wurden gemäß den Schachtschnitten 1:5.000 sowie der Militärperspektiven 1:2.000 der jeweiligen Bergwerksabschnitte recherchiert. Bei der Erstellung der Abbaubereiche wurde weiterhin die Gangflächenentwicklung gemäß BORNHARDT (1910) und FENCHEL et al. (1985) berücksichtigt.

Auf Grund der Ankopplung der DFE an das Gebirge in Abhängigkeit der umgebenden Gesteinsdurchlässigkeit ist es nicht möglich, die Abbaubereiche so im Modell umzusetzen, wie diese aus den Grubenrisen direkt recherchiert wurden. Als DFE umgesetzte Schächte und Sohlen in einem gut durchlässigen Abbaubereich fungieren nicht mehr wie bezweckt als Schächte und Sohlen, da die Ankopplung der DFE an das Gebirge sehr gut ist und daher das eigentlich über die Schächte und Sohlen zu transportierende Grubenwasser in das umgebende Gestein abgeführt ist. Daher wurden unter Beibehaltung von grundsätzlicher Position und Größe der recherchierten Abbaubereiche dies im Modell so angesetzt, dass ein Abbaubereich für alle relevanten Layer entwickelt wurde, der nicht die Schächte und Sohlen erfasst, jedoch nach wie vor zu einer Auflockerung des Gebirges und sekundären Erhöhung der Durchlässigkeit beiträgt. Der Abbaubereich wurde bis Layer 17 umgesetzt, unterhalb ist nicht aufgelockertes, anstehendes Gebirge anstehend, welches nicht durch Bergwerkstätigkeiten erschlossen worden ist.

Weiterhin ist zu berücksichtigen, dass durch den obertägig begonnenen Bergbau durch Pingen das Gebirge aufgelockert ist und bevorzugte Wegsamkeiten für die Versickerung von Niederschlagswasser darstellt.

Die Layer-bezogene Zuweisung des Abbaubereiches ist in Tabelle 5-6 zusammengestellt, die Lage des Abbaubereichs im Modell ist in Abbildung 5-17 dargestellt.

Tabelle 5-6 Zuweisung der Abbaubereiche auf den jeweiligen Sohlen/Slices

Slice	Layer- mächtigkeit [m]	Tiefe [m NN]	Wolf Sohle	San Fernando Sohle	Friedrich Wilhelm Sohle	Füsseberg Sohle	Glaskopf Sohle
1	-	256			Abbau		
2	16	240			Abbau		
3	204	36			Abbau		
4	150	-114			Abbau		
5	88	-202			Abbau		
6	29	-231			Abbau		
7	40	-271			Abbau		
8	19	-290			Abbau		
9	29	-319			Abbau		
10	42	-361			Abbau		
11	35	-396			Abbau		
12	25	-421			Abbau		
13	21	-442			Abbau		
14	39	-481			Abbau		
15	60	-541			Abbau		
16	50	-591			Abbau		
17	49	-640			Abbau		
18	60	-700	Nicht-aufgelockertes Gebirge				
19	300	-1000					
20	500	-1500					

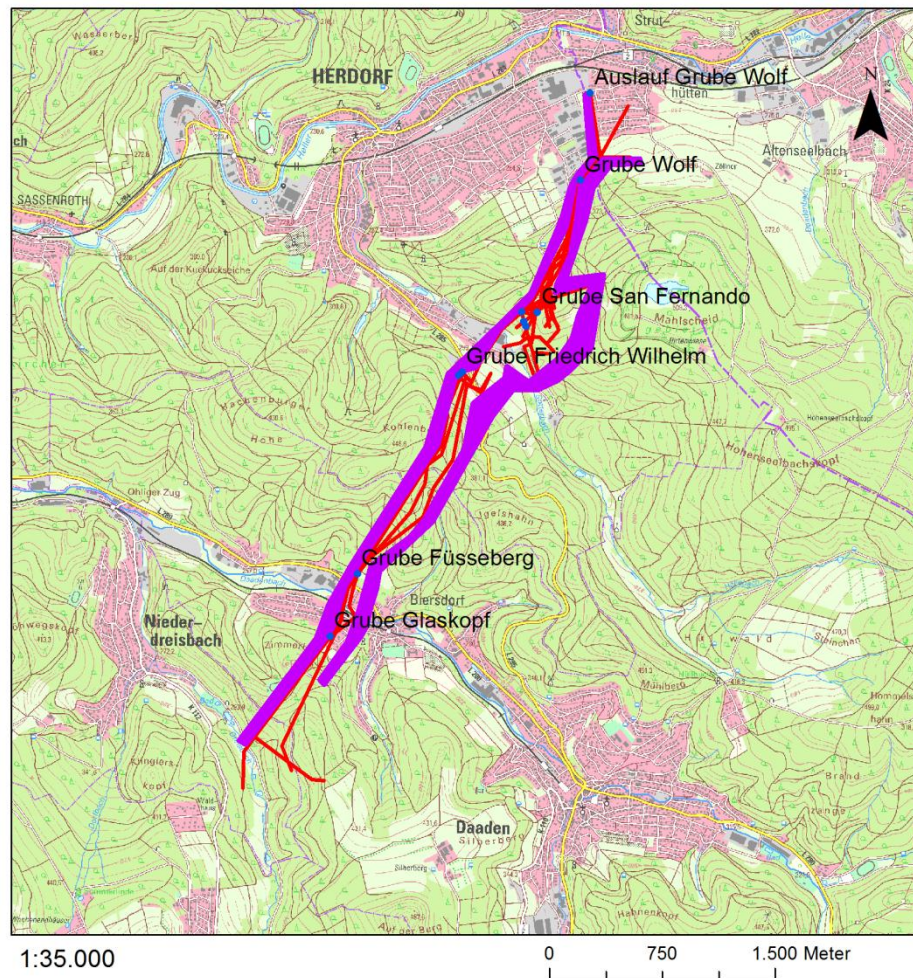


Abbildung 5-17 Lage des Abbaubereiches im Modellgebietes (lila), mit Verlauf der Grubensohlen (rot) sowie der Lage der Schächte und des Auslaufes Grube Wolf (blaue Punkte)

Die Lage des Modellgebietes und der Verlauf der Modellgrenzen sind in Abbildung 5-18 dargestellt. Das Modellgebiet umfasst eine Fläche von 3,89 km² bei einer W-E-Erstreckung von rund 0,74 km und einer N-S-Erstreckung von rund 5,62 km.

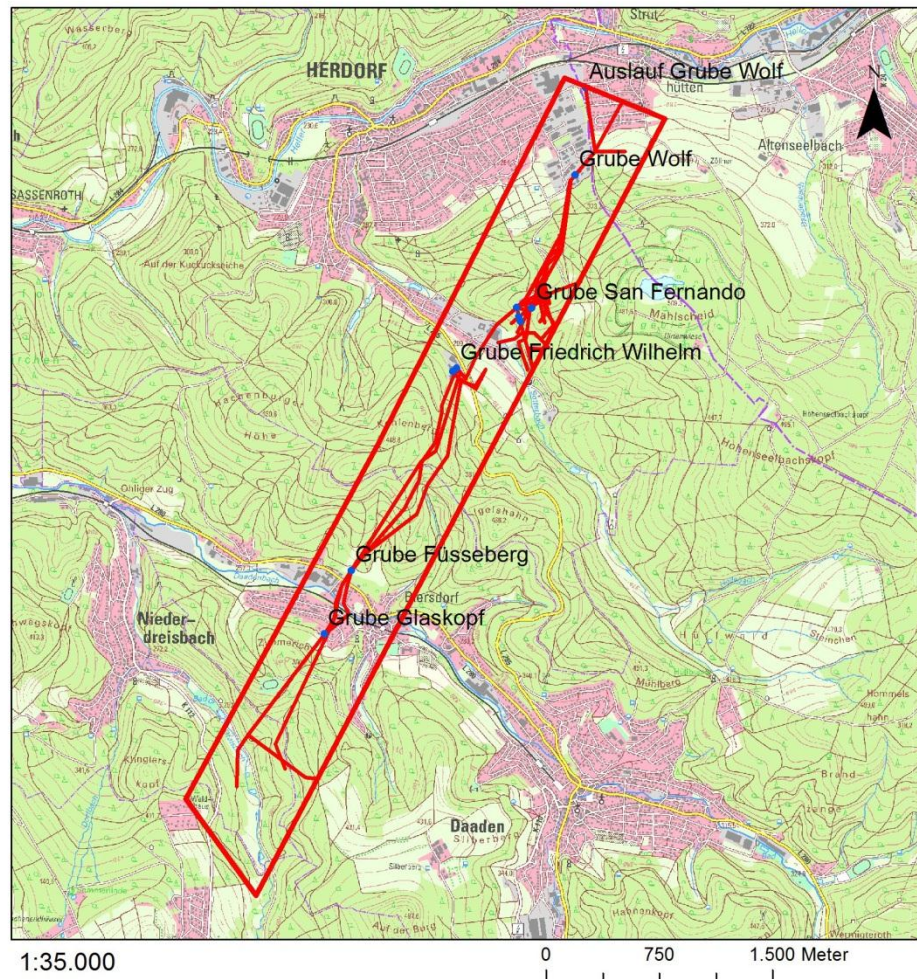


Abbildung 5-18 Lage des Modellgebietes (rote Umrandung), mit Verlauf der Grubensohlen (rot) sowie der Lage der Schächte und des Auslaufes Grube Wolf (blaue Punkte)

Die Wahl des Modellgebietes stellt einen Ausschnitt aus dem Kluftgrundwasserleiter, in welchem die hydraulisch wirksamen Bergwerkselemente modelliert werden. Die Wahl dieses Modellausschnittes ist so möglich, da durch die 2D-Modelle gezeigt werden konnte, dass der Kluftgrundwasserleiter nicht bzw. nur sehr untergeordnet an der Hydraulik beteiligt ist und die wesentlichen hydraulischen Effekte über die Schächte und Sohlen des Bergwerkes ablaufen.

In Abbildung 5-19 ist das Superelemente-Gitter dargestellt. Die darin vorangelegten Linien- und Punktelemente liefern die geometrische Grundlage für die daraus resultierende Erstellung des Finite-Elemente-Gitters und stellen die äußeren Modellränder dar.

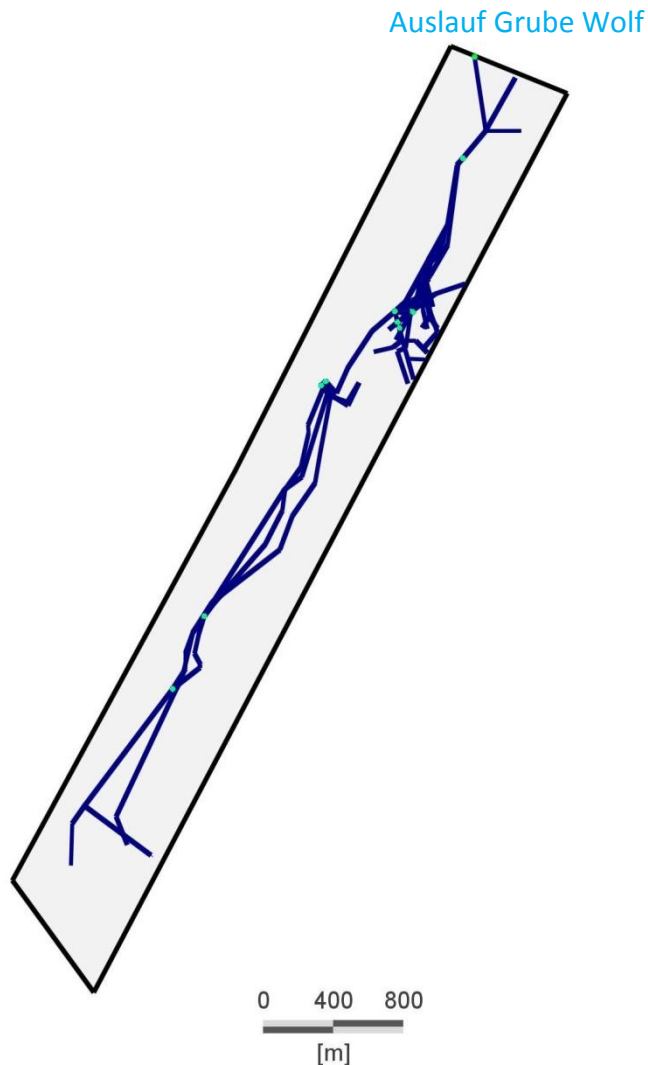


Abbildung 5-19 Superelemente-Gitter des 3D-Modells mit Linien (dunkelblau)- und Punktelementen (hellblau)

Für die Erstellung des Finite-Elemente-Gitters (Abbildung 5-20) wurde der Triangle Mesh Generator (Version 1.6, Shewchuk, 2005) mit einer 3-stufigen Verfeinerung entlang der Linienelemente mit einer Zellgröße von 10 m und einer 3-stufigen Verfeinerung an den Punktelementen mit einer Zellgröße von ebenfalls 10 m gearbeitet. Daraus resultieren 19.602 Knoten und 38.868 Finite Elemente für jedes Slice.



Abbildung 5-20 Finite Elemente-Gitter des Modells mit angelegten Linien- und Punktelementen
(Aufsicht auf Slice 1)

Darauf aufbauend wurde entsprechend den Tabellen 5-4 bis 5-6 die Erstellung des FE-Modells in Slices und Layer vorgenommen. Das daraus resultierende 3D-FE-Modell ist in Abbildung 5-21 dargestellt. Es besteht aus 392.040 Knoten und 738.492 Finiten Elementen. Für die Modellierung wurden stationäre, gesättigte Bedingungen gewählt.

Auslauf Grube Wolf

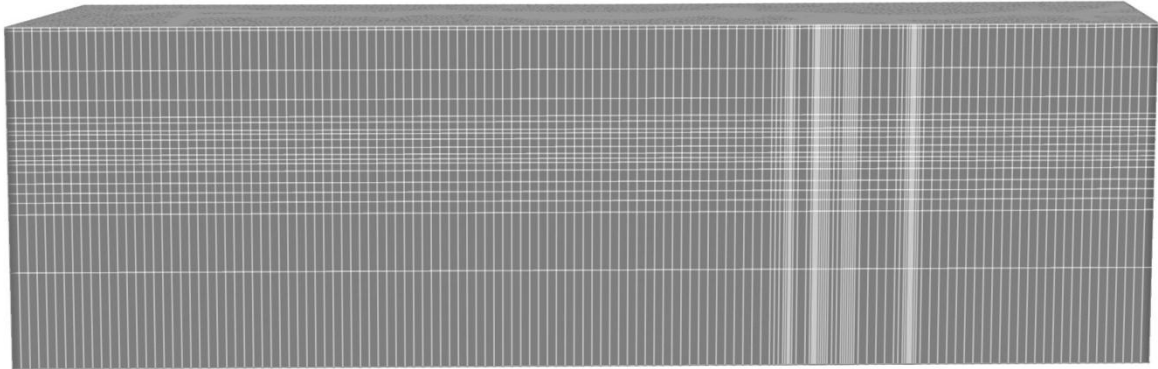


Abbildung 5-21 vollständiges 3D-FE-Modell

Für die Modellierung von Sohlen und Schächten mittels DFE sind wie bereits in Kapitel 5-1 beschrieben verschiedene Angaben zur Geometrie und daraus resultierende Korrekturen notwendig. In Tabelle 5-7 und Tabelle 5-8 sind die hydraulischen Radien und korrigierten hydraulischen Radien für die Schächte und Sohlen sowie die Durchmesser (Querschnittsfläche) der Schächte, bzw. Sohlen aufgeführt. Dabei spielt für den Durchmesser der Sohlen das Jahr, bzw. Jahrzehnt des Auffahrens eine Rolle in Hinblick auf den Durchmesser (Kapitel 4 Untersuchungen, Abbildung 4-20). Für die Schächte wurden entsprechend aus der Literatur (KRAH 2005) sowie aus vorliegenden Schachtschnitten Durchmesser und Art des Schachtquerschnittes (rund, eckig) zusammengestellt.

Die Sohlen werden als 1D-horizontale DFE auf den Oberflächen der Slices, die Schächte als 1D-vertikale DFE von Slice zu Slice (also über die gesamte Layermächtigkeit) modelliert.

In Anhang 12.4 ist die Position der modellierten Sohlen als DFE auf den jeweiligen Slices dargestellt.

Tabelle 5-7 Eingabeparameter für die Modellierung der Sohlen als DFE

		Seiten- länge kurz	Seiten- länge lang	rHydr.	rkorr	Querschnitts- fläche
	Sohlen	[m]	[m]			[m²]
Wolf	alle	2,24	2,24	0,56	1,12	5,0
	bis 280	1,50	2,00	0,43	0,86	3,0
San Fernando	bis 560	2,24	2,24	0,56	1,12	5,0
	ab 600	2,50	2,60	0,64	1,27	6,5
Friedrich Wilhelm/ Füsseberg/ Einigkeit	bis 404	1,50	2,00	0,43	0,86	3,0
	bis 744	2,24	2,24	0,56	1,12	5,0
	ab 16.	2,50	2,60	0,64	1,27	6,5
Glaskopf	alle	1,50	2,00	0,43	0,86	3,0

Die in Tabelle 5-8 für Schacht 2 von Grube Friedrich Wilhelm verwendeten Schachtmaße weichen von den recherchierten Angaben (s. Kapitel 4 Untersuchungsgebiet) ab. Im Rahmen der Modellkalibration zeigte sich, dass die recherchierten Angaben das tatsächlich durchströmte Schachtvolumen überschätzen. Aus Grubenkarten konnte bereits ein Hinweis auf das Vorhandensein umfangreicher Einbauten (z.B. Fahrten, Körbe) festgestellt werden. Möglicherweise tragen diese zu einer Verringerung des durchflossenen Querschnittes bei, daher wurde für die Modellierung auf angepasste verkleinerte Querschnitte zurückgegriffen.

Tabelle 5-8 Eingabeparameter für die Modellierung der Schächte als DFE

		Oberkante Schacht	Teufe Schacht-/ bereich	Durch- messer	Radius	Seiten- länge kurz	Seiten- länge lang	rHydr.	rkorrr	Querschnitts- fläche
		[m NN]	[m]	[m]	[m]	[m]	[m]			[m²]
Wolf	Schacht	337,5	-478,1	3,65	1,83			0,92	0,67	10,5
San Fernando	Schacht 1	358,4	-316,4			2,00	5,00	0,71	1,43	10,0
	Schacht 2	374,7	-627,3	5,00	2,50			1,25	0,49	19,6
	Blindschacht	-310,9	-651,0			2,00	5,00	0,71	1,43	10,0
Friedrich Wilhelm	Schacht 1 oben	334,6	-214,0	3,00	1,50			0,75	0,82	7,1
	Schacht 1 unten	334,6	-618,8	4,00	2,00			1,00	0,61	12,6
	Schacht 2 oben	337,7	-214,0	3,00	1,50			0,75	0,82	7,1
	Schacht 2 unten	337,7	-714,4	4,00	2,00			1,00	0,61	12,6
Füsseberg	Schacht oben*	304,0	-214,0	3,80	1,90			0,95	0,64	11,3
	Schacht unten	304,0	-741,8	4,64	2,32			1,16	0,53	16,9
Glaskopf	Schacht oben	313,4	-214,8	3,10	1,55			0,78	0,79	7,5
	Schacht unten	313,4	-556,6	4,00	2,00			1,00	0,61	12,6

5.3.2 3D-Strömungsmodell

Die Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm ist in den Oberen Siegen-Schichten des Unterdevon abgeteuft worden. Diese aus Sandsteinen und Tonschiefern bestehenden Gesteine weisen eine geringe Gesteinsdurchlässigkeit auf. Auf Grund der Klüftung kann die Gebirgsdurchlässigkeit der Gesteine höher liegen. Für die thermohydraulische Modellierung der Verbundgrube legen die geologischen Bedingungen nur die grundsätzlichen äußeren Rahmenbedingungen fest. Die Gesteine wurden mit einer einheitlichen in allen Tiefen gleichen, isotropen Durchlässigkeit von $1 \cdot 10^{-9}$ m/s modelliert, es erfolgte keine weitere Aufteilung in Einzelschichten etc. Da sich der Aufbau des Modells an der Geometrie der Verbundgrube ausrichtet, spielen die Position der Sohlen und Schächte eine viel entscheidendere Rolle für die Hydraulik als die Gebirgsdurchlässigkeit des umgebenden Kluftgrundwasserleiters. Die Durchlässigkeit des Gebirges orientiert sich zum einen an den in Kapitel 5.1 (Geologisches Modell) recherchierten Durchlässigkeiten, muss aber auch deshalb relativ niedrig gewählt werden, damit die Schächte und Sohlen, welche als DFE modelliert werden, nur eine sehr geringe Anbindung an das Gebirge aufweisen und somit der wesentliche Transport von Wasser über die Schächte und Sohlen stattfindet.

Die Durchlässigkeit der rückversetzten Abbaubereiche ist deutlich größer als die des anstehenden Gebirges und wurde mit einem kf-Wert von $1 \cdot 10^{-3}$ m/s modelliert. In Ermangelung von direkt ermittelten Gesteinsparametern unmittelbar aus dem Untersuchungsgebiet stellen diese Werte eine mittlere Abschätzung dar und können lokal und kleinräumig größer als auch kleiner ausfallen.

Für die versetzten Abbaubereich im Rahmen der Modellierung wurde eine Durchlässigkeit von $1 \cdot 10^{-3}$ m/s angenommen. Dieser Wert stellt in Hinblick auf die stark variierende Hohlraumverteilung auf Grund der Variation der versetzten Korngrößen und die unterschiedliche Ausbildung der verschiedenen Abbaubereiche eine mittlere Durchlässigkeit in Hinblick auf alle Bereiche dar. Diese kann in einzelnen Abschnitten größer, jedoch sowohl kleiner als auch größer ausfallen. Da im Rahmen des Verbundmodells ein relativ großräumiger Betrachtungsmaßstab gewählt wurde, ist an dieser Stelle keine weitere Differenzierung möglich, bzw. notwendig.

Die Position der zugewiesenen Abbaubereiche ist in Abbildung 5-22 dargestellt und wurde für Slice 1 bis Slice 17 verwendet.



Abbildung 5-22 Position der Abbaubereiche auf Slices 1 bis 17

Da im modellierten Gebiet an zahlreichen Stellen, insbesondere am obertägig ausstreichenden Florz-Füsseberger-Gangzug der Bergbau an der Erdoberfläche begonnen hat, sind diese Bereiche gegenüber den tiefer liegenden Schichten stark aufgelockert. Dies stellt bevorzugte Möglichkeiten der Versickerung von Niederschlag bzw. Bereiche erhöhter Grundwasserneubildung dar.

Die Strömungsrandbedingungen des Modells der Verbundgrube wurden sowohl im Hinblick auf die auslaufende Wassermenge am Auslauf der Grube Wolf als auch im Hinblick auf die anteilige Zusammensetzung dieser Wassermenge in Jungwasser und älteres Grundwasser gewählt. Die Größenordnung der

Grundwasserneubildung wurde aus den errechneten Grundwasserneubildungsraten (Kapitel 4 Untersuchungen) übernommen.

Das Strömungsmodell wurde unter Anpassung aller gewählten Parameter erstellt und im Hinblick auf die auslaufende Wassermenge am Auslauf der Grube Wolf sowie deren Zusammensetzung in jüngere und ältere Wasseranteile, kalibriert. Die gewählten finalen Strömungsrandbedingungen setzen sich wie folgt zusammen:

Strömungsrandbedingung:

<u>1. Art</u>	Tiefer Stollen Auslauf Grube Wolf, Slice 1	256 [m]
	Slice 20	257 [m]
	Slice 1, S-W-Grundwasserzustrom am Rand	257 [m]
<u>4. Art</u>	Infiltrationsbrunnen auf Tiefer Sohle auf Slice 17	-340 [m ³ /d]
	Infiltrationsbrunnen auf Slice 1 an 4 ausgewählten	
	Stellen innerhalb des Abbaubereiches, jeweils	-75 [m ³ /]

Da die obertägigen Pingenbereiche bevorzugte Bereiche zur Grundwasserneubildung darstellen, wurde neben einer gleichmäßigen Grundwasserneubildung (Zugabe an der Oberfläche / Inflow on Top / Slice 1) über das gesamte Modellgebiet von 30 mm/a (= 319,489 m³/d) eine erhöhte Grundwasserneubildung in vier ausgewählten Bereichen innerhalb der gut durchlässigen Abbaubereiche über Brunnen (Infiltration von jeweils 75 m³/d) gewählt. Dies entspricht einer gesamten Grundwasserneubildungsmenge von rund 58 mm/a (= 619 m³/d) und entspricht damit genau der für das Untersuchungsgebiet recherchierten und berechneten Größenordnung.

Die gewählten hydraulischen Druckspiegelhöhen an Slice 20 und am S-E-Rand von Slice 1 stellen die Randbedingungen des umgebenden Kluftgesteins dar und geben zum einen die allgemeine Grundwasserfließrichtung von Süden nach Norden zum Auslauf der Grube Wolf vor, sowie geben eine Fließrichtung der Schächte (von der Modellbasis zur Modelloberseite) vor. Der hydraulische Gradient gegenüber der Randbedingung am Auslauf der Grube Wolf ist sehr gering gewählt, da es sich bei dem anstehenden Gebirge um einen schlecht durchlässigen, gering ergiebigen Grundwassergering- bis –Nichtleiter handelt. Auf Grund der Randbedingung 1. Art am Auslauf der Grube Wolf und des über die Tiefe zunehmenden hydraulischen Druckspiegels entwickelt sich ein hydraulischer

Gradient. Dieser ist für die im Bergwerk vertikal nach oben gerichtete Strömung im Gebirge und im Bergwerk verantwortlich.

Der Infiltrationsbrunnen auf einem Abschnitt der 19. Sohle von Grube Füsseberg-Friedrich Wilhelm auf Slice 17 stellt den Zufluss von älterem Grundwasser über bevorzugte Fließpfade wie z.B. über aufgelockerte Abbaubereiche und Klüftung sicher. Dieser Grundwasserzufluss in der Tiefe konnte auf Grund der geringen Gebirgsdurchlässigkeit nicht über einen erhöhten hydraulischen Gradienten dargestellt werden. Der Infiltrationsbrunnen wurde in seiner Position so gewählt, dass er keinen Einfluss auf die hydraulischen Verhältnisse der Schächte hat.

Das Strömungsmodell wurde unter stationären, gesättigten Verhältnissen berechnet, wobei sich der Grundwasserspiegel auf Niveau des Tiefen Stollen der Grube Wolf (Slice 1) einstellt. Damit befinden alle Layer in der gesättigten Zone und die Strömung im umgebenden Gebirge wird nach Darcy berechnet.

Aus den zu Grunde gelegten Parametern und Randbedingungen entwickelt sich ein Strömungsmodell der Grube mit einer auslaufenden Wassermenge am Auslauf der Grube Wolf von 10,86 l/s (Abbildung 5-23).

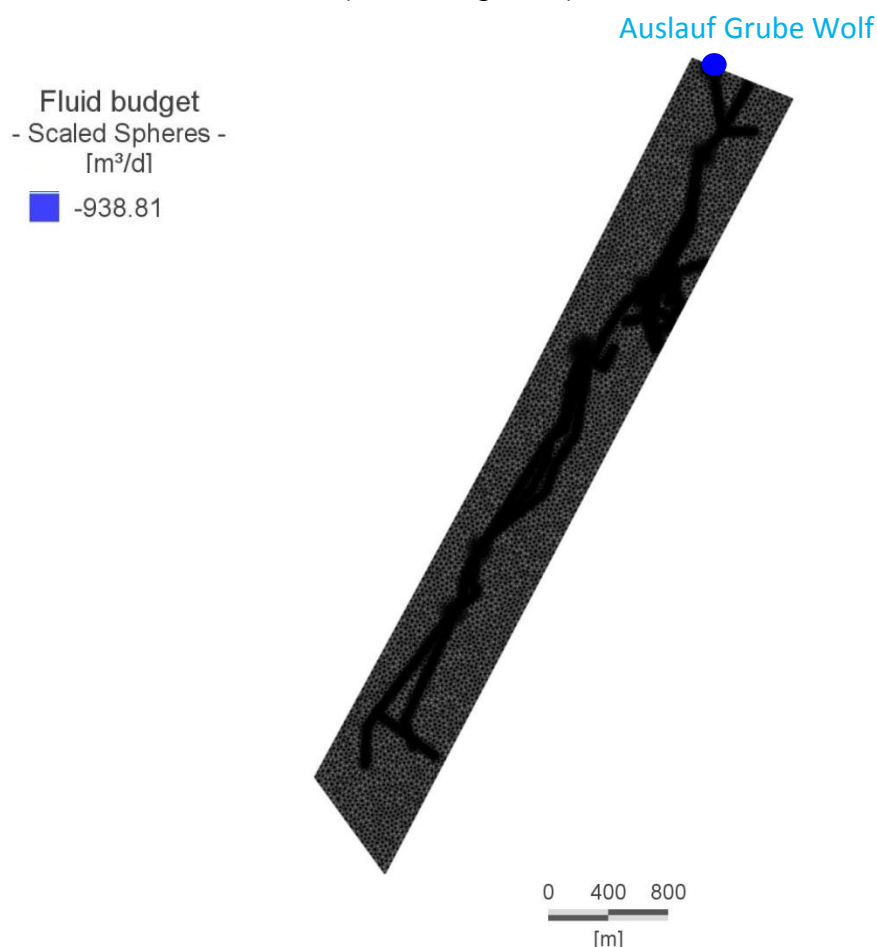


Abbildung 5-23 Wasserbudget an Slice 1 (blau: Auslauf Grube Wolf)

Anteilig setzt sich diese Menge zu 63,5% jungem Wasser (rezentes Niederschlagswasser) und 36,5% älterem Grundwasser zusammen. Die Wasserbilanz des Modells ist ausgeglichen, der Bilanzfehler liegt bei 0,1%. Damit kann über die gewählten Material- und Strömungsrandbedingungen eine gute Darstellung der hydraulischen Verhältnisse der Verbundgrube wiedergegeben werden, die modellierte Wassermenge am Auslauf der Grube Wolf stimmt gut mit der gemessenen Menge am Messwehr überein.

In Abbildung 5-24 ist das Strömungsmodell (hydraulische Druckspiegel-Verteilung) der Verbundgrube dargestellt.

Auslauf Grube Wolf

Hydraulic head
- Continuous -
[m]

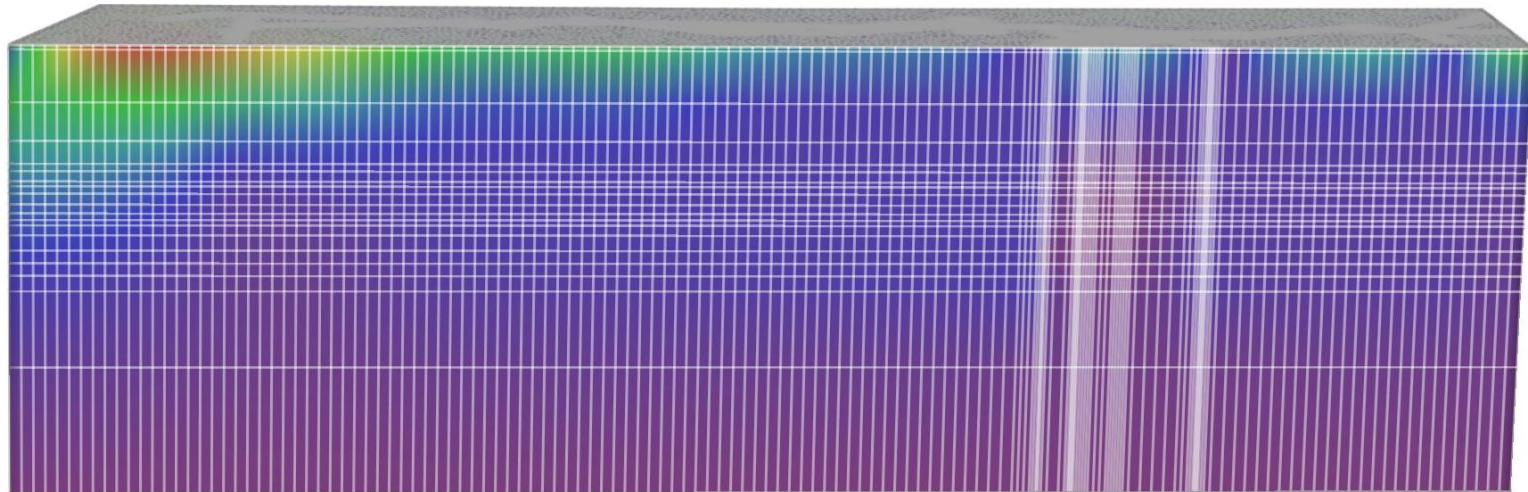
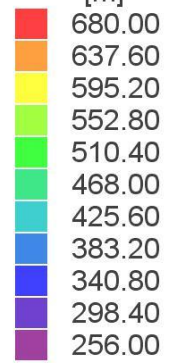


Abbildung 5-24 3D-FE-Modell (Druckspiegel-Höhen)

Nach Abbildung 5-24 ist festzustellen, dass sich der gesamte Bereich der modellierten Verbundgrube auf einem einheitlichen Druckspiegelbereich befindet. Dies ist Voraussetzung dafür, dass sich der Grundwasserspiegel über die gesamte Verbundgrube auf einem einheitlichen Niveau einstellt. Der Grundwasserspiegel des Modells stellt sich entsprechend auf dem Niveau des Tiefen Stollens (Auslauf Grube Wolf) auf Slice 1 ein.

Das 3D-Strömungsmodell betätigt die dem Modell zu Grunde liegenden Annahmen der Hydraulik der Verbundgrube. Die Schächte stellen ein System der kommunizierenden Röhren dar. Schächte und Sohlen bilden bevorzugte Fließpfade im ansonsten eher gering durchlässigen, geklüfteten Gebirge. Das Grubenwasser steigt über die Schächte auf, jedoch kommt es lediglich am Schacht Wolf zu einem Überlaufen des Wassers und schließlich der Entwässerung über den Neuen Förderstollen der Grube Wolf. Das Bergwerk wirkt als überdimensionale Drainage und der Auslauf der Grube Wolf stellt den einzigen Punkt der Entwässerung dar. Innerhalb des über Schächte und Sohlen erschlossenes Gebirges stellt sich der Druckspiegel auf den an der Grube Wolf angesetzten Wert an, das gesamte System Schächte und Sohlen stellt somit ein System der kommunizierenden Röhren dar.

Für die Betrachtung der Fließgeschwindigkeiten des Wassers auf den Sohlen der jeweiligen Slices wurde exemplarisch Slice 1 gewählt. An diesem Slice ist sowohl die Fließgeschwindigkeit an Schacht Wolf sowohl am Tiefen Stollen dargestellt (Abbildung 5-25).

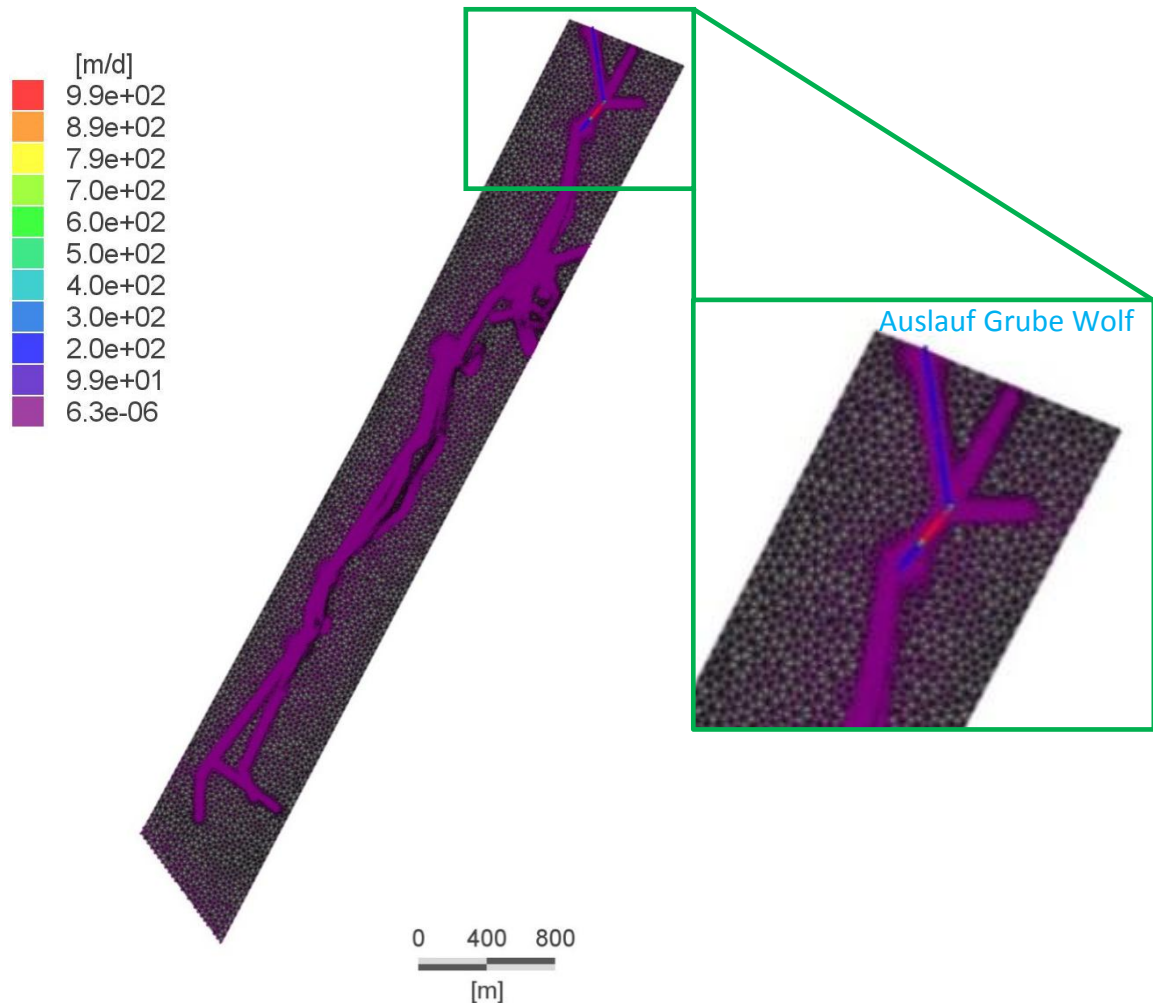


Abbildung 5-25 3D-FE-Modell, Slice 1, Strömungsgeschwindigkeiten

Aus den an Hand Slice 1 exemplarisch dargestellten Fließgeschwindigkeiten innerhalb des Grubengebäudes zeigt sich, dass der Transport von Grubenwasser nahezu ausschließlich über den Schacht Wolf und den anschließenden Tiefen Stollen stattfindet, während die Fließgeschwindigkeit innerhalb des Kluftgesteins sehr langsam (im Bereich von 6.3×10^{-6} m/d ist. Diese Situation ist ebenso in den tieferen Bereichen der Verbundgrube festzustellen. Auch dort findet der wesentliche Transport von Grundwasser über die Schächte und Sohlen statt, während die Fließgeschwindigkeit im umgebenden Gestein sehr gering ist. Dies bestätigt die dem Modell zu Grunde liegende und über Literatur recherchierten hydrogeologischen Verhältnisse des Untersuchungsgebietes. Die Fließgeschwindigkeit am Schacht Wolf beträgt rund 993 m/d (11,5 mm/s) und liegt damit in der Größenordnung der am Schacht Wolf mittels Strömungssensor gemessener Geschwindigkeit von 4 mm/s bis 11 mm/s (Kapitel 4 Untersuchungen). Die Strömungsgeschwindigkeit innerhalb des Tiefen

Stollens beträgt rund 180 m/d (2 mm/s). Die Fließgeschwindigkeiten der tiefer liegenden Sohlen liegen in einem Bereich von 10 m/d (0,12 mm/s) bis 20 m/d (0,23 mm/s) und sind damit durchschnittlich kleiner als am Tiefen Stollen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass über den Tiefen Stollen sämtliches Grubenwasser über einen definierten Querschnitt entwässert, wodurch sich die Geschwindigkeit erhöht. In tieferen Bereichen stehen dem Wasser hingegen auf Grund der Bergwerksgeometrie unterschiedliche Fließpfade (unterschiedliche Sohlen, Schächte) zur Verfügung. Über einen im Bereich Grube San Fernando – Friedrich Wilhelm mit Uranin durchgeführten Tracerversuch resultieren maximale Abstandsgeschwindigkeiten von 2,9 mm/s bis 3,6 mm/s (mündl. Mitteilung WIEBER 2012). Diese Größenordnung ist auf einzelnen Bereichen tieferer Sohlen im Grubengebäude ebenfalls festzustellen. Grundsätzlich bietet jedoch die Verbundgrube unterschiedliche Strömungswege (Querschläge, Erzrollen, etc.), welche im Modell nicht bis ins Detail nachgebildet werden können. Daher kann die modellierte Strömungsgeschwindigkeit lediglich als Annäherung an die Verhältnisse in der Verbundgrube betrachtet werden.

Aus den Ergebnissen und unter Berücksichtigung der Tritium-Isotopendatierungen von PORR (2011) lässt sich feststellen, dass die Verweilzeit des Wassers innerhalb des Grubengebäudes selbst nur gering ist. Die Verweilzeit des Wassers innerhalb des umgebenden Gesteins bis hin zu Erreichen von Schächten oder Sohlen kann jedoch relativ groß sein, so dass auch anteilig ältere Wässer über den Auslauf der Grube Wolf entwässert werden können.

5.3.3 3D-Strömungs- und Wärmemodell

Aufbauend auf das 3D-Strömungsmodell wurde ein Wärmetransportmodell aufgebaut. Die Wärmerandbedingungen setzen sich wie folgt zusammen:

Wärmerandbedingung:

<u>1. Art</u>	Slice 20	55 [°C]
	Slice 1, S-W-Grundwasserzustrom am Rand	10 [°C]
	Infiltrationsbrunnen auf Slice 1 an 4 ausgewählten	
	Stellen innerhalb des Abbaubereiches, jeweils	10 [°C]

Dem anstehenden devonischen Grundgebirge wurde für die 3D-Modellierung eine Porosität von 0,01 (1%) zugewiesen, dies stellt eine typische Porosität für Sand- bis Tonsteine dar. Die Abbaubereiche wurden mit einer deutlich erhöhten Porosität von 0,35 gewählt (siehe Kapitel 5.3.2. Strömungsmodell und (WIEBER et al. 2011) und entsprechend Abbildung 5-22 im Modell verteilt.

Für die anstehenden Gesteine wurden eine Wärmekapazität von 2,52 MJ/m³K und eine Wärmeleitfähigkeit von 3,0 W/mK gewählt. Dem Wasser wurden eine Wärmekapazität von 4,2 MJ/m³K und eine Wärmeleitfähigkeit von 0,65 W/mK zugewiesen. Die jeweiligen Werte wurden aus der Literatur recherchiert (VDI 4640 Blatt 2 2001, STÖBER 2007) und an die lokalen Gegebenheiten (devonische Sandsteine, Tonsteine, leicht erhöhter geothermischer Gradient des Untersuchungsgebietes) angepasst.

Den Infiltrationsbrunnen, welche die bevorzugte Grundwasserneubildung in den Pingenbereichen darstellen, wurde eine feste Randbedingung 1. Art von 10°C zugewiesen, da dieses Wasser mit einer durchschnittlich angenommenen Grundwassertemperatur dem Grubengebäude zutritt. Aus dem Strömungs- und Wärmemodell ergibt sich eine Temperatur des am Auslauf der Grube Wolf austretenden Grundwassers von 16,86°C. Diese modellierte Temperatur liegt genau im Bereich der über der am Messwehr aufgezeichneten Grundwassertemperatur.

Die Temperaturverteilung im Bergwerksmodell stellt sich so dar (Abbildung 5-26), dass es bis in eine Tiefe von etwa -319 m NN (Slice 9), also einer

Tiefe unterhalb der Grundwasseroberfläche von etwa 575 m die Wassertemperatur im Bergwerk nur leicht auf eine Temperatur zwischen 17°C bis rund 19°C zunimmt. Bis zur Endteufe der Schächte (Slice 16) nimmt die Wassertemperatur dann auf einen Bereich von etwa 25°C zu, unterhalb des durch Schächte und Sohlen aufgelockerten Gebirges stellt sich ein entsprechender natürlicher geothermischer Gradient innerhalb des anstehenden Gesteins ein.

In Abbildung 5-26 ist weiterhin zu erkennen, dass es über die bevorzugte Grundwasserneubildung im Bereich von Grube Wolf (dokumentierte Pingenbereiche aus den Grubenrissen) zu einer Verringerung der Temperatur in Schacht Wolf kommt. Der Einfluss des Grundwassers ist an dieser Stelle sehr deutlich, da zusätzlich zu den gut durchlässigen, porösen Abbaubereichen Schacht Wolf selbst eine große Oberfläche bietet. In Schach Wolf beträgt die Temperatur auf Slice 8 in einer Tiefe von rund 546 m (u. WOF) 16,9°C und stimmt daher mit den Tiefenmessungen (Kapitel 4 Untersuchungen) gut überein.

Temperature
- Isolines -
[°C]



Auslauf Grube Wolf

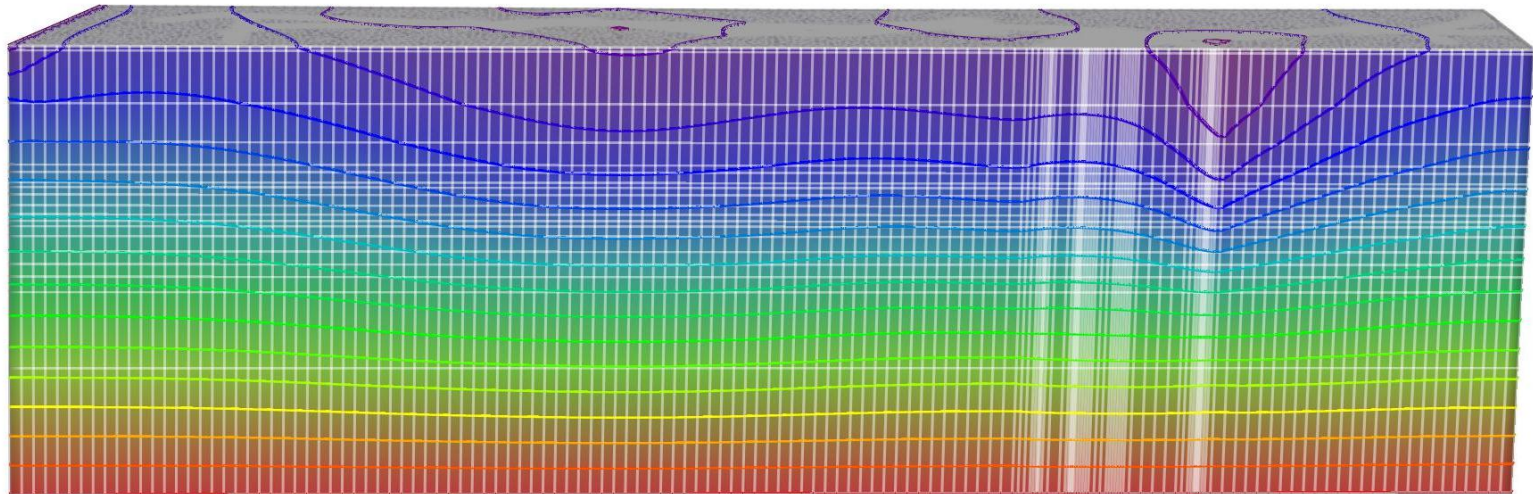


Abbildung 5-26 3D-FE-Modell, Temperaturverteilung

Maßgeblich für die Temperaturverteilung im Bergwerk selbst sind die Bereiche bevorzugter Grundwasserneubildung über Pingen bzw. Bereiche obertägig begonnenen Bergbaus. Durch die aufgelockerten Abbaubereiche kann oberflächlich versickerndes Niederschlags- bzw. Sickerwasser in den Grubenbereichen versickern. Das kalte Wasser hat eine größere Dichte, sinkt nach unten ab und führt im Gegenzug dazu, dass warmes, leichteres Wasser aus tieferen Bereichen aufsteigen kann. Zudem kommt es anteilig zu einer Durchmischung von warmen, aufsteigenden mit kaltem, absinkendem Wasser. Durch die anteilige Mischung von jungem (rezenten) Niederschlagswasser mit älterem Grundwasser resultiert die am Auslauf der Grube Wolf anzutreffende Wassertemperatur von 16,85°C.

In Abbildung 5-27 ist exemplarisch für Slice 1 die Temperaturverteilung des Wärme- und Strömungsmodells der Verbundgrube dargestellt.

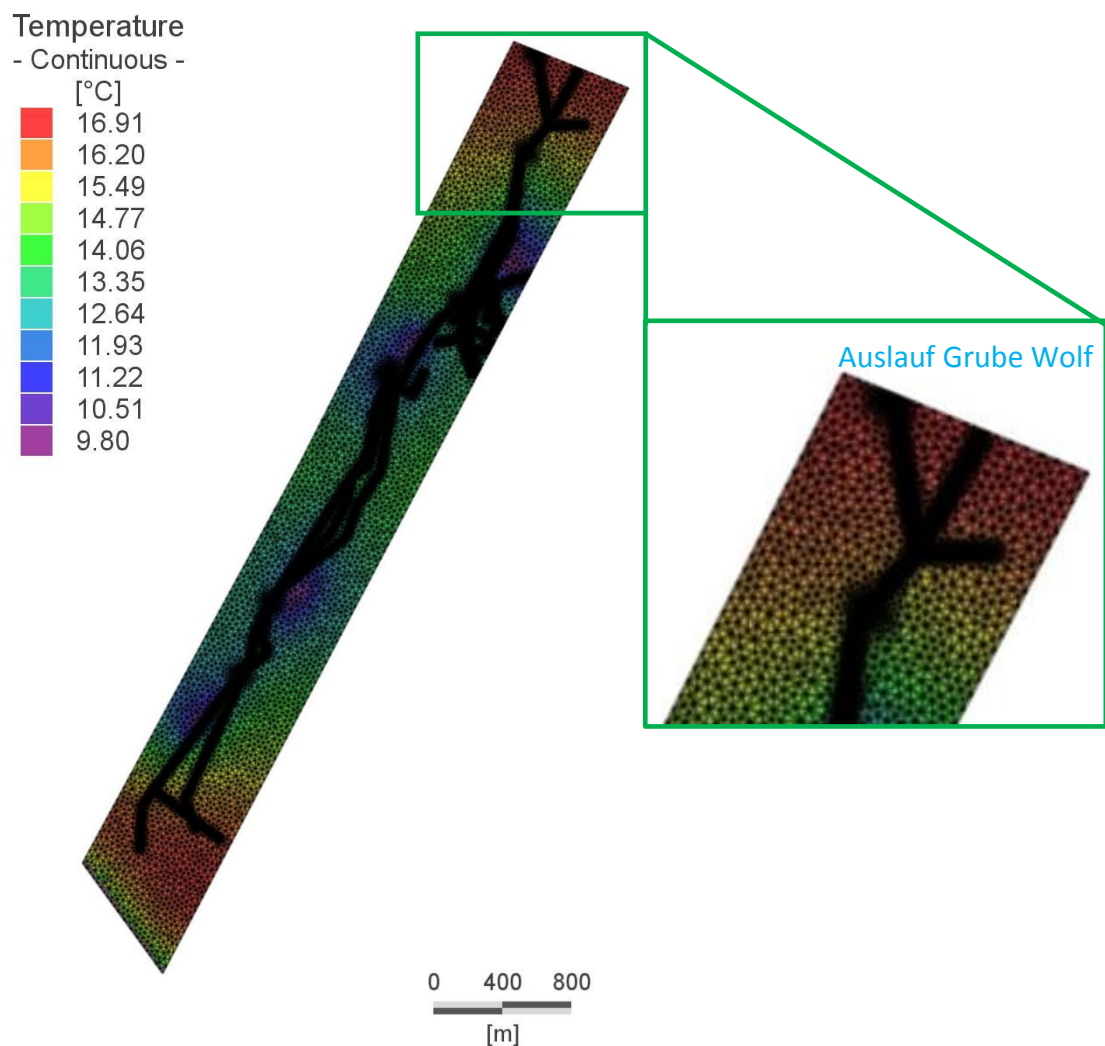


Abbildung 5-27 3D-FE-Modell, Temperaturverteilung Slice 1

Es ist zu erkennen, dass es neben dem Austritt von warmem Grubenwasser am Auslauf der Grube Wolf im Norden des Modellgebietes auch einen wärmeren Bereich im Süden des Modellgebietes gibt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass auch an diesen Stellen kaltes absinkendes Grundwasser über Abbaubereiche und Schächte zu einem Aufstieg von wärmerem Wasser aus tieferen Bereichen sorgt. Da allerdings auf Höhe des Tiefen Stollens keine weitere hydraulische Möglichkeit vorhanden ist, kommt es nicht zu einem Austritt von (warmem) Grubenwasser.

In Abbildung 5-28 ist ein W-E-orientierter Schnitt durch den Bergwerksbereich San Fernando-Friedrich Wilhelm dargestellt, da sich in diesem Bereich auf Slice 15 die einzige Verbindungssohle der Bergwerksbereiche San Fernando-Wolf und Füsseberg-Friedrich Wilhelm befindet.

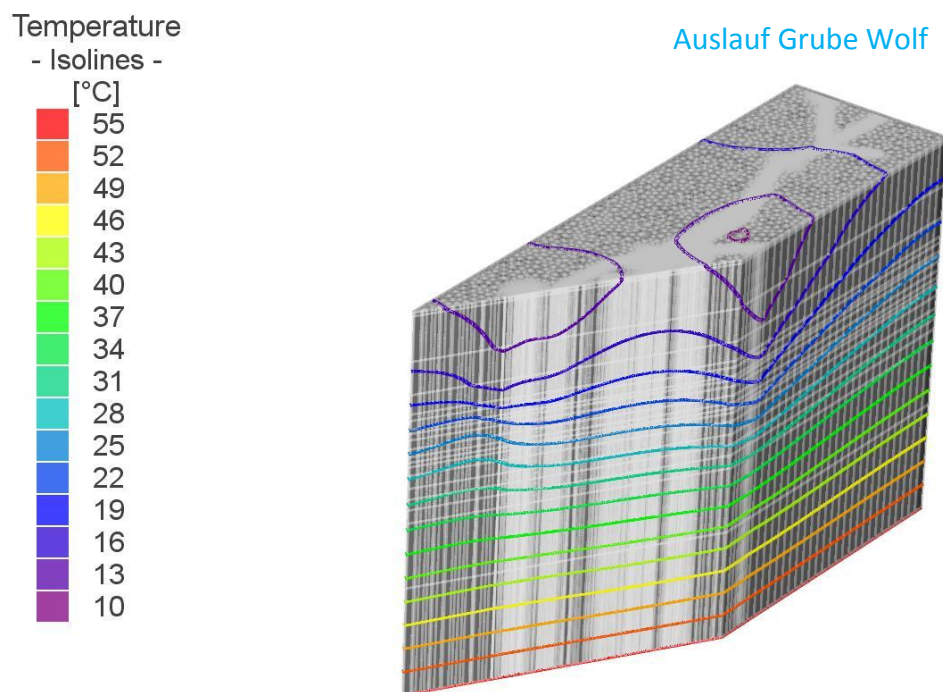


Abbildung 5-28 3D-FE-Modell, Temperaturverteilung, E-W orientierter Schnitt durch San Fernando-Friedrich Wilhelm

An Hand der Temperaturverteilung zeigt sich, dass bevorzugt über die Schächte und Sohlen ein Aufstieg von warmem Wasser erfolgt. Dort ist die Temperatur gegenüber der Temperatur auf dem gleichen topographischen Niveau erhöht. An den Bereichen der bevorzugten Grundwasserneubildung (Pingen) hingegen ist die Temperatur gegenüber der Umgebung kühler. Der mit einem Absinken von kühlerem, dichterem Wasser einhergehende Aufstieg von wärmerem, leichterem Wasser wird deutlich sichtbar.

5.3.4 Szenariomodellierungen

Um Abschätzungen über die Auswirkungen einer Entnahme von warmen Grubenwasser auf die Temperatur und Wassermenge am Auslauf des Tiefen Stollens der Grube Wolf treffen zu können, wurde an Schacht 2 von Grube San Fernando Grubenwasser entnommen und auf 11°C abgekühlt an Schacht 2 von Grube Friedrich Wilhelm reinfiltiert. Die Temperatur des entnommenen Wassers resultiert dabei aus der über das Wärmetransportmodell modellierten Temperatur am Förderbrunnen. Die Position von Entnahme- und Infiltrationsstelle wurde an den Schächten Friedrich Wilhelm und San Fernando gewählt, da diese beiden Bergwerksbereiche lediglich auf Slice 15 über die 830-m-Sohle San Fernando und die 17. Tiefbausohle Friedrich Wilhelm miteinander verbunden sind. Damit kann bei einer Infiltration von abgekühltem Grubenwasser (nach der geothermischen Nutzung) über Schacht 2 Grube Friedrich Wilhelm das Auftreten eines hydraulischen Kurzschlusses und eine Verringerung des geothermischen Potentials weitest möglich vermieden werden. Das reinfiltierte kühle Wasser muss über den Schacht, die angeschlossenen Sohlen und Abbaubereiche in tiefere Bereiche der Grube sinken und kann als früheste Möglichkeit an Slice 15 wieder in den Bereich der Grube San Fernando gelangen.

Für die Szenarien wurden die Entnahmemengen variiert von 10 l/s, 20 l/s, 30 l/s, 40 l/s bis zu 50 l/s und 100 l/s.

Die Gegenüberstellung der Szenarien und die jeweiligen Temperaturen des Grubenwassers und die resultierende Wassermenge am Auslauf der Grube Wolf sind Tabelle 5-9 zu entnehmen. Die Position des Entnahme- und Infiltrationsbrunnens ist in Abbildung 5-29 dargestellt.

Tabelle 5-9 Szenariomodellierungen

Szenario	Entnahmemenge		Bilanzfehler %	Auslauf Wolf		Temp. Auslauf Wolf °C
	l/s	m³/d		m³/d	l/s	
1	10	864	-0,03	938,2	10,86	16,84
2	20	1.728	3,02	857,9	9,93	16,97
3	30	2.592	2,88	836,9	9,69	16,98
4	40	3.456	2,30	837,7	9,70	16,98
5	50	4.320	2,17	824,7	9,54	16,98
6	100	8.640	1,16	827,7	9,58	16,98

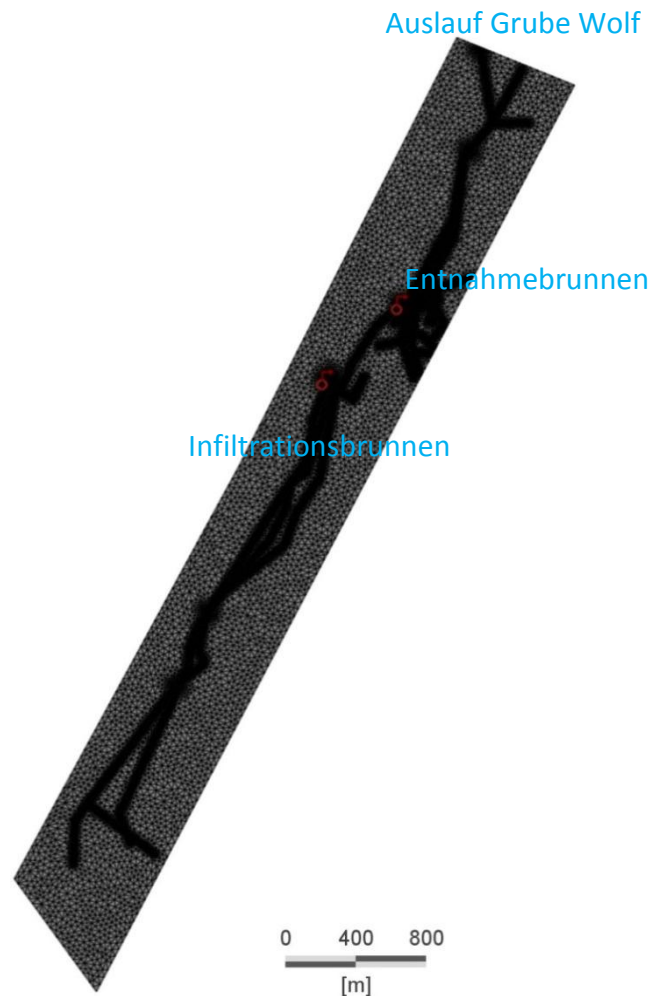


Abbildung 5-29 Lage des Entnahmebrunnens und Infiltrationsbrunnens der Szenariomodellierungen

Alle Szenarien wurden unter gesättigten, stationären Verhältnissen gerechnet, der Wasserbilanzfehler aller Szenarien ist gering und liegt bei Szenario 2 einen maximalen Bilanzfehler von 3,02%.

Die Szenariomodellierungen zeigen, dass die Entnahme von warmen Grubenwasser an Schacht 2 von Grube San Fernando unter anschließender Reinfiltration in das Grubengebäude an Schacht 2 von Grube Friedrich Wilhelm möglich ist, ohne dass sich die Grubenwassertemperatur am Auslauf wesentlich verändert. Lediglich eine Abnahme der auslaufenden Wassermenge mit zunehmender Förderrate ist festzustellen. Ein gleichbleiben bzw. sogar minimaler Anstieg der Grubenwassertemperatur am Auslauf der Grube Wolf ist darauf zurückzuführen, dass kühles, dichteres Wasser reinfiltrierte wird und zu einem weiteren Aufstieg von warmen, leichterem Wasser führt. Das kalte reinfiltrierte

Wasser tritt dem Grubengebäude zu, kann sich auf dem Transport durch das Grubengebäude erneut erwärmen und tieferes, warmes Wasser tritt am Auslauf zu Tage. Es kommt nicht zu einem hydraulischen Kurzschluss zwischen den beiden Bergwerksbereichen. Die abnehmende Menge Grubenwasser am Auslauf ist darauf zurückzuführen, dass nicht das gesamte, reinfiltrierte Wasser direkt in das Grubengebäude zurückgeführt wird, sondern über den hydraulischen Anschluss der Schächte, Sohlen und Abbaubereiche an das umgebende Gebirge abgegeben wird. Durch die Entnahme von Grubenwasser kommt es entsprechend dem Modell nicht zu einer gravierenden Beeinflussung des geothermischen Potentials am Auslauf des Tiefen Stollens. Weiterhin kommt es nicht zu signifikanten Änderungen der Fließgeschwindigkeiten im Modell, auch die grundsätzlichen hydraulischen Bedingungen bleiben bestehen (z.B. bevorzugter Transport des Grubenwassers über Schächte und Sohlen) und die Temperaturverteilung innerhalb der Schächte wird nicht nachteilig beeinflusst.

6 Diskussion

Als Ergebnis der dreidimensionalen thermohydraulischen Modellierung lässt sich feststellen, dass die verwendete Software FEFLOW im Hinblick auf die Fragestellung eines gefluteten Bergwerkes bestehend aus einem System kommunizierender Schächte und Sohlen unter Berücksichtigung von vereinfachten geometrischen Verhältnissen zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Es ist plausibel möglich, die allgemeinen hydraulischen Bedingungen innerhalb der Grube zu modellieren und darauf aufbauen geothermische Szenarien zur Grubenwasserentnahme zu simulieren. Die Verwendung von Finiten Elementen ermöglicht das Modellieren der komplexen Bergwerksstrukturen. Die verwendeten Discrete Feature Elements (DFE) stellen dabei selbstständige nach dem Strömungsgesetz von Poiseuille modellierte Schächte und Sohlen dar und ermöglichen die Berechnung turbulenter Strömungsverhältnisse von Schächten und Sohlen in einem ansonsten nach laminare Strömung modellierten Grundwasser-Geringleiter. Die DFE sind über die Gesteins- bzw. Gebirgsdurchlässigkeit an das umgebende Gesteinsmaterial angebunden. Diese muss daher sehr gering ausfallen, damit die DFE als eigenständige Röhren fungieren, über die der Wassertransport stattfinden kann. Bei besseren Durchlässigkeiten des Gebirges treten über den hydraulischen Kontakt größere Mengen des über Schächte und Sohlen transportierten Wassers in das Gestein über und stehen einem Weitertransport somit nicht bzw. nicht mehr vollständig zur Verfügung.

Das 3D-Strömungsmodell bestätigt, dass wie ebenfalls aus der Literatur recherchiert, das Bergwerk als überdimensionale Drainage wirkt. Die Druckspiegelhöhen oberhalb des Grundwasserspiegels sind höher als am Grundwasserspiegel selbst. Das über die ungesättigte Zone oberhalb des Grundwasserspiegels dem Grubengebäude zutretende Wasser wird somit dem Grubengebäude bzw. dem Auslauf der Grube Wolf mit dem Punkt des niedrigsten hydraulischen Punktes zugeleitet. Damit kann über das Modell bestätigt werden, dass die auslaufende Wassermenge am Auslauf der Grube Wolf zu einem großen Anteil von Niederschlags- bzw. Sickerwasser beeinflusst ist. Die Temperatur des auslaufenden Grubenwassers setzt sich ebenso anteilig aus warmem, tieferen Grundwasser sowie kälterem, oberflächennahem Wasser zusammen. Da kühles,

dichteres Wasser in den Abbaubereichen, Sohlen und Schächten des Grubengebäudes bevorzugt versickert, kommt es zum Aufstieg von wärmerem, leichterem Grundwasser aus tieferen Bereichen. Dadurch und durch den kontinuierlichen Zustrom von warmem Wasser aus tieferen Bereichen bleibt die Temperatur des auslaufenden Grubenwassers auf einem konstanten Niveau von rund 17°C.

Über die tiefenorientierten Messungen in den Schächten (soweit zugänglich) konnte eine gleichbleibende Temperatur über eine Wassertiefe von rund 500 m festgestellt werden. In den Messungen Vor-Ort war lediglich eine geringe Temperaturzunahme um bis zu 0,2°C in der Tiefe festzustellen. Über das Modell zeigt sich, dass bis in eine Tiefe von rund 575 m die Temperatur im Bergwerk nur um wenige Grad Celsius zunimmt. Im Hinblick auf die starken geometrischen Vereinfachungen der Verbundgrube und Anpassungen der Gesteinsparameter stellt dies jedoch ein plausibles Ergebnis dar. Erst unterhalb des durch Bergwerksbereiche aufgelockerten Gebirges nimmt die Temperatur entsprechend dem geothermischen Gradienten deutlich zu.

Da sowohl das Strömungs- und Wärmemodell als auch die berechneten Szenarien nur geringe Wasserbilanzfehler aufweisen und eine anteilige Zusammensetzung der Wässer in jüngere Wässer und ältere Wässer entsprechend PORR (2011) sowie der eigenen Untersuchungen im Modell möglich war, werden die Modellergebnisse als plausibel und belastbar eingestuft. Ebenso konnten Fließgeschwindigkeiten am Schacht Wolf bzw. auf den weiteren Sohlen festgestellt werden, welche in der gleichen Größenordnung wie im Rahmen der Vor-Ort gemessenen Geschwindigkeiten liegen.

Da für die Gesteine des Untersuchungsgebietes keine Materialparameter direkt verfügbar waren, mussten z.B. Durchlässigkeiten und Wärmeleitfähigkeiten aus Literaturquellen recherchiert werden. Weiterhin gibt es keine Grundwassermessstellen im Untersuchungsgebiet, daher musste für die Wahl der Randbedingungen auf plausible Werte im Hinblick auf die angenommenen Verhältnisse zurückgegriffen werden. Die in der Nähe des Untersuchungsgebietes vorhandenen Messstellen dokumentieren entweder lediglich Schwankungen des Gewässerspiegels der jeweiligen Vorfluter oder sind vom eigentlichen Bergbaubereich zu weit entfernt, als dass Rückschlüsse auf den durch den Bergbau hervorgerufene Grundwasserabsenkung getroffen werden können. Die aus der

Arbeit von PORR (2011) aus Tritium-Isotopenmessungen ermittelte Zusammensetzung des Wassers bestehend aus rund 70% Jungwasser und 30% älterem Grundwasser konnte im Modell bestätigt werden.

Die anstehenden devonischen Gesteine variieren in ihrer lokalen Ausprägung kleinräumig, jedoch mit einem begrenzten Korngrößenspektrum. Dies konnte im Modell nicht berücksichtigt werden, da bereits die Geometrie der gefluteten Verbundgrube komplex ist und als Basis für den allgemeinen Modellaufbau gewählt wurde. Die Grubengeometrie wurde für das Modell aus unterschiedlichem Kartenmaterial zusammengestellt, in ARCGIS auf die TK 1:25.000 georeferenziert und als Datenquelle für das Modell verwendet. Die Grubenrisse mussten für das Modell vereinheitlicht und vereinfacht werden, da nicht jede einzelne Sohle oder jeder Schacht, die nicht zur Gesamthydraulik der Grube beitragen, verwendet werden konnten.

Für die Erstellung des 3D-Modells der Verbundgrube musste auf der einen Seite die Fragestellung, also die Entnahme von Grubenwasser und die Reinfiltration des abgekühlten Wassers nach der geothermischen Nutzung berücksichtigt werden, als auch auf der anderen Seite die grundsätzliche, modellierungstechnische Beherrschbarkeit des Modells. Das Modell soll die Fragestellung so gut wie möglich beschreiben und dazu so komplex wie notwendig aufgebaut sein, aber die Lösung des Strömungs- und Wärmetransportmodells muss in einer angemessenen Zeitspanne und unter Berücksichtigung der zur Verfügung stehenden Hardware möglich sein.

Bei der Betrachtung des 3D-Modells ist wichtig, dass Details wie z.B. ortsaufgelöste Abbaubereiche, lokale Pingenbereiche, einzelne Erzrollen etc. nicht im Verbundmodell berücksichtigt werden konnten. Um diese eher kleinskaligen Geometrien modellieren zu können, müsste die Erstellung des Finite-Elemente-Gitters sehr viel kleiner aufgelöst erfolgen. Daraus würde sich dann ein Modell von einer nicht mehr berechenbaren Größe ergeben. Im Hinblick auf diese Tatsache wurde die Finite-Elemente-Diskretisierung so gewählt, dass um die Bereiche von großem Interesse wie z.B. Sohlen und Schächte eine stärkere Verfeinerung des Gitters angesetzt wurde.

All dies stellt im Hinblick auf die Ergebnisse des 3D-Modells zu berücksichtigende Faktoren dar.

Obwohl oder auch gerade weil dem Modell zahlreiche Annahmen und Abschätzungen hinsichtlich Materialparameter und Randbedingungen zu Grunde liegen, liefert das Modell belastbare Ergebnisse und konnte auf die auslaufende Wassermenge und die Temperatur des austretenden Wassers kalibriert werden. Die potentiellen Fehlerquellen fallen einzeln weniger ins Gewicht und werden durch die Summe aller modellbestimmenden Parameter insgesamt ausgeglichen. Die Temperaturverteilung im Bergwerk stimmt gerade an Schacht Wolf gut mit den gemessenen Werten überein und liefert für das gesamte Bergwerk im Hinblick auf die notwendigen Anpassungen plausible und realistische Werte in einem erwarteten Temperaturspektrum.

Die exakte Anpassung der Temperaturverteilung im Bergwerk selbst konnte im Hinblick auf Grund des großen Einflusses der Bereiche bevorzugter Grundwasserneubildung in einen Bereich von 17°C bis rund 19°C nachmodelliert werden. Da die Bereiche bevorzugter Grundwasserneubildung über das Modell auf Grund der großen Komplexität nur idealisiert über vier Brunnen dargestellt wurden, kann damit keine vollständige Anpassung des Modells an die Wirklichkeit erzielt werden. Die Temperaturverteilung im gesamten Bergwerk selbst lässt sich auch über eine Anpassung der Parameter (u. a. Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität, Porosität) nicht auf die, mittels Tiefenmessung ermittelte, Temperatur von 17°C in einer Tiefe von rund 500 m (unter Wasseroberfläche / u. WOF) einstellen. Eine Abweichung von den gewählten Parametern hat auch immer einen Einfluss auf die Temperatur des auslaufenden Wassers. Die modellierte Temperaturverteilung des Bergwerkes entspricht daher im Hinblick auf die notwendigen Vereinfachungen des Modells aber bezogen auf das gewünschte Ergebnis und die erfolgte Kalibration über die auslaufende Wassermenge und die Temperatur des auslaufenden Wassers einem plausiblen Ergebnis. Des Weiteren konnten nur Tiefenmessungen in einzelnen zugänglichen Schächten bis zu einer erreichbaren Teufe durchgeführt werden. Weitere Messungen von Grubenwassertemperaturen in weiteren gefluteten Bereichen waren und sind nicht möglich. Daher ist zum Beispiel nicht abschließend festzustellen, wie sich im Detail und lokal in den unterschiedlichen Bereichen des Bergwerks die Temperatur ausgebildet hat.

Alle vorgestellten Ergebnisse sind jeweils im Hinblick auf die getroffenen Vereinfachungen und Anpassungen zu betrachten. Über das Modell kann nicht abschließend ausgeschlossen werden, dass eine tatsächliche Entnahme von

Grubenwasser am Schacht 2 der Grube San Fernando und Reinfiltration des abgekühlten Grubenwassers an Schacht 2 der Grube Friedrich Wilhelm nicht doch zu einer Verringerung des geothermischen Potentials am Auslauf der Grube Wolf führen kann. Im Gelände ist es möglich, dass auf Grund von Klüftung und z.B. höher gelegenen Sohlen, Erzrollen oder Pingenbereichen, welche z.B. im Modell nicht berücksichtigt werden konnten, ein hydraulischer Kontakt zwischen den beiden Grubenabschnitten besteht. Dann könnte das kühlere, reinfiltrierte Grubenwasser unter Umständen einen direkteren Weg zur Entnahmestelle zurückzulegen haben.

Für detaillierte Fragestellungen unter Berücksichtigung kleinskaliger Grubeneinheiten müssen gesonderte Modelle mit einem Ausschnitt der Verbundgrube von Interesse gewählt werden.

7 Zusammenfassung

Aus den durchgeführten hydrochemischen und hydraulischen Untersuchungen der gefluteten Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm konnte gezeigt werden, dass sich gegenüber der Situation vor der Flutung die hydrochemische Zusammensetzung und die Temperatur des Grubenwassers verändert haben. Die gesamte Verbundgrube wird über den Auslauf der Grube Wolf auf Niveau des Neuen Förderstollens bei 256 m NN entwässert, dies ist der einzige bekannte Grubenwasserauslauf der Verbundgrube.

Soweit es möglich war, die Grubenwässer in den unterschiedlichen Bereichen der Grube zu beproben, wurden im Wesentlichen Wässer einer ähnlichen hydrochemischen Zusammensetzung angetroffen. Im Allgemeinen weisen die Grubenwässer einen pH-Wert im neutralen bis leicht basischen Bereich, eine elektrische Leitfähigkeit von leicht über 1000 $\mu\text{S}/\text{cm}$ und eine Temperatur von rund 16,9°C auf. Dabei befindet sich das Redoxvermögen bei den in den Schächten der Grube entnommenen Wässer im reduzierenden Milieu, während das Redoxvermögen des über den Neuen Förderstollen der Grube Wolf beprobte Wasser im oxidierenden Bereich liegt. Hydrochemische Modellierungen mit PhreeqC bestätigten diese Untersuchungen und geben einen Überblick über die Sättigungsverhältnisse des Grubenwassers.

Die durchgeführten Tiefenmessungen innerhalb der zugänglichen Schächte weisen über die gesamte erfasste im Wesentlichen eine gleichbleibende Temperatur und Leitfähigkeit auf. Lediglich in Tiefen mit bekannten durchschlägigen Sohlen von Grube Wolf nach Grube San Fernando, bzw. vermutlich durch einen wasserdurchlässige Kluftbereich hervorgerufen, konnte eine geringfügige Änderung der Temperatur- und Leitfähigkeitsverteilung erfasst werden. Dies bestätigt die über die hydrochemischen Untersuchungen Erkenntnisse der hydraulischen Verbindung der Grubenbereiche untereinander.

Unter turbulenten Strömungsbedingungen bei Vorhandensein von Gaslift wurde seit Flutung der Grube eine Durchmischung des Grubenwassers hervorgerufen. Dies zeigt sich in den ähnlichen bis gleichen hydrochemischen Zusammensetzungen zum einen über die Tiefe und zum anderen an den verschiedenen Probenpunkten innerhalb der Verbundgrube. Die geflutete Grube mit

ihren tiefreichenden Schächten ist nach dem Prinzip der kommunizierenden Röhren zu verstehen. Es hat sich auf die gesamte Verbundgrube bezogen ein einheitlicher Grubenwasserspiegel auf dem Niveau des Entwässerungstollens, dem Neuen Förderstollen der Grube Wolf eingestellt.

Aus der kontinuierlichen Erfassung der Grubenwassermenge sowie der Grubenwassertemperatur zeigte sich, dass die Schüttung am Auslauf der Grube Wolf anteilig und mit zeitlicher Verzögerung von Niederschlag bzw. Sickerwasser beeinflusst ist. Die abfließende Grubenwassermenge fällt jedoch auch in Zeiten gänzlich ohne Niederschlag nicht unter eine Menge von rund 6 l/s fällt, die Grubenwassermenge weist somit einen kontinuierlichen Grundwasserzustrom auf. Die Temperatur des austretenden Grubenwassers ist dabei über die Zeit stabil auf einem Niveau von rund 16,9°C. Diese Temperatur und die ablaufende Basismenge stellen damit ein geothermisches Potential des Grubenwassers dar, welches zu Heizzwecken im Niedertemperatur-Bereich genutzt werden kann, ohne dass eine Nutzung des Grubenwassers über den freien Auslauf die thermohydraulischen Bedingungen des Bergwerkes beeinflusst.

Aus der Bestimmung der in die Verbundgrube eingestauten Wassermenge zeigte sich, dass unter Berücksichtigung eines Hohlraumanteils des versetzten Abbaubereiches von 0,35 eine Gesamtmenge von rund 2,43 Mio. m³ temperiertes Grubenwasser einer theoretischen geothermischen Nutzung zur Verfügung stehen würden (einmalige komplette Nutzung).

Aus den vorliegenden Grubenrissen wurde die Geometrie der Verbundgrube mit den Hauptschächten, wesentlichen Verbindungssohlen sowie den dazugehörigen Abbaubereichen in GIS auf die TK 1:25.000 Blatt Betzdorf georeferenziert. Darüber konnten Eingabedokumente für die Erstellung der geometrischen Grundlage in FEFLOW entwickelt werden.

Basierend auf den durchgeführten Untersuchungen wurden im ersten Schritt thermohydraulische 2D-Szenario-Modellierungen des Ausschnittes Grube San Fernando-Wolf durchgeführt. Diese Szenarien hatten das Ziel, die Wesentlichen, bei der Betrachtung der Gesamt-Hydraulik der Verbundgrube, eine Rolle spielenden Einheiten der Grube (Schächte, Sohlen, Erzrollen, Abbaubereiche) zu identifizieren. Als Software wurde DHI-WASY FEFLOW gewählt, da sich mittels Finite Elemente die Bergwerksgeometrie zum Einen sinnvoll nachbilden lässt und zum Anderen mittels Discrete Feature Elements (DFE) die turbulenten Strömungsbedingungen der

Schächte und Sohlen in einem umgebenden laminaren Strömungsmilieu nach Darcy umgesetzt werden können. Die 2D-Szenario-Modellierung zeigte, dass Schächte und Verbindungssohlen die Gesamt-Hydraulik der Grube dominieren, während der umgebende Grundwasser-Gering bis Nichtleiter den grundsätzlichen hydraulischen Rahmen liefert.

Bereits durch die 2D-Szenario-Modellierung konnte im Vorfeld der 3D-Modellierung gezeigt werden, welche Bergwerkseinheiten (Schächte, Sohlen, Erzrollen, verfüllte Abbaubereiche) für die grundsätzlichen hydraulischen Bedingungen der gefluteten Verbundgrube eine wichtige Rolle spielen. Da die Bergwerksgeometrie mit zahlreichen verzweigten Sohlen in unterschiedlichen Teufen, unterschiedlichen Teufen und z.B. unterschiedlichen Durchmessern ab bestimmten Tiefenniveaus äußerst komplex ist, konnte im Rahmen der 3D-Modellierung diese Komplexität nicht beibehalten werden. Daher musste, resultierend aus den Ergebnissen der 2D-Szenarien, die Grubengeometrie dahingehend vereinfacht werden, dass lediglich die Hauptschächte der Einzelgruben (wobei die Vergrößerung des Durchmessers ab bestimmten Tiefenniveaus berücksichtigt wurde) sowie tiefere als auch höher gelegene Sohlen, welche die Gruben untereinander verbinden, im Modell berücksichtigt werden. Ergänzt wird die Grubengeometrie durch Sohlen, welche über lange Strecken (also z.B. von Friedrich Wilhelm über Füsseberg bis nach Glaskopf) reichen. Kurze im oberen Bereich der Gruben angesiedelte Sohlen ohne hydraulische Verbindung konnten im Modell nicht berücksichtigt werden. Da jede modellierte Sohle über ein Slice der entsprechenden Tiefe repräsentiert wird, würde eine Modellierung aller Sohlen zu einer sehr großen Anzahl Slices mit sehr geringen Layermächtigkeiten führen. Dies hätte wiederum eine sehr große Anzahl Finite Elemente mit nur geringer Zellgröße zur Folge und somit ein modellierungstechnisch nicht zu beherrschendes Modell.

Auf Grundlage der durchgeführten Untersuchungen zur Hydrochemie und den hydraulischen Bedingungen der gefluteten Grube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm wurde mit Hilfe einer thermohydraulischen 3D-Modellierung ein Strömungs- und Wärmemodell der gefluteten Grube aufgebaut. Mit den gewählten Materialparametern und Randbedingungen konnte eine Wassermenge am Auslauf der Grube Wolf von 10,86 l/s bei einer Temperatur von 16,89°C modelliert werden. Dieses plausible thermohydraulische Modell ermöglichte die Modellierung eines Grubenwasserentnahme- und reinfiltrationsszenarios. Dabei wurde als

Entnahmestelle Schacht 2 von Grube San Fernando und als Infiltrationsstelle Schacht 2 von Grube Friedrich Wilhelm gewählt. Diese beiden Grubenabschnitte weisen auf der 830-m-Sohle bzw. 17. Sohle die einzige hydraulische Verbindung der beiden Grubenabschnitte San Fernando-Wolf und Füsseberg-Friedrich Wilhelm auf. Durch die Szenarionmodellierung mit unterschiedlichen Entnahmemengen konnte gezeigt werden, dass sich die Temperatur des auslaufenden Wassers nicht wesentlich verändert und es auch nur zu einer Abnahme der austretenden Grubenwassermenge in geringem Maße kommt.

8 Literaturverzeichnis

- ALDOUS, P.J. & SMART, P.L. (1988) Tracing groundwater movement in abandoned coal mined aquifers using fluorescent dyes. *Ground Water*, **26**, Seiten 172-178.
- ALJOE, W.W. & HAWKINGS, J.W. (1994) Application of aquifer testing in surface and underground coal mines. In: *Proceedings of the 5th International Mine Water Congress*, Nottingham, UK, 17-24 September 1994, **1**, Seite 3-21.
- BAEHR, H.D. & STEPHAN, K. (2006) *Wärme- und Stoffübertragung*, 5. Neu bearbeitete Auflage, 332 Abb., 757 Seiten, Springer Verlag.
- BAUMANN, M., LAUE, H.-J. & MÜLLER, P. (2007) *Wärmepumpen - Heizen mit Umweltenergie*, 112 Seiten, BINE Informationsdienst [Hrsg.] Solarpraxis AG Verlag, Berlin.
- BANKS, D., YOUNGER, P.L., ARNESEN, R.T., IVERSEN, E.R. & BANKS, S.B. (1997) Mine-water chemistry: the good, the bad and the ugly, *Environ. Geol.*, **32**, Seite 157-174
- BÜRGENER, M. (1969) *Geographische Landschaftsaufnahme 1:200.000. Naturräumliche Gliederung Deutschlands. Die naturräumlichen Einheiten auf Blatt 110 Arnsberg. 80 S., 5. Abb., 1 Karte. Bad Godesberg (Bundesforsch.-Anst. Landeskd. u. Raumordn.).*
- BORNHARDT, W. (1910) *Über die Gangverhältnisse des Siegerlandes und seiner Umgebung - Teil 1. Königlich Preußische Geologisch Landesanstalt (Hg.). Berlin (Archiv für Lagerstättenforschung, Heft 2).*
- CERMÁK, V., RYBACH, L. (1979) *Terrestrial Heat Flow in Europe*, Springer Verlag Heidelberg, 328 Seiten.

- CHILDS, E.C. & TZIMAS, E. (1971) Darcy's law at small potential gradients. J. Soil Sci., 22, S. 319-327.
- CLAUSER, C., HEITFELD, M., ROSNER, P., SAHL, H. & SCHETELIG, K. (2005) Nutzung von Erdwärme in aufgelassenen Bergwerken – Beispiel Aachener Steinkohlenrevier, VBI – Fachmagazin Beratende Ingenieure, 6/14.
- CLAUSER, C. (2009) Heat Transport Processes in the Earth's Crust, Surveys in Geophysics, 30, Seiten 163-191, Springer.
- DESCAMPS, M.N., OLIEMANS, R.V.A., OOMS, G. & MUDDE, R.F. (2007) Experimental investigations of three-phase flow in a vertical pipe: Local characteristics of the gas phase for gas-lift conditions, International Journal of Multiphase Flow, 33, Seiten 1205-1221, Springer Verlag.
- DEUTSCHES GEWÄSSERKUNDLICHES JAHRBUCH (2007) Rheingebiet, Teil III, Mittel- und Niederrhein mit deutschem Issel- und Maasgebiet, Zeitraum 1.11.2004-31.12.2005, Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen (Hrsg.)
- DEV (2011) Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlamm-Untersuchung, Physikalische, chemische, biologische und mikrobiologische Verfahren, Band 1, 80. Lieferung (2011), A 0-5, Wasserchemische Gesellschaft – Fachgruppe der Gesellschaft Deutscher Chemiker in der Gemeinschaft mit dem Normenausschuss Wasserwesen (NAW) im DIN Deutsches Institut für Normung e.V. (Hrsg.), Verlag Wiley VCH.
- DIERSCH, H.J., VOIGT, R., PAGENKOPF, W. & GRÜNDER, R. (1997): Three-dimensional Modeling and Visualization of the Königstein Uranium Mine Using GIS and FEM. Geowissenschaften, 15, S. 52-60.
- DIN 38409-7 (2005) Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser, Abwasser- und Schlammuntersuchung – Summarische Wirkungs- und Stoffkenngrößen

(Gruppe H) – Teil 7: Bestimmung der Säure- und Basekapazität (H7), Normenausschuss Wasserwesen im DIN, 28 Seiten.

FEFLOW White Papers (2006): Finite Element Subsurface Flow & Transport Simulation Systems, Vol.1-5, WASY – Institut für Water Resources Planning and Systems Research Ltd.

FENCHEL, W., GIES, H., GLEICHMANN, H.-D., HELLMUND, W., HENTSCHEL, H., HEYL, K.E., HÜTTENHAIN, H., LANGENBACH, U., LIPPERT, H.-J., LUSZNAT, M., MEYER, W., PAHL, A., RAO, M.S., REICHENBACH, R., STADLER, G., VOGLER, H. & WALTHER, H. (1985) Sammelwerk Deutsche Eisenerzlagertstätten, I. Eisenerze im Grundgebirge (Varistikum), 1. Die Sideriterzgänge im Siegerland-Wied-Distrikt, Geologisches Jahrbuch Reihe D (Mineralogie, Petrographie, Geochemie, Lagerstättenkunde), Heft 77, 128 Abb., 38 Tab., 31 Tafeln, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe & Geologische Landesämter in der BRD (Hrsg.), E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung (Nägele u. Obermiller).

FISCHER, H. (1972) Geographische Landschaftsaufnahme 1:200.000. Naturräumliche Gliederung Deutschlands. Die naturräumlichen Einheiten auf Blatt 124 Siegen. 36 S., 2. Abb., 1 Karte. Bonn-Bad Godesberg (Bundesforsch.-Anst. Landeskd. u. Raumordn.).

FRIEDRICH, G. & JOCHUM, J. (1997) Lagerstättenbildung durch intraformationale Stoffumsetzungen – Ein Beitrag zur Einordnung der Metallogenese in die geodynamische Entwicklung Mitteleuropas. – In: Fortschritte geowissenschaftlicher Forschung. DFG-Mitteilung, 23: 25-103; Weinheim.

FURTAK H., LANGGUTH H.R. (1967) Zur hydrochemischen Kennzeichnung von Grundwässern und Grundwassertypen mittels Kennzahlen, Mem. IAH-Congress, 1965, VII, Seite 86-96, 5 Abb., Hannover.

- GANDO, A., GANDO, Y, ICHIMURA, K., IKEDA, INOUE, K. et al. (KamLAND Collaboration) (2011) Partial radiogenic heat model for Earth revealed by geoneutrino measurements, Nature Geoscience,
- GEOLOGISCHES LANDESAMT RGB-RLP (2010) Mündliche Mitteilung zur Durchlässigkeit der Gesteine im Untersuchungsgebiet.
- GLEICHMANN, H.D. (1990) Bergbaumuseum des Kreises Altenkirchen – Herdorf-Sassenroth, Museen in Rheinland-Pfalz, 5, 184 Seiten, Landkreis Altenkirchen (Hrsg.) in Zusammenarbeit mit dem Förderverein zur Erhaltung und Pflege der Bergbau- und Hüttentradition im Kreise Altenkirchen e.V. und der Landesbildstelle Rheinland-Pfalz in Koblenz, , Verlag der Zehnerschen Buchdruckerei, Speyer.
- GUET, S. & OOMS, G. (2006) Fluid Mechanical Aspects of the Gas-Lift Technique, Annu. Rev. Fluid Mech., **38**, Seiten 225-249.
- HAEHNLEIN, S., BAYER, P., BLUM, P (2010) International legal status of the use of shallow geothermal energy, Renewable Sustainable Energy Reviews, 14, Seite 2611-2625, Elsevier.
- HALL, A., SCOTT, J.A. & SHANG, H. (2011) Geothermal energy recovery from underground mines, Renewable and Sustainable Energy Reviews, 15, Seiten 916-924, Elsevier.
- HART, R. (2006) Sanierungsorientierte Wasserhaltung beim Tunnelvortrieb unter der Deponie Fernthal/Westerwald - Sanierung eines kontaminierten Kluftgrundwasserleiters mittels Drainagestollen. Fakultät für Georessourcen und Materialtechnik, Rheinisch-Westfälische-Technische Hochschule (RWTH) Aachen.
- HEITFELD, M., ROSNER, P., SCHETELIG, K. & SAHL, H. (2006) Nutzung aufgegebener Tagesschächte des Steinkohlenbergbaus für die Gewinnung von Erdwärme, Glückauf **142**/10, Seiten 432-438., VGE Verlag Essen.

- HEIN, U.F. (1993) Synmetamorphic Variscan siderite mineralization of the Rhenish Massif, Central Europe. – In: Mineralogical Magazine, 57: 451-467; London (Mineralogical Society of Great Britain and Ireland).
- HELMBOLD, F. (1988) Funktioneller Zusammenhang von Durchlässigkeit und Entwässerbarem Porenraum in Sanden des Mitteldeutschen Braunkohlenreviers. Unveröff. Notiz, 2 Seiten, 1 Abbildung.
- HERZOG, C.E. (2005) Die Geothermiebohrung „RWTH-1“: Technische, geologische und bergrechtliche Aspekte eines Geothermiprojektes in öffentlicher Trägerschaft, 180 Seiten, Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen.
- HEYL K.E. (1954) Hydrochemische Untersuchungen im Gebiet des Siegerländer Erzbergbaus. – 72 Seiten., 7 Tab., 10 Abb., Heidelberg.
- HÖLTING, B. & COLDEWEY, W.G. (2005) Hydrogeologie – Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie, 326 Seiten, 6. überarbeitete und erweiterte Auflage, Spektrum Akademischer Verlag.
- HOFFMANN, A. (1964) Beschreibung rheinland-pfälzischer Bergamtsbezirke. Band 1 Bergamtsbezirk Betzdorf. Bearbeitet im Auftrag des Oberbergamtes Rheinland-Pfalz in Bad Ems, 260 S., 1 Karte, 20. Abb., Verlag Glückauf GmbH Essen
- HÜTTENHAIN, H. (1962) Zur Geochemie des Spateisensteins in den Siegerländer Erzgängen, Bericht über das DFG-Kolloquium „Geochemi“ in Bad Soden-Allendorf, Seiten 32-33, Bad Godesberg.
- HURTER, S. & HAENEL, R. (Hrsg.) (2002) Atlas of geothermal resources in Europe, European Commission for Official Publications of the European Communities, Luxemburg.

- HUTTRER, G.W. (1997) Geothermal heat pumps: an increasingly successful technology, *Renew. Ener.*, **10**, Seite 481-488.
- JACOBI, O. & EVERLING, G. (1981) *Praxis der Gebirgsbeherrschung*, 2. Auflage, 576 Seiten, Verlag Glückauf, Essen.
- KALTSCHMITT, M., HUENGES, E. & WOLFF, H. (Hrsg.) (1999) *Energie aus Erdwärme – Geologie, Technik und Energiewirtschaft*, 77. Abb. 45 Tab., 265 Seiten, Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie.
- KINZELBACH, W. & RAUSCH, R. (1995) *Grundwassermodellierung – Eine Einführung mit Übungen*, 223 Abb., 15 Tab., 283 Seiten, Gebrüder Borntraeger Verlag Berlin.
- KIRNBAUER, T. (1998) *Geologie und hydrothermale Mineralisation im rechtsrheinischen Schiefergebirge. Tagungsband zur VFMG-Sommertagung in Herborn.* – In: Nassauischer Verein für Naturkunde, SB 1, 328 S., 77 Abb., 12 Tab., 8 Taf.; Wiesbaden.
- KRAH, H.W. (2005) *Erinnerungen aus meiner bergmännischen Zeit – Bergbau im Siegerland, am Beispiel der Grube San Fernando / Wolf, Herdorf*, 2. Auflage, Verlag Vorländer Siegen.
- KRAPP, L. (1979) *Gebirgsdurchlässigkeit im linksrheinischen Schiefergebirge - Bestimmung nach verschiedenen Methoden.* In: *Mitt. Ing.- u. Hydrogeol.*, H. 9, S. 313–347.
- LANDAU, L.D. & LIFSCHITZ, E.M. (1991) *Hydrodynamik.* In: ZIESCHE, P.: *Lehrbuch der theoretischen Physik VI*, 5. Auflage, 683 Seiten, 136 Abb., Akademie Verlag, Berlin.
- LANDSCHREIBER, K. (2010) *Hydrogeologische Verhältnisse im Umfeld der Grube Georg bei Willroth im Westerwald*, Diplomarbeit an der Johannes-Gutenberg Universität Mainz, 148 S. (unveröff.).

- LANGGUTH, H.R. & VOIGT, R. (2005) Hydrogeologische Methoden, 2. überarbeitete und erweiterte Auflage, 1005 Seiten, 304 Abb., Springer Verlag, Berlin.
- LAWA (1993) Grundwasser-Richtlinien für Beobachtung und Auswertung, Teil 3: Grundwasserbeschaffenheit, 59 Seiten, 17 Abbildungen, 3 Tabellen, Essen.
- MALOLEPSZY, Z. (2003) Low-temperature, man-made geothermal reservoirs in abandoned workings of the underground mines, In: 28th workshop on geothermal reservoir engineering.
- MATTHEß, G. & UBELL, K. (2003) Allgemeine Hydrogeologie – Grundwasserhaushalt, Lehrbuch der Hydrogeologie, Band 1, 2. Überarbeitete und erweiterte Auflage, 575 Seiten, 249 Abb., 83 Tab., Gebrüder Borntraeger, Berlin.
- MERKEL, B. & SPERLING, B. (1996) Hydrogeochemische Stoffsysteme Teil 1, DVWK Schriften 10, 306 Seiten, Kommissionsvertrieb Wirtschafts- und Verlagsgesellschaft Gas und Wasser mbH, Bonn.
- MIBUS, J., SZYMCZAK, P., HERBERT, D. & OSTER, H. (2002): Kombiniertes Einsatz von FCKW und Tritium als Tracer – In: HERBERT, D., MERKEL, B. & WOLKERSDORFER, C. (Hrsg.): Isotope und Tracer in der Wasserforschung – Wissenschaftliche Mitteilungen, 19: 1-111, 78 Abb., 8 Tab.; Institut für Geologie der TU Bergakademie Freiberg/Sachsen.
- MILITZER, H., SCHÖN, J. & STÖTZNER, Z. (1986) Angewandte Geophysik im Ingenieur- und Bergbau, 2. Auflage, 419 Seiten, 341 Abb., 53 Tab., Enke Verlag, Stuttgart.
- MÜLLER-SALZBURG, L. (1978) Der Felsbau 3, 945 Seiten, 612 Abb., 50 Tab., Enke Verlag, Stuttgart.

- OFNER, C. & WIEBER, G. (2008) Geothermische Potentiale gefluteter Erzbergwerke, bbr-Fachmagazin für Brunnen- und Leitungsbau, Jahresmagazin 12/2008: S. 72-77.
- OTTOW, J.C.G (1981) Mechanism of Bacterial Iron-Reduction in Flooded Soils, Inst. Soil Sci, Academica Sinica: Proc. Symp. Paddy Soil, Seiten 331-343, Peking, Springer Verlag.
- PARKHURST, D.L. & APELLO, C.A.J (1999) User's Guide to PhreeqC (Version 2) – A Computer Program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations, Water-Resources Investigations Report 99-4259, U.S. Department of the Interior, U.S. Geological Survey, 326 Seiten.
- PORR, S. (2011) Hydrogeologie ausgewählter gefluteter Gruben im Siegerland-Wied-Distrikt, Diplomarbeit an der Johannes-Gutenberg Universität Mainz, 200 S. (unveröff.).
- PRETOR, A. & RINN, I. (1964) Bergbau in der Bundesrepublik Deutschland, 478 Seiten, Essen.
- RAYMOND, J. & THERRIEN, R. (2008) Low-temperature geothermal potential of the flooded Gaspé Mines, Québec, Canada, Geothermics, **37**, Seiten 189-210, Elsevier.
- RICHARDS, L.A. (1931) Capillary conductivity of liquids in porous mediums. Physics, 1, S. 318-333.
- SHARP, K.V. & ADRIAN, R.J. (2004) Transition from laminar to turbulent flow in liquid filled microtubes – Experiments in Fluids, **36**(5), Seiten 741-747, 6 Abb., Berlin.
- SLOTTA, R. (1983) Der Metallerzbergbau - Technische Baudenkmäler in der Bundesrepublik, Band 4, Teil II, 855 Seiten, Bochum.

- SPITZ, K.H. & MORENO, J. (1996) A Practical Guide to Groundwater and Solute Transport Modeling, 461 Seiten, John Wiley & Sons, New York.
- STOBER, I. (2007) Wärme ist unter uns – Geothermie in Baden-Württemberg, Wirtschaftsministerium Baden-Württemberg (Hrsg.), Stuttgart.
- STOLL, R. & BAUER, D. (1991) Anwendung geophysikalischer Verfahren zur Kontrolle und Überwachung technologischer Teilprozesse im untertägigen Erzbergbau, Neue Bergbautechnik, 21(12), Seiten 427-431, 11 Abb., 1 Tab., Leipzig.
- STREB, C. & WIEBER, G. (2011) Geothermal energy from a flooded mine: a hydraulic model, IMWA Congress 2011, Aachen.
- THÜNKER, M. (2008) Unterdevon im Siegerland - Stratigraphie von Deutschland VIII, Devon, Schriftenreihe der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften SDGG Heft 52, Deutsche Stratigraphische Kommission (Hrsg.), Hannover.
- VDI-RICHTLINIEN 4640, BLATT 1 (2000) Thermische Nutzung des Untergrundes – Grundlagen, Genehmigungen, Umweltaspekte. 32 Seiten, VDI-Gesellschaft Energietechnik [Hrsg.], Düsseldorf.
- VDI-RICHTLINIEN 4640, BLATT 2 (2001) Thermische Nutzung des Untergrundes: Erdgekoppelte Wärmepumpenanlagen. VDI-Gesellschaft Energietechnik [Hrsg.], Düsseldorf.
- YOUNGER, P.L. & LAPIERRE, A.B. (2000) 'Uisge Mèinne': mine water hydrogeology in the Celtic lands, from Kernow (Cornwall, UK) to Ceap Breatain (Cape Breton, Canada), In: ROBINS, N.S. & MISSTEAD, B.D.R. (Hrsg.) Groundwater in the Celtic Regions: Studies in Hard Rock and Quaternary Hydrogeology, Geological Society, London, Special Publications, **182**, Seiten 35-52.
- WALLISER, O.H. & ZIEGLER, W. (2008) Paläogeographie und Fazies des Devons - Stratigraphie von Deutschland VIII, Devon, Schriftenreihe der Deutschen

Gesellschaft für Geowissenschaften SDGG Heft 52, Deutsche Stratigraphische Kommission (Hrsg.), Hannover.

WATZLAF, G.R. & ACKMAN, T.E. (2006) Underground Mine Water for Heating and Cooling using Geothermal Heat Pump Systems, Mine Water and the Environment, **25**, Seite 1-14, Springer Verlag.

WETTIG, E. (1974) Die Erzgänge des nördlichen, rechtsrheinischen Schiefergebirges, ihr Inhalt und ihre tektonischen Zusammenhänge. – In: Clausthaler Geologische Abhandlungen, 19: 1-363, Clausthal-Zellerfeld.

WIEBER, G. (1999) Die Grubenwässer des ehemaligen Blei-, Zink-, Kupfer- und Quecksilber-Erzbergbaus an Beispielen des westlichen Rheinischen Schiefergebirges und der Saar-Nahe-Senke: Hydraulik, hydrochemische Beschaffenheit und umweltgeologische Bewertung, Habilitationsschrift, Fachbereich 16 (Geowissenschaften und Geographie), Justus - Liebig - Universität Gießen

WIEBER, G. (2007) Studie zur Erfassung und Quantifizierung des Wärmeflusses aus gefluteten Grubenbauen des ehemaligen Erzbergbaus in Herdorf und Abschätzung der geothermischen Nutzungsmöglichkeiten (unveröff.).

WIEBER, G. & POHL, S. (2008) Mine water – a source of geothermal energy – examples from the Rhenish Massif. In: IMWA Congress Proceedings.

WIEBER, G. & STREB, C. (2011) Hydrochemistry and mine water hydraulics of flooded mines: case studies from the Rhenish Massif, Germany. IMWA Congress 2011, Aachen.

WIEBER, G., POHL, C., LANDSCHREIBER, K. & STREB, C. (2011) Geflutete Grubenbaue als Wärmespeicher, bbr-Fachmagazin für Brunnen- und Leitungsbau, **5**, S. 34-40.

WOLKERSDORFER, C. (2008) Water Management at Abandoned Flooded Underground Mines, 465 Seiten., 33 Tab., 125 Abb., Berlin.

9 Kartenverzeichnis

Geologische Karte:

QUIRING, H. (1934) Geologische Karte 1:25.000 Blatt 3040 Betzdorf, aufgenommen 1929, Königlich Preußische Landesaufnahme 1901, Reichsamt für Landesaufnahme, berichtigt 1928, Berliner Lithographisches Institut, Berlin.

Topographische Karte:

TK 1:25.000 Blatt 5213 Betzdorf (2008) Landesamt für Vermessung und Geobasisinformation Rheinland-Pfalz (Copyright 2011).

Hydrogeologische Karte:

Hydrogeologische Übersichtskarte 1:500.000, Blatt Köln (1955), Pfeifer, D., Quitzow, H.W. & Schröder, E. (Bearbeiter), Bundesministerium für Wirtschaft (Hrsg.), Hydrogeologischer Arbeitskreis, Leitung Grahmann, R.

Grubenrisse:

Gangkarte Grube Wolf 1:10.000 (1906-1923)

Gangkarte San Fernando-Füsseberg-Friedrich Wilhelm 1:10.000 (1906-1923)

Übersichts-Seigerriss Florz-Füsseberger Gangzug 1:4.000, angefertigt Januar 1946 durch den Markscheider, Betzdorf.

Militärperspektive Grube Wolf 1:2.000

Militärperspektive Grube San Fernando 1:2.000, Stand 30.9.1959

Militärperspektive Grube Füsseberg-Friedrich Wilhelm 1:2.000, angefertigt Januar 1947 durch den Markscheider

Eisenerzbergwerk Füsseberg-Friedrich Wilhelm, Schachtschnitte 1:5.000 (1959), nachgetragen bis 1963

Eisenerzbergwerk San Fernando-Wolf, Schachtschnitte 1:5.000 (1959),
nachgetragen bis 1963

Übersichtsrisse Eisenerzbergwerk San Fernando-Wolf 1:2.000

Blatt Neunkirchen 8	(1960)
Blatt Neunkirchen 7	(1961)
Blatt Neunkirchen 7	(1961)

Übersichtsrisse Eisenerzbergwerk Füsseberg-Friedrich Wilhelm 1:2.000

Blatt Neunkirchen 1	(1959)
Blatt Neunkirchen 2	(1959)
Blatt Daaden 16	(1959)
Blatt Daaden 21	(1959)
Blatt Elkenroth 14	(1959)
Blatt Elkenroth 29	(1959)
Blatt Daaden 11	(1960)
Blatt Elkenroth 25	(1960)
Blatt Betzdorf 5	(1960)
Blatt Elkenroth 15	(1961)

10 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2-1	Leitfähigkeits- und Temperaturprofil des Fluor-Schachtes der Grube Straßberg/Harz (bearbeitet aus WOLKERSDORFER 2008)
Abbildung 3-1	Lage des Untersuchungsgebiets sowie Position der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (Karte LVG RLP)
Abbildung 3-2	Geologische Übersicht über das Siegerland (THÜNKER 2008)
Abbildung 3-3	Geologische Lage der untersuchten Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (Ausschnitt aus der Geologischen Karte 1:25.000 Blatt Betzdorf, 1929)
Abbildung 3-4	Schematischer Schnitt ohne Maßstab durch die gefalteten Schichten des Siegerlandes und den Sideriterzgängen (aus KRAH 2005 [umgezeichnet nach Dr. Henke])
Abbildung 3-5	Grundwasserlandschaften im nördlichen Rheinland-Pfalz, roter Kasten: Untersuchungsgebiet (bearbeitet aus: Hydrogeologischer Atlas Rheinland-Pfalz 2005)
Abbildung 3-6	Temperatur und Niederschlag (tägliche Werte) der DWD Klimastation Bad Marienberg
Abbildung 3-7	mittlere Grundwasserneubildungshöhe im nördlichen Rheinland-Pfalz, roter Kasten: Untersuchungsgebiet (bearbeitet aus: Hydrogeologischer Atlas Rheinland-Pfalz 2005)
Abbildung 3-8	Schematischer Überblick Grubenwässer (bearbeitet nach WIEBER 1999)
Abbildung 3-9	Übersichtskarte des Siegerland-Wied-Distriktes (bearbeitet nach HOFFMANN 1964)
Abbildung 3-10	schematische Darstellung der abgebauten Erzmittel der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (ergänzt und bearbeitet nach WIEBER 2007, Grundlage nach FENCHEL et al. 1985)
Abbildung 3-11	Hauptmineralisatin im Siegerland-Wied-Distrikt (aus LANDSCHREIBER 2010, nach WETTIG (1974) und HEIN (1993))
Abbildung 3-12	schematischer Überblick über die Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (ergänzt und bearbeitet nach WIEBER 2007, Grundlage nach FENCHEL et al. 1985)

-
- Abbildung 3-13 hydrochemische Beschaffenheit der Grubenwässer der verschiedenen Gruben in unterschiedlichen Teufen während des aktiven Bergbaus
(zusammengestellt aus FENCHEL et al. 1985, Analysen überwiegend nach HEYL 1954)
- Abbildung 3-14 Temperaturen von Grubenwässern im Siegerland während des aktiven Bergbaus (bearbeitet nach FENCHEL et al. 1985)
- Abbildung 3-15 Gangkarte (Ausschnitt) der Grube Wolf (undatiert)
- Abbildung 3-16 Gangkarte (Ausschnitt) der Grube San Fernando (einschließlich der im Weiteren angeschlossenen Grube Friedrich Wilhelm sowie Grube Zufälligglück
(nicht hydraulisch angeschlossen) (undatiert)
- Abbildung 3-17 links: Entwässerung der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm über den Neuen Förderstollen der Grube Wolf (Auslauf mit Messwehr),
rechts: Neuer Förderstollen Wolf mit Eisenhydroxid-Ablagerungen, welche auf unterschiedliche Wasserstände hinweisen (Fotos: POHL 2011)
- Abbildung 3-18 Zugang zur Grube San Fernando (Foto: PORR 2011)
- Abbildung 3-19 links: Blick auf/in Schacht Wolf von Grube Wolf (Foto: POHL 2011),
rechts: Blick in Schacht 2 von Grube San Fernando (Foto: PORR 2011)
- Abbildung 4-1 Gegenüberstellung der Vor-Ort-Parameter der Grubenwässer an den unterschiedlichen Probenlokalitäten
- Abbildung 4-2 Schöller-Diagramm der chemischen Zusammensetzung (Hauptanionen und -kationen) der ausgewählten Grubenwasser-Proben
- Abbildung 4-3 Piper-Diagramm der chemischen Zusammensetzung (Hauptanionen und -kationen) der ausgewählten Grubenwasser-Proben
- Abbildung 4-4 Probenahme (Titration) am Auslauf der Grube Wolf (Foto: PORR 2011)
- Abbildung 4-5 zeitlicher Verlauf der Vor-Ort-Parameter Temperatur, pH-Wert und elektrischer Leitfähigkeit am Auslauf der Grube Wolf
- Abbildung 4-6 zeitlicher Verlauf der Vor-Ort-Parameter Sauerstoffgehalt und Redoxvermögen am Auslauf der Grube Wolf

Abbildung 4-7	Abflussganglinien (basierend auf Tagesmittelwerten) der Vorfluter Sieg und Heller (Datenquelle Geoportal Wasser des MUFV RLP)
Abbildung 4-8	Niederschlag, Evapotranspiration und Grundwasserneubildung
Abbildung 4-9	Dreiecksüberfallmesswehr am Auslauf der Grube Wolf (Foto: PORR 2011) und Schemaskizze des Dreiecks-Überfallmesswehres mit zugehörigen Kennzahlen (w: gemessener Wasserstand, a: Abstand Sohle-Scheitel, hü: eingestaute Wasserhöhe)
Abbildung 4-10	Temperatur und Abflussmenge am Auslauf des Neuen Förderstollens der Grube Wolf (grüner Kasten: hydrologisches Jahr 2010)
Abbildung 4-11	Abflussmenge und Temperatur am Neuen Förderstollen der Grube Wolf, Temperatur und Niederschlag an der Wetterstation des DWD in Bad Marienberg
Abbildung 4-12	Verlauf der Abflussganglinien der Vorfluter Heller und Sieg sowie der Abflussmenge am Tiefen Stollen der Grube Wolf
Abbildung 4-13	links: Blick in/auf Blindschacht Wolf,; rechts: Gasblasen auf Wasseroberfläche von Blindschacht Wolf (Fotos: POHL 2011)
Abbildung 4-14	Tiefenmessung Schacht Wolf, Grube Wolf, 10.03.2009
Abbildung 4-15	Tiefenmessung Schacht Wolf, Grube Wolf, 17.07.2010
Abbildung 4-16	Tiefenmessung 10.03.2009 und Schachtschnitt Grube San Fernando-Wolf (Grundlage Schachtschnitt 1:2000, 1959, bearbeitet)
Abbildung 4-17	Tiefenmessung Schacht 2, Grube San Fernando, 25.09.2010
Abbildung 4-18	Gangflächenentwicklung der Grube San Fernando-Wolf (zusammengestellt aus FENCHEL ET AL., 1985 und HOFFMANN, 1964)
Abbildung 4-19	Gangflächenentwicklung der Grube Füsseberg – Friedrich Wilhelm (zusammengestellt aus FENCHEL et al. 1985 und HOFFMANN 1964)
Abbildung 4-20	Streckenquerschnitte im Siegerländer Bergbau im Verlaufe der Jahrhunderte (GLEICHMANN 1990)
Abbildung 4-21	Versatz (rückverfüllter Abbaubereich, Grube San Fernando (Foto: POHL 2011)

Abbildung 5-1	Superelemente-Gitter als Grundlage für die Szenario-Modellierung (rot: vorangelegte Punktelemente, blau: vorangelegte Linienelemente)
Abbildung 5-2	Finite Elemente-Gitter als Grundlage für die Szenario-Modellierung
Abbildung 5-3	Position der rückversetzten Abbaubereiche und obertägigen Auflockerungszone (rot) mit, gegenüber der Matrix (violett), erhöhter Durchlässigkeit
Abbildung 5-4	Position der verwendeten DFE in Szenario 1
Abbildung 5-5	hydraulische Druckspiegelhöhenverteilung (hydraulic head) in Szenario 1
Abbildung 5-6	Temperaturverteilung in Szenario 1
Abbildung 5-7	Position der verwendeten DFE in Szenario 2
Abbildung 5-8	hydraulische Druckspiegelhöhenverteilung (hydraulic head) in Szenario 2
Abbildung 5-9	Temperaturverteilung in Szenario 2
Abbildung 5-10	Position der verwendeten DFE in Szenario 3
Abbildung 5-11	hydraulische Druckspiegelhöhenverteilung (hydraulic head) in Szenario 3
Abbildung 5-12	Temperaturverteilung in Szenario 3
Abbildung 5-13	Position der verwendeten DFE in Szenario 4
Abbildung 5-14	hydraulische Druckspiegelhöhenverteilung (hydraulic head) in Szenario 4
Abbildung 5-15	Temperaturverteilung in Szenario 4
Abbildung 5-16	Aufteilung eines 3D-Modells in Layer und Slices
Abbildung 5-17	Lage des Abbaubereiches im Modellgebietes (lila), mit Verlauf der Grubensohlen (rot) sowie der Lage der Schächte und des Auslaufes Grube Wolf (blaue Punkte)
Abbildung 5-18	Lage des Modellgebietes (rote Umrandung), mit Verlauf der Grubensohlen (rot) sowie der Lage der Schächte und des Auslaufes Grube Wolf (blaue Punkte)
Abbildung 5-19	Superelemente-Gitter des 3D-Modells mit Linien (dunkelblau)- und Punktelelementen (hellblau)

Abbildung 5-20	Finite Elemente-Gitter des Modells mit angelegten Linien- und Punktelelementen (Aufsicht auf Slice 1)
Abbildung 5-21	vollständiges 3D-FE-Modell
Abbildung 5-22	Position der Abbaubereiche auf Slices 1 bis 17
Abbildung 5-23	Wasserbudget an Slice 1 (blau: Auslauf Grube Wolf)
Abbildung 5-24	3D-FE-Modell (Druckspiegel-Höhen)
Abbildung 5-25	3D-FE-Modell, Slice 15, Strömungsgeschwindigkeiten
Abbildung 5-26	3D-FE-Modell, Temperaturverteilung
Abbildung 5-27	3D-FE-Modell, Temperaturverteilung Slice 1
Abbildung 5-28	Lage des Entnahmebrunnens und Infiltrationsbrunnens der Szenariomodellierungen
Abbildung 5-29	Lage des Entnahmebrunnens und Infiltrationsbrunnens der Szenariomodellierungen

11 Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1	Wärmeleitfähigkeiten ausgewählter Materialien (bei 20°C und 100kPa)
Tabelle 3-1	Stratigraphische Gliederung (zusammengestellt aus FENCHEL et al. 1985 und THÜNKER 2008)
Tabelle 3-2	Schichtenfolge der Oberen Siegen Schichten (bearbeitet aus KRAH 2005, zusammengestellt nach DENKMANN, HENKE, QUIRING, PILGERT & DAPPERT)
Tabelle 3-3	Wasserzuflussmengen während des aktiven Bergbaus um 1910 und 1953 (aus FENCHEL et al. 1985, Daten von BORNHARDT 1910 und HEYL 1953)
Tabelle 4-1	Bestimmungsgrenzen der einzelnen Elemente
Tabelle 4-2	Ergebnisse der ausgewählten Wasserproben an Lokalitäten der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (Teil 1)
Tabelle 4-3	Ergebnisse der ausgewählten Wasserproben an Lokalitäten der Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm (Teil 2)
Tabelle 4-4	berechnete Sättigungsindizes der ausgewählten Proben
Tabelle 4-5	berechnete Spezies der ausgewählten Proben
Tabelle 4-5	berechnete Spezies der ausgewählten Proben (Fortsetzung)
Tabelle 4-6	Verdünnungsmodellierung (70% Grubenwasser Schacht Wolf, 30% Niederschlag)
Tabelle 4-7	Grundwasserneubildung für das Einzugsgebiet der Heller aus den Klimadaten der Wetterstation Bad Marienberg, Größe Einzugsgebiet 196 km ²
Tabelle 4-8	berechnete Reynoldszahlen für Grube Wolf, Schacht Wolf und Blindschacht
Tabelle 4-9	Eingestaute Wassermenge in den Abbaubereichen (blau hinterlegt: gesättigte Zone)
Tabelle 4-10	Eingestaute Wassermenge in den Abbaubereichen (blau hinterlegt: gesättigte Zone, rot: geschätzt)
Tabelle 4-11	In Sohlen der Grube Wolf eingestautes Wasservolumen

Tabelle 4-12	In Sohlen der Grube San Fernando eingestautes Wasservolumen
Tabelle 4-13	In Sohlen der Grube Füsseberg-Friedrich Wilhelm (einschließlich Grube Einigkeit) eingestautes Wasservolumen
Tabelle 4-14	In Sohlen der Grube Glaskopf eingestautes Wasservolumen
Tabelle 4-15	In die Schächte eingestaute Wassermenge der Schächte der Verbundgrube
Tabelle 4-16	Gesamtwassermenge für die einzelnen Bergwerksbereiche und bilanzierte Wassermenge für die Verbundgrube San Fernando-Wolf-Füsseberg-Friedrich Wilhelm unter Annahmen verschiedener Versatzhohlraumanteile
Tabelle 5-1	Eingabeparameter für die Modellierung der Schächte und Sohlen als DFE
Tabelle 5-2	Materialparameter
Tabelle 5-3	Zusammenstellung der modellierten Strömungsgeschwindigkeiten in verschiedenen Bereichen des Grubengebäudes
Tabelle 5-4	Aufteilung des Modells in Slices an Hand der Bergwerksgeometrie, sowie die Position der Bergwerkssohlen auf den Slices
Tabelle 5-5	Aufteilung des Modells in Slices an Hand der Bergwerksgeometrie, Reichweite der Schächte
Tabelle 5-6	Zuweisung der Abbaubereiche auf den jeweiligen Sohlen/Slices
Tabelle 5-7	Eingabeparameter für die Modellierung der Sohlen als DFE
Tabelle 5-8	Eingabeparameter für die Modellierung der Schächte als DFE
Tabelle 5-9	Szenariomodellierungen

12 Anhang

12.1 Anhang A

Zusammenstellung der Proben am Auslauf der Grube Wolf

	06.01.2007	17.03.2007	14.04.2007	11.08.2007	14.03.2008	21.11.2008	04.07.2009	25.07.2009
	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf
Temperatur [°C]	16,0	16,9	17,7	18,2	16,1	15,4	18,4	17,4
el. Leitfähigkeit [mS/cm]	1057	1055	1071	1011	983	953	986	1015
pH-Wert	7,56	7,36	7,18	7,14	7,62	7,79	7,63	7,57
Redoxvermögen [mV]	427	382	354	308	469	494	434	204
Sauerstoff [mg/l]	5,00	5,44	6,12	4,32	5,84	6,05	6,56	6,44
K _{S 4,3} [mmol/l]	7,00	7,50	7,60	n.b.	7,90	7,40	8,50	7,50
K _{B 8,2} [mmol/l]	1,10	0,60	1,20	n.b.	0,30	0,13	0,70	0,84
CO ₂ [mg/l] *	48,4	26,4	52,8	n.b.	13,2	5,72	30,8	37,0
Ca ²⁺ [mg/l]	79,0	77,2	76,8	n.b.	n.b.	72,6	73,8	n.b.
Mg ²⁺ [mg/l]	90,1	89,2	91,7	n.b.	n.b.	82,4	88,1	n.b.
Na ⁺ [mg/l]	7,81	29,8	30,4	n.b.	n.b.	27,9	28,7	n.b.
K ⁺ [mg/l]	7,81	6,5	17,3	n.b.	n.b.	6,26	6,63	n.b.
Li ⁺ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,02	0,09	n.b.
F ⁻ [mg/l]	0,24	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,21	0,18	n.b.
Cl ⁻ [mg/l]	12,3	19,7	12,9	n.b.	n.b.	14,9	13,74	n.b.
SO ₄ ²⁻ [mg/l]	229	251	226	n.b.	n.b.	201	201	n.b.
HCO ₃ ²⁻ [mg/l]	427	458	463	n.b.	482	451	519	458
NO ₃ ²⁻ [mg/l]	1,40	n.b.	14,8	n.b.	n.b.	7,64	n.b.	n.b.
As [mg/l] gef./ungef.	0,005	0,003	<0,03	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Pb [mg/l] gef./ungef.	< 0,0005	0,0003	<0,01	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Fe [mg/l] gef./ungef.	< 0,09	0,18	0,33	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Mn [mg/l] gef./ungef.	1,59	1,91	1,65	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Ni [mg/l] gef./ungef.	0,013	0,009	<0,01	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Zn [mg/l] gef./ungef.	0,07	0,032	0,03	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Σ Kationen [mmol(eq)/l]	12,9	12,7	13,1	n.b.	n.b.	11,8	12,4	n.b.
Σ Anionen [mmol(eq)/l]	12,6	13,28	12,9	n.b.	n.b.	12,1	13,1	n.b.
relativer Fehler %	2,52	4,83	1,81	n.b.	n.b.	-2,89	-5,64	n.b.

	21.10.2009	06.12.2009	12.12.2009	20.02.2010	17.04.2010	24.05.2010	04.02.2011	11.05.2011
	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf	Auslauf TS Wolf
Temperatur [°C]	16,7	16,6	16,8	16,7	17,2	16,7	16,9	16,8
el. Leitfähigkeit [mS/cm]	1014	1015	1008	1015	1018	995	1015	1049
pH-Wert	7,70	7,73	7,66	7,63	n.b.	7,73	7,57	7,51
Redoxvermögen [mV]	432	452	439	472	n.b.	293	252	365
Sauerstoff [mg/l]	4,95	n.b.	n.b.	4,58	n.b.	8,21	6,47	3,63
K _{S 4,3} [mmol/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	7,25
K _{B 8,2} [mmol/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,35
CO ₂ [mg/l] *	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	15,4
Ca ²⁺ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	67,6
Mg ²⁺ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	81,3
Na ⁺ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	1,38
K ⁺ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,20
Li ⁺ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.n.
F ⁻ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,22
Cl ⁻ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	12,2
SO ₄ ²⁻ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	201
HCO ₃ ²⁻ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	442
NO ₃ ²⁻ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
As [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Pb [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Fe [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,042/0,270
Mn [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	2,20/2,40
Ni [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Zn [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Σ Kationen [mmol(eq)/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	11,6
Σ Anionen [mmol(eq)/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	11,8
relativer Fehler %	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	-1,36

n.b. nicht bestimmbar

WOF Wasseroberfläche

* gelöst

12.2 Anhang B

Zusammenstellung der Proben an den Schächten der Grube Wolf und San Fernando

	17.03.2007 Schacht Wolf 0,5m u WOF	27.03.2007 Schacht Wolf 0,5m u WOF	05.09.2010 Schacht Wolf 0,5 m u WOF	12.09.2010 Schacht Wolf 0,5 m u WOF	17.03.2007 Schacht Wolf 80 m u WOF	05.09.2010 Schacht Wolf 195 m u WOF	27.03.2007 Alter Schacht Wolf 0,5m u WOF	12.09.2010 Alter Schacht Wolf 0,5 m u WOF
Temperatur [°C]	17,5	17,6	17,5	17,6	17,7	18,0	15,0	14,5
el. Leitfähigkeit [mS/cm]	1090	1109	1065	1059	1091	1080	1007	922
pH-Wert	6,70	7,05	7,07	7,09	6,84	7,14	6,90	6,92
Redoxvermögen [mV]	238	186	186	107	237	18,5	527	260
Sauerstoff [mg/l]	1,91	1,02	9,27	n.b.	1,80	2,46	1,18	n.b.
K _{S 4,3} [mmol/l]	8,00	7,90	7,80	7,90	8,00	8,00	6,50	6,15
K _{B 8,2} [mmol/l]	1,91	1,70	1,20	1,25	1,80	1,00	1,50	1,30
CO ₂ [mg/l] *	79,2	74,8	52,8	55,0	79,2	44,0	66,0	57,2
Ca ²⁺ [mg/l]	77,4	67,8	66,9	67,3	77,6	67,7	61,1	60,6
Mg ²⁺ [mg/l]	91,2	85,0	86,1	84,5	90,3	86,9	73,1	68,1
Na ⁺ [mg/l]	30,1	35,1	33,1	31,2	29,9	33,9	31,4	26,4
K ⁺ [mg/l]	6,58	7,52	7,80	7,60	6,62	7,90	9,34	729
Li ⁺ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
F ⁻ [mg/l]	n.b.	0,27	0,10	0,24	n.b.	0,09	0,30	0,25
Cl ⁻ [mg/l]	n.b.	13,5	11,3	12,1	n.b.	11,2	16,9	16,4
SO ₄ ²⁻ [mg/l]	n.b.	202	208	157	n.b.	210	197	195
HCO ₃ ²⁻ [mg/l]	488	482	476	482	488	488	397	375
NO ₃ ²⁻ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
As [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	0,005/ n.b.	n.b./0,006	n.b.	0,0008/n.b.	n.b.	n.b./u.d.B.
Pb [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	u.d.B./n.b.	n.b./u.d.B.	n.b.	u.d.B./n.b.	n.b.	n.b./u.d.B.
Fe [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	0,35/n.b.	n.b./0,67	n.b.	0,45/n.b.	n.b.	n.b./0,32
Mn [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	2,10/n.b.	n.b./2,50	n.b.	2,20/n.b.	n.b.	n.b./2,20
Ni [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	u.d.B./n.b.	n.b./u.d.B.	n.b.	0,096/n.b.	n.b.	n.b./0,028
Zn [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	u.d.B./n.b.	n.b./0,029	n.b.	0,05/n.b.	n.b.	n.b./0,15
Σ Kationen [mmol(eq)/l]	12,8	12,1	12,1	11,9	12,8	12,5	10,7	9,95
Σ Anionen [mmol(eq)/l]	n.b.	12,5	12,2	11,5	n.b.	12,7	11,1	10,7
relativer Fehler %	n.b.	-3,21	-3,20	2,87	n.b.	-3,98	-3,88	-7,14

	27.03.2007 Blindschacht Wolf 0,5m u WOF	12.09.2010 Blindschacht Wolf 0,5 m u WOF	17.03.2007 Blindschacht Wolf 0,5m u WOF	11.08.2007 Schacht San Fernando	04.07.2009 Schacht San Fernando	11.05.2011 Schacht San Fernando 55 m u WOF	12.09.2010 Schacht San Fernando 77 m u WOF
Temperatur [°C]	17,6	17,5	12,3	16,6	16,4	15,8	16,9
el. Leitfähigkeit [mS/cm]	1062	1059	764	1088	1041	1073	1061
pH-Wert	7,04	7,09	6,54	6,85	7,12	7,11	7,10
Redoxvermögen [mV]	180	230	345	202	351	290	224
Sauerstoff [mg/l]	0,85	n.b.	4,86	0,77	1,17	1,29	n.b.
K _{S 4,3} [mmol/l]	7,90	8,05	1,40	8,00	8,40	7,30	7,50
K _{B 8,2} [mmol/l]	1,30	1,20	1,10	3,20	0,60	1,20	1,25
CO ₂ [mg/l] *	57,2	52,8	48,4	140	26,4	52,8	55,0
Ca ²⁺ [mg/l]	68,2	66,4	77,1	n.b.	74,4	67,0	67,0
Mg ²⁺ [mg/l]	84,1	85,4	38,3	n.b.	89,2	81,9	85,6
Na ⁺ [mg/l]	33,5	33,0	14,8	n.b.	29,4	1,34	32,9
K ⁺ [mg/l]	7,79	7,20	7,15	n.b.	7,20	0,19	7,30
Li ⁺ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,09	n.n.	n.b.
F ⁻ [mg/l]	0,32	0,26	n.b.	n.b.	0,09	0,20	0,24
Cl ⁻ [mg/l]	14,1	13,6	n.b.	n.b.	13,8	12,1	12,8
SO ₄ ²⁻ [mg/l]	213	193	n.b.	n.b.	201	203	169
HCO ₃ ²⁻ [mg/l]	482	491	85,4	488	512	445	458
NO ₃ ²⁻ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	
As [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b./0,011	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b./0,003
Pb [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b./0,032	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b./u.d.B.
Fe [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b./9,50	n.b.	n.b.	n.b.	n.b./0,630	n.b./0,51
Mn [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b./4,40	n.b.	n.b.	n.b.	n.b./2,70	n.b./2,10
Ni [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b./0,015	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b./0,042
Zn [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b./0,15	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b./0,054
Σ Kationen [mmol(eq)/l]	12,0	12,0	7,82	n.b.	12,5	11,6	12,0
Σ Anionen [mmol(eq)/l]	12,7	12,5	n.b.	n.b.	13,0	11,9	11,4
relativer Fehler %	-6,19	-4,13	n.b.	n.b.	-3,60	-2,27	5,12

	17.04.2010	17.04.2010	17.04.2010	18.07.2010
	TS Lina Oskar	TS Milde Hand	TS Ohliger Zug	TS Stahlert
Temperatur [°C]	10,5	13,0	11,4	14,8
el. Leitfähigkeit [mS/cm]	386	345	184	434
pH-Wert	7,24	7,38	7,24	7,58
Redoxvermögen [mV]	434	367	385	n.b.
Sauerstoff [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
K _{S 4,3} [mmol/l]	1,45	1,90	n.b.	2,40
K _{B 8,2} [mmol/l]	0,45	0,05	n.b.	0,35
CO ₂ [mg/l] *	19,8	2,20	n.b.	15,4
Ca ²⁺ [mg/l]	13,8	24,2	n.b.	12,9
Mg ²⁺ [mg/l]	14,6	15,1	n.b.	17,8
Na ⁺ [mg/l]	5,34	9,58	n.b.	7,00
K ⁺ [mg/l]	0,77	0,69	n.b.	5,80
Li ⁺ [mg/l]	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
F ⁻ [mg/l]	0,18	0,18	n.b.	0,30
Cl ⁻ [mg/l]	4,81	4,70	n.b.	7,23
SO ₄ ²⁻ [mg/l]	22,9	20,8	n.b.	4,03
HCO ₃ ²⁻ [mg/l]	88,5	116	n.b.	21,4
NO ₃ ²⁻ [mg/l]	7,18	5,03	n.b.	1,49
As [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Pb [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Fe [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Mn [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Ni [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Zn [mg/l] gef./ungef.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.
Σ Kationen [mmol(eq)/l]	2,14	2,88	n.b.	2,56
Σ Anionen [mmol(eq)/l]	2,19	2,55	n.b.	2,73
relativer Fehler %	-2,09	-12,52	n.b.	-6,28

n.b. nicht bestimmbar u.d.B. unter der Bestimmungsgrenze WOF Wasseroberfläche

* gelöst

12.3. Anhang C

Hydrochemische Modellierungen mit PhreeqC

12.3.1. Grube Wolf, Auslauf

12.3.2 Grube Wolf, Schacht Wolf, 0,5 m u WOF

12.3.3. Grube Wolf, 195 m u WOF

12.3.4 Grube Wolf, Blindschacht

12.3.5 Grube Wolf, Alter Schacht

12.3.6 Grube San Fernando, Schacht 2, 0,5 m u WOF

12.3.7 Grube San Fernando, Schacht 2, 55 m u WOF

12.3.8 Grube San Fernando, Schacht 2, 77 m u WOF

12.3.9 Alter Schacht, Verdünnung

12.3.1 Grube Wolf, Auslauf

```

Title Wolf_Auslauf
Solution 1
temp          16.5
pH            7.51
pe            6.2
redox         Pe
units         mg/l
density       1.0
F             0.22
Cl            12. 2
S(6)          201
C(4)          464
Ca            67.6
Mg            81.3
Na            31. 7
K             7.83
Fe            0.27
Mn            2.4
O(0)          3.63
EQUILIBRIUM_PHASES
CO2(g)        -3.38
Save Solution 2
end

```

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution 1.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
C(4)	7.611e-03	7.611e-03
Ca	1.688e-03	1.688e-03
Cl	3.444e-04	3.444e-04
F	1.159e-05	1.159e-05
Fe	4.839e-06	4.839e-06
K	2.004e-04	2.004e-04
Mg	3.347e-03	3.347e-03
Mn	4.372e-05	4.372e-05
Na	1.380e-03	1.380e-03
O(0)	2.271e-04	2.271e-04
S(6)	2.094e-03	2.094e-03

-----Description of solution-----

pH	=	7.510
pe	=	6.200
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	1,64E+01
Mass of water (kg)	=	1,00E+03
Total alkalinity (eq/kg)	=	7,18E+00
Total CO2 (mol/kg)	=	7,61E+00
Temperature (deg C)	=	16.500
Electrical balance (eq)	=	1,96E-02

percent error,
 $100 \cdot (\text{Cat} - |\text{An}|) / (\text{Cat} + |\text{An}|)$ = 0.09
 Iterations = 8
 Total H = 1,11E+08
 Total O = 5.553719e+01

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
O(-2)/O(0)	137.491	0.7902

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	1.874e-07	1.653e-07	-6.727	-6.782	-0.055
H+	3.441e-08	3.090e-08	-7.463	-7.510	-0.047
H2O	5.551e+01	9.997e-01	1.744	-0.000	0.000
C(4)	7.611e-03				
HCO3-	6.870e-03	6.088e-03	-2.163	-2.216	-0.052
CO2	4.785e-04	4.803e-04	-3.320	-3.318	0.002
MgHCO3+	1.399e-04	1.234e-04	-3.854	-3.909	-0.055
CaHCO3+	6.736e-05	5.941e-05	-4.172	-4.226	-0.055
CO3-2	1.237e-05	7.630e-06	-4.907	-5.117	-0.210
MgCO3	1.137e-05	1.141e-05	-4.944	-4.943	0.002
CaCO3	9.875e-06	9.913e-06	-5.005	-5.004	0.002
MnHCO3+	8.905e-06	7.853e-06	-5.050	-5.105	-0.055
MnCO3	8.740e-06	8.773e-06	-5.058	-5.057	0.002
NaHCO3	4.125e-06	4.141e-06	-5.385	-5.383	0.002
NaCO3-	1.254e-07	1.105e-07	-6.902	-6.956	-0.055
FeHCO3+	9.138e-09	8.059e-09	-8.039	-8.094	-0.055
FeCO3	2.414e-09	2.423e-09	-8.617	-8.616	0.002
Ca	1.688e-03				
Ca+2	1.451e-03	8.941e-04	-2.838	-3.049	-0.210
CaSO4	1.602e-04	1.608e-04	-3.795	-3.794	0.002
CaHCO3+	6.736e-05	5.941e-05	-4.172	-4.226	-0.055
CaCO3	9.875e-06	9.913e-06	-5.005	-5.004	0.002
CaF+	6.644e-08	5.859e-08	-7.178	-7.232	-0.055
CaOH+	5.443e-09	4.800e-09	-8.264	-8.319	-0.055
CaHSO4+	2.995e-11	2.641e-11	-10.524	-10.578	-0.055
Cl	3.444e-04				
Cl-	3.444e-04	3.028e-04	-3.463	-3.519	-0.056
MnCl+	2.025e-08	1.786e-08	-7.694	-7.748	-0.055
FeCl+	6.274e-12	5.533e-12	-11.202	-11.257	-0.055
MnCl2	2.351e-12	2.360e-12	-11.629	-11.627	0.002
MnCl3-	2.232e-16	1.968e-16	-15.651	-15.706	-0.055
FeCl+2	1.421e-17	8.596e-18	-16.847	-17.066	-0.218
FeCl2+	1.740e-20	1.534e-20	-19.759	-19.814	-0.055
FeCl3	4.629e-25	4.646e-25	-24.335	-24.333	0.002
F	1.159e-05				
F-	1.046e-05	9.227e-06	-4.980	-5.035	-0.055
MgF+	1.053e-06	9.289e-07	-5.977	-6.032	-0.055
CaF+	6.644e-08	5.859e-08	-7.178	-7.232	-0.055
NaF	6.398e-09	6.422e-09	-8.194	-8.192	0.002
MnF+	1.048e-09	9.239e-10	-8.980	-9.034	-0.055
HF	3.666e-10	3.680e-10	-9.436	-9.434	0.002
FeF+	1.385e-12	1.221e-12	-11.859	-11.913	-0.055
FeF+2	2.624e-14	1.587e-14	-13.581	-13.799	-0.218
HF2-	1.370e-14	1.208e-14	-13.863	-13.918	-0.055

FeF2+	5.957e-15	5.254e-15	-14.225	-14.280	-0.055
FeF3	7.429e-17	7.458e-17	-16.129	-16.127	0.002
H2F2	4.747e-19	4.765e-19	-18.324	-18.322	0.002
Fe(2)	3.548e-08				
Fe+2	2.188e-08	1.324e-08	-7.660	-7.878	-0.218
FeHCO3+	9.138e-09	8.059e-09	-8.039	-8.094	-0.055
FeCO3	2.414e-09	2.423e-09	-8.617	-8.616	0.002
FeSO4	1.954e-09	1.962e-09	-8.709	-8.707	0.002
FeOH+	7.986e-11	7.043e-11	-10.098	-10.152	-0.055
FeCl+	6.274e-12	5.533e-12	-11.202	-11.257	-0.055
FeF+	1.385e-12	1.221e-12	-11.859	-11.913	-0.055
Fe(OH)2	9.026e-15	9.060e-15	-14.044	-14.043	0.002
FeHSO4+	4.434e-16	3.911e-16	-15.353	-15.408	-0.055
Fe(OH)3-	1.133e-17	9.993e-18	-16.946	-17.000	-0.055
Fe(3)	4.803e-06				
Fe(OH)3	3.374e-06	3.387e-06	-5.472	-5.470	0.002
Fe(OH)2+	1.349e-06	1.190e-06	-5.870	-5.924	-0.055
Fe(OH)4-	7.971e-08	7.030e-08	-7.098	-7.153	-0.055
FeOH+2	2.559e-10	1.548e-10	-9.592	-9.810	-0.218
FeF+2	2.624e-14	1.587e-14	-13.581	-13.799	-0.218
FeSO4+	1.243e-14	1.096e-14	-13.906	-13.960	-0.055
FeF2+	5.957e-15	5.254e-15	-14.225	-14.280	-0.055
Fe+3	3.844e-15	1.241e-15	-14.415	-14.906	-0.491
Fe(SO4)2-	2.569e-16	2.266e-16	-15.590	-15.645	-0.055
FeF3	7.429e-17	7.458e-17	-16.129	-16.127	0.002
FeCl+2	1.421e-17	8.596e-18	-16.847	-17.066	-0.218
Fe2(OH)2+4	6.917e-18	9.259e-19	-17.160	-18.033	-0.873
FeCl2+	1.740e-20	1.534e-20	-19.759	-19.814	-0.055
Fe3(OH)4+5	1.195e-20	5.161e-22	-19.923	-21.287	-1.365
FeHSO4+2	1.522e-21	9.205e-22	-20.818	-21.036	-0.218
FeCl3	4.629e-25	4.646e-25	-24.335	-24.333	0.002
H(0)	5.851e-31				
H2	2.925e-31	2.937e-31	-30.534	-30.532	0.002
K	2.004e-04				
K+	1.992e-04	1.752e-04	-3.701	-3.756	-0.056
KSO4-	1.172e-06	1.033e-06	-5.931	-5.986	-0.055
Mg	3.347e-03				
Mg+2	2.869e-03	1.786e-03	-2.542	-2.748	-0.206
MgSO4	3.255e-04	3.267e-04	-3.487	-3.486	0.002
MgHCO3+	1.399e-04	1.234e-04	-3.854	-3.909	-0.055
MgCO3	1.137e-05	1.141e-05	-4.944	-4.943	0.002
MgF+	1.053e-06	9.289e-07	-5.977	-6.032	-0.055
MgOH+	1.079e-07	9.517e-08	-6.967	-7.021	-0.055
Mn(2)	4.372e-05				
Mn+2	2.393e-05	1.447e-05	-4.621	-4.839	-0.218
MnHCO3+	8.905e-06	7.853e-06	-5.050	-5.105	-0.055
MnCO3	8.740e-06	8.773e-06	-5.058	-5.057	0.002
MnSO4	2.122e-06	2.130e-06	-5.673	-5.672	0.002
MnCl+	2.025e-08	1.786e-08	-7.694	-7.748	-0.055
MnOH+	6.688e-09	5.898e-09	-8.175	-8.229	-0.055
MnF+	1.048e-09	9.239e-10	-8.980	-9.034	-0.055
MnCl2	2.351e-12	2.360e-12	-11.629	-11.627	0.002
MnCl3-	2.232e-16	1.968e-16	-15.651	-15.706	-0.055
Mn(OH)3-	8.807e-18	7.767e-18	-17.055	-17.110	-0.055
Mn(3)	6.122e-25				
Mn+3	6.122e-25	1.975e-25	-24.213	-24.704	-0.491
Mn(6)	0.000e+00				
MnO4-2	0.000e+00	0.000e+00	-41.408	-41.627	-0.218
Mn(7)	0.000e+00				
MnO4-	0.000e+00	0.000e+00	-45.328	-45.383	-0.055
Na	1.380e-03				
Na+	1.369e-03	1.210e-03	-2.863	-2.917	-0.054

NaSO4-	6.360e-06	5.609e-06	-5.197	-5.251	-0.055
NaHCO3	4.125e-06	4.141e-06	-5.385	-5.383	0.002
NaCO3-	1.254e-07	1.105e-07	-6.902	-6.956	-0.055
NaF	6.398e-09	6.422e-09	-8.194	-8.192	0.002
O(0)	2.271e-04				
O2	1.135e-04	1.140e-04	-3.945	-3.943	0.002
S(6)	2.094e-03				
SO4-2	1.599e-03	9.779e-04	-2.796	-3.010	-0.214
MgSO4	3.255e-04	3.267e-04	-3.487	-3.486	0.002
CaSO4	1.602e-04	1.608e-04	-3.795	-3.794	0.002
NaSO4-	6.360e-06	5.609e-06	-5.197	-5.251	-0.055
MnSO4	2.122e-06	2.130e-06	-5.673	-5.672	0.002
KSO4-	1.172e-06	1.033e-06	-5.931	-5.986	-0.055
HSO4-	2.786e-09	2.457e-09	-8.555	-8.610	-0.055
FeSO4	1.954e-09	1.962e-09	-8.709	-8.707	0.002
CaHSO4+	2.995e-11	2.641e-11	-10.524	-10.578	-0.055
FeSO4+	1.243e-14	1.096e-14	-13.906	-13.960	-0.055
FeHSO4+	4.434e-16	3.911e-16	-15.353	-15.408	-0.055
Fe(SO4)2-	2.569e-16	2.266e-16	-15.590	-15.645	-0.055
FeHSO4+2	1.522e-21	9.205e-22	-20.818	-21.036	-0.218

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-1.72	-6.06	-4.34	CaSO4
Aragonite	0.12	-8.17	-8.29	CaCO3
Artinite	-5.81	4.41	10.22	MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
Birnessite	-6.00	37.60	43.60	MnO2
Bixbyite	-4.07	-4.35	-0.28	Mn2O3
Brucite	-5.15	12.27	17.42	Mg(OH)2
Calcite	0.27	-8.17	-8.44	CaCO3
CO2(g)	-1.96	-3.32	-1.36	CO2
Dolomite	0.86	-16.03	-16.89	CaMg(CO3)2
Dolomite(d)	0.27	-16.03	-16.30	CaMg(CO3)2
Epsomite	-3.56	-5.76	-2.20	MgSO4:7H2O
Fe(OH)2.7Cl.3	7.35	4.31	-3.04	Fe(OH)2.7Cl0.3
Fe(OH)3(a)	2.73	7.62	4.89	Fe(OH)3
Fe3(OH)8	2.17	22.39	20.22	Fe3(OH)8
Fluorite	-2.41	-13.12	-10.71	CaF2
Goethite	8.31	7.62	-0.69	FeOOH
Gypsum	-1.48	-6.06	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-27.42	-30.53	-3.11	H2
H2O(g)	-1.74	-0.00	1.74	H2O
Halite	-8.00	-6.44	1.56	NaCl
Hausmannite	-5.23	57.96	63.19	Mn3O4
Hematite	18.59	15.25	-3.34	Fe2O3
Huntite	-2.35	-31.76	-29.41	CaMg3(CO3)4
Hydromagnesite	-11.55	-19.19	-7.64	Mg5(CO3)4(OH)2:4H2O
Jarosite(ss)	-0.33	-10.16	-9.83	(K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	-0.90	-9.44	-8.54	KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	-4.09	-8.60	-4.50	NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	-8.99	-13.19	-4.20	(H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Maghemite	8.86	15.25	6.39	Fe2O3
Magnesite	0.03	-7.87	-7.90	MgCO3
Magnetite	17.57	22.39	4.82	Fe3O4
Manganite	-1.45	23.89	25.34	MnOOH
Melanterite	-8.57	-10.89	-2.32	FeSO4:7H2O
Mirabilite	-7.32	-8.85	-1.52	Na2SO4:10H2O
Mn2(SO4)3	-53.57	-58.44	-4.87	Mn2(SO4)3
MnCl2:4H2O	-14.21	-11.88	2.34	MnCl2:4H2O
MnSO4	-10.85	-7.85	3.00	MnSO4

Nahcolite	-4.50	-5.13	-0.63	NaHCO ₃
Natron	-9.30	-10.95	-1.65	Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O
Nesquehonite	-2.37	-7.87	-5.50	MgCO ₃ ·3H ₂ O
Nsutite	-4.96	37.60	42.56	MnO ₂
O ₂ (g)	-1.12	-3.94	-2.83	O ₂
Portlandite	-11.50	11.97	23.47	Ca(OH) ₂
Pyrochroite	-5.02	10.18	15.20	Mn(OH) ₂
Pyrolusite	-5.18	37.60	42.78	MnO ₂
Rhodochrosite	1.14	-9.96	-11.10	MnCO ₃
Rhodochrosite(d)	0.4	3 -9.96	-10.39	MnCO ₃
Siderite	-2.16	-13.00	-10.84	FeCO ₃
Siderite(d)(3)	-2.55	-13.00	-10.45	FeCO ₃
Thenardite	-8.68	-8.84	-0.17	Na ₂ SO ₄
Thermonatrite	-11.14	-10.95	0.19	Na ₂ CO ₃ ·H ₂ O
Trona	-15.68	-16.09	-0.41	NaHCO ₃ :Na ₂ CO ₃ :2H ₂ O

Beginning of batch-reaction calculations.

Reaction step 1.

Using solution 1.

Using pure phase assemblage 1.

-----Phase assemblage-----

Moles in assemblage

Phase	SI	log IAP	log KT	Initial	Final	Delta
CO ₂ (g)	-3.38	-4.74	-1.36	1,00E+04	1,00E+04	1,11E+00

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
C	6,51E+00	6,51E+00
Ca	1,69E+00	1,69E+00
Cl	3,44E-01	3,44E-01
F	1,16E-02	1,16E-02
Fe	4,84E-03	4,84E-03
K	2,00E-01	2,00E-01
Mg	3,35E+00	3,35E+00
Mn	4,37E-02	4,37E-02
Na	1,38E+00	1,38E+00
S	2,09E+00	2,09E+00

-----Description of solution-----

pH	=	8.853	Charge balance
pe	=	12.375	Adjusted to redox equilibrium
Activity of water	=	1.000	
Ionic strength	=	1,57E+01	
Mass of water (kg)	=	1,00E+03	
Total alkalinity (eq/kg)	=	7,11E+00	
Total CO ₂ (mol/kg)	=	6,51E+00	
Temperature (deg C)	=	16.500	
Electrical balance (eq)	=	1,96E-02	
percent error, 100*(Cat-	=	0.10	

An)/(Cat+ An)			
Iterations	=	13	
Total H	=	1,11E+08	
Total O	=	5,55E+07	

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	4.122e-06	3.644e-06	-5.385	-5.438	-0.054
H+	1.558e-09	1.402e-09	-8.807	-8.853	-0.046
H2O	5.551e+01	9.998e-01	1.744	-0.000	0.000
C(-4)	0.000e+00				
CH4	0.000e+00	0.000e+00	-149.008	-149.006	0.002
C(4)	6.506e-03				
HCO3-	5.710e-03	5.071e-03	-2.243	-2.295	-0.052
CO3-2	2.252e-04	1.401e-04	-3.647	-3.853	-0.206
MgCO3	1.994e-04	2.001e-04	-3.700	-3.699	0.002
CaCO3	1.665e-04	1.671e-04	-3.779	-3.777	0.002
MgHCO3+	1.110e-04	9.816e-05	-3.955	-4.008	-0.054
CaHCO3+	5.139e-05	4.543e-05	-4.289	-4.343	-0.054
CO2	1.808e-05	1.815e-05	-4.743	-4.741	0.002
MnCO3	1.790e-05	1.796e-05	-4.747	-4.746	0.002
NaHCO3	3.441e-06	3.454e-06	-5.463	-5.462	0.002
NaCO3-	2.299e-06	2.033e-06	-5.638	-5.692	-0.054
MnHCO3+	8.250e-07	7.293e-07	-6.084	-6.137	-0.054
FeCO3	2.576e-18	2.585e-18	-17.589	-17.588	0.002
FeHCO3+	4.411e-19	3.900e-19	-18.355	-18.409	-0.054
Ca	1.688e-03				
Ca+2	1.320e-03	8.208e-04	-2.880	-3.086	-0.206
CaCO3	1.665e-04	1.671e-04	-3.779	-3.777	0.002
CaSO4	1.502e-04	1.508e-04	-3.823	-3.822	0.002
CaHCO3+	5.139e-05	4.543e-05	-4.289	-4.343	-0.054
CaOH+	1.099e-07	9.716e-08	-6.959	-7.013	-0.054
CaF+	6.127e-08	5.417e-08	-7.213	-7.266	-0.054
CaHSO4+	1.271e-12	1.124e-12	-11.896	-11.949	-0.054
Cl	3.444e-04				
Cl-	3.444e-04	3.036e-04	-3.463	-3.518	-0.055
MnCl+	2.257e-09	1.996e-09	-8.646	-8.700	-0.054
MnCl2	2.635e-13	2.645e-13	-12.579	-12.578	0.002
MnCl3-	2.501e-17	2.211e-17	-16.602	-16.655	-0.054
FeCl+2	1.228e-21	7.498e-22	-20.911	-21.125	-0.214
FeCl+	3.645e-22	3.222e-22	-21.438	-21.492	-0.054
FeCl2+	1.518e-24	1.342e-24	-23.819	-23.872	-0.054
FeCl3	4.059e-29	4.074e-29	-28.392	-28.390	0.002
F	1.159e-05				
F-	1.051e-05	9.292e-06	-4.978	-5.032	-0.054
MgF+	1.010e-06	8.932e-07	-5.996	-6.049	-0.054
CaF+	6.127e-08	5.417e-08	-7.213	-7.266	-0.054
NaF	6.452e-09	6.476e-09	-8.190	-8.189	0.002
MnF+	1.173e-10	1.037e-10	-9.931	-9.984	-0.054
HF	1.675e-11	1.681e-11	-10.776	-10.774	0.002
HF2-	6.289e-16	5.559e-16	-15.201	-15.255	-0.054
FeF+2	2.277e-18	1.391e-18	-17.643	-17.857	-0.214
FeF2+	5.244e-19	4.636e-19	-18.280	-18.334	-0.054
FeF3	6.604e-21	6.628e-21	-20.180	-20.179	0.002
H2F2	9.907e-22	9.943e-22	-21.004	-21.002	0.002
FeF+	8.083e-23	7.145e-23	-22.092	-22.146	-0.054
Fe(2)	4.495e-18				
FeCO3	2.576e-18	2.585e-18	-17.589	-17.588	0.002
Fe+2	1.259e-18	7.689e-19	-17.900	-18.114	-0.214

FeHCO ₃ ⁺	4.411e-19	3.900e-19	-18.355	-18.409	-0.054
FeSO ₄	1.160e-19	1.164e-19	-18.936	-18.934	0.002
FeOH ⁺	1.020e-19	9.020e-20	-18.991	-19.045	-0.054
FeCl ⁺	3.645e-22	3.222e-22	-21.438	-21.492	-0.054
Fe(OH) ₂	2.549e-22	2.558e-22	-21.594	-21.592	0.002
FeF ⁺	8.083e-23	7.145e-23	-22.092	-22.146	-0.054
Fe(OH) ₃ ⁻	7.038e-24	6.222e-24	-23.153	-23.206	-0.054
FeHSO ₄ ⁺	1.191e-27	1.053e-27	-26.924	-26.978	-0.054
Fe(HS) ₂	0.000e+00	0.000e+00	-302.553	-302.552	0.002
Fe(HS) ₃ ⁻	0.000e+00	0.000e+00	-447.155	-447.209	-0.054
Fe(3)	4.839e-06				
Fe(OH) ₃	3.147e-06	3.158e-06	-5.502	-5.501	0.002
Fe(OH) ₄ ⁻	1.635e-06	1.445e-06	-5.786	-5.840	-0.054
Fe(OH) ₂ ⁺	5.693e-08	5.033e-08	-7.245	-7.298	-0.054
FeOH ₂	4.862e-13	2.969e-13	-12.313	-12.527	-0.214
FeF ₂	2.277e-18	1.391e-18	-17.643	-17.857	-0.214
FeSO ₄ ⁺	1.102e-18	9.742e-19	-17.958	-18.011	-0.054
FeF ₂ ⁺	5.244e-19	4.636e-19	-18.280	-18.334	-0.054
Fe ₃	3.273e-19	1.079e-19	-18.485	-18.967	-0.482
Fe(SO ₄) ₂ ⁻	2.328e-20	2.058e-20	-19.633	-19.687	-0.054
FeF ₃	6.604e-21	6.628e-21	-20.180	-20.179	0.002
FeCl ₂	1.228e-21	7.498e-22	-20.911	-21.125	-0.214
Fe ₂ (OH) ₂ ⁺	2.449e-23	3.407e-24	-22.611	-23.468	-0.857
FeCl ₂ ⁺	1.518e-24	1.342e-24	-23.819	-23.872	-0.054
FeHSO ₄ ₂	6.077e-27	3.711e-27	-26.216	-26.430	-0.214
Fe ₃ (OH) ₄ ⁺	1.751e-27	8.032e-29	-26.757	-28.095	-1.339
FeCl ₃	4.059e-29	4.074e-29	-28.392	-28.390	0.002
H(0)	0.000e+00				
H ₂	0.000e+00	0.000e+00	-45.571	-45.570	0.002
K	2.004e-04				
K ⁺	1.992e-04	1.756e-04	-3.701	-3.755	-0.055
KSO ₄ ⁻	1.197e-06	1.058e-06	-5.922	-5.975	-0.054
Mg	3.347e-03				
Mg ₂	2.716e-03	1.705e-03	-2.566	-2.768	-0.202
MgSO ₄	3.176e-04	3.187e-04	-3.498	-3.497	0.002
MgCO ₃	1.994e-04	2.001e-04	-3.700	-3.699	0.002
MgHCO ₃ ⁺	1.110e-04	9.816e-05	-3.955	-4.008	-0.054
MgOH ⁺	2.266e-06	2.003e-06	-5.645	-5.698	-0.054
MgF ⁺	1.010e-06	8.932e-07	-5.996	-6.049	-0.054
Mn(2)	2.162e-05				
MnCO ₃	1.790e-05	1.796e-05	-4.747	-4.746	0.002
Mn ₂	2.642e-06	1.613e-06	-5.578	-5.792	-0.214
MnHCO ₃ ⁺	8.250e-07	7.293e-07	-6.084	-6.137	-0.054
MnSO ₄	2.417e-07	2.426e-07	-6.617	-6.615	0.002
MnOH ⁺	1.640e-08	1.450e-08	-7.785	-7.839	-0.054
MnCl ⁺	2.257e-09	1.996e-09	-8.646	-8.700	-0.054
MnF ⁺	1.173e-10	1.037e-10	-9.931	-9.984	-0.054
MnCl ₂	2.635e-13	2.645e-13	-12.579	-12.578	0.002
Mn(OH) ₃ ⁻	1.050e-14	9.280e-15	-13.979	-14.032	-0.054
MnCl ₃ ⁻	2.501e-17	2.211e-17	-16.602	-16.655	-0.054
Mn(3)	1.000e-19				
Mn ₃	1.000e-19	3.298e-20	-19.000	-19.482	-0.482
Mn(6)	1.211e-07				
MnO ₄ ⁻²	1.211e-07	7.398e-08	-6.917	-7.131	-0.214
Mn(7)	2.198e-05				
MnO ₄ ⁻	2.198e-05	1.943e-05	-4.658	-4.712	-0.054
Na	1.380e-03				
Na ⁺	1.368e-03	1.211e-03	-2.864	-2.917	-0.053
NaSO ₄ ⁻	6.490e-06	5.737e-06	-5.188	-5.241	-0.054
NaHCO ₃	3.441e-06	3.454e-06	-5.463	-5.462	0.002
NaCO ₃ ⁻	2.299e-06	2.033e-06	-5.638	-5.692	-0.054
NaF	6.452e-09	6.476e-09	-8.190	-8.189	0.002

O(0)	1.719e-04				
O2	8.593e-05	8.624e-05	-4.066	-4.064	0.002
S(-2)	0.000e+00				
HS-	0.000e+00	0.000e+00	-146.640	-146.694	-0.054
S5-2	0.000e+00	0.000e+00	-147.467	-147.636	-0.169
S6-2	0.000e+00	0.000e+00	-147.562	-147.721	-0.160
S4-2	0.000e+00	0.000e+00	-147.700	-147.878	-0.179
H2S	0.000e+00	0.000e+00	-148.487	-148.486	0.002
S-2	0.000e+00	0.000e+00	-150.805	-151.019	-0.214
S3-2	0.000e+00	0.000e+00	-151.157	-151.346	-0.190
S2-2	0.000e+00	0.000e+00	-152.415	-152.614	-0.199
Fe(HS)2	0.000e+00	0.000e+00	-302.553	-302.552	0.002
Fe(HS)3-	0.000e+00	0.000e+00	-447.155	-447.209	-0.054
S(6)	2.094e-03				
SO4-2	1.618e-03	9.991e-04	-2.791	-3.000	-0.209
MgSO4	3.176e-04	3.187e-04	-3.498	-3.497	0.002
CaSO4	1.502e-04	1.508e-04	-3.823	-3.822	0.002
NaSO4-	6.490e-06	5.737e-06	-5.188	-5.241	-0.054
KSO4-	1.197e-06	1.058e-06	-5.922	-5.975	-0.054
MnSO4	2.417e-07	2.426e-07	-6.617	-6.615	0.002
HSO4-	1.288e-10	1.139e-10	-9.890	-9.944	-0.054
CaHSO4+	1.271e-12	1.124e-12	-11.896	-11.949	-0.054
FeSO4+	1.102e-18	9.742e-19	-17.958	-18.011	-0.054
FeSO4	1.160e-19	1.164e-19	-18.936	-18.934	0.002
Fe(SO4)2-	2.328e-20	2.058e-20	-19.633	-19.687	-0.054
FeHSO4+2	6.077e-27	3.711e-27	-26.216	-26.430	-0.214
FeHSO4+	1.191e-27	1.053e-27	-26.924	-26.978	-0.054

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-1.75	-6.09	-4.34	CaSO4
Aragonite	1.35	-6.94	-8.29	CaCO3
Artinite	-1.90	8.32	10.22	MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
Birnessite	10.77	54.37	43.60	MnO2
Bixbyite	14.44	14.16	-0.28	Mn2O3
Brucite	-2.48	14.94	17.42	Mg(OH)2
Calcite	1.50	-6.94	-8.44	CaCO3
CH4(g)	-146.22	-149.01	-2.79	CH4
CO2(g)	-3.38	-4.74	-1.36	CO2
Dolomite	3.33	-13.56	-16.89	CaMg(CO3)2
Dolomite(d)	2.74	-13.56	-16.30	CaMg(CO3)2
Epsomite	-3.57	-5.77	-2.20	MgSO4:7H2O
Fe(OH)2.7Cl.3	6.92	3.88	-3.04	Fe(OH)2.7Cl0.3
Fe(OH)3(a)	2.70	7.59	4.89	Fe(OH)3
Fe3(OH)8	-5.44	14.78	20.22	Fe3(OH)8
FeS(ppt)	-152.04	-155.95	-3.92	FeS
Fluorite	-2.44	-13.15	-10.71	CaF2
Goethite	8.28	7.59	-0.69	FeOOH
Greigite	-562.37	-607.41	-45.04	Fe3S4
Gypsum	-1.50	-6.09	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-42.46	-45.57	-3.11	H2
H2O(g)	-1.74	-0.00	1.74	H2O
H2S(g)	-147.59	-148.49	-0.90	H2S
Halite	-8.00	-6.43	1.56	NaCl
Hausmannite	15.01	78.20	63.19	Mn3O4
Hematite	18.53	15.19	-3.34	Fe2O3
Huntite	2.61	-26.80	-29.41	CaMg3(CO3)4
Hydromagnesite	-3.91	-11.55	-7.64	Mg5(CO3)4(OH)2:4H2O
Jarosite(ss)	-4.70	-14.53	-9.83	(K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	-5.00	-13.54	-8.54	KFe3(SO4)2(OH)6

Jarosite-Na	-8.20	-12.70	-4.50	NaFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
JarositeH	-14.43	-18.64	-4.20	(H ₃ O)Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Mackinawite	-151.31	-155.95	-4.65	FeS
Maghemite	8.80	15.19	6.39	Fe ₂ O ₃
Magnesite	1.27	-6.62	-7.90	MgCO ₃
Magnetite	9.96	14.78	4.82	Fe ₃ O ₄
Manganite	7.80	33.14	25.34	MnOOH
Melanterite	-18.80	-21.12	-2.32	FeSO ₄ ·7H ₂ O
Mirabilite	-7.31	-8.84	-1.52	Na ₂ SO ₄ ·10H ₂ O
Mn ₂ (SO ₄) ₃	-43.09	-47.96	-4.87	Mn ₂ (SO ₄) ₃
MnCl ₂ ·4H ₂ O	-15.16	-12.83	2.34	MnCl ₂ ·4H ₂ O
MnS(Green)	-147.56	-143.63	3.92	MnS
MnSO ₄	-11.79	-8.79	3.00	MnSO ₄
Nahcolite	-4.58	-5.21	-0.63	NaHCO ₃
Natron	-8.04	-9.69	-1.65	Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O
Nesquehonite	-1.13	-6.62	-5.50	MgCO ₃ ·3H ₂ O
Nsutite	11.81	54.37	42.56	MnO ₂
O ₂ (g)	-1.24	-4.06	-2.83	O ₂
Portlandite	-8.85	14.62	23.47	Ca(OH) ₂
Pyrite	-250.32	-269.04	-18.72	FeS ₂
Pyrochroite	-3.29	11.91	15.20	Mn(OH) ₂
Pyrolusite	11.59	54.37	42.78	MnO ₂
Rhodochrosite	1.45	-9.65	-11.10	MnCO ₃
Rhodochrosite(d) 0.7	4	-9.65	-10.39	MnCO ₃
Siderite	-11.13	-21.97	-10.84	FeCO ₃
Siderite(d)(3)	-11.52	-21.97	-10.45	FeCO ₃
Sulfur	-111.07	-126.27	-15.20	S
Thenardite	-8.67	-8.83	-0.17	Na ₂ SO ₄
Thermonatrite	-9.87	-9.69	0.19	Na ₂ CO ₃ ·H ₂ O
Trona	-14.49	-14.90	-0.41	NaHCO ₃ :Na ₂ CO ₃ :2H ₂ O

End of simulation.

Reading input data for simulation 2.

Title
Use Solution 2
Equilibrium_Phases
O₂(g) -0.68
End

Beginning of batch-reaction calculations.

Reaction step 1.

Using solution
2. Solution after simulation 1.
Using pure phase assemblage 1.

-----Phase assemblage-----

Moles in assemblage

Phase	SI	log IAP	log KT	Initial	Final	Delta
O ₂ (g)	-0.68	-3.51	-2.83	1,00E+04	1,00E+04	-2,42E-01

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
C	6,51E+00	6,51E+00
Ca	1,69E+00	1,69E+00
Cl	3,44E-01	3,44E-01
F	1,16E-02	1,16E-02
Fe	4,84E-03	4,84E-03
K	2,00E-01	2,00E-01
Mg	3,35E+00	3,35E+00
Mn	4,37E-02	4,37E-02
Na	1,38E+00	1,38E+00
S	2,09E+00	2,09E+00

-----Description of solution-----

pH	=	8.829	Charge balance
pe	=	12.540	Adjusted to redox equilibrium
Activity of water	=	1.000	
Ionic strength	=	1,57E+01	
Mass of water (kg)	=	1,00E+03	
Total alkalinity (eq/kg)	=	7,07E+00	
Total CO2 (mol/kg)	=	6,51E+00	
Temperature (deg C)	=	16.500	
Electrical balance (eq)	=	1,96E-02	
Percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	0.10	
Iterations	=	5	
Total H	=	1,11E+08	
Total O	=	5,55E+07	

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	3.894e-06	3.442e-06	-5.410	-5.463	-0.054
H+	1.650e-09	1.484e-09	-8.783	-8.829	-0.046
H2O	5.551e+01	9.997e-01	1.744	-0.000	0.000
C(-4)	0.000e+00				
CH4	0.000e+00	0.000e+00	-150.098	-150.097	0.002
C(4)	6.506e-03				
HCO3-	5.747e-03	5.104e-03	-2.241	-2.292	-0.052
CO3-2	2.142e-04	1.332e-04	-3.669	-3.875	-0.206
MgCO3	1.900e-04	1.907e-04	-3.721	-3.720	0.002
CaCO3	1.590e-04	1.596e-04	-3.799	-3.797	0.002
MgHCO3+	1.120e-04	9.904e-05	-3.951	-4.004	-0.054
CaHCO3+	5.196e-05	4.593e-05	-4.284	-4.338	-0.054
CO2	1.926e-05	1.933e-05	-4.715	-4.714	0.002
MnCO3	6.545e-06	6.568e-06	-5.184	-5.183	0.002
NaHCO3	3.463e-06	3.476e-06	-5.461	-5.459	0.002
NaCO3-	2.186e-06	1.933e-06	-5.660	-5.714	-0.054
MnHCO3+	3.194e-07	2.823e-07	-6.496	-6.549	-0.054
FeCO3	2.026e-18	2.033e-18	-17.693	-17.692	0.002
FeHCO3+	3.673e-19	3.246e-19	-18.435	-18.489	-0.054
Ca	1.688e-03				
Ca+2	1.326e-03	8.245e-04	-2.877	-3.084	-0.206
CaCO3	1.590e-04	1.596e-04	-3.799	-3.797	0.002
CaSO4	1.508e-04	1.513e-04	-3.822	-3.820	0.002

CaHCO ₃ +	5.196e-05	4.593e-05	-4.284	-4.338	-0.054
CaOH+	1.043e-07	9.219e-08	-6.982	-7.035	-0.054
CaF+	6.153e-08	5.439e-08	-7.211	-7.264	-0.054
CaHSO ₄ +	1.350e-12	1.194e-12	-11.870	-11.923	-0.054
Cl	3.444e-04				
Cl-	3.444e-04	3.036e-04	-3.463	-3.518	-0.055
MnCl+	8.683e-10	7.675e-10	-9.061	-9.115	-0.054
MnCl ₂	1.013e-13	1.017e-13	-12.994	-12.993	0.002
MnCl ₃ -	9.620e-18	8.503e-18	-17.017	-17.070	-0.054
FeCl+ ₂	1.484e-21	9.057e-22	-20.829	-21.043	-0.214
FeCl+	3.015e-22	2.665e-22	-21.521	-21.574	-0.054
FeCl ₂ +	1.834e-24	1.621e-24	-23.737	-23.790	-0.054
FeCl ₃	4.902e-29	4.920e-29	-28.310	-28.308	0.002
F	1.159e-05				
F-	1.051e-05	9.289e-06	-4.978	-5.032	-0.054
MgF+	1.013e-06	8.952e-07	-5.994	-6.048	-0.054
CaF+	6.153e-08	5.439e-08	-7.211	-7.264	-0.054
NaF	6.450e-09	6.473e-09	-8.190	-8.189	0.002
MnF+	4.512e-11	3.988e-11	-10.346	-10.399	-0.054
HF	1.772e-11	1.779e-11	-10.751	-10.750	0.002
HF ₂ -	6.653e-16	5.881e-16	-15.177	-15.231	-0.054
FeF+ ₂	2.751e-18	1.679e-18	-17.561	-17.775	-0.214
FeF ₂ +	6.332e-19	5.597e-19	-18.198	-18.252	-0.054
FeF ₃	7.970e-21	7.998e-21	-20.099	-20.097	0.002
H ₂ F ₂	1.110e-21	1.114e-21	-20.955	-20.953	0.002
FeF+	6.684e-23	5.909e-23	-22.175	-22.229	-0.054
Fe(2)	3.611e-18				
FeCO ₃	2.026e-18	2.033e-18	-17.693	-17.692	0.002
Fe+ ₂	1.042e-18	6.361e-19	-17.982	-18.197	-0.214
FeHCO ₃ +	3.673e-19	3.246e-19	-18.435	-18.489	-0.054
FeSO ₄	9.587e-20	9.622e-20	-19.018	-19.017	0.002
FeOH+	7.974e-20	7.048e-20	-19.098	-19.152	-0.054
FeCl+	3.015e-22	2.665e-22	-21.521	-21.574	-0.054
Fe(OH) ₂	1.882e-22	1.888e-22	-21.725	-21.724	0.002
FeF+	6.684e-23	5.909e-23	-22.175	-22.229	-0.054
Fe(OH) ₃ -	4.908e-24	4.338e-24	-23.309	-23.363	-0.054
FeHSO ₄ +	1.042e-27	9.209e-28	-26.982	-27.036	-0.054
Fe(HS) ₂	0.000e+00	0.000e+00	-304.823	-304.821	0.002
Fe(HS) ₃ -	0.000e+00	0.000e+00	-450.518	-450.572	-0.054
Fe(3)	4.839e-06				
Fe(OH) ₃	3.204e-06	3.216e-06	-5.494	-5.493	0.002
Fe(OH) ₄ -	1.573e-06	1.390e-06	-5.803	-5.857	-0.054
Fe(OH) ₂ +	6.138e-08	5.425e-08	-7.212	-7.266	-0.054
FeOH+ ₂	5.551e-13	3.389e-13	-12.256	-12.470	-0.214
FeF+ ₂	2.751e-18	1.679e-18	-17.561	-17.775	-0.214
FeSO ₄ +	1.330e-18	1.176e-18	-17.876	-17.930	-0.054
FeF ₂ +	6.332e-19	5.597e-19	-18.198	-18.252	-0.054
Fe+ ₃	3.958e-19	1.304e-19	-18.403	-18.885	-0.482
Fe(SO ₄) ₂ -	2.807e-20	2.481e-20	-19.552	-19.605	-0.054
FeF ₃	7.970e-21	7.998e-21	-20.099	-20.097	0.002
FeCl+ ₂	1.484e-21	9.057e-22	-20.829	-21.043	-0.214
Fe ₂ (OH) ₂ + ₄	3.194e-23	4.437e-24	-22.496	-23.353	-0.857
FeCl ₂ +	1.834e-24	1.621e-24	-23.737	-23.790	-0.054
FeHSO ₄ + ₂	7.767e-27	4.742e-27	-26.110	-26.324	-0.214
Fe ₃ (OH) ₄ + ₅	2.464e-27	1.128e-28	-26.608	-27.948	-1.340
FeCl ₃	4.902e-29	4.920e-29	-28.310	-28.308	0.002
H(0)	0.000e+00				
H ₂	0.000e+00	0.000e+00	-45.851	-45.849	0.002
K	2.004e-04				
K+	1.992e-04	1.756e-04	-3.701	-3.755	-0.055
KSO ₄ -	1.196e-06	1.057e-06	-5.922	-5.976	-0.054
Mg	3.347e-03				

Mg+2	2.724e-03	1.709e-03	-2.565	-2.767	-0.202
MgSO4	3.181e-04	3.192e-04	-3.497	-3.496	0.002
MgCO3	1.900e-04	1.907e-04	-3.721	-3.720	0.002
MgHCO3+	1.120e-04	9.904e-05	-3.951	-4.004	-0.054
MgOH+	2.147e-06	1.897e-06	-5.668	-5.722	-0.054
MgF+	1.013e-06	8.952e-07	-5.994	-6.048	-0.054
Mn(2)	7.980e-06				
MnCO3	6.545e-06	6.568e-06	-5.184	-5.183	0.002
Mn+2	1.017e-06	6.206e-07	-5.993	-6.207	-0.214
MnHCO3+	3.194e-07	2.823e-07	-6.496	-6.549	-0.054
MnSO4	9.289e-08	9.323e-08	-7.032	-7.030	0.002
MnOH+	5.959e-09	5.267e-09	-8.225	-8.278	-0.054
MnCl+	8.683e-10	7.675e-10	-9.061	-9.115	-0.054
MnF+	4.512e-11	3.988e-11	-10.346	-10.399	-0.054
MnCl2	1.013e-13	1.017e-13	-12.994	-12.993	0.002
Mn(OH)3-	3.404e-15	3.009e-15	-14.468	-14.522	-0.054
MnCl3-	9.620e-18	8.503e-18	-17.017	-17.070	-0.054
Mn(3)	5.624e-20				
Mn+3	5.624e-20	1.853e-20	-19.250	-19.732	-0.482
Mn(6)	1.344e-07				
MnO4-2	1.344e-07	8.208e-08	-6.871	-7.086	-0.214
Mn(7)	3.561e-05				
MnO4-	3.561e-05	3.148e-05	-4.448	-4.502	-0.054
Na	1.380e-03				
Na+	1.368e-03	1.211e-03	-2.864	-2.917	-0.053
NaSO4-	6.484e-06	5.732e-06	-5.188	-5.242	-0.054
NaHCO3	3.463e-06	3.476e-06	-5.461	-5.459	0.002
NaCO3-	2.186e-06	1.933e-06	-5.660	-5.714	-0.054
NaF	6.450e-09	6.473e-09	-8.190	-8.189	0.002
O(0)	6.225e-04				
O2	3.112e-04	3.124e-04	-3.507	-3.505	0.002
S(-2)	0.000e+00				
HS-	0.000e+00	0.000e+00	-147.734	-147.787	-0.054
S5-2	0.000e+00	0.000e+00	-148.585	-148.754	-0.169
S6-2	0.000e+00	0.000e+00	-148.680	-148.840	-0.160
S4-2	0.000e+00	0.000e+00	-148.818	-148.996	-0.179
H2S	0.000e+00	0.000e+00	-149.556	-149.554	0.002
S-2	0.000e+00	0.000e+00	-151.923	-152.137	-0.214
S3-2	0.000e+00	0.000e+00	-152.275	-152.464	-0.190
S2-2	0.000e+00	0.000e+00	-153.533	-153.732	-0.199
Fe(HS)2	0.000e+00	0.000e+00	-304.823	-304.821	0.002
Fe(HS)3-	0.000e+00	0.000e+00	-450.518	-450.572	-0.054
S(6)	2.094e-03				
SO4-2	1.618e-03	9.982e-04	-2.791	-3.001	-0.210
MgSO4	3.181e-04	3.192e-04	-3.497	-3.496	0.002
CaSO4	1.508e-04	1.513e-04	-3.822	-3.820	0.002
NaSO4-	6.484e-06	5.732e-06	-5.188	-5.242	-0.054
KSO4-	1.196e-06	1.057e-06	-5.922	-5.976	-0.054
MnSO4	9.289e-08	9.323e-08	-7.032	-7.030	0.002
HSO4-	1.362e-10	1.204e-10	-9.866	-9.919	-0.054
CaHSO4+	1.350e-12	1.194e-12	-11.870	-11.923	-0.054
FeSO4+	1.330e-18	1.176e-18	-17.876	-17.930	-0.054
FeSO4	9.587e-20	9.622e-20	-19.018	-19.017	0.002
Fe(SO4)2-	2.807e-20	2.481e-20	-19.552	-19.605	-0.054
FeHSO4+2	7.767e-27	4.742e-27	-26.110	-26.324	-0.214
FeHSO4+	1.042e-27	9.209e-28	-26.982	-27.036	-0.054

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-1.75	-6.08	-4.34	CaSO4

Aragonite	1.33	-6.96	-8.29	CaCO ₃
Artinite	-1.97	8.25	10.22	MgCO ₃ :Mg(OH) ₂ :3H ₂ O
Birnessite	10.59	54.19	43.60	MnO ₂
Bixbyite	13.79	13.51	-0.28	Mn ₂ O ₃
Brucite	-2.53	14.89	17.42	Mg(OH) ₂
Calcite	1.48	-6.96	-8.44	CaCO ₃
CH ₄ (g)	-147.31	-150.10	-2.79	CH ₄
CO ₂ (g)	-3.35	-4.71	-1.36	CO ₂
Dolomite	3.29	-13.60	-16.89	CaMg(CO ₃) ₂
Dolomite(d)	2.70	-13.60	-16.30	CaMg(CO ₃) ₂
Epsomite	-3.57	-5.77	-2.20	MgSO ₄ :7H ₂ O
Fe(OH) ₂ :7Cl ₂ .3	6.94	3.90	-3.04	Fe(OH) ₂ :7Cl ₂ .3
Fe(OH) ₃ (a)	2.71	7.60	4.89	Fe(OH) ₃
Fe ₃ (OH) ₈	-5.56	14.66	20.22	Fe ₃ (OH) ₈
FeS(ppt)	-153.24	-157.16	-3.92	FeS
Fluorite	-2.44	-13.15	-10.71	CaF ₂
Goethite	8.29	7.60	-0.69	FeOOH
Greigite	-566.77	-611.80	-45.04	Fe ₃ S ₄
Gypsum	-1.50	-6.08	-4.58	CaSO ₄ :2H ₂ O
H ₂ (g)	-42.74	-45.85	-3.11	H ₂
H ₂ O(g)	-1.74	-0.00	1.74	H ₂ O
H ₂ S(g)	-148.66	-149.55	-0.90	H ₂ S
Halite	-8.00	-6.43	1.56	NaCl
Hausmannite	13.89	77.09	63.19	Mn ₃ O ₄
Hematite	18.55	15.20	-3.34	Fe ₂ O ₃
Huntite	2.53	-26.89	-29.41	CaMg ₃ (CO ₃) ₄
Hydromagnesite	-4.04	-11.68	-7.64	Mg ₅ (CO ₃) ₄ (OH) ₂ :4H ₂ O
Jarosite(ss)	-4.60	-14.43	-9.83	(K _{0.77} Na _{0.03} H _{0.2})Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-K	-4.90	-13.44	-8.54	KFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-Na	-8.10	-12.60	-4.50	NaFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
JarositeH	-14.31	-18.51	-4.20	(H ₃ O)Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Mackinawite	-152.51	-157.16	-4.65	FeS
Maghemite	8.82	15.20	6.39	Fe ₂ O ₃
Magnesite	1.25	-6.64	-7.90	MgCO ₃
Magnetite	9.84	14.66	4.82	Fe ₃ O ₄
Manganite	7.48	32.82	25.34	MnOOH
Melanterite	-18.88	-21.20	-2.32	FeSO ₄ :7H ₂ O
Mirabilite	-7.31	-8.84	-1.52	Na ₂ SO ₄ :10H ₂ O
Mn ₂ (SO ₄) ₃	-43.60	-48.47	-4.87	Mn ₂ (SO ₄) ₃
MnCl ₂ :4H ₂ O	-15.58	-13.24	2.34	MnCl ₂ :4H ₂ O
MnS(Green)	-149.09	-145.17	3.92	MnS
MnSO ₄	-12.21	-9.21	3.00	MnSO ₄
Nahcolite	-4.58	-5.21	-0.63	NaHCO ₃
Natron	-8.06	-9.71	-1.65	Na ₂ CO ₃ :10H ₂ O
Nesquehonite	-1.15	-6.64	-5.50	MgCO ₃ :3H ₂ O
Nsutite	11.62	54.19	42.56	MnO ₂
O ₂ (g)	-0.68	-3.51	-2.83	O ₂
Portlandite	-8.89	14.57	23.47	Ca(OH) ₂
Pyrite	-252.31	-271.03	-18.72	FeS ₂
Pyrochroite	-3.75	11.45	15.20	Mn(OH) ₂
Pyrolusite	11.41	54.19	42.78	MnO ₂
Rhodochrosite	1.02	-10.08	-11.10	MnCO ₃
Rhodochrosite(d)	0.3	1 -10.08	-10.39	MnCO ₃
Siderite	-11.24	-22.07	-10.84	FeCO ₃
Siderite(d)(3)	-11.62	-22.07	-10.45	FeCO ₃
Sulfur	-111.86	-127.06	-15.20	S
Thenardite	-8.67	-8.83	-0.17	Na ₂ SO ₄
Thermonatrite	-9.89	-9.71	0.19	Na ₂ CO ₃ :H ₂ O
Trona	-14.51	-14.92	-0.41	NaHCO ₃ :Na ₂ CO ₃ :2H ₂ O

End of simulation.

12.3.2 Grube Wolf, Schacht Wolf, 0,5 m u WOF

Title Wolf_Schacht Wolf, oberflächennah

Solution 1

temp	17. 6
pH	7. 9
pe	1.8
redox	pe
units	mg/l
density	1.0
F	0.24
Cl	12. 1
S(6)	157
C(4)	558
Ca	67.3
Mg	84.5
Na	31.2
K	07. 6
As	0.006
Fe	0.67
Mn	2.5
Zn	0.029
End	

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution
1.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
As	8,02E-05	8,02E-05
C(4)	9,15E+00	9,15E+00
Ca	1,68E+00	1,68E+00
Cl	3,42E-01	3,42E-01
F	1,26E-02	1,26E-02
Fe	1,20E-02	1,20E-02
K	1,95E-01	1,95E-01
Mg	3,48E+00	3,48E+00
Mn	4,56E-02	4,56E-02
Na	1,36E+00	1,36E+00
S(6)	1,64E+00	1,64E+00
Zn	4,44E-04	4,44E-04

-----Description of solution-----

pH	=	7.090
pe	=	1.800
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	1,64E+01
Mass of water (kg)	=	1,00E+03
Total alkalinity (eq/kg)	=	7,82E+00
Total CO2 (mol/kg)	=	9,15E+00
Temperature (deg C)	=	17.600
Electrical balance (eq)	=	5,41E-01
percent error,	=	2.55

100*(Cat- An)/(Cat+ An)		
Iterations	=	9
Total H	=	1,11E+08
Total O	=	5,55E+07

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	9.053e-08	8.128e-08	-7.043	-7.090	-0.047
OH-	7.801e-08	6.879e-08	-7.108	-7.162	-0.055
H2O	5.551e+01	9.997e-01	1.744	-0.000	0.000
As(3)	6.503e-11				
H3AsO3	6.455e-11	6.479e-11	-10.190	-10.188	0.002
H2AsO3-	4.824e-13	4.253e-13	-12.317	-12.371	-0.055
H4AsO3+	2.959e-18	2.609e-18	-17.529	-17.583	-0.055
HAsO3-2	1.245e-20	7.527e-21	-19.905	-20.123	-0.219
AsO3-3	4.422e-29	1.425e-29	-28.354	-28.846	-0.492
As(5)	8.009e-08				
HAsO4-2	4.370e-08	2.642e-08	-7.359	-7.578	-0.219
H2AsO4-	3.639e-08	3.208e-08	-7.439	-7.494	-0.055
AsO4-3	1.873e-12	6.036e-13	-11.727	-12.219	-0.492
H3AsO4	4.821e-13	4.839e-13	-12.317	-12.315	0.002
C(4)	9.153e-03				
HCO3-	7.523e-03	6.665e-03	-2.124	-2.176	-0.053
CO2	1.352e-03	1.357e-03	-2.869	-2.867	0.002
MgHCO3+	1.626e-04	1.434e-04	-3.789	-3.843	-0.055
CaHCO3+	7.665e-05	6.759e-05	-4.115	-4.170	-0.055
MnHCO3+	1.135e-05	1.001e-05	-4.945	-5.000	-0.055
CO3-2	5.295e-06	3.264e-06	-5.276	-5.486	-0.210
MgCO3	5.231e-06	5.251e-06	-5.281	-5.280	0.002
NaHCO3	4.449e-06	4.466e-06	-5.352	-5.350	0.002
CaCO3	4.352e-06	4.369e-06	-5.361	-5.360	0.002
MnCO3	4.352e-06	4.368e-06	-5.361	-5.360	0.002
FeHCO3+	3.480e-06	3.068e-06	-5.458	-5.513	-0.055
FeCO3	3.590e-07	3.604e-07	-6.445	-6.443	0.002
ZnHCO3+	1.204e-07	1.062e-07	-6.919	-6.974	-0.055
ZnCO3	8.210e-08	8.241e-08	-7.086	-7.084	0.002
NaCO3-	5.600e-08	4.938e-08	-7.252	-7.306	-0.055
Zn(CO3)2-2	9.512e-09	5.750e-09	-8.022	-8.240	-0.219
Ca	1.681e-03				
Ca+2	1.473e-03	9.076e-04	-2.832	-3.042	-0.210
CaSO4	1.262e-04	1.267e-04	-3.899	-3.897	0.002
CaHCO3+	7.665e-05	6.759e-05	-4.115	-4.170	-0.055
CaCO3	4.352e-06	4.369e-06	-5.361	-5.360	0.002
CaF+	7.502e-08	6.615e-08	-7.125	-7.179	-0.055
CaOH+	2.101e-09	1.853e-09	-8.678	-8.732	-0.055
CaHSO4+	6.282e-11	5.539e-11	-10.202	-10.257	-0.055
Cl	3.416e-04				
Cl-	3.416e-04	3.003e-04	-3.466	-3.522	-0.056
MnCl+	2.338e-08	2.061e-08	-7.631	-7.686	-0.055
FeCl+	2.164e-09	1.908e-09	-8.665	-8.719	-0.055
ZnCl+	8.302e-11	7.320e-11	-10.081	-10.135	-0.055
ZnOHCl	1.542e-11	1.548e-11	-10.812	-10.810	0.002
MnCl2	2.692e-12	2.702e-12	-11.570	-11.568	0.002
ZnCl2	2.224e-14	2.233e-14	-13.653	-13.651	0.002
MnCl3-	2.535e-16	2.235e-16	-15.596	-15.651	-0.055
ZnCl3-	8.152e-18	7.188e-18	-17.089	-17.143	-0.055
FeCl+2	2.159e-19	1.305e-19	-18.666	-18.884	-0.219
ZnCl4-2	1.685e-21	1.019e-21	-20.773	-20.992	-0.219

FeCl ₂ +	2.525e-22	2.226e-22	-21.598	-21.652	-0.055
FeCl ₃	6.660e-27	6.686e-27	-26.176	-26.175	0.002
F	1.264e-05				
F-	1.133e-05	9.988e-06	-4.946	-5.001	-0.055
MgF+	1.232e-06	1.087e-06	-5.909	-5.964	-0.055
CaF+	7.502e-08	6.615e-08	-7.125	-7.179	-0.055
NaF	6.822e-09	6.848e-09	-8.166	-8.164	0.002
MnF+	1.321e-09	1.164e-09	-8.879	-8.934	-0.055
HF	1.064e-09	1.068e-09	-8.973	-8.971	0.002
FeF+	5.215e-10	4.598e-10	-9.283	-9.337	-0.055
ZnF+	1.841e-11	1.623e-11	-10.735	-10.790	-0.055
HF ₂ -	4.352e-14	3.838e-14	-13.361	-13.416	-0.055
FeF+ ₂	4.268e-16	2.580e-16	-15.370	-15.588	-0.219
FeF ₂ +	1.063e-16	9.374e-17	-15.973	-16.028	-0.055
H ₂ F ₂	3.849e-18	3.863e-18	-17.415	-17.413	0.002
FeF ₃	1.441e-18	1.446e-18	-17.841	-17.840	0.002
Fe(2)	1.200e-05				
Fe+ ₂	7.615e-06	4.604e-06	-5.118	-5.337	-0.219
FeHCO ₃ +	3.480e-06	3.068e-06	-5.458	-5.513	-0.055
FeSO ₄	5.332e-07	5.352e-07	-6.273	-6.271	0.002
FeCO ₃	3.590e-07	3.604e-07	-6.445	-6.443	0.002
FeOH+	1.152e-08	1.016e-08	-7.939	-7.993	-0.055
FeCl+	2.164e-09	1.908e-09	-8.665	-8.719	-0.055
FeF+	5.215e-10	4.598e-10	-9.283	-9.337	-0.055
Fe(OH) ₂	5.474e-13	5.495e-13	-12.262	-12.260	0.002
FeHSO ₄ +	3.186e-13	2.810e-13	-12.497	-12.551	-0.055
Fe(OH) ₃ -	2.643e-16	2.330e-16	-15.578	-15.633	-0.055
Fe(3)	6.472e-09				
Fe(OH) ₂ +	3.220e-09	2.839e-09	-8.492	-8.547	-0.055
Fe(OH) ₃	3.220e-09	3.232e-09	-8.492	-8.491	0.002
Fe(OH) ₄ -	3.031e-11	2.672e-11	-10.518	-10.573	-0.055
FeOH+ ₂	1.538e-12	9.297e-13	-11.813	-12.032	-0.219
FeF+ ₂	4.268e-16	2.580e-16	-15.370	-15.588	-0.219
FeSO ₄ +	1.445e-16	1.274e-16	-15.840	-15.895	-0.055
FeF ₂ +	1.063e-16	9.374e-17	-15.973	-16.028	-0.055
Fe+ ₃	5.680e-17	1.830e-17	-16.246	-16.737	-0.492
Fe(SO ₄) ₂ -	2.306e-18	2.033e-18	-17.637	-17.692	-0.055
FeF ₃	1.441e-18	1.446e-18	-17.841	-17.840	0.002
FeCl+ ₂	2.159e-19	1.305e-19	-18.666	-18.884	-0.219
FeCl ₂ +	2.525e-22	2.226e-22	-21.598	-21.652	-0.055
Fe ₂ (OH) ₂ + ₄	2.384e-22	3.183e-23	-21.623	-22.497	-0.874
FeHSO ₄ + ₂	4.641e-23	2.806e-23	-22.333	-22.552	-0.219
FeCl ₃	6.660e-27	6.686e-27	-26.176	-26.175	0.002
Fe ₃ (OH) ₄ + ₅	8.840e-28	3.804e-29	-27.054	-28.420	-1.366
H(0)	2.525e-21				
H ₂	1.262e-21	1.267e-21	-20.899	-20.897	0.002
K	1.945e-04				
K+	1.937e-04	1.702e-04	-3.713	-3.769	-0.056
KSO ₄ -	8.926e-07	7.871e-07	-6.049	-6.104	-0.055
Mg	3.479e-03				
Mg+ ₂	3.037e-03	1.889e-03	-2.518	-2.724	-0.206
MgSO ₄	2.726e-04	2.736e-04	-3.565	-3.563	0.002
MgHCO ₃ +	1.626e-04	1.434e-04	-3.789	-3.843	-0.055
MgCO ₃	5.231e-06	5.251e-06	-5.281	-5.280	0.002
MgF+	1.232e-06	1.087e-06	-5.909	-5.964	-0.055
MgOH+	4.822e-08	4.251e-08	-7.317	-7.371	-0.055
Mn(2)	4.555e-05				
Mn+ ₂	2.788e-05	1.685e-05	-4.555	-4.773	-0.219
MnHCO ₃ +	1.135e-05	1.001e-05	-4.945	-5.000	-0.055
MnCO ₃	4.352e-06	4.368e-06	-5.361	-5.360	0.002
MnSO ₄	1.940e-06	1.947e-06	-5.712	-5.711	0.002
MnCl+	2.338e-08	2.061e-08	-7.631	-7.686	-0.055

MnOH+	3.255e-09	2.870e-09	-8.487	-8.542	-0.055
MnF+	1.321e-09	1.164e-09	-8.879	-8.934	-0.055
MnCl2	2.692e-12	2.702e-12	-11.570	-11.568	0.002
MnCl3-	2.535e-16	2.235e-16	-15.596	-15.651	-0.055
Mn(OH)3-	5.635e-19	4.969e-19	-18.249	-18.304	-0.055
Mn(3)	3.366e-29				
Mn+3	3.366e-29	1.085e-29	-28.473	-28.965	-0.492
Mn(6)	0.000e+00				
MnO4-2	0.000e+00	0.000e+00	-61.874	-62.093	-0.219
Mn(7)	0.000e+00				
MnO4-	0.000e+00	0.000e+00	-70.118	-70.173	-0.055
Na	1.358e-03				
Na+	1.349e-03	1.191e-03	-2.870	-2.924	-0.054
NaSO4-	4.848e-06	4.274e-06	-5.314	-5.369	-0.055
NaHCO3	4.449e-06	4.466e-06	-5.352	-5.350	0.002
NaCO3-	5.600e-08	4.938e-08	-7.252	-7.306	-0.055
NaF	6.822e-09	6.848e-09	-8.166	-8.164	0.002
O(0)	0.000e+00				
O2	0.000e+00	0.000e+00	-53.036	-53.035	0.002
S(6)	1.636e-03				
SO4-2	1.229e-03	7.511e-04	-2.911	-3.124	-0.214
MgSO4	2.726e-04	2.736e-04	-3.565	-3.563	0.002
CaSO4	1.262e-04	1.267e-04	-3.899	-3.897	0.002
NaSO4-	4.848e-06	4.274e-06	-5.314	-5.369	-0.055
MnSO4	1.940e-06	1.947e-06	-5.712	-5.711	0.002
KSO4-	8.926e-07	7.871e-07	-6.049	-6.104	-0.055
FeSO4	5.332e-07	5.352e-07	-6.273	-6.271	0.002
ZnSO4	2.094e-08	2.102e-08	-7.679	-7.677	0.002
HSO4-	5.757e-09	5.076e-09	-8.240	-8.294	-0.055
Zn(SO4)2-2	2.251e-10	1.361e-10	-9.648	-9.866	-0.219
CaHSO4+	6.282e-11	5.539e-11	-10.202	-10.257	-0.055
FeHSO4+	3.186e-13	2.810e-13	-12.497	-12.551	-0.055
FeSO4+	1.445e-16	1.274e-16	-15.840	-15.895	-0.055
Fe(SO4)2-	2.306e-18	2.033e-18	-17.637	-17.692	-0.055
FeHSO4+2	4.641e-23	2.806e-23	-22.333	-22.552	-0.219
Zn	4.440e-07				
Zn+2	2.094e-07	1.266e-07	-6.679	-6.898	-0.219
ZnHCO3+	1.204e-07	1.062e-07	-6.919	-6.974	-0.055
ZnCO3	8.210e-08	8.241e-08	-7.086	-7.084	0.002
ZnSO4	2.094e-08	2.102e-08	-7.679	-7.677	0.002
Zn(CO3)2-2	9.512e-09	5.750e-09	-8.022	-8.240	-0.219
ZnOH+	1.089e-09	9.598e-10	-8.963	-9.018	-0.055
Zn(OH)2	2.401e-10	2.410e-10	-9.620	-9.618	0.002
Zn(SO4)2-2	2.251e-10	1.361e-10	-9.648	-9.866	-0.219
ZnCl+	8.302e-11	7.320e-11	-10.081	-10.135	-0.055
ZnF+	1.841e-11	1.623e-11	-10.735	-10.790	-0.055
ZnOHCl	1.542e-11	1.548e-11	-10.812	-10.810	0.002
ZnCl2	2.224e-14	2.233e-14	-13.653	-13.651	0.002
Zn(OH)3-	1.063e-14	9.374e-15	-13.973	-14.028	-0.055
ZnCl3-	8.152e-18	7.188e-18	-17.089	-17.143	-0.055
Zn(OH)4-2	3.023e-20	1.827e-20	-19.520	-19.738	-0.219
ZnCl4-2	1.685e-21	1.019e-21	-20.773	-20.992	-0.219

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-1.83	-6.17	-4.34	CaSO4
Aragonite	-0.24	-8.53	-8.29	CaCO3
Arsenolite	-18.86	-20.38	-1.51	As2O3
Artinite	-6.89	3.25	10.14	MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
As2O5(cr)	-33.00	-24.63	8.37	As2O5

As_native	-23.81	-36.86	-13.05	As
Bianchite	-8.26	-10.02	-1.76	ZnSO ₄ ·6H ₂ O
Birnessite	-16.41	27.19	43.60	MnO ₂
Bixbyite	-15.06	-15.39	-0.33	Mn ₂ O ₃
Brucite	-5.89	11.46	17.35	Mg(OH) ₂
Ca ₃ (AsO ₄) ₂ ·4w	-14.66	-33.57	-18.90	Ca ₃ (AsO ₄) ₂ ·4H ₂ O
Calcite	-0.09	-8.53	-8.44	CaCO ₃
Claudetite	-18.91	-20.38	-1.47	As ₂ O ₃
CO ₂ (g)	-1.49	-2.87	-1.38	CO ₂
Dolomite	0.18	-16.74	-16.91	CaMg(CO ₃) ₂
Dolomite(d)	-0.41	-16.74	-16.33	CaMg(CO ₃) ₂
Epsomite	-3.66	-5.85	-2.19	MgSO ₄ ·7H ₂ O
Fe(OH)·2.7Cl ₃	4.39	1.35	-3.04	Fe(OH)·2.7Cl ₃
Fe(OH) ₃ (a)	-0.36	4.53	4.89	Fe(OH) ₃
Fe ₃ (OH) ₈	-2.31	17.91	20.22	Fe ₃ (OH) ₈
Fluorite	-2.35	-13.04	-10.69	CaF ₂
Goethite	5.26	4.53	-0.73	FeOOH
Goslarite	-8.00	-10.02	-2.02	ZnSO ₄ ·7H ₂ O
Gypsum	-1.58	-6.17	-4.58	CaSO ₄ ·2H ₂ O
H ₂ (g)	-17.78	-20.90	-3.12	H ₂
H ₂ O(g)	-1.71	-0.00	1.71	H ₂ O
Halite	-8.01	-6.45	1.56	NaCl
Hausmannite	-16.91	46.00	62.91	Mn ₃ O ₄
Hematite	12.50	9.06	-3.43	Fe ₂ O ₃
Huntite	-3.67	-33.16	-29.49	CaMg ₃ (CO ₃) ₄
Hydromagnesite	-13.60	-21.38	-7.79	Mg ₅ (CO ₃) ₄ (OH) ₂ ·4H ₂ O (K _{0.77} Na _{0.03} H _{0.2})Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite(ss)	-8.50	-18.33	-9.83	KFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-K	-9.06	-17.69	-8.63	NaFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-Na	-12.24	-16.85	-4.61	(H ₃ O)Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
JarositeH	-16.65	-21.01	-4.36	Fe ₂ O ₃
Maghemite	2.68	9.06	6.39	MgCO ₃
Magnesite	-0.30	-8.21	-7.91	Fe ₃ O ₄
Magnetite	13.23	17.91	4.68	MnOOH
Manganite	-7.04	18.30	25.34	FeSO ₄ ·7H ₂ O
Melanterite	-6.16	-8.46	-2.30	Na ₂ SO ₄ ·10H ₂ O
Mirabilite	-7.51	-8.97	-1.47	Mn ₂ (SO ₄) ₃
Mn ₂ (SO ₄) ₃	-62.32	-67.30	-4.98	
Mn ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O				Mn ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O
O	-10.05	-38.76	-28.71	MnCl ₂ ·4H ₂ O
MnCl ₂ ·4H ₂ O	-14.20	-11.82	2.39	MnSO ₄
MnSO ₄	-10.86	-7.90	2.96	NaHCO ₃
Nahcolite	-4.48	-5.10	-0.62	Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O
Natron	-9.73	-11.34	-1.60	MgCO ₃ ·3H ₂ O
Nesquehonite	-2.70	-8.21	-5.51	MnO ₂
Nsutite	-15.38	27.19	42.56	O ₂
O ₂ (g)	-50.20	-53.03	-2.83	Ca(OH) ₂
Portlandite	-12.24	11.14	23.38	Mn(OH) ₂
Pyrochroite	-5.79	9.41	15.20	MnO ₂
Pyrolusite	-15.41	27.19	42.59	MnCO ₃
Rhodo-chrosite	0.84	-10.26	-11.10	MnCO ₃
Rhodo-chrosite(d)) 0.1	3 -10.26	-10.39	FeAsO ₄ ·2H ₂ O
Scorodite	-8.71	-28.96	-20.25	FeCO ₃
Siderite	0.02	-10.82	-10.84	FeCO ₃
Siderite(d)(3)	-0.37	-10.82	-10.45	ZnCO ₃
Smithsonite	-2.47	-12.38	-9.92	Na ₂ SO ₄
Thenardite	-8.80	-8.97	-0.17	Na ₂ CO ₃ ·H ₂ O
Thermonatrite	-11.51	-11.33	0.18	NaHCO ₃ ·Na ₂ CO ₃ ·2H ₂ O
Trona	-15.98	-16.43	-0.46	ZnO
Zincite(c)	-4.27	7.28	11.55	ZnSO ₄
Zincosite	-13.39	-10.02	3.37	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -a	-5.17	7.28	12.45	

Zn(OH)2-b	-4.47	7.28	11.75	Zn(OH)2
Zn(OH)2-c	-4.92	7.28	12.20	Zn(OH)2
Zn(OH)2-e	-4.22	7.28	11.50	Zn(OH)2
Zn(OH)2-g	-4.43	7.28	11.71	Zn(OH)2
Zn2(OH)2SO4	-10.24	-2.74	7.50	Zn2(OH)2SO4
Zn2(OH)3Cl	-11.25	3.95	15.20	Zn2(OH)3Cl
Zn3(AsO4)2:2.5w	-17.59	-45.13	-27.55	Zn3(AsO4)2:2.5H2O
Zn3O(SO4)2	-32.94	-12.76	20.18	ZnO:2ZnSO4
Zn4(OH)6SO4	-16.58	11.82	28.40	Zn4(OH)6SO4
Zn5(OH)8Cl2	-23.31	15.19	38.50	Zn5(OH)8Cl2
ZnCl2	-21.30	-13.94	7.36	ZnCl2
ZnCO3:H2O	-2.12	-12.38	-10.26	ZnCO3:H2O
ZnF2	-15.62	-16.90	-1.28	ZnF2
ZnMetal	-36.94	-10.50	26.44	Zn
ZnO(a)	-4.03	7.28	11.31	ZnO
ZnSO4:H2O	-9.65	-10.02	-0.37	ZnSO4:H2O

End of simulation.

12.3.3 Grube Wolf, Schacht Wolf, 195 m u WOF

Title Wolf_Schacht Wolf, 195 u WOF

Solution 1

temp	18
pH	7.14
pe	3.1
redox	Pe
units	mg/l
density	1.0
F	0.09
Cl	11. 2
S(6)	210
C(4)	549
Ca	67.7
Mg	86.9
Na	33.9
K	7.9
As	0.0008
Fe	0.45
Mn	2.2
Ni	0.096
Zn	0.05
O(0)	2.46
End	

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution
1.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
As	1,07E-05	1,07E-05
C(4)	9,01E+00	9,01E+00
Ca	1,69E+00	1,69E+00
Cl	3,16E-01	3,16E-01
F	4,74E-03	4,74E-03
Fe	8,07E-03	8,07E-03
K	2,02E-01	2,02E-01
Mg	3,58E+00	3,58E+00
Mn	4,01E-02	4,01E-02
Na	1,48E+00	1,48E+00
Ni	1,64E-03	1,64E-03
O(0)	1,54E-01	1,54E-01
S(6)	2,19E+00	2,19E+00
Zn	7,66E-04	7,66E-04

-----Description of solution-----

pH	=	7.140
pe	=	3.100
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	1,73E+01
Mass of water (kg)	=	1,00E+03
Total alkalinity (eq/kg)	=	7,83E+00
Total CO2 (mol/kg)	=	9,01E+00
Temperature (deg C)	=	18.000

Electrical balance (eq)	=	-2,15E-01
percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	-0.97
Iterations	=	9
Total H	=	1,11E+08
Total O = 5.554095e+01		

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
O(-2)/O(0)	139.459	0.8056

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
OH-	9.068e-08	7,97E-05	-7.042	-7.098	-0.056
H+	8.085e-08	7,24E-05	-7.092	-7.140	-0.048
H2O	5.551e+01	1,00E+03	1.744	-0.000	0.000
As(3)	1.343e-14				
H3AsO3	1.332e-14	1,34E-11	-13.876	-13.874	0.002
H2AsO3-	1.137e-16	1,00E-13	-15.944	-16.000	-0.056
H4AsO3+	5.457e-22	4,80E-19	-21.263	-21.319	-0.056
HAsO3-2	3.382e-24	2,02E-21	-23.471	-23.694	-0.223
AsO3-3	1.386e-32	4,36E-30	-31.858	-32.361	-0.503
As(5)	1.069e-08				
HAsO4-2	6.162e-09	3,68E-06	-8.210	-8.434	-0.223
H2AsO4-	4.526e-09	3,98E-06	-8.344	-8.400	-0.056
AsO4-3	3.036e-13	9,54E-11	-12.518	-13.020	-0.503
H3AsO4	5.351e-14	5,37E-11	-13.272	-13.270	0.002
C(4)	9.006e-03				
HCO3-	7.534e-03	6,66E+00	-2.123	-2.177	-0.054
CO2	1.195e-03	1,20E+00	-2.922	-2.921	0.002
MgHCO3+	1.619e-04	1,42E-01	-3.791	-3.846	-0.056
CaHCO3+	7.525e-05	6,62E-02	-4.123	-4.179	-0.056
MnHCO3+	9.677e-06	8,51E-03	-5.014	-5.070	-0.056
CO3-2	6.054e-06	3,69E-03	-5.218	-5.433	-0.215
MgCO3	5.914e-06	5,94E-03	-5.228	-5.226	0.002
CaCO3	4.814e-06	4,83E-03	-5.317	-5.316	0.002
NaHCO3	4.809e-06	4,83E-03	-5.318	-5.316	0.002
MnCO3	4.190e-06	4,21E-03	-5.378	-5.376	0.002
FeHCO3+	2.248e-06	1,98E-03	-5.648	-5.704	-0.056
NiCO3	1.465e-06	1,47E-03	-5.834	-5.832	0.002
FeCO3	2.620e-07	2,63E-04	-6.582	-6.580	0.002
ZnHCO3+	1.976e-07	1,74E-04	-6.704	-6.760	-0.056
ZnCO3	1.521e-07	1,53E-04	-6.818	-6.816	0.002
NaCO3-	7.025e-08	6,18E-05	-7.153	-7.209	-0.056
NiHCO3+	5.615e-08	4,94E-05	-7.251	-7.306	-0.056
Zn(CO3)2-2	2.017e-08	1,21E-05	-7.695	-7.919	-0.223
Ni(CO3)2-2	1.579e-08	9,44E-06	-7.802	-8.025	-0.223
Ca	1.691e-03				
Ca+2	1.447e-03	8,82E-01	-2.840	-3.054	-0.215
CaSO4	1.637e-04	1,64E-01	-3.786	-3.784	0.002
CaHCO3+	7.525e-05	6,62E-02	-4.123	-4.179	-0.056
CaCO3	4.814e-06	4,83E-03	-5.317	-5.316	0.002
CaF+	2.762e-08	2,43E-05	-7.559	-7.615	-0.056
CaOH+	2.298e-09	2,02E-06	-8.639	-8.695	-0.056
CaHSO4+	7.311e-11	6,43E-08	-10.136	-10.192	-0.056
Cl	3.162e-04				

Cl-	3.162e-04	2,77E-01	-3.500	-3.557	-0.057
MnCl+	1.841e-08	1,62E-05	-7.735	-7.791	-0.056
FeCl+	1.292e-09	1,14E-06	-8.889	-8.945	-0.056
ZnCl+	1.282e-10	1,13E-07	-9.892	-9.948	-0.056
NiCl+	4.254e-11	3,74E-08	-10.371	-10.427	-0.056
ZnOHCl	2.615e-11	2,63E-08	-10.583	-10.581	0.002
MnCl2	1.951e-12	1,96E-09	-11.710	-11.708	0.002
NiCl2	3.749e-14	3,76E-11	-13.426	-13.424	0.002
ZnCl2	3.166e-14	3,18E-11	-13.499	-13.498	0.002
MnCl3-	1.701e-16	1,50E-13	-15.769	-15.825	-0.056
ZnCl3-	1.077e-17	9,47E-15	-16.968	-17.024	-0.056
FeCl+2	2.688e-18	1,61E-15	-17.571	-17.794	-0.223
FeCl2+	2.840e-21	2,50E-18	-20.547	-20.603	-0.056
ZnCl4-2	2.078e-21	1,24E-18	-20.682	-20.906	-0.223
FeCl3	6.894e-26	6,92E-23	-25.161	-25.160	0.002
F	4.742e-06				
F-	4.248e-06	3,74E-03	-5.372	-5.428	-0.056
MgF+	4.624e-07	4,07E-04	-6.335	-6.391	-0.056
CaF+	2.762e-08	2,43E-05	-7.559	-7.615	-0.056
NaF	2.761e-09	2,77E-06	-8.559	-8.557	0.002
MnF+	4.215e-10	3,71E-07	-9.375	-9.431	-0.056
HF	3.570e-10	3,59E-07	-9.447	-9.446	0.002
FeF+	1.261e-10	1,11E-07	-9.899	-9.955	-0.056
ZnF+	1.137e-11	1,00E-08	-10.944	-11.000	-0.056
NiF+	4.554e-12	4,00E-09	-11.342	-11.397	-0.056
HF2-	5.500e-15	4,84E-12	-14.260	-14.315	-0.056
FeF+2	2.139e-15	1,28E-12	-14.670	-14.893	-0.223
FeF2+	1.986e-16	1,75E-13	-15.702	-15.758	-0.056
FeF3	1.005e-18	1,01E-15	-17.998	-17.996	0.002
H2F2	4.275e-19	4,29E-16	-18.369	-18.367	0.002
Fe(2)	7.946e-06				
Fe+2	4.965e-06	2,97E-03	-5.304	-5.527	-0.223
FeHCO3+	2.248e-06	1,98E-03	-5.648	-5.704	-0.056
FeSO4	4.603e-07	4,62E-04	-6.337	-6.335	0.002
FeCO3	2.620e-07	2,63E-04	-6.582	-6.580	0.002
FeOH+	8.623e-09	7,58E-06	-8.064	-8.120	-0.056
FeCl+	1.292e-09	1,14E-06	-8.889	-8.945	-0.056
FeF+	1.261e-10	1,11E-07	-9.899	-9.955	-0.056
Fe(OH)2	4.756e-13	4,78E-10	-12.323	-12.321	0.002
FeHSO4+	2.460e-13	2,16E-10	-12.609	-12.665	-0.056
Fe(OH)3-	2.595e-16	2,28E-13	-15.586	-15.642	-0.056
Fe(3)	1.200e-07				
Fe(OH)3	6.351e-08	6,38E-05	-7.197	-7.195	0.002
Fe(OH)2+	5.575e-08	4,90E-05	-7.254	-7.310	-0.056
Fe(OH)4-	6.841e-10	6,02E-07	-9.165	-9.221	-0.056
FeOH+2	2.355e-11	1,41E-08	-10.628	-10.851	-0.223
FeSO4+	2.559e-15	2,25E-12	-14.592	-14.648	-0.056
FeF+2	2.139e-15	1,28E-12	-14.670	-14.893	-0.223
Fe+3	7.666e-16	2,41E-13	-15.115	-15.618	-0.503
FeF2+	1.986e-16	1,75E-13	-15.702	-15.758	-0.056
Fe(SO4)2-	5.433e-17	4,78E-14	-16.265	-16.321	-0.056
FeCl+2	2.688e-18	1,61E-15	-17.571	-17.794	-0.223
FeF3	1.005e-18	1,01E-15	-17.998	-17.996	0.002
Fe2(OH)2+4	5.614e-20	7,18E-18	-19.251	-20.144	-0.893
FeCl2+	2.840e-21	2,50E-18	-20.547	-20.603	-0.056
FeHSO4+2	7.377e-22	4,41E-19	-21.132	-21.355	-0.223
Fe3(OH)4+5	3.544e-24	1,42E-22	-23.450	-24.847	-1.396
FeCl3	6.894e-26	6,92E-23	-25.161	-25.160	0.002
H(0)	5.015e-24				
H2	2.508e-24	2,52E-21	-23.601	-23.599	0.002
K	2.022e-04				
K+	2.010e-04	1,76E-01	-3.697	-3.754	-0.057

KSO4-	1.240e-06	1,09E-03	-5.907	-5.963	-0.056
Mg	3.578e-03				
Mg+2	3.046e-03	1,88E+00	-2.516	-2.727	-0.210
MgSO4	3.635e-04	3,65E-01	-3.440	-3.438	0.002
MgHCO3+	1.619e-04	1,42E-01	-3.791	-3.846	-0.056
MgCO3	5.914e-06	5,94E-03	-5.228	-5.226	0.002
MgF+	4.624e-07	4,07E-04	-6.335	-6.391	-0.056
MgOH+	5.596e-08	4,92E-05	-7.252	-7.308	-0.056
Mn(2)	4.008e-05				
Mn+2	2.398e-05	1,43E-02	-4.620	-4.843	-0.223
MnHCO3+	9.677e-06	8,51E-03	-5.014	-5.070	-0.056
MnCO3	4.190e-06	4,21E-03	-5.378	-5.376	0.002
MnSO4	2.211e-06	2,22E-03	-5.655	-5.654	0.002
MnCl+	1.841e-08	1,62E-05	-7.735	-7.791	-0.056
MnOH+	3.225e-09	2,84E-06	-8.491	-8.547	-0.056
MnF+	4.215e-10	3,71E-07	-9.375	-9.431	-0.056
MnCl2	1.951e-12	1,96E-09	-11.710	-11.708	0.002
MnCl3-	1.701e-16	1,50E-13	-15.769	-15.825	-0.056
Mn(OH)3-	6.792e-19	5,97E-16	-18.168	-18.224	-0.056
Mn(3)	6.230e-28				
Mn+3	6.230e-28	1,96E-25	-27.206	-27.708	-0.503
Mn(6)	0.000e+00				
MnO4-2	0.000e+00	0.000e+00	-56.184	-56.408	-0.223
Mn(7)	0.000e+00				
MnO4-	0.000e+00	0.000e+00	-63.105	-63.161	-0.056
Na	1.476e-03				
Na+	1.464e-03	1,29E+00	-2.834	-2.890	-0.055
NaSO4-	7.009e-06	6,16E-03	-5.154	-5.210	-0.056
NaHCO3	4.809e-06	4,83E-03	-5.318	-5.316	0.002
NaCO3-	7.025e-08	6,18E-05	-7.153	-7.209	-0.056
NaF	2.761e-09	2,77E-06	-8.559	-8.557	0.002
Ni	1.637e-06				
NiCO3	1.465e-06	1,47E-03	-5.834	-5.832	0.002
Ni+2	8.986e-08	5,37E-05	-7.046	-7.270	-0.223
NiHCO3+	5.615e-08	4,94E-05	-7.251	-7.306	-0.056
Ni(CO3)2-2	1.579e-08	9,44E-06	-7.802	-8.025	-0.223
NiSO4	9.790e-09	9,83E-06	-8.009	-8.007	0.002
NiOH+	7.031e-11	6,18E-08	-10.153	-10.209	-0.056
NiCl+	4.254e-11	3,74E-08	-10.371	-10.427	-0.056
NiF+	4.554e-12	4,00E-09	-11.342	-11.397	-0.056
Ni(OH)2	1.019e-12	1,02E-09	-11.992	-11.990	0.002
Ni(SO4)2-2	9.371e-13	5,60E-10	-12.028	-12.252	-0.223
NiCl2	3.749e-14	3,76E-11	-13.426	-13.424	0.002
Ni(OH)3-	1.606e-16	1,41E-13	-15.794	-15.850	-0.056
O(0)	1.539e-04				
O2	7.695e-05	7,73E-02	-4.114	-4.112	0.002
S(6)	2.188e-03				
SO4-2	1.650e-03	9,98E-01	-2.782	-3.001	-0.218
MgSO4	3.635e-04	3,65E-01	-3.440	-3.438	0.002
CaSO4	1.637e-04	1,64E-01	-3.786	-3.784	0.002
NaSO4-	7.009e-06	6,16E-03	-5.154	-5.210	-0.056
MnSO4	2.211e-06	2,22E-03	-5.655	-5.654	0.002
KSO4-	1.240e-06	1,09E-03	-5.907	-5.963	-0.056
FeSO4	4.603e-07	4,62E-04	-6.337	-6.335	0.002
ZnSO4	4.571e-08	4,59E-05	-7.340	-7.338	0.002
NiSO4	9.790e-09	9,83E-06	-8.009	-8.007	0.002
HSO4-	6.892e-09	6,06E-06	-8.162	-8.217	-0.056
Zn(SO4)2-2	6.579e-10	3,93E-07	-9.182	-9.405	-0.223
CaHSO4+	7.311e-11	6,43E-08	-10.136	-10.192	-0.056
Ni(SO4)2-2	9.371e-13	5,60E-10	-12.028	-12.252	-0.223
FeHSO4+	2.460e-13	2,16E-10	-12.609	-12.665	-0.056
FeSO4+	2.559e-15	2,25E-12	-14.592	-14.648	-0.056

Fe(SO ₄) ₂ -	5.433e-17	4,78E-14	-16.265	-16.321	-0.056
FeHSO ₄ +2	7.377e-22	4,41E-19	-21.132	-21.355	-0.223
Zn	7.656e-07				
Zn+2	3.467e-07	2,07E-04	-6.460	-6.683	-0.223
ZnHCO ₃ +	1.976e-07	1,74E-04	-6.704	-6.760	-0.056
ZnCO ₃	1.521e-07	1,53E-04	-6.818	-6.816	0.002
ZnSO ₄	4.571e-08	4,59E-05	-7.340	-7.338	0.002
Zn(CO ₃) ₂ -2	2.017e-08	1,21E-05	-7.695	-7.919	-0.223
ZnOH+	2.071e-09	1,82E-06	-8.684	-8.740	-0.056
Zn(SO ₄) ₂ -2	6.579e-10	3,93E-07	-9.182	-9.405	-0.223
Zn(OH) ₂	4.949e-10	4,97E-07	-9.305	-9.304	0.002
ZnCl+	1.282e-10	1,13E-07	-9.892	-9.948	-0.056
ZnOHCl	2.615e-11	2,63E-08	-10.583	-10.581	0.002
ZnF+	1.137e-11	1,00E-08	-10.944	-11.000	-0.056
ZnCl ₂	3.166e-14	3,18E-11	-13.499	-13.498	0.002
Zn(OH) ₃ -	2.466e-14	2,17E-11	-13.608	-13.664	-0.056
ZnCl ₃ -	1.077e-17	9,47E-15	-16.968	-17.024	-0.056
Zn(OH) ₄ -2	7.932e-20	4,74E-17	-19.101	-19.324	-0.223
ZnCl ₄ -2	2.078e-21	1,24E-18	-20.682	-20.906	-0.223

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-1.72	-6.06	-4.34	CaSO ₄
Aragonite	-0.19	-8.49	-8.29	CaCO ₃
Arsenolite	-26.24	-27.75	-1.51	As ₂ O ₃
Artinite	-6.71	3.39	10.11	MgCO ₃ :Mg(OH) ₂ :3H ₂ O
As ₂ O ₅ (cr)	-34.90	-26.54	8.36	As ₂ O ₅
As_native	-31.58	-44.59	-13.02	As
Bianchite	-7.92	-9.69	-1.76	ZnSO ₄ :6H ₂ O
Birnessite	-13.68	29.92	43.60	MnO ₂
Bixbyite	-12.23	-12.58	-0.34	Mn ₂ O ₃
Brucite	-5.76	11.55	17.32	Mg(OH) ₂
Bunsenite	-5.86	7.01	12.87	NiO
Ca ₃ (AsO ₄) ₂ :4w	-16.30	-35.20	-18.90	Ca ₃ (AsO ₄) ₂ :4H ₂ O
Calcite	-0.04	-8.49	-8.44	CaCO ₃
Claudetite	-26.29	-27.75	-1.46	As ₂ O ₃
CO ₂ (g)	-1.54	-2.92	-1.38	CO ₂
Dolomite	0.28	-16.65	-16.92	CaMg(CO ₃) ₂
Dolomite(d)	-0.30	-16.65	-16.34	CaMg(CO ₃) ₂
Epsomite	-3.54	-5.73	-2.19	MgSO ₄ :7H ₂ O
Fe(OH) ₂ :7Cl ₃	5.63	2.59	-3.04	Fe(OH) ₂ :7Cl ₃
Fe(OH) ₃ (a)	0.91	5.80	4.89	Fe(OH) ₃
Fe ₃ (OH) ₈	0.13	20.36	20.22	Fe ₃ (OH) ₈
Fluorite	-3.22	-13.91	-10.69	CaF ₂
Goethite	6.55	5.80	-0.74	FeOOH
Goslarite	-7.67	-9.69	-2.02	ZnSO ₄ :7H ₂ O
Gypsum	-1.47	-6.06	-4.58	CaSO ₄ :2H ₂ O
H ₂ (g)	-20.48	-23.60	-3.12	H ₂
H ₂ O(g)	-1.70	-0.00	1.70	H ₂ O
Halite	-8.01	-6.45	1.57	NaCl
Hausmannite	-14.01	48.79	62.80	Mn ₃ O ₄
Hematite	15.07	11.60	-3.46	Fe ₂ O ₃
Huntite	-3.45	-32.97	-29.51	CaMg ₃ (CO ₃) ₄
Hydromagnesite	-13.24	-21.08	-7.84	Mg ₅ (CO ₃) ₄ (OH) ₂ :4H ₂ O
Jarosite(ss)	-4.59	-14.42	-9.83	(K _{0.77} Na _{0.03} H _{0.2})Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-K	-5.11	-13.77	-8.66	KFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-Na	-8.26	-12.91	-4.64	NaFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
JarositeH	-12.74	-17.16	-4.42	(H ₃ O)Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Maghemite	5.22	11.60	6.39	Fe ₂ O ₃
Magnesite	-0.24	-8.16	-7.92	MgCO ₃

Magnetite	15.73	20.36	4.63	Fe ₃ O ₄
Manganite	-5.66	19.68	25.34	MnOOH
Melanterite	-6.23	-8.53	-2.30	FeSO ₄ ·7H ₂ O
Mirabilite	-7.33	-8.78	-1.45	Na ₂ SO ₄ ·10H ₂ O
Mn ₂ (SO ₄) ₃	-59.40	-64.42	-5.02	Mn ₂ (SO ₄) ₃
Mn ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O	-11.87	-40.57	-28.71	Mn ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O
MnCl ₂ ·4H ₂ O	-14.36	-11.96	2.40	MnCl ₂ ·4H ₂ O
MnSO ₄	-10.79	-7.84	2.94	MnSO ₄
Morenosite	-7.86	-10.27	-2.41	NiSO ₄ ·7H ₂ O
Nahcolite	-4.45	-5.07	-0.61	NaHCO ₃
Natron	-9.62	-11.21	-1.59	Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O
Nesquehonite	-2.64	-8.16	-5.52	MgCO ₃ ·3H ₂ O
Ni(OH) ₂	-3.25	7.01	10.26	Ni(OH) ₂
Ni ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O	-22.34	-47.85	-25.51	Ni ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O
Ni ₄ (OH) ₆ SO ₄	-21.24	10.76	32.00	Ni ₄ (OH) ₆ SO ₄
NiCO ₃	-6.04	-12.70	-6.66	NiCO ₃
Nsutite	-12.65	29.92	42.56	MnO ₂
O ₂ (g)	-1.27	-4.11	-2.84	O ₂
Portlandite	-12.12	11.23	23.35	Ca(OH) ₂
Pyrochroite	-5.76	9.44	15.20	Mn(OH) ₂
Pyrolusite	-12.61	29.92	42.53	MnO ₂
Retgersite	-8.21	-10.27	-2.06	NiSO ₄ ·6H ₂ O
Rhodochrosite	0.83	-10.28	-11.10	MnCO ₃
Rhodochrosite(d)) 0.1	1 -10.28	-10.39	MnCO ₃
Scorodite	-8.39	-28.64	-20.25	FeAsO ₄ ·2H ₂ O
Siderite	-0.11	-10.96	-10.85	FeCO ₃
Siderite(d)(3)	-0.51	-10.96	-10.45	FeCO ₃
Smithsonite	-2.19	-12.12	-9.92	ZnCO ₃
Thenardite	-8.61	-8.78	-0.17	Na ₂ SO ₄
Thermonatrite	-11.39	-11.21	0.17	Na ₂ CO ₃ ·H ₂ O
Trona	-15.80	-16.28	-0.48	NaHCO ₃ :Na ₂ CO ₃ :2H ₂ O
Zincite(c)	-3.93	7.60	11.53	ZnO
Zincosite	-13.03	-9.68	3.35	ZnSO ₄
Zn(OH) ₂ -a	-4.85	7.60	12.45	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -b	-4.15	7.60	11.75	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -c	-4.60	7.60	12.20	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -e	-3.90	7.60	11.50	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -g	-4.11	7.60	11.71	Zn(OH) ₂
Zn ₂ (OH) ₂ SO ₄	-9.59	-2.09	7.50	Zn ₂ (OH) ₂ SO ₄
Zn ₂ (OH) ₃ Cl	-10.70	4.50	15.20	Zn ₂ (OH) ₃ Cl
Zn ₃ (AsO ₄) ₂ ·2.5w	-18.55	-46.09	-27.55	Zn ₃ (AsO ₄) ₂ ·2.5H ₂ O
Zn ₃ O(SO ₄) ₂	-31.88	-11.77	20.11	ZnO:2ZnSO ₄
Zn ₄ (OH) ₆ SO ₄	-15.30	13.10	28.40	Zn ₄ (OH) ₆ SO ₄
Zn ₅ (OH) ₈ Cl ₂	-21.91	16.59	38.50	Zn ₅ (OH) ₈ Cl ₂
ZnCl ₂	-21.14	-13.80	7.34	ZnCl ₂
ZnCO ₃ ·H ₂ O	-1.86	-12.12	-10.26	ZnCO ₃ ·H ₂ O
ZnF ₂	-16.25	-17.54	-1.29	ZnF ₂
ZnMetal	-39.29	-12.88	26.41	Zn
ZnO(a)	-3.71	7.60	11.31	ZnO
ZnSO ₄ ·H ₂ O	-9.30	-9.68	-0.38	ZnSO ₄ ·H ₂ O

End of simulation.

12.3.4 Grube Wolf, Blindschacht, 0,5 m u WOF

Title Wolf_Blindschacht, oberflächennah

Solution 1

temp	17.5
pH	7.9
pe	3.9
redox	Pe
units	mg/l
density	1.0
F	0.26
Cl	13.6
S(6)	193
C(4)	564
Ca	66.4
Mg	85.4
Na	33.0
K	7.2
As	0.011
Pb	0.032
Fe	9.5
Mn	4.4
Ni	0.015
Zn	0.15
End	

Initial solution
1.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
As	1,47E-04	1,47E-04
C(4)	9,25E+00	9,25E+00
Ca	1,66E+00	1,66E+00
Cl	3,84E-01	3,84E-01
F	1,37E-02	1,37E-02
Fe	1,70E-01	1,70E-01
K	1,84E-01	1,84E-01
Mg	3,52E+00	3,52E+00
Mn	8,02E-02	8,02E-02
Na	1,44E+00	1,44E+00
Ni	2,56E-04	2,56E-04
Pb	1,55E-04	1,55E-04
S(6)	2,01E+00	2,01E+00
Zn	2,30E-03	2,30E-03

-----Description of solution-----

pH	=	7.090
pe	=	3.900
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	1,72E+01
Mass of water (kg)	=	1,00E+03
Total alkalinity (eq/kg)	=	7,93E+00
Total CO2 (mol/kg)	=	9,25E+00
Temperature (deg C)	=	17.500
Electrical balance (eq)	=	1,18E-01
Percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	0.53
Iterations	=	9

Total H	=	1,11E+08
Total O	=	5,55E+07

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	9.070e-08	8.128e-08	-7.042	-7.090	-0.048
OH-	7.756e-08	6.822e-08	-7.110	-7.166	-0.056
H2O	5.551e+01	9.997e-01	1.744	-0.000	0.000
As(3)	7.607e-15				
H3AsO3	7.551e-15	7.581e-15	-14.122	-14.120	0.002
H2AsO3-	5.636e-17	4.957e-17	-16.249	-16.305	-0.056
H4AsO3+	3.471e-22	3.053e-22	-21.460	-21.515	-0.056
HAsO3-2	1.459e-24	8.733e-25	-23.836	-24.059	-0.223
AsO3-3	5.226e-33	1.647e-33	-32.282	-32.783	-0.501
As(5)	1.470e-07				
HAsO4-2	8.045e-08	4.815e-08	-7.094	-7.317	-0.223
H2AsO4-	6.651e-08	5.850e-08	-7.177	-7.233	-0.056
AsO4-3	3.482e-12	1.097e-12	-11.458	-11.960	-0.501
H3AsO4	8.781e-13	8.815e-13	-12.056	-12.055	0.002
C(4)	9.252e-03				
HCO3-	7.561e-03	6.683e-03	-2.121	-2.175	-0.054
CO2	1.358e-03	1.363e-03	-2.867	-2.865	0.002
MgHCO3+	1.611e-04	1.417e-04	-3.793	-3.849	-0.056
CaHCO3+	7.403e-05	6.512e-05	-4.131	-4.186	-0.056
FeHCO3+	4.577e-05	4.026e-05	-4.339	-4.395	-0.056
MnHCO3+	1.975e-05	1.738e-05	-4.704	-4.760	-0.056
MnCO3	7.534e-06	7.564e-06	-5.123	-5.121	0.002
CO3-2	5.346e-06	3.264e-06	-5.272	-5.486	-0.214
MgCO3	5.150e-06	5.171e-06	-5.288	-5.286	0.002
NaHCO3	4.702e-06	4.721e-06	-5.328	-5.326	0.002
FeCO3	4.698e-06	4.717e-06	-5.328	-5.326	0.002
CaCO3	4.185e-06	4.201e-06	-5.378	-5.377	0.002
ZnHCO3+	6.158e-07	5.416e-07	-6.211	-6.266	-0.056
ZnCO3	4.176e-07	4.193e-07	-6.379	-6.377	0.002
NiCO3	2.264e-07	2.273e-07	-6.645	-6.643	0.002
PbCO3	1.328e-07	1.333e-07	-6.877	-6.875	0.002
NaCO3-	5.889e-08	5.180e-08	-7.230	-7.286	-0.056
Zn(CO3)2-2	4.889e-08	2.926e-08	-7.311	-7.534	-0.223
PbHCO3+	1.418e-08	1.247e-08	-7.848	-7.904	-0.056
NiHCO3+	9.854e-09	8.667e-09	-8.006	-8.062	-0.056
Ni(CO3)2-2	2.155e-09	1.290e-09	-8.667	-8.890	-0.223
Pb(CO3)2-2	1.826e-09	1.093e-09	-8.738	-8.961	-0.223
Ca	1.658e-03				
Ca+2	1.432e-03	8.739e-04	-2.844	-3.059	-0.214
CaSO4	1.483e-04	1.489e-04	-3.829	-3.827	0.002
CaHCO3+	7.403e-05	6.512e-05	-4.131	-4.186	-0.056
CaCO3	4.185e-06	4.201e-06	-5.378	-5.377	0.002
CaF+	7.815e-08	6.874e-08	-7.107	-7.163	-0.056
CaOH+	2.028e-09	1.784e-09	-8.693	-8.749	-0.056
CaHSO4+	7.391e-11	6.501e-11	-10.131	-10.187	-0.056
Cl	3.840e-04				
Cl-	3.839e-04	3.366e-04	-3.416	-3.473	-0.057
MnCl+	4.548e-08	4.000e-08	-7.342	-7.398	-0.056
FeCl+	3.182e-08	2.799e-08	-7.497	-7.553	-0.056
ZnCl+	4.723e-10	4.154e-10	-9.326	-9.381	-0.056
ZnOHCl	8.790e-11	8.825e-11	-10.056	-10.054	0.002
PbCl+	2.958e-11	2.602e-11	-10.529	-10.585	-0.056
NiCl+	9.031e-12	7.944e-12	-11.044	-11.100	-0.056
MnCl2	5.854e-12	5.878e-12	-11.233	-11.231	0.002

ZnCl ₂	1.414e-13	1.420e-13	-12.850	-12.848	0.002
PbCl ₂	1.596e-14	1.603e-14	-13.797	-13.795	0.002
NiCl ₂	9.670e-15	9.708e-15	-14.015	-14.013	0.002
MnCl ₃ -	6.195e-16	5.449e-16	-15.208	-15.264	-0.056
FeCl+ ₂	3.989e-16	2.388e-16	-15.399	-15.622	-0.223
ZnCl ₃ -	5.821e-17	5.120e-17	-16.235	-16.291	-0.056
PbCl ₃ -	4.646e-18	4.087e-18	-17.333	-17.389	-0.056
FeCl ₂ +	5.209e-19	4.582e-19	-18.283	-18.339	-0.056
ZnCl ₄ - ₂	1.358e-20	8.127e-21	-19.867	-20.090	-0.223
PbCl ₄ - ₂	1.037e-21	6.206e-22	-20.984	-21.207	-0.223
FeCl ₃	1.536e-23	1.542e-23	-22.814	-22.812	0.002
F	1.370e-05				
F-	1.229e-05	1.081e-05	-4.911	-4.966	-0.056
MgF+	1.315e-06	1.157e-06	-5.881	-5.937	-0.056
CaF+	7.815e-08	6.874e-08	-7.107	-7.163	-0.056
NaF	7.781e-09	7.812e-09	-8.109	-8.107	0.002
FeF+	7.401e-09	6.510e-09	-8.131	-8.186	-0.056
MnF+	2.480e-09	2.181e-09	-8.606	-8.661	-0.056
HF	1.149e-09	1.153e-09	-8.940	-8.938	0.002
ZnF+	1.014e-10	8.921e-11	-9.994	-10.050	-0.056
NiF+	2.303e-12	2.026e-12	-11.638	-11.693	-0.056
FeF+ ₂	7.626e-13	4.565e-13	-12.118	-12.341	-0.223
PbF+	5.134e-13	4.516e-13	-12.290	-12.345	-0.056
FeF ₂ +	2.038e-13	1.792e-13	-12.691	-12.747	-0.056
HF ₂ -	5.094e-14	4.481e-14	-13.293	-13.349	-0.056
FeF ₃	2.979e-15	2.990e-15	-14.526	-14.524	0.002
PbF ₂	9.925e-17	9.964e-17	-16.003	-16.002	0.002
H ₂ F ₂	4.505e-18	4.523e-18	-17.346	-17.345	0.002
PbF ₃ -	8.869e-21	7.801e-21	-20.052	-20.108	-0.056
PbF ₄ - ₂	6.741e-26	4.035e-26	-25.171	-25.394	-0.223
Fe(2)	1.598e-04				
Fe+ ₂	1.006e-04	6.024e-05	-3.997	-4.220	-0.223
FeHCO ₃ +	4.577e-05	4.026e-05	-4.339	-4.395	-0.056
FeSO ₄	8.504e-06	8.538e-06	-5.070	-5.069	0.002
FeCO ₃	4.698e-06	4.717e-06	-5.328	-5.326	0.002
FeOH+	1.499e-07	1.318e-07	-6.824	-6.880	-0.056
FeCl+	3.182e-08	2.799e-08	-7.497	-7.553	-0.056
FeF+	7.401e-09	6.510e-09	-8.131	-8.186	-0.056
Fe(OH) ₂	7.040e-12	7.068e-12	-11.152	-11.151	0.002
FeHSO ₄ +	5.095e-12	4.481e-12	-11.293	-11.349	-0.056
Fe(OH) ₃ -	3.405e-15	2.995e-15	-14.468	-14.524	-0.056
Fe(3)	1.048e-05				
Fe(OH) ₂ +	5.233e-06	4.603e-06	-5.281	-5.337	-0.056
Fe(OH) ₃	5.195e-06	5.216e-06	-5.284	-5.283	0.002
Fe(OH) ₄ -	4.882e-08	4.294e-08	-7.311	-7.367	-0.056
FeOH+ ₂	2.528e-09	1.513e-09	-8.597	-8.820	-0.223
FeF+ ₂	7.626e-13	4.565e-13	-12.118	-12.341	-0.223
FeSO ₄ +	2.892e-13	2.543e-13	-12.539	-12.595	-0.056
FeF ₂ +	2.038e-13	1.792e-13	-12.691	-12.747	-0.056
Fe+ ₃	9.512e-14	2.998e-14	-13.022	-13.523	-0.501
Fe(SO ₄) ₂ -	5.632e-15	4.954e-15	-14.249	-14.305	-0.056
FeF ₃	2.979e-15	2.990e-15	-14.526	-14.524	0.002
Fe ₂ (OH) ₂ + ₄	6.599e-16	8.471e-17	-15.181	-16.072	-0.892
FeCl+ ₂	3.989e-16	2.388e-16	-15.399	-15.622	-0.223
Fe ₃ (OH) ₄ + ₅	4.096e-18	1.657e-19	-17.388	-18.781	-1.393
FeCl ₂ +	5.209e-19	4.582e-19	-18.283	-18.339	-0.056
FeHSO ₄ + ₂	9.358e-20	5.602e-20	-19.029	-19.252	-0.223
FeCl ₃	1.536e-23	1.542e-23	-22.814	-22.812	0.002
H(0)	1.594e-25				
H ₂	7.972e-26	8.003e-26	-25.098	-25.097	0.002
K	1.843e-04				
K+	1.833e-04	1.607e-04	-3.737	-3.794	-0.057

KSO4-	1.030e-06	9.059e-07	-5.987	-6.043	-0.056
Mg	3.516e-03				
Mg+2	3.021e-03	1.863e-03	-2.520	-2.730	-0.210
MgSO4	3.273e-04	3.286e-04	-3.485	-3.483	0.002
MgHCO3+	1.611e-04	1.417e-04	-3.793	-3.849	-0.056
MgCO3	5.150e-06	5.171e-06	-5.288	-5.286	0.002
MgF+	1.315e-06	1.157e-06	-5.881	-5.937	-0.056
MgOH+	4.721e-08	4.152e-08	-7.326	-7.382	-0.056
Mn(2)	8.017e-05				
Mn+2	4.873e-05	2.917e-05	-4.312	-4.535	-0.223
MnHCO3+	1.975e-05	1.738e-05	-4.704	-4.760	-0.056
MnCO3	7.534e-06	7.564e-06	-5.123	-5.121	0.002
MnSO4	4.093e-06	4.110e-06	-5.388	-5.386	0.002
MnCl+	4.548e-08	4.000e-08	-7.342	-7.398	-0.056
MnOH+	5.600e-09	4.925e-09	-8.252	-8.308	-0.056
MnF+	2.480e-09	2.181e-09	-8.606	-8.661	-0.056
MnCl2	5.854e-12	5.878e-12	-11.233	-11.231	0.002
MnCl3-	6.195e-16	5.449e-16	-15.208	-15.264	-0.056
Mn(OH)3-	9.778e-19	8.601e-19	-18.010	-18.065	-0.056
Mn(3)	7.387e-27				
Mn+3	7.387e-27	2.328e-27	-26.132	-26.633	-0.501
Mn(6)	0.000e+00				
MnO4-2	0.000e+00	0.000e+00	-53.270	-53.493	-0.223
Mn(7)	0.000e+00				
MnO4-	0.000e+00	0.000e+00	-59.424	-59.480	-0.056
Na	1.437e-03				
Na+	1.426e-03	1.256e-03	-2.846	-2.901	-0.055
NaSO4-	6.254e-06	5.501e-06	-5.204	-5.260	-0.056
NaHCO3	4.702e-06	4.721e-06	-5.328	-5.326	0.002
NaCO3-	5.889e-08	5.180e-08	-7.230	-7.286	-0.056
NaF	7.781e-09	7.812e-09	-8.109	-8.107	0.002
Ni	2.557e-07				
NiCO3	2.264e-07	2.273e-07	-6.645	-6.643	0.002
Ni+2	1.570e-08	9.395e-09	-7.804	-8.027	-0.223
NiHCO3+	9.854e-09	8.667e-09	-8.006	-8.062	-0.056
Ni(CO3)2-2	2.155e-09	1.290e-09	-8.667	-8.890	-0.223
NiSO4	1.567e-09	1.573e-09	-8.805	-8.803	0.002
NiOH+	1.056e-11	9.286e-12	-10.976	-11.032	-0.056
NiCl+	9.031e-12	7.944e-12	-11.044	-11.100	-0.056
NiF+	2.303e-12	2.026e-12	-11.638	-11.693	-0.056
Ni(OH)2	1.415e-13	1.421e-13	-12.849	-12.847	0.002
Ni(SO4)2-2	1.384e-13	8.281e-14	-12.859	-13.082	-0.223
NiCl2	9.670e-15	9.708e-15	-14.015	-14.013	0.002
Ni(OH)3-	1.987e-17	1.748e-17	-16.702	-16.758	-0.056
O(0)	0.000e+00				
O2	0.000e+00	0.000e+00	-44.671	-44.670	0.002
Pb	1.546e-07				
PbCO3	1.328e-07	1.333e-07	-6.877	-6.875	0.002
PbHCO3+	1.418e-08	1.247e-08	-7.848	-7.904	-0.056
Pb+2	3.926e-09	2.350e-09	-8.406	-8.629	-0.223
Pb(CO3)2-2	1.826e-09	1.093e-09	-8.738	-8.961	-0.223
PbSO4	1.208e-09	1.212e-09	-8.918	-8.916	0.002
PbOH+	6.407e-10	5.635e-10	-9.193	-9.249	-0.056
PbCl+	2.958e-11	2.602e-11	-10.529	-10.585	-0.056
Pb(SO4)2-2	9.753e-12	5.838e-12	-11.011	-11.234	-0.223
Pb(OH)2	2.686e-12	2.696e-12	-11.571	-11.569	0.002
PbF+	5.134e-13	4.516e-13	-12.290	-12.345	-0.056
PbCl2	1.596e-14	1.603e-14	-13.797	-13.795	0.002
Pb(OH)3-	4.329e-16	3.807e-16	-15.364	-15.419	-0.056
PbF2	9.925e-17	9.964e-17	-16.003	-16.002	0.002
Pb2OH+3	9.406e-17	2.964e-17	-16.027	-16.528	-0.501
PbCl3-	4.646e-18	4.087e-18	-17.333	-17.389	-0.056

Pb(OH)4-2	1.792e-20	1.073e-20	-19.747	-19.969	-0.223
PbF3-	8.869e-21	7.801e-21	-20.052	-20.108	-0.056
PbCl4-2	1.037e-21	6.206e-22	-20.984	-21.207	-0.223
Pb3(OH)4+2	2.062e-22	1.234e-22	-21.686	-21.909	-0.223
PbF4-2	6.741e-26	4.035e-26	-25.171	-25.394	-0.223
S(6)	2.011e-03				
SO4-2	1.515e-03	9.175e-04	-2.819	-3.037	-0.218
MgSO4	3.273e-04	3.286e-04	-3.485	-3.483	0.002
CaSO4	1.483e-04	1.489e-04	-3.829	-3.827	0.002
FeSO4	8.504e-06	8.538e-06	-5.070	-5.069	0.002
NaSO4-	6.254e-06	5.501e-06	-5.204	-5.260	-0.056
MnSO4	4.093e-06	4.110e-06	-5.388	-5.386	0.002
KSO4-	1.030e-06	9.059e-07	-5.987	-6.043	-0.056
ZnSO4	1.300e-07	1.305e-07	-6.886	-6.884	0.002
HSO4-	7.035e-09	6.188e-09	-8.153	-8.208	-0.056
Zn(SO4)2-2	1.725e-09	1.033e-09	-8.763	-8.986	-0.223
NiSO4	1.567e-09	1.573e-09	-8.805	-8.803	0.002
PbSO4	1.208e-09	1.212e-09	-8.918	-8.916	0.002
CaHSO4+	7.391e-11	6.501e-11	-10.131	-10.187	-0.056
Pb(SO4)2-2	9.753e-12	5.838e-12	-11.011	-11.234	-0.223
FeHSO4+	5.095e-12	4.481e-12	-11.293	-11.349	-0.056
FeSO4+	2.892e-13	2.543e-13	-12.539	-12.595	-0.056
Ni(SO4)2-2	1.384e-13	8.281e-14	-12.859	-13.082	-0.223
Fe(SO4)2-	5.632e-15	4.954e-15	-14.249	-14.305	-0.056
FeHSO4+2	9.358e-20	5.602e-20	-19.029	-19.252	-0.223
Zn	2.297e-06				
Zn+2	1.075e-06	6.437e-07	-5.968	-6.191	-0.223
ZnHCO3+	6.158e-07	5.416e-07	-6.211	-6.266	-0.056
ZnCO3	4.176e-07	4.193e-07	-6.379	-6.377	0.002
ZnSO4	1.300e-07	1.305e-07	-6.886	-6.884	0.002
Zn(CO3)2-2	4.889e-08	2.926e-08	-7.311	-7.534	-0.223
ZnOH+	5.506e-09	4.843e-09	-8.259	-8.315	-0.056
Zn(SO4)2-2	1.725e-09	1.033e-09	-8.763	-8.986	-0.223
Zn(OH)2	1.221e-09	1.226e-09	-8.913	-8.912	0.002
ZnCl+	4.723e-10	4.154e-10	-9.326	-9.381	-0.056
ZnF+	1.014e-10	8.921e-11	-9.994	-10.050	-0.056
ZnOHCl	8.790e-11	8.825e-11	-10.056	-10.054	0.002
ZnCl2	1.414e-13	1.420e-13	-12.850	-12.848	0.002
Zn(OH)3-	5.420e-14	4.768e-14	-13.266	-13.322	-0.056
ZnCl3-	5.821e-17	5.120e-17	-16.235	-16.291	-0.056
Zn(OH)4-2	1.553e-19	9.294e-20	-18.809	-19.032	-0.223
ZnCl4-2	1.358e-20	8.127e-21	-19.867	-20.090	-0.223

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anglesite	-3.84	-11.67	-7.83	PbSO4
Anhydrite	-1.76	-6.10	-4.34	CaSO4
Aragonite	-0.25	-8.54	-8.29	CaCO3
Arsenolite	-26.72	-28.24	-1.52	As2O3
Artinite	-6.91	3.23	10.14	MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
As2O5(cr)	-32.48	-24.11	8.37	As2O5
As_native	-34.04	-47.09	-13.05	As
Bianchite	-7.47	-9.23	-1.76	ZnSO4:6H2O
Birnessite	-11.98	31.62	43.60	MnO2
Bixbyite	-10.40	-10.73	-0.32	Mn2O3
Brucite	-5.90	11.45	17.35	Mg(OH)2
Bunsenite	-6.75	6.15	12.90	NiO
Ca3(AsO4)2:4w	-14.19	-33.10	-18.90	Ca3(AsO4)2:4H2O
Calcite	-0.10	-8.54	-8.44	CaCO3
Cerrusite	-0.89	-14.12	-13.22	PbCO3

Claudetite	-26.77	-28.24	-1.47	As ₂ O ₃
CO ₂ (g)	-1.49	-2.87	-1.37	CO ₂
Cotunnite	-10.70	-15.57	-4.88	PbCl ₂
Dolomite	0.15	-16.76	-16.91	CaMg(CO ₃) ₂
Dolomite(d)	-0.43	-16.76	-16.33	CaMg(CO ₃) ₂
Epsomite	-3.57	-5.77	-2.19	MgSO ₄ ·7H ₂ O
Fe(OH)2·7Cl ₃	7.62	4.58	-3.04	Fe(OH)2·7Cl _{0.3}
Fe(OH)3(a)	2.86	7.75	4.89	Fe(OH)3
Fe ₃ (OH)8	5.23	25.45	20.22	Fe ₃ (OH)8
Fluorite	-2.30	-12.99	-10.69	CaF ₂
Goethite	8.47	7.75	-0.73	FeOOH
Goslarite	-7.21	-9.23	-2.02	ZnSO ₄ ·7H ₂ O
Gypsum	-1.51	-6.10	-4.58	CaSO ₄ ·2H ₂ O
H ₂ (g)	-21.98	-25.10	-3.12	H ₂
H ₂ O(g)	-1.71	-0.00	1.71	H ₂ O
Halite	-7.94	-6.37	1.56	NaCl
Hausmannite	-12.02	50.91	62.93	Mn ₃ O ₄
Hematite	18.92	15.49	-3.42	Fe ₂ O ₃
Huntite	-3.71	-33.19	-29.48	CaMg ₃ (CO ₃) ₄
Hydrocerrusite	-5.22	-22.68	-17.46	Pb(OH) ₂ ·2PbCO ₃
Hydromagnesite	-13.64	-21.41	-7.77	Mg ₅ (CO ₃) ₄ (OH) ₂ ·4H ₂ O (K _{0.77} Na _{0.03} H _{0.2})Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite(ss)	1.30	-8.53	-9.83	KFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-K	0.72	-7.90	-8.62	NaFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-Na	-2.41	-7.01	-4.60	(H ₃ O)Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
JarositeH	-6.85	-11.20	-4.35	PbO:PbSO ₄
Larnakite	-5.96	-6.12	-0.16	PbOHCl
Laurionite	-5.63	-5.01	0.62	PbO
Litharge	-7.48	5.55	13.03	Fe ₂ O ₃
Maghemite	9.11	15.49	6.39	MgCO ₃
Magnesite	-0.30	-8.22	-7.91	Fe ₃ O ₄
Magnetite	20.76	25.45	4.69	MnOOH
Manganite	-4.71	20.63	25.34	PbO
Massicot	-7.68	5.55	13.23	PbClF
Matlockite	-7.49	-17.07	-9.58	FeSO ₄ ·7H ₂ O
Melanterite	-4.95	-7.26	-2.30	Pb ₃ O ₄
Minium	-37.00	38.63	75.63	Na ₂ SO ₄ ·10H ₂ O
Mirabilite	-7.37	-8.84	-1.47	Mn ₂ (SO ₄) ₃
Mn ₂ (SO ₄) ₃	-57.41	-62.38	-4.97	Mn ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O
Mn ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O	-8.82	-37.53	-28.71	MnCl ₂ ·4H ₂ O
MnCl ₂ ·4H ₂ O	-13.86	-11.48	2.38	MnSO ₄
MnSO ₄	-10.53	-7.57	2.96	NiSO ₄ ·7H ₂ O
Morenosite	-8.65	-11.07	-2.42	NaHCO ₃
Nahcolite	-4.46	-5.08	-0.62	Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O
Natron	-9.68	-11.29	-1.61	MgCO ₃ ·3H ₂ O
Nesquehonite	-2.70	-8.22	-5.51	Ni(OH) ₂
Ni(OH) ₂	-4.07	6.15	10.22	Ni ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O
Ni ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O	-22.49	-48.00	-25.51	Ni ₄ (OH) ₆ SO ₄
Ni ₄ (OH) ₆ SO ₄	-24.61	7.39	32.00	NiCO ₃
NiCO ₃	-6.86	-13.51	-6.65	MnO ₂
Nsutite	-10.94	31.62	42.56	O ₂
O ₂ (g)	-41.84	-44.67	-2.83	Pb(OH) ₂
Pb(OH) ₂	-2.86	5.55	8.41	Pb ₂ (OH) ₃ Cl
Pb ₂ (OH) ₃ Cl	-8.25	0.54	8.79	PbO:Pb(OH) ₂
Pb ₂ O(OH) ₂	-15.10	11.10	26.20	Pb ₂ O ₃
Pb ₂ O ₃	-27.96	33.08	61.04	PbO:PbCO ₃
Pb ₂ OCO ₃	-8.28	-8.56	-0.28	Pb ₃ (AsO ₄) ₂
Pb ₃ (AsO ₄) ₂	-14.40	-49.81	-35.40	PbCO ₃ ·2PbO
Pb ₃ O ₂ CO ₃	-14.53	-3.01	11.52	PbSO ₄ ·2PbO
Pb ₃ O ₂ SO ₄	-11.36	-0.56	10.79	Pb ₄ (OH) ₆ SO ₄
Pb ₄ (OH) ₆ SO ₄	-16.11	4.99	21.10	PbSO ₄ ·3PbO
Pb ₄ O ₃ SO ₄	-17.78	4.99	22.76	

PbF2	-11.13	-18.56	-7.43	PbF2
PbMetal	-20.69	-16.43	4.26	Pb
PbO:0.3H2O	-7.43	5.55	12.98	PbO:0.33H2O
Phosgenite	-9.88	-29.69	-19.81	PbCl2:PbCO3
Plattnerite	-23.11	27.53	50.64	PbO2
Portlandite	-12.27	11.12	23.39	Ca(OH)2
Pyrochroite	-5.56	9.64	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	-10.99	31.62	42.61	MnO2
Retgersite	-9.00	-11.07	-2.06	NiSO4:6H2O
Rhodochrosite	1.08	-10.02	-11.10	MnCO3
Rhodochrosite(d)) 0.3	7 -10.02	-10.39	MnCO3
Scorodite	-5.23	-25.48	-20.25	FeAsO4:2H2O
Siderite	1.14	-9.71	-10.84	FeCO3
Siderite(d)(3)	0.74	-9.71	-10.45	FeCO3
Smithsonite	-1.76	-11.68	-9.92	ZnCO3
Thenardite	-8.67	-8.84	-0.17	Na2SO4
Thermonatrite	-11.47	-11.29	0.18	Na2CO3:H2O
Trona	-15.91	-16.36	-0.45	NaHCO3:Na2CO3:2H2O
Zincite(c)	-3.56	7.99	11.55	ZnO
Zincosite	-12.60	-9.23	3.37	ZnSO4
Zn(OH)2-a	-4.46	7.99	12.45	Zn(OH)2
Zn(OH)2-b	-3.76	7.99	11.75	Zn(OH)2
Zn(OH)2-c	-4.21	7.99	12.20	Zn(OH)2
Zn(OH)2-e	-3.51	7.99	11.50	Zn(OH)2
Zn(OH)2-g	-3.72	7.99	11.71	Zn(OH)2
Zn2(OH)2SO4	-8.74	-1.24	7.50	Zn2(OH)2SO4
Zn2(OH)3Cl	-9.79	5.41	15.20	Zn2(OH)3Cl
Zn3(AsO4)2:2.5w	-14.95	-42.49	-27.55	Zn3(AsO4)2:2.5H2O
Zn3O(SO4)2	-30.66	-10.47	20.19	ZnO:2ZnSO4
Zn4(OH)6SO4	-13.66	14.74	28.40	Zn4(OH)6SO4
Zn5(OH)8Cl2	-19.68	18.82	38.50	Zn5(OH)8Cl2
ZnCl2	-20.50	-13.14	7.36	ZnCl2
ZnCO3:H2O	-1.42	-11.68	-10.26	ZnCO3:H2O
ZnF2	-14.85	-16.12	-1.27	ZnF2
ZnMetal	-40.44	-13.99	26.45	Zn
ZnO(a)	-3.32	7.99	11.31	ZnO
ZnSO4:H2O	-8.86	-9.23	-0.37	ZnSO4:H2O

End of simulation.

12.3.5 Grube Wolf, Alter Schacht, 0,5 m u WOF

```

Title Wolf_Alter Schacht, oberflächennah
Solution 1
temp                14. 5
pH                  6.92
pe                  4.4
redox               pe
units               mg/l
density             1.0
F                   0.25
Cl                  16. 4
S(6)                195
C(4)                476
Ca                  60.6
Mg                  68.1
Na                  26. 2
K                   7.2
Fe                   0.32
Mn                   2.2
Ni                   0.028
Zn                   0.15
End

```

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution
1.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
C(4)	7,81E+00	7,81E+00
Ca	1,51E+00	1,51E+00
Cl	4,63E-01	4,63E-01
F	1,32E-02	1,32E-02
Fe	5,74E-03	5,74E-03
K	1,84E-01	1,84E-01
Mg	2,80E+00	2,80E+00
Mn	4,01E-02	4,01E-02
Na	1,15E+00	1,15E+00
Ni	4,77E-04	4,77E-04
S(6)	2,03E+00	2,03E+00
Zn	2,30E-03	2,30E-03

-----Description of solution-----

pH	=	6.920
pe	=	4.400
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	1,47E+01
Mass of water (kg)	=	1,00E+03
Total alkalinity (eq/kg)	=	6,14E+00
Total CO2 (mol/kg)	=	7,81E+00
Temperature (deg C)	=	14.500
Electrical balance (eq)	=	-6,11E-01
percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	-3.27
Iterations	=	9
Total H	=	1,11E+08

Total O = 5,55E+07

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	1.333e-07	1.202e-07	-6.875	-6.920	-0.045
OH-	4.050e-08	3.593e-08	-7.393	-7.444	-0.052
H2O	5.551e+01	9.997e-01	1.744	-0.000	0.000
C(4)	7.808e-03				
HCO3-	5.947e-03	5.300e-03	-2.226	-2.276	-0.050
CO2	1.682e-03	1.688e-03	-2.774	-2.773	0.001
MgHCO3+	1.041e-04	9.233e-05	-3.983	-4.035	-0.052
CaHCO3+	5.150e-05	4.570e-05	-4.288	-4.340	-0.052
MnHCO3+	8.814e-06	7.821e-06	-5.055	-5.107	-0.052
NaHCO3	3.011e-06	3.021e-06	-5.521	-5.520	0.001
CO3-2	2.572e-06	1.623e-06	-5.590	-5.790	-0.200
MnCO3	2.127e-06	2.134e-06	-5.672	-5.671	0.001
MgCO3	2.025e-06	2.031e-06	-5.694	-5.692	0.001
CaCO3	1.896e-06	1.902e-06	-5.722	-5.721	0.001
FeHCO3+	1.360e-06	1.206e-06	-5.867	-5.919	-0.052
ZnHCO3+	5.892e-07	5.228e-07	-6.230	-6.282	-0.052
NiCO3	3.903e-07	3.916e-07	-6.409	-6.407	0.001
ZnCO3	2.528e-07	2.537e-07	-6.597	-6.596	0.001
FeCO3	8.829e-08	8.859e-08	-7.054	-7.053	0.001
NiHCO3+	2.685e-08	2.382e-08	-7.571	-7.623	-0.052
NaCO3-	1.994e-08	1.769e-08	-7.700	-7.752	-0.052
Zn(CO3)2-2	1.420e-08	8.800e-09	-7.848	-8.056	-0.208
Ni(CO3)2-2	1.782e-09	1.104e-09	-8.749	-8.957	-0.208
Ca	1.513e-03				
Ca+2	1.311e-03	8.266e-04	-2.882	-3.083	-0.200
CaSO4	1.488e-04	1.493e-04	-3.827	-3.826	0.001
CaHCO3+	5.150e-05	4.570e-05	-4.288	-4.340	-0.052
CaCO3	1.896e-06	1.902e-06	-5.722	-5.721	0.001
CaF+	6.749e-08	5.988e-08	-7.171	-7.223	-0.052
CaOH+	1.286e-09	1.141e-09	-8.891	-8.943	-0.052
CaHSO4+	1.054e-10	9.355e-11	-9.977	-10.029	-0.052
Cl	4.630e-04				
Cl-	4.629e-04	4.097e-04	-3.334	-3.388	-0.053
MnCl+	3.114e-08	2.763e-08	-7.507	-7.559	-0.052
FeCl+	1.451e-09	1.287e-09	-8.838	-8.890	-0.052
ZnCl+	6.025e-10	5.346e-10	-9.220	-9.272	-0.052
ZnOHCl	8.808e-11	8.838e-11	-10.055	-10.054	0.001
NiCl+	3.776e-11	3.350e-11	-10.423	-10.475	-0.052
MnCl2	4.924e-12	4.941e-12	-11.308	-11.306	0.001
ZnCl2	2.188e-13	2.195e-13	-12.660	-12.659	0.001
NiCl2	4.967e-14	4.983e-14	-13.304	-13.302	0.001
MnCl3-	6.283e-16	5.575e-16	-15.202	-15.254	-0.052
ZnCl3-	1.065e-16	9.452e-17	-15.973	-16.024	-0.052
FeCl+2	4.252e-17	2.635e-17	-16.371	-16.579	-0.208
FeCl2+	7.673e-20	6.808e-20	-19.115	-19.167	-0.052
ZnCl4-2	2.873e-20	1.780e-20	-19.542	-19.749	-0.208
FeCl3	2.780e-24	2.789e-24	-23.556	-23.555	0.001
F	1.317e-05				
F-	1.208e-05	1.072e-05	-4.918	-4.970	-0.052
MgF+	1.010e-06	8.966e-07	-5.995	-6.047	-0.052
CaF+	6.749e-08	5.988e-08	-7.171	-7.223	-0.052
NaF	6.233e-09	6.254e-09	-8.205	-8.204	0.001
HF	1.601e-09	1.607e-09	-8.795	-8.794	0.001
MnF+	1.384e-09	1.228e-09	-8.859	-8.911	-0.052
FeF+	2.750e-10	2.440e-10	-9.561	-9.613	-0.052

ZnF+	1.166e-10	1.035e-10	-9.933	-9.985	-0.052
NiF+	7.850e-12	6.965e-12	-11.105	-11.157	-0.052
FeF+2	6.981e-14	4.327e-14	-13.156	-13.364	-0.208
HF2-	6.771e-14	6.008e-14	-13.169	-13.221	-0.052
FeF2+	1.829e-14	1.623e-14	-13.738	-13.790	-0.052
FeF3	2.648e-16	2.657e-16	-15.577	-15.576	0.001
H2F2	9.704e-18	9.737e-18	-17.013	-17.012	0.001
Fe(2)	5.456e-06				
Fe+2	3.672e-06	2.276e-06	-5.435	-5.643	-0.208
FeHCO3+	1.360e-06	1.206e-06	-5.867	-5.919	-0.052
FeSO4	3.314e-07	3.325e-07	-6.480	-6.478	0.001
FeCO3	8.829e-08	8.859e-08	-7.054	-7.053	0.001
FeOH+	2.991e-09	2.654e-09	-8.524	-8.576	-0.052
FeCl+	1.451e-09	1.287e-09	-8.838	-8.890	-0.052
FeF+	2.750e-10	2.440e-10	-9.561	-9.613	-0.052
FeHSO4+	2.903e-13	2.576e-13	-12.537	-12.589	-0.052
Fe(OH)2	7.264e-14	7.289e-14	-13.139	-13.137	0.001
Fe(OH)3-	2.281e-17	2.024e-17	-16.642	-16.694	-0.052
Fe(3)	2.784e-07				
Fe(OH)2+	1.747e-07	1.550e-07	-6.758	-6.810	-0.052
Fe(OH)3	1.030e-07	1.033e-07	-6.987	-6.986	0.001
Fe(OH)4-	5.704e-10	5.061e-10	-9.244	-9.296	-0.052
FeOH+2	1.373e-10	8.508e-11	-9.862	-10.070	-0.208
FeF+2	6.981e-14	4.327e-14	-13.156	-13.364	-0.208
FeSO4+	2.928e-14	2.598e-14	-13.533	-13.585	-0.052
FeF2+	1.829e-14	1.623e-14	-13.738	-13.790	-0.052
Fe+3	8.824e-15	3.007e-15	-14.054	-14.522	-0.467
Fe(SO4)2-	6.153e-16	5.459e-16	-15.211	-15.263	-0.052
FeF3	2.648e-16	2.657e-16	-15.577	-15.576	0.001
FeCl+2	4.252e-17	2.635e-17	-16.371	-16.579	-0.208
Fe2(OH)2+4	2.070e-18	3.054e-19	-17.684	-18.515	-0.831
FeCl2+	7.673e-20	6.808e-20	-19.115	-19.167	-0.052
FeHSO4+2	1.379e-20	8.549e-21	-19.860	-20.068	-0.208
Fe3(OH)4+5	5.371e-22	2.701e-23	-21.270	-22.569	-1.299
FeCl3	2.780e-24	2.789e-24	-23.556	-23.555	0.001
H(0)	3.603e-26				
H2	1.801e-26	1.807e-26	-25.744	-25.743	0.001
K	1.843e-04				
K+	1.832e-04	1.621e-04	-3.737	-3.790	-0.053
KSO4-	1.064e-06	9.444e-07	-5.973	-6.025	-0.052
Mg	2.803e-03				
Mg+2	2.424e-03	1.542e-03	-2.616	-2.812	-0.196
MgSO4	2.728e-04	2.737e-04	-3.564	-3.563	0.001
MgHCO3+	1.041e-04	9.233e-05	-3.983	-4.035	-0.052
MgCO3	2.025e-06	2.031e-06	-5.694	-5.692	0.001
MgF+	1.010e-06	8.966e-07	-5.995	-6.047	-0.052
MgOH+	1.963e-08	1.742e-08	-7.707	-7.759	-0.052
Mn(2)	4.008e-05				
Mn+2	2.671e-05	1.656e-05	-4.573	-4.781	-0.208
MnHCO3+	8.814e-06	7.821e-06	-5.055	-5.107	-0.052
MnSO4	2.390e-06	2.398e-06	-5.622	-5.620	0.001
MnCO3	2.127e-06	2.134e-06	-5.672	-5.671	0.001
MnCl+	3.114e-08	2.763e-08	-7.507	-7.559	-0.052
MnOH+	1.643e-09	1.457e-09	-8.784	-8.836	-0.052
MnF+	1.384e-09	1.228e-09	-8.859	-8.911	-0.052
MnCl2	4.924e-12	4.941e-12	-11.308	-11.306	0.001
MnCl3-	6.283e-16	5.575e-16	-15.202	-15.254	-0.052
Mn(OH)3-	1.700e-19	1.509e-19	-18.769	-18.821	-0.052
Mn(3)	7.694e-27				
Mn+3	7.694e-27	2.622e-27	-26.114	-26.581	-0.467
Mn(6)	0.000e+00				
MnO4-2	0.000e+00	0.000e+00	-54.068	-54.275	-0.208

Mn(7)	0.000e+00				
MnO4-	0.000e+00	0.000e+00	-59.919	-59.971	-0.052
Na	1.149e-03				
Na+	1.141e-03	1.014e-03	-2.943	-2.994	-0.051
NaSO4-	5.357e-06	4.753e-06	-5.271	-5.323	-0.052
NaHCO3	3.011e-06	3.021e-06	-5.521	-5.520	0.001
NaCO3-	1.994e-08	1.769e-08	-7.700	-7.752	-0.052
NaF	6.233e-09	6.254e-09	-8.205	-8.204	0.001
Ni	4.773e-07				
NiCO3	3.903e-07	3.916e-07	-6.409	-6.407	0.001
Ni+2	5.254e-08	3.256e-08	-7.280	-7.487	-0.208
NiHCO3+	2.685e-08	2.382e-08	-7.571	-7.623	-0.052
NiSO4	5.775e-09	5.795e-09	-8.238	-8.237	0.001
Ni(CO3)2-2	1.782e-09	1.104e-09	-8.749	-8.957	-0.208
NiCl+	3.776e-11	3.350e-11	-10.423	-10.475	-0.052
NiOH+	1.960e-11	1.739e-11	-10.708	-10.760	-0.052
NiF+	7.850e-12	6.965e-12	-11.105	-11.157	-0.052
Ni(SO4)2-2	5.527e-13	3.425e-13	-12.258	-12.465	-0.208
Ni(OH)2	2.244e-13	2.251e-13	-12.649	-12.648	0.001
NiCl2	4.967e-14	4.983e-14	-13.304	-13.302	0.001
Ni(OH)3-	2.110e-17	1.872e-17	-16.676	-16.728	-0.052
O(0)	0.000e+00				
O2	0.000e+00	0.000e+00	-44.408	-44.407	0.001
S(6)	2.032e-03				
SO4-2	1.601e-03	1.002e-03	-2.796	-2.999	-0.203
MgSO4	2.728e-04	2.737e-04	-3.564	-3.563	0.001
CaSO4	1.488e-04	1.493e-04	-3.827	-3.826	0.001
NaSO4-	5.357e-06	4.753e-06	-5.271	-5.323	-0.052
MnSO4	2.390e-06	2.398e-06	-5.622	-5.620	0.001
KSO4-	1.064e-06	9.444e-07	-5.973	-6.025	-0.052
FeSO4	3.314e-07	3.325e-07	-6.480	-6.478	0.001
ZnSO4	1.687e-07	1.693e-07	-6.773	-6.771	0.001
HSO4-	1.061e-08	9.413e-09	-7.974	-8.026	-0.052
NiSO4	5.775e-09	5.795e-09	-8.238	-8.237	0.001
Zn(SO4)2-2	2.420e-09	1.500e-09	-8.616	-8.824	-0.208
CaHSO4+	1.054e-10	9.355e-11	-9.977	-10.029	-0.052
Ni(SO4)2-2	5.527e-13	3.425e-13	-12.258	-12.465	-0.208
FeHSO4+	2.903e-13	2.576e-13	-12.537	-12.589	-0.052
FeSO4+	2.928e-14	2.598e-14	-13.533	-13.585	-0.052
Fe(SO4)2-	6.153e-16	5.459e-16	-15.211	-15.263	-0.052
FeHSO4+2	1.379e-20	8.549e-21	-19.860	-20.068	-0.208
Zn	2.297e-06				
Zn+2	1.264e-06	7.835e-07	-5.898	-6.106	-0.208
ZnHCO3+	5.892e-07	5.228e-07	-6.230	-6.282	-0.052
ZnCO3	2.528e-07	2.537e-07	-6.597	-6.596	0.001
ZnSO4	1.687e-07	1.693e-07	-6.773	-6.771	0.001
Zn(CO3)2-2	1.420e-08	8.800e-09	-7.848	-8.056	-0.208
ZnOH+	3.527e-09	3.129e-09	-8.453	-8.505	-0.052
Zn(SO4)2-2	2.420e-09	1.500e-09	-8.616	-8.824	-0.208
Zn(OH)2	6.797e-10	6.821e-10	-9.168	-9.166	0.001
ZnCl+	6.025e-10	5.346e-10	-9.220	-9.272	-0.052
ZnF+	1.166e-10	1.035e-10	-9.933	-9.985	-0.052
ZnOHCl	8.808e-11	8.838e-11	-10.055	-10.054	0.001
ZnCl2	2.188e-13	2.195e-13	-12.660	-12.659	0.001
Zn(OH)3-	2.021e-14	1.794e-14	-13.694	-13.746	-0.052
ZnCl3-	1.065e-16	9.452e-17	-15.973	-16.024	-0.052
Zn(OH)4-2	3.814e-20	2.364e-20	-19.419	-19.626	-0.208
ZnCl4-2	2.873e-20	1.780e-20	-19.542	-19.749	-0.208

-----Saturation indices-----

Phase

SI

log IAP

log KT

Anhydrite	-1.75	-6.08	-4.33	CaSO ₄
Aragonite	-0.60	-8.87	-8.28	CaCO ₃
Artinite	-7.94	2.43	10.37	MgCO ₃ :Mg(OH) ₂ :3H ₂ O
Bianchite	-7.34	-9.11	-1.76	ZnSO ₄ :6H ₂ O
Birnessite	-11.90	31.70	43.60	MnO ₂
Bixbyite	-11.44	-11.64	-0.20	Mn ₂ O ₃
Brucite	-6.54	11.03	17.57	Mg(OH) ₂
Bunsenite	-6.74	6.35	13.09	NiO
Calcite	-0.44	-8.87	-8.43	CaCO ₃
CO ₂ (g)	-1.44	-2.77	-1.33	CO ₂
Dolomite	-0.64	-17.47	-16.84	CaMg(CO ₃) ₂
Dolomite(d)	-1.23	-17.47	-16.24	CaMg(CO ₃) ₂
Epsomite	-3.60	-5.81	-2.22	MgSO ₄ :7H ₂ O
Fe(OH) ₂ .7Cl _{0.3}	6.19	3.15	-3.04	Fe(OH) ₂ .7Cl _{0.3}
Fe(OH) ₃ (a)	1.35	6.24	4.89	Fe(OH) ₃
Fe ₃ (OH) ₈	0.45	20.67	20.22	Fe ₃ (OH) ₈
Fluorite	-2.29	-13.02	-10.73	CaF ₂
Goethite	6.85	6.24	-0.61	FeOOH
Goslarite	-7.06	-9.11	-2.05	ZnSO ₄ :7H ₂ O
Gypsum	-1.50	-6.08	-4.59	CaSO ₄ :2H ₂ O
H ₂ (g)	-22.64	-25.74	-3.10	H ₂
H ₂ O(g)	-1.79	-0.00	1.79	H ₂ O
Halite	-7.94	-6.38	1.56	NaCl
Hausmannite	-13.91	49.82	63.72	Mn ₃ O ₄
Hematite	15.66	12.48	-3.18	Fe ₂ O ₃
Huntite	-5.40	-34.68	-29.28	CaMg ₃ (CO ₃) ₄
Hydromagnesite	-16.02	-23.38	-7.36	Mg ₅ (CO ₃) ₄ (OH) ₂ :4H ₂ O
Jarosite(ss)	-2.61	-12.44	-9.83	(K _{0.77} Na _{0.03} H _{0.2})Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-K	-3.46	-11.83	-8.37	KFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-Na	-6.73	-11.04	-4.31	NaFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
JarositeH	-11.05	-14.96	-3.91	(H ₃ O)Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Maghemite	6.09	12.48	6.39	Fe ₂ O ₃
Magnesite	-0.74	-8.60	-7.86	MgCO ₃
Magnetite	15.59	20.67	5.09	Fe ₃ O ₄
Manganite	-4.96	20.38	25.34	MnOOH
Melanterite	-6.30	-8.64	-2.35	FeSO ₄ :7H ₂ O
Mirabilite	-7.37	-8.99	-1.62	Na ₂ SO ₄ :10H ₂ O
Mn ₂ (SO ₄) ₃	-57.49	-62.16	-4.67	Mn ₂ (SO ₄) ₃
MnCl ₂ :4H ₂ O	-13.80	-11.56	2.24	MnCl ₂ :4H ₂ O
MnSO ₄	-10.86	-7.78	3.08	MnSO ₄
Morenosite	-8.05	-10.49	-2.44	NiSO ₄ :7H ₂ O
Nahcolite	-4.62	-5.27	-0.65	NaHCO ₃
Natron	-10.05	-11.78	-1.73	Na ₂ CO ₃ :10H ₂ O
Nesquehonite	-3.14	-8.60	-5.47	MgCO ₃ :3H ₂ O
Ni(OH) ₂	-3.63	6.35	9.99	Ni(OH) ₂
Ni ₄ (OH) ₆ SO ₄	-23.43	8.57	32.00	Ni ₄ (OH) ₆ SO ₄
NiCO ₃	-6.70	-13.28	-6.57	NiCO ₃
Nsutite	-10.87	31.70	42.56	MnO ₂
O ₂ (g)	-41.60	-44.41	-2.81	O ₂
Portlandite	-12.87	10.76	23.63	Ca(OH) ₂
Pyrochroite	-6.14	9.06	15.20	Mn(OH) ₂
Pyrolusite	-11.42	31.70	43.12	MnO ₂
Retgersite	-8.42	-10.49	-2.07	NiSO ₄ :6H ₂ O
Rhodochrosite	0.52	-10.57	-11.09	MnCO ₃
Rhodochrosite(d)	-0.1	8 -10.57	-10.39	MnCO ₃
Siderite	-0.61	-11.43	-10.82	FeCO ₃
Siderite(d)(3)	-0.98	-11.43	-10.45	FeCO ₃
Smithsonite	-2.01	-11.90	-9.88	ZnCO ₃
Thenardite	-8.82	-8.99	-0.16	Na ₂ SO ₄
Thermonatrite	-11.98	-11.78	0.20	Na ₂ CO ₃ :H ₂ O
Trona	-16.73	-17.05	-0.31	NaHCO ₃ :Na ₂ CO ₃ :2H ₂ O

Zincite(c)	-3.99	7.73	11.72	ZnO
Zincosite	-12.63	-9.10	3.52	ZnSO4
Zn(OH)2-a	-4.72	7.73	12.45	Zn(OH)2
Zn(OH)2-b	-4.02	7.73	11.75	Zn(OH)2
Zn(OH)2-c	-4.47	7.73	12.20	Zn(OH)2
Zn(OH)2-e	-3.77	7.73	11.50	Zn(OH)2
Zn(OH)2-g	-3.98	7.73	11.71	Zn(OH)2
Zn2(OH)2SO4	-8.87	-1.37	7.50	Zn2(OH)2SO4
Zn2(OH)3Cl	-10.04	5.16	15.20	Zn2(OH)3Cl
Zn3O(SO4)2	-31.15	-10.48	20.68	ZnO:2ZnSO4
Zn4(OH)6SO4	-14.30	14.10	28.40	Zn4(OH)6SO4
Zn5(OH)8Cl2	-20.45	18.05	38.50	Zn5(OH)8Cl2
ZnCl2	-20.38	-12.88	7.50	ZnCl2
ZnCO3:H2O	-1.64	-11.90	-10.26	ZnCO3:H2O
ZnF2	-14.88	-16.05	-1.17	ZnF2
ZnMetal	-41.65	-14.91	26.74	Zn
ZnO(a)	-3.58	7.73	11.31	ZnO
ZnSO4:H2O	-8.82	-9.11	-0.29	ZnSO4:H2O

End of simulation.

12.3.6 Grube San Fernando, Schacht 2, oberflächennah

Title San Fernando, Schacht 2, oberflächennah

Solution 1

temp	16. 4
pH	7.12
pe	6
redox	pe
units	mg/l
density	1.0
F	0.09
Cl	13. 8
S(6)	201
C(4)	549
Ca	74.4
Mg	89.2
Na	29. 4
K	7.2
O(0)	1.17
End	

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution
1.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
C(4)	9,01E+00	9,01E+00
Ca	1,86E+00	1,86E+00
Cl	3,90E-01	3,90E-01
F	4,74E-03	4,74E-03
K	1,84E-01	1,84E-01
Mg	3,67E+00	3,67E+00
Na	1,28E+00	1,28E+00
O(0)	7,32E-02	7,32E-02
S(6)	2,09E+00	2,09E+00

-----Description of solution-----

pH	=	7.120
pe	=	6.000
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	1,75E+01
Mass of water (kg)	=	1,00E+03
Total alkalinity (eq/kg)	=	7,75E+00
Total CO2 (mol/kg)	=	9,01E+00
Temperature (deg C)	=	16.400
Electrical balance (eq)	=	1,95E-01
percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	0.88
Iterations	=	9
Total H	=	1,11E+08
Total O	=	5,55E+07

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
--------------	----	------------

O(-2)/O(0) 140.250 0.8057

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	8.468e-08	7.586e-08	-7.072	-7.120	-0.048
OH-	7.596e-08	6.677e-08	-7.119	-7.175	-0.056
H2O	5.551e+01	9.997e-01	1.744	-0.000	0.000
C(4)	9.006e-03				
HCO3-	7.466e-03	6.596e-03	-2.127	-2.181	-0.054
CO2	1.275e-03	1.280e-03	-2.895	-2.893	0.002
MgHCO3+	1.655e-04	1.454e-04	-3.781	-3.837	-0.056
CaHCO3+	7.980e-05	7.015e-05	-4.098	-4.154	-0.056
CO3-2	5.515e-06	3.360e-06	-5.258	-5.474	-0.215
MgCO3	5.435e-06	5.457e-06	-5.265	-5.263	0.002
CaCO3	4.741e-06	4.760e-06	-5.324	-5.322	0.002
NaHCO3	4.132e-06	4.148e-06	-5.384	-5.382	0.002
NaCO3-	5.092e-08	4.476e-08	-7.293	-7.349	-0.056
Ca	1.858e-03				
Ca+2	1.604e-03	9.765e-04	-2.795	-3.010	-0.215
CaSO4	1.699e-04	1.705e-04	-3.770	-3.768	0.002
CaHCO3+	7.980e-05	7.015e-05	-4.098	-4.154	-0.056
CaCO3	4.741e-06	4.760e-06	-5.324	-5.322	0.002
CaF+	2.937e-08	2.582e-08	-7.532	-7.588	-0.056
CaOH+	2.430e-09	2.136e-09	-8.614	-8.670	-0.056
CaHSO4+	7.816e-11	6.871e-11	-10.107	-10.163	-0.056
Cl	3.896e-04				
Cl-	3.896e-04	3.414e-04	-3.409	-3.467	-0.057
F	4.742e-06				
F-	4.246e-06	3.732e-06	-5.372	-5.428	-0.056
MgF+	4.641e-07	4.080e-07	-6.333	-6.389	-0.056
CaF+	2.937e-08	2.582e-08	-7.532	-7.588	-0.056
NaF	2.392e-09	2.402e-09	-8.621	-8.619	0.002
HF	3.632e-10	3.647e-10	-9.440	-9.438	0.002
HF2-	5.506e-15	4.840e-15	-14.259	-14.315	-0.056
H2F2	4.679e-19	4.698e-19	-18.330	-18.328	0.002
H(0)	8.863e-30				
H2	4.431e-30	4.449e-30	-29.353	-29.352	0.002
K	1.843e-04				
K+	1.833e-04	1.606e-04	-3.737	-3.794	-0.057
KSO4-	1.046e-06	9.192e-07	-5.981	-6.037	-0.056
Mg	3.673e-03				
Mg+2	3.158e-03	1.942e-03	-2.501	-2.712	-0.211
MgSO4	3.433e-04	3.447e-04	-3.464	-3.463	0.002
MgHCO3+	1.655e-04	1.454e-04	-3.781	-3.837	-0.056
MgCO3	5.435e-06	5.457e-06	-5.265	-5.263	0.002
MgF+	4.641e-07	4.080e-07	-6.333	-6.389	-0.056
MgOH+	4.753e-08	4.178e-08	-7.323	-7.379	-0.056
Na	1.280e-03				
Na+	1.270e-03	1.118e-03	-2.896	-2.951	-0.055
NaSO4-	5.732e-06	5.038e-06	-5.242	-5.298	-0.056
NaHCO3	4.132e-06	4.148e-06	-5.384	-5.382	0.002
NaCO3-	5.092e-08	4.476e-08	-7.293	-7.349	-0.056
NaF	2.392e-09	2.402e-09	-8.621	-8.619	0.002
O(0)	7.320e-05				
O2	3.660e-05	3.675e-05	-4.437	-4.435	0.002
S(6)	2.094e-03				
SO4-2	1.574e-03	9.508e-04	-2.803	-3.022	-0.219
MgSO4	3.433e-04	3.447e-04	-3.464	-3.463	0.002
CaSO4	1.699e-04	1.705e-04	-3.770	-3.768	0.002

NaSO4-	5.732e-06	5.038e-06	-5.242	-5.298	-0.056
KSO4-	1.046e-06	9.192e-07	-5.981	-6.037	-0.056
HSO4-	6.658e-09	5.853e-09	-8.177	-8.233	-0.056
CaHSO4+	7.816e-11	6.871e-11	-10.107	-10.163	-0.056

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-1.70	-6.03	-4.34	CaSO4
Aragonite	-0.20	-8.48	-8.29	CaCO3
Artinite	-6.88	3.34	10.23	MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
Brucite	-5.90	11.53	17.43	Mg(OH)2
Calcite	-0.05	-8.48	-8.44	CaCO3
CO2(g)	-1.53	-2.89	-1.36	CO2
Dolomite	0.22	-16.67	-16.88	CaMg(CO3)2
Dolomite(d)	-0.37	-16.67	-16.30	CaMg(CO3)2
Epsomite	-3.53	-5.73	-2.20	MgSO4:7H2O
Fluorite	-3.16	-13.87	-10.71	CaF2
Gypsum	-1.45	-6.03	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-26.24	-29.35	-3.11	H2
H2O(g)	-1.74	-0.00	1.74	H2O
Halite	-7.98	-6.42	1.56	NaCl
Huntite	-3.63	-33.04	-29.41	CaMg3(CO3)4
Hydromagnesite	-13.59	-21.21	-7.62	Mg5(CO3)4(OH)2:4H2O
Magnesite	-0.29	-8.19	-7.89	MgCO3
Mirabilite	-7.40	-8.93	-1.53	Na2SO4:10H2O
Nahcolite	-4.50	-5.13	-0.63	NaHCO3
Natron	-9.72	-11.38	-1.65	Na2CO3:10H2O
Nesquehonite	-2.69	-8.19	-5.49	MgCO3:3H2O
O2(g)	-1.61	-4.43	-2.82	O2
Portlandite	-12.25	11.23	23.47	Ca(OH)2
Thenardite	-8.76	-8.92	-0.17	Na2SO4
Thermonatrite	-11.56	-11.38	0.19	Na2CO3:H2O
Trona	-16.11	-16.51	-0.40	NaHCO3:Na2CO3:2H2O

End of simulation.

12.3.7 Grube San Fernando, Schacht 2, 55 m u WOF

Title San Fernando, Schacht 2, 55m u WOF

Solution 1

temp	15. 8
pH	7.11
pe	4.9
redox	Pe
units	mg/l
density	1.0
F	0.2
Cl	12. 1
S(6)	203
C(4)	519
Ca	67
Mg	81.9
Na	30.8
K	7.34
Fe	0.63
Mn	2.7
O(0)	1. 29
End	

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution
1.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
C(4)	8,51E+00	8,51E+00
Ca	1,67E+00	1,67E+00
Cl	3,42E-01	3,42E-01
F	1,05E-02	1,05E-02
Fe	1,13E-02	1,13E-02
K	1,88E-01	1,88E-01
Mg	3,37E+00	3,37E+00
Mn	4,92E-02	4,92E-02
Na	1,34E+00	1,34E+00
O(0)	8,07E-02	8,07E-02
S(6)	2,12E+00	2,12E+00

-----Description of solution-----

pH	=	7.110
pe	=	4.900
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	1,66E+01
Mass of water (kg)	=	1,00E+03
Total alkalinity (eq/kg)	=	7,29E+00
Total CO2 (mol/kg)	=	8,51E+00
Temperature (deg C)	=	15.800
Electrical balance (eq)	=	-1,37E-01
percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	-0.65
Iterations	=	10
Total H	=	1,11E+08
Total O	=	5,55E+07

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
O(-2)/O(0)	140.984	0.8083

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	8.646e-08	7.762e-08	-7.063	-7.110	-0.047
OH-	7.041e-08	6.208e-08	-7.152	-7.207	-0.055
H2O	5.551e+01	9.997e-01	1.744	-0.000	0.000
C(4)	8.514e-03				
HCO3-	7.023e-03	6.221e-03	-2.153	-2.206	-0.053
CO2	1.244e-03	1.249e-03	-2.905	-2.904	0.002
MgHCO3+	1.440e-04	1.270e-04	-3.842	-3.896	-0.055
CaHCO3+	6.734e-05	5.936e-05	-4.172	-4.226	-0.055
MnHCO3+	1.157e-05	1.020e-05	-4.937	-4.991	-0.055
CO3-2	4.953e-06	3.050e-06	-5.305	-5.516	-0.210
MgCO3	4.533e-06	4.551e-06	-5.344	-5.342	0.002
MnCO3	4.441e-06	4.458e-06	-5.352	-5.351	0.002
NaHCO3	4.095e-06	4.111e-06	-5.388	-5.386	0.002
CaCO3	3.885e-06	3.900e-06	-5.411	-5.409	0.002
FeHCO3+	1.986e-06	1.751e-06	-5.702	-5.757	-0.055
FeCO3	2.052e-07	2.060e-07	-6.688	-6.686	0.002
NaCO3-	4.690e-08	4.135e-08	-7.329	-7.384	-0.055
Ca	1.673e-03				
Ca+2	1.442e-03	8.879e-04	-2.841	-3.052	-0.211
CaSO4	1.597e-04	1.604e-04	-3.797	-3.795	0.002
CaHCO3+	6.734e-05	5.936e-05	-4.172	-4.226	-0.055
CaCO3	3.885e-06	3.900e-06	-5.411	-5.409	0.002
CaF+	5.898e-08	5.200e-08	-7.229	-7.284	-0.055
CaOH+	2.152e-09	1.898e-09	-8.667	-8.722	-0.055
CaHSO4+	7.453e-11	6.571e-11	-10.128	-10.182	-0.055
Cl	3.416e-04				
Cl-	3.416e-04	3.002e-04	-3.466	-3.523	-0.056
MnCl+	2.553e-08	2.251e-08	-7.593	-7.648	-0.055
FeCl+	1.323e-09	1.167e-09	-8.878	-8.933	-0.055
MnCl2	2.938e-12	2.950e-12	-11.532	-11.530	0.002
MnCl3-	2.767e-16	2.439e-16	-15.558	-15.613	-0.055
FeCl+2	1.410e-16	8.518e-17	-15.851	-16.070	-0.219
FeCl2+	1.751e-19	1.543e-19	-18.757	-18.812	-0.055
FeCl3	4.616e-24	4.634e-24	-23.336	-23.334	0.002
F	1.054e-05				
F-	9.517e-06	8.390e-06	-5.022	-5.076	-0.055
MgF+	9.533e-07	8.405e-07	-6.021	-6.075	-0.055
CaF+	5.898e-08	5.200e-08	-7.229	-7.284	-0.055
NaF	5.651e-09	5.673e-09	-8.248	-8.246	0.002
MnF+	1.211e-09	1.068e-09	-8.917	-8.971	-0.055
HF	8.272e-10	8.304e-10	-9.082	-9.081	0.002
FeF+	2.679e-10	2.362e-10	-9.572	-9.627	-0.055
FeF+2	2.416e-13	1.460e-13	-12.617	-12.836	-0.219
FeF2+	4.941e-14	4.356e-14	-13.306	-13.361	-0.055
HF2-	2.793e-14	2.462e-14	-13.554	-13.609	-0.055
FeF3	5.587e-16	5.608e-16	-15.253	-15.251	0.002
H2F2	2.477e-18	2.486e-18	-17.606	-17.604	0.002
Fe(2)	7.273e-06				
Fe+2	4.659e-06	2.815e-06	-5.332	-5.551	-0.219
FeHCO3+	1.986e-06	1.751e-06	-5.702	-5.757	-0.055
FeSO4	4.146e-07	4.162e-07	-6.382	-6.381	0.002

FeCO ₃	2.052e-07	2.060e-07	-6.688	-6.686	0.002
FeOH+	6.397e-09	5.640e-09	-8.194	-8.249	-0.055
FeCl+	1.323e-09	1.167e-09	-8.878	-8.933	-0.055
FeF+	2.679e-10	2.362e-10	-9.572	-9.627	-0.055
Fe(OH) ₂	2.697e-13	2.707e-13	-12.569	-12.567	0.002
FeHSO ₄ +	2.363e-13	2.083e-13	-12.627	-12.681	-0.055
Fe(OH) ₃ -	1.339e-16	1.180e-16	-15.873	-15.928	-0.055
Fe(3)	4.018e-06				
Fe(OH) ₂ +	2.037e-06	1.796e-06	-5.691	-5.746	-0.055
Fe(OH) ₃	1.962e-06	1.970e-06	-5.707	-5.706	0.002
Fe(OH) ₄ -	1.792e-08	1.580e-08	-7.747	-7.801	-0.055
FeOH+ ₂	9.990e-10	6.035e-10	-9.000	-9.219	-0.219
FeF+ ₂	2.416e-13	1.460e-13	-12.617	-12.836	-0.219
FeSO ₄ +	1.266e-13	1.116e-13	-12.898	-12.952	-0.055
FeF ₂ +	4.941e-14	4.356e-14	-13.306	-13.361	-0.055
Fe+ ₃	3.945e-14	1.269e-14	-13.404	-13.896	-0.492
Fe(SO ₄) ₂ -	2.639e-15	2.326e-15	-14.579	-14.633	-0.055
FeF ₃	5.587e-16	5.608e-16	-15.253	-15.251	0.002
FeCl+ ₂	1.410e-16	8.518e-17	-15.851	-16.070	-0.219
Fe ₂ (OH) ₂ + ₄	1.090e-16	1.451e-17	-15.963	-16.838	-0.875
Fe ₃ (OH) ₄ + ₅	3.050e-19	1.307e-20	-18.516	-19.884	-1.368
FeCl ₂ +	1.751e-19	1.543e-19	-18.757	-18.812	-0.055
FeHSO ₄ + ₂	3.905e-20	2.359e-20	-19.408	-19.627	-0.219
FeCl ₃	4.616e-24	4.634e-24	-23.336	-23.334	0.002
H(0)	1.481e-27				
H ₂	7.403e-28	7.431e-28	-27.131	-27.129	0.002
K	1.879e-04				
K+	1.868e-04	1.642e-04	-3.729	-3.785	-0.056
KSO ₄ -	1.097e-06	9.669e-07	-5.960	-6.015	-0.055
Mg	3.372e-03				
Mg+ ₂	2.897e-03	1.801e-03	-2.538	-2.745	-0.206
MgSO ₄	3.257e-04	3.270e-04	-3.487	-3.485	0.002
MgHCO ₃ +	1.440e-04	1.270e-04	-3.842	-3.896	-0.055
MgCO ₃	4.533e-06	4.551e-06	-5.344	-5.342	0.002
MgF+	9.533e-07	8.405e-07	-6.021	-6.075	-0.055
MgOH+	4.053e-08	3.573e-08	-7.392	-7.447	-0.055
Mn(2)	4.919e-05				
Mn+ ₂	3.046e-05	1.840e-05	-4.516	-4.735	-0.219
MnHCO ₃ +	1.157e-05	1.020e-05	-4.937	-4.991	-0.055
MnCO ₃	4.441e-06	4.458e-06	-5.352	-5.351	0.002
MnSO ₄	2.690e-06	2.700e-06	-5.570	-5.569	0.002
MnCl+	2.553e-08	2.251e-08	-7.593	-7.648	-0.055
MnOH+	3.187e-09	2.810e-09	-8.497	-8.551	-0.055
MnF+	1.211e-09	1.068e-09	-8.917	-8.971	-0.055
MnCl ₂	2.938e-12	2.950e-12	-11.532	-11.530	0.002
MnCl ₃ -	2.767e-16	2.439e-16	-15.558	-15.613	-0.055
Mn(OH) ₃ -	7.066e-19	6.229e-19	-18.151	-18.206	-0.055
Mn(3)	3.509e-26				
Mn+ ₃	3.509e-26	1.129e-26	-25.455	-25.947	-0.492
Mn(6)	0.000e+00				
MnO ₄ - ₂	0.000e+00	0.000e+00	-49.978	-50.197	-0.219
Mn(7)	0.000e+00				
MnO ₄ -	0.000e+00	0.000e+00	-55.247	-55.302	-0.055
Na	1.341e-03				
Na+	1.331e-03	1.175e-03	-2.876	-2.930	-0.054
NaSO ₄ -	6.221e-06	5.484e-06	-5.206	-5.261	-0.055
NaHCO ₃	4.095e-06	4.111e-06	-5.388	-5.386	0.002
NaCO ₃ -	4.690e-08	4.135e-08	-7.329	-7.384	-0.055
NaF	5.651e-09	5.673e-09	-8.248	-8.246	0.002
O(0)	8.070e-05				
O ₂	4.035e-05	4.050e-05	-4.394	-4.393	0.002
S(6)	2.115e-03				

SO4-2	1.619e-03	9.891e-04	-2.791	-3.005	-0.214
MgSO4	3.257e-04	3.270e-04	-3.487	-3.485	0.002
CaSO4	1.597e-04	1.604e-04	-3.797	-3.795	0.002
NaSO4-	6.221e-06	5.484e-06	-5.206	-5.261	-0.055
MnSO4	2.690e-06	2.700e-06	-5.570	-5.569	0.002
KSO4-	1.097e-06	9.669e-07	-5.960	-6.015	-0.055
FeSO4	4.146e-07	4.162e-07	-6.382	-6.381	0.002
HSO4-	6.982e-09	6.155e-09	-8.156	-8.211	-0.055
CaHSO4+	7.453e-11	6.571e-11	-10.128	-10.182	-0.055
FeHSO4+	2.363e-13	2.083e-13	-12.627	-12.681	-0.055
FeSO4+	1.266e-13	1.116e-13	-12.898	-12.952	-0.055
Fe(SO4)2-	2.639e-15	2.326e-15	-14.579	-14.633	-0.055
FeHSO4+2	3.905e-20	2.359e-20	-19.408	-19.627	-0.219

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-1.72	-6.06	-4.34	CaSO4
Aragonite	-0.28	-8.57	-8.28	CaCO3
Artinite	-7.06	3.21	10.27	MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
Birnessite	-10.10	33.50	43.60	MnO2
Bixbyite	-8.98	-9.23	-0.26	Mn2O3
Brucite	-6.00	11.48	17.47	Mg(OH)2
Calcite	-0.13	-8.57	-8.43	CaCO3
CO2(g)	-1.55	-2.90	-1.35	CO2
Dolomite	0.04	-16.83	-16.87	CaMg(CO3)2
Dolomite(d)	-0.55	-16.83	-16.28	CaMg(CO3)2
Epsomite	-3.54	-5.75	-2.21	MgSO4:7H2O
Fe(OH)2.7Cl.3	7.28	4.24	-3.04	Fe(OH)2.7Cl0.3
Fe(OH)3(a)	2.54	7.43	4.89	Fe(OH)3
Fe3(OH)8	3.31	23.54	20.22	Fe3(OH)8
Fluorite	-2.49	-13.20	-10.71	CaF2
Goethite	8.10	7.43	-0.66	FeOOH
Gypsum	-1.47	-6.06	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-24.02	-27.13	-3.11	H2
H2O(g)	-1.76	-0.00	1.76	H2O
Halite	-8.01	-6.45	1.56	NaCl
Hausmannite	-10.90	52.47	63.38	Mn3O4
Hematite	18.15	14.87	-3.29	Fe2O3
Huntite	-3.98	-33.35	-29.37	CaMg3(CO3)4
Hydromagnesite	-14.02	-21.57	-7.54	Mg5(CO3)4(OH)2:4H2O
Jarosite(ss)	0.37	-9.46	-9.83	(K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	-0.34	-8.82	-8.48	KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	-3.53	-7.97	-4.44	NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	-8.05	-12.15	-4.10	(H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Maghemite	8.48	14.87	6.39	Fe2O3
Magnesite	-0.38	-8.26	-7.89	MgCO3
Magnetite	18.62	23.54	4.91	Fe3O4
Manganite	-3.85	21.49	25.34	MnOOH
Melanterite	-6.23	-8.56	-2.33	FeSO4:7H2O
Mirabilite	-7.31	-8.87	-1.56	Na2SO4:10H2O
Mn2(SO4)3	-56.11	-60.91	-4.80	Mn2(SO4)3
MnCl2:4H2O	-14.09	-11.78	2.30	MnCl2:4H2O
MnSO4	-10.77	-7.74	3.03	MnSO4
Nahcolite	-4.50	-5.14	-0.63	NaHCO3
Natron	-9.70	-11.38	-1.68	Na2CO3:10H2O
Nesquehonite	-2.77	-8.26	-5.49	MgCO3:3H2O
Nsutite	-9.06	33.50	42.56	MnO2
O2(g)	-1.57	-4.39	-2.82	O2
Portlandite	-12.36	11.17	23.52	Ca(OH)2
Pyrochroite	-5.72	9.48	15.20	Mn(OH)2

Pyrolusite	-9.39	33.50	42.90	MnO ₂
Rhodochrosite	0.85	-10.25	-11.10	MnCO ₃
Rhodochrosite(d) 0.1	4	-10.25	-10.39	MnCO ₃
Siderite	-0.23	-11.07	-10.83	FeCO ₃
Siderite(d)(3)	-0.62	-11.07	-10.45	FeCO ₃
Thenardite	-8.70	-8.86	-0.17	Na ₂ SO ₄
Thermonatrite	-11.57	-11.38	0.19	Na ₂ CO ₃ :H ₂ O
Trona	-16.14	-16.51	-0.37	NaHCO ₃ :Na ₂ CO ₃ :2H ₂ O

End of simulation.

12.3.8 Grube San Fernando, Schacht 2, 77 m u WOF

Title San Fernando, Schacht 2, 77m u WOF

Solution 1

temp	16.9
pH	7.10
pe	0.54
redox	Pe
units	mg/l
density	1.0
F	0.24
Cl	12.8
S(6)	169
C(4)	534
Ca	67
Mg	85.6
Na	32.9
K	7.30
As	0.004
Fe	0.51
Mn	2.1
Ni	0.042
Zn	0.054
End	

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution
1.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
As	5,34E-05	5,34E-05
C(4)	8,76E+00	8,76E+00
Ca	1,67E+00	1,67E+00
Cl	3,61E-01	3,61E-01
F	1,26E-02	1,26E-02
Fe	9,14E-03	9,14E-03
K	1,87E-01	1,87E-01
Mg	3,52E+00	3,52E+00
Mn	3,83E-02	3,83E-02
Na	1,43E+00	1,43E+00
Ni	7,16E-04	7,16E-04
S(6)	1,76E+00	1,76E+00
Zn	8,27E-04	8,27E-04

-----Description of solution-----

pH	=	7.100
pe	=	0.540
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	1,65E+01
Mass of water (kg)	=	1,00E+03
Total alkalinity (eq/kg)	=	7,50E+00
Total CO2 (mol/kg)	=	8,76E+00
Temperature (deg C)	=	16.900
Electrical balance (eq)	=	7,19E-01
percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	3.39

Iterations	=	10
Total H	=	1,11E+08
Total O	=	5,55E+07

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	8.848e-08	7.943e-08	-7.053	-7.100	-0.047
OH-	7.538e-08	6.646e-08	-7.123	-7.177	-0.055
H2O	5.551e+01	9.997e-01	1.744	-0.000	0.000
As(3)	1.166e-08				
H3AsO3	1.157e-08	1.162e-08	-7.937	-7.935	0.002
H2AsO3-	8.611e-11	7.591e-11	-10.065	-10.120	-0.055
H4AsO3+	5.185e-16	4.571e-16	-15.285	-15.340	-0.055
HAsO3-2	2.205e-18	1.332e-18	-17.657	-17.876	-0.219
AsO3-3	7.819e-27	2.515e-27	-26.107	-26.600	-0.493
As(5)	4.178e-08				
HAsO4-2	2.301e-08	1.390e-08	-7.638	-7.857	-0.219
H2AsO4-	1.877e-08	1.655e-08	-7.727	-7.781	-0.055
AsO4-3	9.922e-13	3.191e-13	-12.003	-12.496	-0.493
H3AsO4	2.413e-13	2.422e-13	-12.618	-12.616	0.002
C(4)	8.760e-03				
HCO3-	7.213e-03	6.390e-03	-2.142	-2.195	-0.053
CO2	1.282e-03	1.287e-03	-2.892	-2.890	0.002
MgHCO3+	1.572e-04	1.385e-04	-3.804	-3.858	-0.055
CaHCO3+	7.185e-05	6.334e-05	-4.144	-4.198	-0.055
MnHCO3+	9.240e-06	8.146e-06	-5.034	-5.089	-0.055
CO3-2	5.110e-06	3.147e-06	-5.292	-5.502	-0.211
MgCO3	5.039e-06	5.059e-06	-5.298	-5.296	0.002
NaHCO3	4.496e-06	4.513e-06	-5.347	-5.346	0.002
CaCO3	4.124e-06	4.139e-06	-5.385	-5.383	0.002
MnCO3	3.562e-06	3.576e-06	-5.448	-5.447	0.002
FeHCO3+	2.566e-06	2.262e-06	-5.591	-5.646	-0.055
NiCO3	6.338e-07	6.362e-07	-6.198	-6.196	0.002
FeCO3	2.662e-07	2.672e-07	-6.575	-6.573	0.002
ZnHCO3+	2.184e-07	1.925e-07	-6.661	-6.715	-0.055
ZnCO3	1.497e-07	1.503e-07	-6.825	-6.823	0.002
NaCO3-	5.485e-08	4.836e-08	-7.261	-7.316	-0.055
NiHCO3+	2.728e-08	2.405e-08	-7.564	-7.619	-0.055
Zn(CO3)2-2	1.674e-08	1.011e-08	-7.776	-7.995	-0.219
Ni(CO3)2-2	5.760e-09	3.479e-09	-8.240	-8.459	-0.219
Ca	1.673e-03				
Ca+2	1.463e-03	9.005e-04	-2.835	-3.046	-0.211
CaSO4	1.342e-04	1.347e-04	-3.872	-3.871	0.002
CaHCO3+	7.185e-05	6.334e-05	-4.144	-4.198	-0.055
CaCO3	4.124e-06	4.139e-06	-5.385	-5.383	0.002
CaF+	7.319e-08	6.453e-08	-7.136	-7.190	-0.055
CaOH+	2.133e-09	1.881e-09	-8.671	-8.726	-0.055
CaHSO4+	6.479e-11	5.712e-11	-10.188	-10.243	-0.055
Cl	3.614e-04				
Cl-	3.613e-04	3.176e-04	-3.442	-3.498	-0.056
MnCl+	2.099e-08	1.851e-08	-7.678	-7.733	-0.055
FeCl+	1.760e-09	1.552e-09	-8.754	-8.809	-0.055
ZnCl+	1.608e-10	1.417e-10	-9.794	-9.849	-0.055
ZnOHCl	3.156e-11	3.168e-11	-10.501	-10.499	0.002
NiCl+	2.468e-11	2.176e-11	-10.608	-10.662	-0.055
MnCl2	2.556e-12	2.566e-12	-11.592	-11.591	0.002
ZnCl2	4.541e-14	4.558e-14	-13.343	-13.341	0.002
NiCl2	2.499e-14	2.509e-14	-13.602	-13.601	0.002
MnCl3-	2.546e-16	2.244e-16	-15.594	-15.649	-0.055

ZnCl3-	1.753e-17	1.545e-17	-16.756	-16.811	-0.055
FeCl+2	9.059e-21	5.471e-21	-20.043	-20.262	-0.219
ZnCl4-2	3.812e-21	2.302e-21	-20.419	-20.638	-0.219
FeCl2+	1.146e-23	1.011e-23	-22.941	-22.995	-0.055
FeCl3	3.198e-28	3.210e-28	-27.495	-27.494	0.002
F	1.264e-05				
F-	1.133e-05	9.991e-06	-4.946	-5.000	-0.055
MgF+	1.228e-06	1.083e-06	-5.911	-5.965	-0.055
CaF+	7.319e-08	6.453e-08	-7.136	-7.190	-0.055
NaF	7.193e-09	7.220e-09	-8.143	-8.141	0.002
MnF+	1.121e-09	9.886e-10	-8.950	-9.005	-0.055
HF	1.027e-09	1.031e-09	-8.988	-8.987	0.002
FeF+	4.012e-10	3.537e-10	-9.397	-9.451	-0.055
ZnF+	3.451e-11	3.042e-11	-10.462	-10.517	-0.055
NiF+	6.166e-12	5.436e-12	-11.210	-11.265	-0.055
HF2-	4.176e-14	3.682e-14	-13.379	-13.434	-0.055
FeF+2	1.715e-17	1.036e-17	-16.766	-16.985	-0.219
FeF2+	4.232e-18	3.731e-18	-17.373	-17.428	-0.055
H2F2	3.677e-18	3.691e-18	-17.434	-17.433	0.002
FeF3	5.721e-20	5.743e-20	-19.243	-19.241	0.002
Fe(2)	9.140e-06				
Fe+2	5.861e-06	3.540e-06	-5.232	-5.451	-0.219
FeHCO3+	2.566e-06	2.262e-06	-5.591	-5.646	-0.055
FeSO4	4.364e-07	4.381e-07	-6.360	-6.358	0.002
FeCO3	2.662e-07	2.672e-07	-6.575	-6.573	0.002
FeOH+	8.579e-09	7.563e-09	-8.067	-8.121	-0.055
FeCl+	1.760e-09	1.552e-09	-8.754	-8.809	-0.055
FeF+	4.012e-10	3.537e-10	-9.397	-9.451	-0.055
Fe(OH)2	3.912e-13	3.927e-13	-12.408	-12.406	0.002
FeHSO4+	2.547e-13	2.245e-13	-12.594	-12.649	-0.055
Fe(OH)3-	1.919e-16	1.692e-16	-15.717	-15.772	-0.055
Fe(3)	2.549e-10				
Fe(OH)2+	1.274e-10	1.124e-10	-9.895	-9.949	-0.055
Fe(OH)3	1.262e-10	1.267e-10	-9.899	-9.897	0.002
Fe(OH)4-	1.181e-12	1.041e-12	-11.928	-11.983	-0.055
FeOH+2	6.121e-14	3.697e-14	-13.213	-13.432	-0.219
FeF+2	1.715e-17	1.036e-17	-16.766	-16.985	-0.219
FeSO4+	6.226e-18	5.489e-18	-17.206	-17.261	-0.055
FeF2+	4.232e-18	3.731e-18	-17.373	-17.428	-0.055
Fe+3	2.310e-18	7.428e-19	-17.636	-18.129	-0.493
Fe(SO4)2-	1.068e-19	9.419e-20	-18.971	-19.026	-0.055
FeF3	5.721e-20	5.743e-20	-19.243	-19.241	0.002
FeCl+2	9.059e-21	5.471e-21	-20.043	-20.262	-0.219
FeCl2+	1.146e-23	1.011e-23	-22.941	-22.995	-0.055
FeHSO4+2	1.959e-24	1.183e-24	-23.708	-23.927	-0.219
Fe2(OH)2+4	3.899e-25	5.190e-26	-24.409	-25.285	-0.876
FeCl3	3.198e-28	3.210e-28	-27.495	-27.494	0.002
Fe3(OH)4+5	6.136e-32	2.626e-33	-31.212	-32.581	-1.369
H(0)	8.042e-19				
H2	4.021e-19	4.037e-19	-18.396	-18.394	0.002
K	1.869e-04				
K+	1.859e-04	1.634e-04	-3.731	-3.787	-0.056
KSO4-	9.128e-07	8.047e-07	-6.040	-6.094	-0.055
Mg	3.524e-03				
Mg+2	3.069e-03	1.908e-03	-2.513	-2.719	-0.207
MgSO4	2.913e-04	2.924e-04	-3.536	-3.534	0.002
MgHCO3+	1.572e-04	1.385e-04	-3.804	-3.858	-0.055
MgCO3	5.039e-06	5.059e-06	-5.298	-5.296	0.002
MgF+	1.228e-06	1.083e-06	-5.911	-5.965	-0.055
MgOH+	4.662e-08	4.110e-08	-7.331	-7.386	-0.055
Mn(2)	3.826e-05				
Mn+2	2.368e-05	1.430e-05	-4.626	-4.845	-0.219

MnHCO ₃ ⁺	9.240e-06	8.146e-06	-5.034	-5.089	-0.055
MnCO ₃	3.562e-06	3.576e-06	-5.448	-5.447	0.002
MnSO ₄	1.752e-06	1.758e-06	-5.757	-5.755	0.002
MnCl ⁺	2.099e-08	1.851e-08	-7.678	-7.733	-0.055
MnOH ⁺	2.663e-09	2.347e-09	-8.575	-8.629	-0.055
MnF ⁺	1.121e-09	9.886e-10	-8.950	-9.005	-0.055
MnCl ₂	2.556e-12	2.566e-12	-11.592	-11.591	0.002
MnCl ₃ ⁻	2.546e-16	2.244e-16	-15.594	-15.649	-0.055
Mn(OH) ₃ ⁻	5.126e-19	4.519e-19	-18.290	-18.345	-0.055
Mn(3)	1.413e-30				
Mn+3	1.413e-30	4.543e-31	-29.850	-30.343	-0.493
Mn(6)	0.000e+00				
MnO ₄ -2	0.000e+00	0.000e+00	-67.177	-67.396	-0.219
Mn(7)	0.000e+00				
MnO ₄ ⁻	0.000e+00	0.000e+00	-76.730	-76.784	-0.055
Na	1.432e-03				
Na ⁺	1.422e-03	1.256e-03	-2.847	-2.901	-0.054
NaSO ₄ ⁻	5.488e-06	4.838e-06	-5.261	-5.315	-0.055
NaHCO ₃	4.496e-06	4.513e-06	-5.347	-5.346	0.002
NaCO ₃ ⁻	5.485e-08	4.836e-08	-7.261	-7.316	-0.055
NaF	7.193e-09	7.220e-09	-8.143	-8.141	0.002
Ni	7.160e-07				
NiCO ₃	6.338e-07	6.362e-07	-6.198	-6.196	0.002
Ni+2	4.515e-08	2.727e-08	-7.345	-7.564	-0.219
NiHCO ₃ ⁺	2.728e-08	2.405e-08	-7.564	-7.619	-0.055
Ni(CO ₃) ₂ -2	5.760e-09	3.479e-09	-8.240	-8.459	-0.219
NiSO ₄	3.996e-09	4.011e-09	-8.398	-8.397	0.002
NiOH ⁺	2.993e-11	2.638e-11	-10.524	-10.579	-0.055
NiCl ⁺	2.468e-11	2.176e-11	-10.608	-10.662	-0.055
NiF ⁺	6.166e-12	5.436e-12	-11.210	-11.265	-0.055
Ni(OH) ₂	4.303e-13	4.320e-13	-12.366	-12.365	0.002
Ni(SO ₄) ₂ -2	3.104e-13	1.875e-13	-12.508	-12.727	-0.219
NiCl ₂	2.499e-14	2.509e-14	-13.602	-13.601	0.002
Ni(OH) ₃ ⁻	6.167e-17	5.436e-17	-16.210	-16.265	-0.055
O(0)	0.000e+00				
O ₂	0.000e+00	0.000e+00	-58.281	-58.279	0.002
S(6)	1.761e-03				
SO ₄ -2	1.327e-03	8.103e-04	-2.877	-3.091	-0.214
MgSO ₄	2.913e-04	2.924e-04	-3.536	-3.534	0.002
CaSO ₄	1.342e-04	1.347e-04	-3.872	-3.871	0.002
NaSO ₄ ⁻	5.488e-06	4.838e-06	-5.261	-5.315	-0.055
MnSO ₄	1.752e-06	1.758e-06	-5.757	-5.755	0.002
KSO ₄ ⁻	9.128e-07	8.047e-07	-6.040	-6.094	-0.055
FeSO ₄	4.364e-07	4.381e-07	-6.360	-6.358	0.002
ZnSO ₄	4.248e-08	4.264e-08	-7.372	-7.370	0.002
HSO ₄ ⁻	5.985e-09	5.276e-09	-8.223	-8.278	-0.055
NiSO ₄	3.996e-09	4.011e-09	-8.398	-8.397	0.002
Zn(SO ₄) ₂ -2	4.958e-10	2.995e-10	-9.305	-9.524	-0.219
CaHSO ₄ ⁺	6.479e-11	5.712e-11	-10.188	-10.243	-0.055
Ni(SO ₄) ₂ -2	3.104e-13	1.875e-13	-12.508	-12.727	-0.219
FeHSO ₄ ⁺	2.547e-13	2.245e-13	-12.594	-12.649	-0.055
FeSO ₄ ⁺	6.226e-18	5.489e-18	-17.206	-17.261	-0.055
Fe(SO ₄) ₂ ⁻	1.068e-19	9.419e-20	-18.971	-19.026	-0.055
FeHSO ₄ +2	1.959e-24	1.183e-24	-23.708	-23.927	-0.219
Zn	8.268e-07				
Zn+2	3.963e-07	2.394e-07	-6.402	-6.621	-0.219
ZnHCO ₃ ⁺	2.184e-07	1.925e-07	-6.661	-6.715	-0.055
ZnCO ₃	1.497e-07	1.503e-07	-6.825	-6.823	0.002
ZnSO ₄	4.248e-08	4.264e-08	-7.372	-7.370	0.002
Zn(CO ₃) ₂ -2	1.674e-08	1.011e-08	-7.776	-7.995	-0.219
ZnOH ⁺	1.992e-09	1.756e-09	-8.701	-8.755	-0.055
Zn(SO ₄) ₂ -2	4.958e-10	2.995e-10	-9.305	-9.524	-0.219

Zn(OH)2	4.755e-10	4.773e-10	-9.323	-9.321	0.002
ZnCl+	1.608e-10	1.417e-10	-9.794	-9.849	-0.055
ZnF+	3.451e-11	3.042e-11	-10.462	-10.517	-0.055
ZnOHCl	3.156e-11	3.168e-11	-10.501	-10.499	0.002
ZnCl2	4.541e-14	4.558e-14	-13.343	-13.341	0.002
Zn(OH)3-	2.155e-14	1.900e-14	-13.667	-13.721	-0.055
ZnCl3-	1.753e-17	1.545e-17	-16.756	-16.811	-0.055
Zn(OH)4-2	6.273e-20	3.789e-20	-19.203	-19.421	-0.219
ZnCl4-2	3.812e-21	2.302e-21	-20.419	-20.638	-0.219

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-1.80	-6.14	-4.34	CaSO4
Aragonite	-0.26	-8.55	-8.29	CaCO3
Arsenolite	-14.34	-15.87	-1.53	As2O3
Artinite	-6.93	3.26	10.19	MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
As2O5(cr)	-33.61	-25.23	8.38	As2O5
As_native	-17.76	-30.85	-13.10	As
Bianchite	-7.95	-9.71	-1.76	ZnSO4:6H2O
Birnessite	-18.97	24.64	43.60	MnO2
Bixbyite	-17.79	-18.09	-0.30	Mn2O3
Brucite	-5.91	11.48	17.39	Mg(OH)2
Bunsenite	-6.30	6.64	12.94	NiO
Ca3(AsO4)2:4w	-15.22	-34.13	-18.90	Ca3(AsO4)2:4H2O
Calcite	-0.11	-8.55	-8.44	CaCO3
Claudetite	-14.39	-15.87	-1.48	As2O3
CO2(g)	-1.52	-2.89	-1.37	CO2
Dolomite	0.13	-16.77	-16.90	CaMg(CO3)2
Dolomite(d)	-0.46	-16.77	-16.31	CaMg(CO3)2
Epsomite	-3.61	-5.81	-2.20	MgSO4:7H2O
Fe(OH)2.7Cl.3	3.03	-0.01	-3.04	Fe(OH)2.7Cl0.3
Fe(OH)3(a)	-1.72	3.17	4.89	Fe(OH)3
Fe3(OH)8	-5.13	15.09	20.22	Fe3(OH)8
Fluorite	-2.35	-13.05	-10.70	CaF2
Goethite	3.87	3.17	-0.70	FeOOH
Goslarite	-7.69	-9.71	-2.03	ZnSO4:7H2O
Gypsum	-1.55	-6.14	-4.58	CaSO4:2H2O
H2(g)	-15.28	-18.39	-3.11	H2
H2O(g)	-1.73	-0.00	1.73	H2O
Halite	-7.96	-6.40	1.56	NaCl
Hausmannite	-19.74	43.35	63.09	Mn3O4
Hematite	9.72	6.34	-3.38	Fe2O3
Huntite	-3.77	-33.21	-29.44	CaMg3(CO3)4
Hydromagnesite	-13.71	-21.41	-7.69	Mg5(CO3)4(OH)2:4H2O
Jarosite(ss)	-12.56	-22.39	-9.83	(K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	-13.19	-21.76	-8.57	KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	-16.33	-20.87	-4.54	NaFe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	-20.81	-25.07	-4.26	(H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
Maghemite	-0.04	6.34	6.39	Fe2O3
Magnesite	-0.32	-8.22	-7.90	MgCO3
Magnetite	10.32	15.09	4.77	Fe3O4
Manganite	-8.34	17.00	25.34	MnOOH
Melanterite	-6.23	-8.54	-2.31	FeSO4:7H2O
Mirabilite	-7.39	-8.89	-1.50	Na2SO4:10H2O
Mn2(SO4)3	-65.05	-69.96	-4.91	Mn2(SO4)3
Mn3(AsO4)2:8H2O	-10.82	-39.53	-28.71	Mn3(AsO4)2:8H2O
MnCl2:4H2O	-14.20	-11.84	2.35	MnCl2:4H2O
MnSO4	-10.92	-7.94	2.99	MnSO4
Morenosite	-8.24	-10.66	-2.42	NiSO4:7H2O
Nahcolite	-4.47	-5.10	-0.62	NaHCO3

Natron	-9.67	-11.31	-1.63	Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O
Nesquehonite	-2.72	-8.22	-5.50	MgCO ₃ ·3H ₂ O
Ni(OH) ₂	-3.54	6.64	10.18	Ni(OH) ₂
Ni ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O	-22.18	-47.69	-25.51	Ni ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O
Ni ₄ (OH) ₆ SO ₄	-22.75	9.25	32.00	Ni ₄ (OH) ₆ SO ₄
NiCO ₃	-6.43	-13.07	-6.64	NiCO ₃
Nsutite	-17.93	24.64	42.56	MnO ₂
O ₂ (g)	-55.45	-58.28	-2.83	O ₂
Portlandite	-12.28	11.15	23.43	Ca(OH) ₂
Pyrochroite	-5.84	9.36	15.20	Mn(OH) ₂
Pyrolusite	-18.08	24.64	42.71	MnO ₂
Retgersite	-8.59	-10.66	-2.06	NiSO ₄ ·6H ₂ O
Rhodochrosite	0.75	-10.35	-11.10	MnCO ₃
Rhodochrosite(d)) 0.0	4 -10.35	-10.39	MnCO ₃
Scorodite	-10.38	-30.63	-20.25	FeAsO ₄ ·2H ₂ O
Siderite	-0.11	-10.95	-10.84	FeCO ₃
Siderite(d)(3)	-0.50	-10.95	-10.45	FeCO ₃
Smithsonite	-2.21	-12.12	-9.91	ZnCO ₃
Thenardite	-8.73	-8.89	-0.17	Na ₂ SO ₄
Thermonatrite	-11.49	-11.30	0.18	Na ₂ CO ₃ ·H ₂ O
Trona	-15.97	-16.40	-0.43	NaHCO ₃ ·Na ₂ CO ₃ ·2H ₂ O
Zincite(c)	-4.01	7.58	11.59	ZnO
Zincosite	-13.12	-9.71	3.40	ZnSO ₄
Zn(OH) ₂ -a	-4.87	7.58	12.45	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -b	-4.17	7.58	11.75	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -c	-4.62	7.58	12.20	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -e	-3.92	7.58	11.50	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -g	-4.13	7.58	11.71	Zn(OH) ₂
Zn ₂ (OH) ₂ SO ₄	-9.63	-2.13	7.50	Zn ₂ (OH) ₂ SO ₄
Zn ₂ (OH) ₃ Cl	-10.64	4.56	15.20	Zn ₂ (OH) ₃ Cl
Zn ₃ (AsO ₄) ₂ ·2.5w	-17.31	-44.86	-27.55	Zn ₃ (AsO ₄) ₂ ·2.5H ₂ O
Zn ₃ O(SO ₄) ₂	-32.13	-11.85	20.29	ZnO·2ZnSO ₄
Zn ₄ (OH) ₆ SO ₄	-15.38	13.02	28.40	Zn ₄ (OH) ₆ SO ₄
Zn ₅ (OH) ₈ Cl ₂	-21.80	16.70	38.50	Zn ₅ (OH) ₈ Cl ₂
ZnCl ₂	-21.01	-13.62	7.39	ZnCl ₂
ZnCO ₃ ·H ₂ O	-1.86	-12.12	-10.26	ZnCO ₃ ·H ₂ O
ZnF ₂	-15.37	-16.62	-1.25	ZnF ₂
ZnMetal	-34.21	-7.70	26.51	Zn
ZnO(a)	-3.73	7.58	11.31	ZnO
ZnSO ₄ ·H ₂ O	-9.36	-9.71	-0.35	ZnSO ₄ ·H ₂ O

End of simulation.

12.3.9 Verdünnungsmodellierung

Title Schacht Wolf_oberflächennah, verdünnt

Solution 1

temp	17. 6
pH	7.90
pe	1.80
redox	Pe
units	mg/l
density	1.0
F	0.24
Cl	12. 1
S(6)	157
C(4)	558
Ca	67.3
Mg	84.5
Na	31.2
K	7.6
As	0.006
Fe	0.67
Mn	2.50i
Zn	0.029

Save Solution 1

End

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution
1.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
As	8,02E-05	8,02E-05
C(4)	9,15E+00	9,15E+00
Ca	1,68E+00	1,68E+00
Cl	3,42E-01	3,42E-01
F	1,26E-02	1,26E-02
Fe	1,20E-02	1,20E-02
K	1,95E-01	1,95E-01
Mg	3,48E+00	3,48E+00
Mn	4,56E-02	4,56E-02
Na	1,36E+00	1,36E+00
S(6)	1,64E+00	1,64E+00
Zn	4,44E-04	4,44E-04

-----Description of solution-----

pH	=	7.090
pe	=	1.800
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	1,64E+01
Mass of water (kg)	=	1,00E+03
Total alkalinity (eq/kg)	=	7,82E+00
Total CO2 (mol/kg)	=	9,15E+00
Temperature (deg C)	=	17.600
Electrical balance (eq)	=	5,41E-01
percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	2.55
Iterations	=	9

Total H	=	1,11E+08
Total O	=	5,55E+07

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	9.053e-08	8.128e-08	-7.043	-7.090	-0.047
OH-	7.801e-08	6.879e-08	-7.108	-7.162	-0.055
H2O	5.551e+01	9.997e-01	1.744	-0.000	0.000
As(3)	6.503e-11				
H3AsO3	6.455e-11	6.479e-11	-10.190	-10.188	0.002
H2AsO3-	4.824e-13	4.253e-13	-12.317	-12.371	-0.055
H4AsO3+	2.959e-18	2.609e-18	-17.529	-17.583	-0.055
HAsO3-2	1.245e-20	7.527e-21	-19.905	-20.123	-0.219
AsO3-3	4.422e-29	1.425e-29	-28.354	-28.846	-0.492
As(5)	8.009e-08				
HAsO4-2	4.370e-08	2.642e-08	-7.359	-7.578	-0.219
H2AsO4-	3.639e-08	3.208e-08	-7.439	-7.494	-0.055
AsO4-3	1.873e-12	6.036e-13	-11.727	-12.219	-0.492
H3AsO4	4.821e-13	4.839e-13	-12.317	-12.315	0.002
C(4)	9.153e-03				
HCO3-	7.523e-03	6.665e-03	-2.124	-2.176	-0.053
CO2	1.352e-03	1.357e-03	-2.869	-2.867	0.002
MgHCO3+	1.626e-04	1.434e-04	-3.789	-3.843	-0.055
CaHCO3+	7.665e-05	6.759e-05	-4.115	-4.170	-0.055
MnHCO3+	1.135e-05	1.001e-05	-4.945	-5.000	-0.055
CO3-2	5.295e-06	3.264e-06	-5.276	-5.486	-0.210
MgCO3	5.231e-06	5.251e-06	-5.281	-5.280	0.002
NaHCO3	4.449e-06	4.466e-06	-5.352	-5.350	0.002
CaCO3	4.352e-06	4.369e-06	-5.361	-5.360	0.002
MnCO3	4.352e-06	4.368e-06	-5.361	-5.360	0.002
FeHCO3+	3.480e-06	3.068e-06	-5.458	-5.513	-0.055
FeCO3	3.590e-07	3.604e-07	-6.445	-6.443	0.002
ZnHCO3+	1.204e-07	1.062e-07	-6.919	-6.974	-0.055
ZnCO3	8.210e-08	8.241e-08	-7.086	-7.084	0.002
NaCO3-	5.600e-08	4.938e-08	-7.252	-7.306	-0.055
Zn(CO3)2-2	9.512e-09	5.750e-09	-8.022	-8.240	-0.219
Ca	1.681e-03				
Ca+2	1.473e-03	9.076e-04	-2.832	-3.042	-0.210
CaSO4	1.262e-04	1.267e-04	-3.899	-3.897	0.002
CaHCO3+	7.665e-05	6.759e-05	-4.115	-4.170	-0.055
CaCO3	4.352e-06	4.369e-06	-5.361	-5.360	0.002
CaF+	7.502e-08	6.615e-08	-7.125	-7.179	-0.055
CaOH+	2.101e-09	1.853e-09	-8.678	-8.732	-0.055
CaHSO4+	6.282e-11	5.539e-11	-10.202	-10.257	-0.055
Cl	3.416e-04				
Cl-	3.416e-04	3.003e-04	-3.466	-3.522	-0.056
MnCl+	2.338e-08	2.061e-08	-7.631	-7.686	-0.055
FeCl+	2.164e-09	1.908e-09	-8.665	-8.719	-0.055
ZnCl+	8.302e-11	7.320e-11	-10.081	-10.135	-0.055
ZnOHCl	1.542e-11	1.548e-11	-10.812	-10.810	0.002
MnCl2	2.692e-12	2.702e-12	-11.570	-11.568	0.002
ZnCl2	2.224e-14	2.233e-14	-13.653	-13.651	0.002
MnCl3-	2.535e-16	2.235e-16	-15.596	-15.651	-0.055
ZnCl3-	8.152e-18	7.188e-18	-17.089	-17.143	-0.055
FeCl+2	2.159e-19	1.305e-19	-18.666	-18.884	-0.219
ZnCl4-2	1.685e-21	1.019e-21	-20.773	-20.992	-0.219
FeCl2+	2.525e-22	2.226e-22	-21.598	-21.652	-0.055
FeCl3	6.660e-27	6.686e-27	-26.176	-26.175	0.002
F	1.264e-05				

F-	1.133e-05	9.988e-06	-4.946	-5.001	-0.055
MgF+	1.232e-06	1.087e-06	-5.909	-5.964	-0.055
CaF+	7.502e-08	6.615e-08	-7.125	-7.179	-0.055
NaF	6.822e-09	6.848e-09	-8.166	-8.164	0.002
MnF+	1.321e-09	1.164e-09	-8.879	-8.934	-0.055
HF	1.064e-09	1.068e-09	-8.973	-8.971	0.002
FeF+	5.215e-10	4.598e-10	-9.283	-9.337	-0.055
ZnF+	1.841e-11	1.623e-11	-10.735	-10.790	-0.055
HF2-	4.352e-14	3.838e-14	-13.361	-13.416	-0.055
FeF+2	4.268e-16	2.580e-16	-15.370	-15.588	-0.219
FeF2+	1.063e-16	9.374e-17	-15.973	-16.028	-0.055
H2F2	3.849e-18	3.863e-18	-17.415	-17.413	0.002
FeF3	1.441e-18	1.446e-18	-17.841	-17.840	0.002
Fe(2)	1.200e-05				
Fe+2	7.615e-06	4.604e-06	-5.118	-5.337	-0.219
FeHCO3+	3.480e-06	3.068e-06	-5.458	-5.513	-0.055
FeSO4	5.332e-07	5.352e-07	-6.273	-6.271	0.002
FeCO3	3.590e-07	3.604e-07	-6.445	-6.443	0.002
FeOH+	1.152e-08	1.016e-08	-7.939	-7.993	-0.055
FeCl+	2.164e-09	1.908e-09	-8.665	-8.719	-0.055
FeF+	5.215e-10	4.598e-10	-9.283	-9.337	-0.055
Fe(OH)2	5.474e-13	5.495e-13	-12.262	-12.260	0.002
FeHSO4+	3.186e-13	2.810e-13	-12.497	-12.551	-0.055
Fe(OH)3-	2.643e-16	2.330e-16	-15.578	-15.633	-0.055
Fe(3)	6.472e-09				
Fe(OH)2+	3.220e-09	2.839e-09	-8.492	-8.547	-0.055
Fe(OH)3	3.220e-09	3.232e-09	-8.492	-8.491	0.002
Fe(OH)4-	3.031e-11	2.672e-11	-10.518	-10.573	-0.055
FeOH+2	1.538e-12	9.297e-13	-11.813	-12.032	-0.219
FeF+2	4.268e-16	2.580e-16	-15.370	-15.588	-0.219
FeSO4+	1.445e-16	1.274e-16	-15.840	-15.895	-0.055
FeF2+	1.063e-16	9.374e-17	-15.973	-16.028	-0.055
Fe+3	5.680e-17	1.830e-17	-16.246	-16.737	-0.492
Fe(SO4)2-	2.306e-18	2.033e-18	-17.637	-17.692	-0.055
FeF3	1.441e-18	1.446e-18	-17.841	-17.840	0.002
FeCl+2	2.159e-19	1.305e-19	-18.666	-18.884	-0.219
FeCl2+	2.525e-22	2.226e-22	-21.598	-21.652	-0.055
Fe2(OH)2+4	2.384e-22	3.183e-23	-21.623	-22.497	-0.874
FeHSO4+2	4.641e-23	2.806e-23	-22.333	-22.552	-0.219
FeCl3	6.660e-27	6.686e-27	-26.176	-26.175	0.002
Fe3(OH)4+5	8.840e-28	3.804e-29	-27.054	-28.420	-1.366
H(0)	2.525e-21				
H2	1.262e-21	1.267e-21	-20.899	-20.897	0.002
K	1.945e-04				
K+	1.937e-04	1.702e-04	-3.713	-3.769	-0.056
KSO4-	8.926e-07	7.871e-07	-6.049	-6.104	-0.055
Mg	3.479e-03				
Mg+2	3.037e-03	1.889e-03	-2.518	-2.724	-0.206
MgSO4	2.726e-04	2.736e-04	-3.565	-3.563	0.002
MgHCO3+	1.626e-04	1.434e-04	-3.789	-3.843	-0.055
MgCO3	5.231e-06	5.251e-06	-5.281	-5.280	0.002
MgF+	1.232e-06	1.087e-06	-5.909	-5.964	-0.055
MgOH+	4.822e-08	4.251e-08	-7.317	-7.371	-0.055
Mn(2)	4.555e-05				
Mn+2	2.788e-05	1.685e-05	-4.555	-4.773	-0.219
MnHCO3+	1.135e-05	1.001e-05	-4.945	-5.000	-0.055
MnCO3	4.352e-06	4.368e-06	-5.361	-5.360	0.002
MnSO4	1.940e-06	1.947e-06	-5.712	-5.711	0.002
MnCl+	2.338e-08	2.061e-08	-7.631	-7.686	-0.055
MnOH+	3.255e-09	2.870e-09	-8.487	-8.542	-0.055
MnF+	1.321e-09	1.164e-09	-8.879	-8.934	-0.055
MnCl2	2.692e-12	2.702e-12	-11.570	-11.568	0.002

MnCl3-	2.535e-16	2.235e-16	-15.596	-15.651	-0.055
Mn(OH)3-	5.635e-19	4.969e-19	-18.249	-18.304	-0.055
Mn(3)	3.366e-29				
Mn+3	3.366e-29	1.085e-29	-28.473	-28.965	-0.492
Mn(6)	0.000e+00				
MnO4-2	0.000e+00	0.000e+00	-61.874	-62.093	-0.219
Mn(7)	0.000e+00				
MnO4-	0.000e+00	0.000e+00	-70.118	-70.173	-0.055
Na	1.358e-03				
Na+	1.349e-03	1.191e-03	-2.870	-2.924	-0.054
NaSO4-	4.848e-06	4.274e-06	-5.314	-5.369	-0.055
NaHCO3	4.449e-06	4.466e-06	-5.352	-5.350	0.002
NaCO3-	5.600e-08	4.938e-08	-7.252	-7.306	-0.055
NaF	6.822e-09	6.848e-09	-8.166	-8.164	0.002
O(0)	0.000e+00				
O2	0.000e+00	0.000e+00	-53.036	-53.035	0.002
S(6)	1.636e-03				
SO4-2	1.229e-03	7.511e-04	-2.911	-3.124	-0.214
MgSO4	2.726e-04	2.736e-04	-3.565	-3.563	0.002
CaSO4	1.262e-04	1.267e-04	-3.899	-3.897	0.002
NaSO4-	4.848e-06	4.274e-06	-5.314	-5.369	-0.055
MnSO4	1.940e-06	1.947e-06	-5.712	-5.711	0.002
KSO4-	8.926e-07	7.871e-07	-6.049	-6.104	-0.055
FeSO4	5.332e-07	5.352e-07	-6.273	-6.271	0.002
ZnSO4	2.094e-08	2.102e-08	-7.679	-7.677	0.002
HSO4-	5.757e-09	5.076e-09	-8.240	-8.294	-0.055
Zn(SO4)2-2	2.251e-10	1.361e-10	-9.648	-9.866	-0.219
CaHSO4+	6.282e-11	5.539e-11	-10.202	-10.257	-0.055
FeHSO4+	3.186e-13	2.810e-13	-12.497	-12.551	-0.055
FeSO4+	1.445e-16	1.274e-16	-15.840	-15.895	-0.055
Fe(SO4)2-	2.306e-18	2.033e-18	-17.637	-17.692	-0.055
FeHSO4+2	4.641e-23	2.806e-23	-22.333	-22.552	-0.219
Zn	4.440e-07				
Zn+2	2.094e-07	1.266e-07	-6.679	-6.898	-0.219
ZnHCO3+	1.204e-07	1.062e-07	-6.919	-6.974	-0.055
ZnCO3	8.210e-08	8.241e-08	-7.086	-7.084	0.002
ZnSO4	2.094e-08	2.102e-08	-7.679	-7.677	0.002
Zn(CO3)2-2	9.512e-09	5.750e-09	-8.022	-8.240	-0.219
ZnOH+	1.089e-09	9.598e-10	-8.963	-9.018	-0.055
Zn(OH)2	2.401e-10	2.410e-10	-9.620	-9.618	0.002
Zn(SO4)2-2	2.251e-10	1.361e-10	-9.648	-9.866	-0.219
ZnCl+	8.302e-11	7.320e-11	-10.081	-10.135	-0.055
ZnF+	1.841e-11	1.623e-11	-10.735	-10.790	-0.055
ZnOHCl	1.542e-11	1.548e-11	-10.812	-10.810	0.002
ZnCl2	2.224e-14	2.233e-14	-13.653	-13.651	0.002
Zn(OH)3-	1.063e-14	9.374e-15	-13.973	-14.028	-0.055
ZnCl3-	8.152e-18	7.188e-18	-17.089	-17.143	-0.055
Zn(OH)4-2	3.023e-20	1.827e-20	-19.520	-19.738	-0.219
ZnCl4-2	1.685e-21	1.019e-21	-20.773	-20.992	-0.219

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-1.83	-6.17	-4.34	CaSO4
Aragonite	-0.24	-8.53	-8.29	CaCO3
Arsenolite	-18.86	-20.38	-1.51	As2O3
Artinite	-6.89	3.25	10.14	MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
As2O5(cr)	-33.00	-24.63	8.37	As2O5
As_native	-23.81	-36.86	-13.05	As
Bianchite	-8.26	-10.02	-1.76	ZnSO4:6H2O
Birnessite	-16.41	27.19	43.60	MnO2

Bixbyite	-15.06	-15.39	-0.33	Mn ₂ O ₃
Brucite	-5.89	11.46	17.35	Mg(OH) ₂
Ca ₃ (AsO ₄) ₂ ·4H ₂ O	-14.66	-33.57	-18.90	Ca ₃ (AsO ₄) ₂ ·4H ₂ O
Calcite	-0.09	-8.53	-8.44	CaCO ₃
Claudetite	-18.91	-20.38	-1.47	As ₂ O ₃
CO ₂ (g)	-1.49	-2.87	-1.38	CO ₂
Dolomite	0.18	-16.74	-16.91	CaMg(CO ₃) ₂
Dolomite(d)	-0.41	-16.74	-16.33	CaMg(CO ₃) ₂
Epsomite	-3.66	-5.85	-2.19	MgSO ₄ ·7H ₂ O
Fe(OH)·2.7Cl ₂ ·3	4.39	1.35	-3.04	Fe(OH)·2.7Cl ₂ ·3
Fe(OH) ₃ (a)	-0.36	4.53	4.89	Fe(OH) ₃
Fe ₃ (OH) ₈	-2.31	17.91	20.22	Fe ₃ (OH) ₈
Fluorite	-2.35	-13.04	-10.69	CaF ₂
Goethite	5.26	4.53	-0.73	FeOOH
Goslarite	-8.00	-10.02	-2.02	ZnSO ₄ ·7H ₂ O
Gypsum	-1.58	-6.17	-4.58	CaSO ₄ ·2H ₂ O
H ₂ (g)	-17.78	-20.90	-3.12	H ₂
H ₂ O(g)	-1.71	-0.00	1.71	H ₂ O
Halite	-8.01	-6.45	1.56	NaCl
Hausmannite	-16.91	46.00	62.91	Mn ₃ O ₄
Hematite	12.50	9.06	-3.43	Fe ₂ O ₃
Huntite	-3.67	-33.16	-29.49	CaMg ₃ (CO ₃) ₄
Hydromagnesite	-13.60	-21.38	-7.79	Mg ₅ (CO ₃) ₄ (OH)·2.4H ₂ O (K _{0.77} Na _{0.03} H _{0.2})Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite(ss)	-8.50	-18.33	-9.83	KFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-K	-9.06	-17.69	-8.63	NaFe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
Jarosite-Na	-12.24	-16.85	-4.61	(H ₃ O)Fe ₃ (SO ₄) ₂ (OH) ₆
JarositeH	-16.65	-21.01	-4.36	Fe ₂ O ₃
Maghemite	2.68	9.06	6.39	MgCO ₃
Magnesite	-0.30	-8.21	-7.91	Fe ₃ O ₄
Magnetite	13.23	17.91	4.68	MnOOH
Manganite	-7.04	18.30	25.34	FeSO ₄ ·7H ₂ O
Melanterite	-6.16	-8.46	-2.30	Na ₂ SO ₄ ·10H ₂ O
Mirabilite	-7.51	-8.97	-1.47	Mn ₂ (SO ₄) ₃
Mn ₂ (SO ₄) ₃	-62.32	-67.30	-4.98	Mn ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O
Mn ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O	-10.05	-38.76	-28.71	MnCl ₂ ·4H ₂ O
MnCl ₂ ·4H ₂ O	-14.20	-11.82	2.39	MnSO ₄
MnSO ₄	-10.86	-7.90	2.96	NaHCO ₃
Nahcolite	-4.48	-5.10	-0.62	Na ₂ CO ₃ ·10H ₂ O
Natron	-9.73	-11.34	-1.60	MgCO ₃ ·3H ₂ O
Nesquehonite	-2.70	-8.21	-5.51	MnO ₂
Nsutite	-15.38	27.19	42.56	O ₂
O ₂ (g)	-50.20	-53.03	-2.83	Ca(OH) ₂
Portlandite	-12.24	11.14	23.38	Mn(OH) ₂
Pyrochroite	-5.79	9.41	15.20	MnO ₂
Pyrolusite	-15.41	27.19	42.59	MnCO ₃
Rhodochrosite	0.84	-10.26	-11.10	MnCO ₃
Rhodochrosite(d)) 0.1	3 -10.26	-10.39	FeAsO ₄ ·2H ₂ O
Scorodite	-8.71	-28.96	-20.25	FeCO ₃
Siderite	0.02	-10.82	-10.84	FeCO ₃
Siderite(d)(3)	-0.37	-10.82	-10.45	ZnCO ₃
Smithsonite	-2.47	-12.38	-9.92	Na ₂ SO ₄
Thenardite	-8.80	-8.97	-0.17	Na ₂ CO ₃ ·H ₂ O
Thermonatrite	-11.51	-11.33	0.18	NaHCO ₃ ·Na ₂ CO ₃ ·2H ₂ O
Trona	-15.98	-16.43	-0.46	ZnO
Zincite(c)	-4.27	7.28	11.55	ZnSO ₄
Zincosite	-13.39	-10.02	3.37	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -a	-5.17	7.28	12.45	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -b	-4.47	7.28	11.75	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -c	-4.92	7.28	12.20	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -e	-4.22	7.28	11.50	Zn(OH) ₂
Zn(OH) ₂ -g	-4.43	7.28	11.71	Zn(OH) ₂

Zn ₂ (OH) ₂ SO ₄	-10.24	-2.74	7.50	Zn ₂ (OH) ₂ SO ₄
Zn ₂ (OH) ₃ Cl	-11.25	3.95	15.20	Zn ₂ (OH) ₃ Cl
Zn ₃ (AsO ₄) ₂ :2.5w	-17.59	-45.13	-27.55	Zn ₃ (AsO ₄) ₂ :2.5H ₂ O
Zn ₃ O(SO ₄) ₂	-32.94	-12.76	20.18	ZnO:2ZnSO ₄
Zn ₄ (OH) ₆ SO ₄	-16.58	11.82	28.40	Zn ₄ (OH) ₆ SO ₄
Zn ₅ (OH) ₈ Cl ₂	-23.31	15.19	38.50	Zn ₅ (OH) ₈ Cl ₂
ZnCl ₂	-21.30	-13.94	7.36	ZnCl ₂
ZnCO ₃ :H ₂ O	-2.12	-12.38	-10.26	ZnCO ₃ :H ₂ O
ZnF ₂	-15.62	-16.90	-1.28	ZnF ₂
ZnMetal	-36.94	-10.50	26.44	Zn
ZnO(a)	-4.03	7.28	11.31	ZnO
ZnSO ₄ :H ₂ O	-9.65	-10.02	-0.37	ZnSO ₄ :H ₂ O

End of simulation.

Reading input data for simulation 2.

Title Niederschlag
Solution 2
temp 7
Equilibrium_Phases
CO₂(g) -3.48
Save Solution 2
End

Beginning of initial solution calculations.

Initial solution
2.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Pure water		

-----Description of solution-----

pH	=	7.000
pe	=	4.000
Activity of water	=	1.000
Ionic strength	=	6,12E-05
Mass of water (kg)	=	1,00E+03
Total alkalinity (eq/kg)	=	-7,77E-05
Total carbon (mol/kg)	=	0.000e+00
Total CO ₂ (mol/kg)	=	0.000e+00
Temperature (deg C)	=	7.000
Electrical balance (eq)	=	7,77E-05
percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	63.52
Iterations	=	0
Total H	=	1,11E+08
Total O	=	5,55E+07

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	1.001e-07	1.000e-07	-7.000	-7.000	-0.000
OH-	2.232e-08	2.231e-08	-7.651	-7.651	-0.000
H2O	5.551e+01	1.000e+00	1.744	0.000	0.000
H(0)	1.713e-25				
H2	8.567e-26	8.567e-26	-25.067	-25.067	0.000
O(0)	0.000e+00				
O2	0.000e+00	0.000e+00	-48.428	-48.428	0.000

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
H2(g)	-22.00	-25.07	-3.07	H2
H2O(g)	-2.01	0.00	2.01	H2O
O2(g)	-45.69	-48.43	-2.74	O2

Beginning of batch-reaction calculations.

Reaction step 1.

Using solution 2.

Using pure phase assemblage 1.

-----Phase assemblage-----

Phase	SI	Moles in assemblage		log KT	Initial	Final	Delta
			log IAP				
CO2(g)	-3.48		-4.70	-1.22	1.000e+01	1.000e+01	-2.227e-05

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
C	2,23E-02	2,23E-02

-----Description of solution-----

pH	=	5.592	Charge balance
pe	=	0.228	Adjusted to redox equilibrium
Activity of water	=	1.000	
Ionic strength	=	2.524e-06	
Mass of water (kg)	=	1.000e+00	
Total alkalinity (eq/kg)	=	-7.773e-08	
Total CO2 (mol/kg)	=	2.227e-05	
Temperature (deg C)	=	7.000	
Electrical balance (eq)	=	7.773e-08	
percent error, 100*(Cat- An)/(Cat+ An)	=	1.54	
Iterations	=	12	
Total H	=	1.110124e+02	
Total O	=	5.550626e+01	

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	2.563e-06	2.558e-06	-5.591	-5.592	-0.001
OH-	8.737e-10	8.721e-10	-9.059	-9.059	-0.001
H2O	5.551e+01	1.000e+00	1.744	-0.000	0.000
C(-4)	4.541e-25				
CH4	4.541e-25	4.541e-25	-24.343	-24.343	0.000
C(4)	2.227e-05				
CO2	1.978e-05	1.978e-05	-4.704	-4.704	0.000
HCO3-	2.484e-06	2.479e-06	-5.605	-5.606	-0.001
CO3-2	2.902e-11	2.881e-11	-10.537	-10.540	-0.003
H(0)	3.917e-15				
H2	1.958e-15	1.958e-15	-14.708	-14.708	0.000
O(0)	0.000e+00				
O2	0.000e+00	0.000e+00	-69.146	-69.146	0.000

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
CH4(g)	-21.64	-24.34	-2.70	CH4
CO2(g)	-3.48	-4.70	-1.22	CO2
H2(g)	-11.64	-14.71	-3.07	H2
H2O(g)	-2.01	-0.00	2.01	H2O
O2(g)	-66.41	-69.15	-2.74	O2

End of simulation.

Reading input data for simulation 3.

Title Mischung
Mix 1

1
0.70
2
0.30

Save Solution 3
End

Beginning of batch-reaction calculations.

Reaction step 1.

Using mix 1.

Mixture 1.

7.000e-01 Solution 1
3.000e-01 Solution 2 Solution after simulation 2.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
As	5.611e-08	5.611e-08
C	6.414e-03	6.414e-03

Ca	1.176e-03	1.176e-03
Cl	2.391e-04	2.391e-04
F	8.851e-06	8.851e-06
Fe	8.406e-06	8.406e-06
K	1.362e-04	1.362e-04
Mg	2.435e-03	2.435e-03
Mn	3.188e-05	3.188e-05
Na	9.509e-04	9.509e-04
S	1.145e-03	1.145e-03
Zn	3.108e-07	3.108e-07

-----Description of solution-----

pH	=	7.124	Charge balance
pe	=	1.902	Adjusted to redox equilibrium
Activity of water	=	1.000	
Ionic strength	=	1.179e-02	
Mass of water (kg)	=	1.000e+00	
Total alkalinity (eq/kg)	=	5.475e-03	
Total CO2 (mol/kg)	=	6.414e-03	
Temperature (deg C)	=	14.420	
Electrical balance (eq)	=	3.786e-04	
percent error, 100*(Cat- [An])/([Cat+[An]])	=	2.49	
Iterations	=	7	
Total H	=	1.110179e+02	
Total O	=	5.552909e+01	

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log Gamma
H+	8.260e-08	7.512e-08	-7.083	-7.124	-0.041
OH-	6.369e-08	5.712e-08	-7.196	-7.243	-0.047
H2O	5.551e+01	9.998e-01	1.744	-0.000	0.000
As(3)	3.888e-11				
H3AsO3	3.861e-11	3.872e-11	-10.413	-10.412	0.001
H2AsO3-	2.703e-13	2.425e-13	-12.568	-12.615	-0.047
H4AsO3+	1.607e-18	1.441e-18	-17.794	-17.841	-0.047
HAsO3-2	6.202e-21	4.013e-21	-20.207	-20.397	-0.189
AsO3-3	1.949e-29	7.320e-30	-28.710	-29.136	-0.425
AsS(OH)(HS)					
-	0.000e+00	0.000e+00	-93.940	-93.987	-0.047
As3S4(HS)2-	0.000e+00	0.000e+00	-277.962	-278.009	-0.047
As(5)	5.607e-08				
HAsO4-2	3.078e-08	1.991e-08	-7.512	-7.701	-0.189
H2AsO4-	2.529e-08	2.268e-08	-7.597	-7.644	-0.047
AsO4-3	1.206e-12	4.530e-13	-11.918	-12.344	-0.425
H3AsO4	3.053e-13	3.061e-13	-12.515	-12.514	0.001
C(-4)	0.000e+00				
CH4	0.000e+00	0.000e+00	-49.374	-49.373	0.001
C(4)	6.414e-03				
HCO3-	5.315e-03	4.785e-03	-2.275	-2.320	-0.046
CO2	9.508e-04	9.534e-04	-3.022	-3.021	0.001
MgHCO3+	8.738e-05	7.837e-05	-4.059	-4.106	-0.047
CaHCO3+	3.868e-05	3.470e-05	-4.412	-4.460	-0.047
MnHCO3+	6.610e-06	5.929e-06	-5.180	-5.227	-0.047
CO3-2	3.561e-06	2.339e-06	-5.448	-5.631	-0.182
MgCO3	2.743e-06	2.751e-06	-5.562	-5.561	0.001
MnCO3	2.577e-06	2.584e-06	-5.589	-5.588	0.001
CaCO3	2.302e-06	2.308e-06	-5.638	-5.637	0.001

NaHCO ₃	2.279e-06	2.286e-06	-5.642	-5.641	0.001
FeHCO ₃ ⁺	2.015e-06	1.807e-06	-5.696	-5.743	-0.047
FeCO ₃	2.114e-07	2.120e-07	-6.675	-6.674	0.001
ZnHCO ₃ ⁺	7.305e-08	6.551e-08	-7.136	-7.184	-0.047
ZnCO ₃	5.063e-08	5.077e-08	-7.296	-7.294	0.001
NaCO ₃ ⁻	2.373e-08	2.128e-08	-7.625	-7.672	-0.047
Zn(CO ₃) ₂ -2	3.924e-09	2.539e-09	-8.406	-8.595	-0.189
Ca	1.176e-03				
Ca ²⁺	1.061e-03	6.965e-04	-2.974	-3.157	-0.183
CaSO ₄	7.460e-05	7.481e-05	-4.127	-4.126	0.001
CaHCO ₃ ⁺	3.868e-05	3.470e-05	-4.412	-4.460	-0.047
CaCO ₃	2.302e-06	2.308e-06	-5.638	-5.637	0.001
CaF ⁺	3.835e-08	3.440e-08	-7.416	-7.463	-0.047
CaOH ⁺	1.715e-09	1.538e-09	-8.766	-8.813	-0.047
CaHSO ₄ ⁺	3.262e-11	2.926e-11	-10.486	-10.534	-0.047
Cl	2.391e-04				
Cl ⁻	2.391e-04	2.140e-04	-3.621	-3.670	-0.048
MnCl ⁺	1.351e-08	1.212e-08	-7.869	-7.916	-0.047
FeCl ⁺	1.244e-09	1.116e-09	-8.905	-8.952	-0.047
ZnCl ⁺	4.306e-11	3.862e-11	-10.366	-10.413	-0.047
ZnOHCl	1.023e-11	1.026e-11	-10.990	-10.989	0.001
MnCl ₂	1.129e-12	1.132e-12	-11.947	-11.946	0.001
ZnCl ₂	8.259e-15	8.281e-15	-14.083	-14.082	0.001
MnCl ₃ ⁻	7.441e-17	6.674e-17	-16.128	-16.176	-0.047
ZnCl ₃ ⁻	2.076e-18	1.862e-18	-17.683	-17.730	-0.047
FeCl ⁺ 2	1.114e-19	7.206e-20	-18.953	-19.142	-0.189
ZnCl ₄ -2	2.829e-22	1.831e-22	-21.548	-21.737	-0.189
FeCl ₂ ⁺	1.087e-22	9.753e-23	-21.964	-22.011	-0.047
FeCl ₃	2.082e-27	2.087e-27	-26.682	-26.680	0.001
F	8.851e-06				
F ⁻	8.166e-06	7.324e-06	-5.088	-5.135	-0.047
MgF ⁺	6.412e-07	5.750e-07	-6.193	-6.240	-0.047
CaF ⁺	3.835e-08	3.440e-08	-7.416	-7.463	-0.047
NaF	3.570e-09	3.580e-09	-8.447	-8.446	0.001
MnF ⁺	7.855e-10	7.045e-10	-9.105	-9.152	-0.047
HF	6.831e-10	6.850e-10	-9.165	-9.164	0.001
FeF ⁺	3.085e-10	2.767e-10	-9.511	-9.558	-0.047
ZnF ⁺	1.093e-11	9.803e-12	-10.961	-11.009	-0.047
HF ₂ ⁻	1.949e-14	1.748e-14	-13.710	-13.757	-0.047
FeF ⁺ 2	2.395e-16	1.550e-16	-15.621	-15.810	-0.189
FeF ₂ ⁺	4.422e-17	3.966e-17	-16.354	-16.402	-0.047
H ₂ F ₂	1.770e-18	1.774e-18	-17.752	-17.751	0.001
FeF ₃	4.423e-19	4.435e-19	-18.354	-18.353	0.001
Fe(2)	8.401e-06				
Fe ²⁺	5.838e-06	3.778e-06	-5.234	-5.423	-0.189
FeHCO ₃ ⁺	2.015e-06	1.807e-06	-5.696	-5.743	-0.047
FeSO ₄	3.269e-07	3.278e-07	-6.486	-6.484	0.001
FeCO ₃	2.114e-07	2.120e-07	-6.675	-6.674	0.001
FeOH ⁺	7.810e-09	7.005e-09	-8.107	-8.155	-0.047
FeCl ⁺	1.244e-09	1.116e-09	-8.905	-8.952	-0.047
FeF ⁺	3.085e-10	2.767e-10	-9.511	-9.558	-0.047
Fe(OH) ₂	3.048e-13	3.056e-13	-12.516	-12.515	0.001
FeHSO ₄ ⁺	1.769e-13	1.587e-13	-12.752	-12.799	-0.047
Fe(OH) ₃ ⁻	1.513e-16	1.357e-16	-15.820	-15.867	-0.047
Fe(HS) ₂	0.000e+00	0.000e+00	-90.963	-90.962	0.001
Fe(HS) ₃ ⁻	0.000e+00	0.000e+00	-136.122	-136.169	-0.047
Fe(3)	4.517e-09				
Fe(OH) ₂ ⁺	2.305e-09	2.067e-09	-8.637	-8.685	-0.047
Fe(OH) ₃	2.192e-09	2.198e-09	-8.659	-8.658	0.001
Fe(OH) ₄ ⁻	1.914e-11	1.716e-11	-10.718	-10.765	-0.047
FeOH ⁺ 2	1.099e-12	7.112e-13	-11.959	-12.148	-0.189
FeF ⁺ 2	2.395e-16	1.550e-16	-15.621	-15.810	-0.189

FeSO4+	9.030e-17	8.098e-17	-16.044	-16.092	-0.047
FeF2+	4.422e-17	3.966e-17	-16.354	-16.402	-0.047
Fe+3	4.205e-17	1.579e-17	-16.376	-16.802	-0.425
Fe(SO4)2-	1.129e-18	1.012e-18	-17.947	-17.995	-0.047
FeF3	4.423e-19	4.435e-19	-18.354	-18.353	0.001
FeCl+2	1.114e-19	7.206e-20	-18.953	-19.142	-0.189
Fe2(OH)2+4	1.222e-22	2.142e-23	-21.913	-22.669	-0.756
FeCl2+	1.087e-22	9.753e-23	-21.964	-22.011	-0.047
FeHSO4+2	2.575e-23	1.666e-23	-22.589	-22.778	-0.189
FeCl3	2.082e-27	2.087e-27	-26.682	-26.680	0.001
Fe3(OH)4+5	3.868e-28	2.546e-29	-27.412	-28.594	-1.182
H(0)	1.395e-21				
H2	6.975e-22	6.994e-22	-21.156	-21.155	0.001
K	1.362e-04				
K+	1.357e-04	1.215e-04	-3.867	-3.916	-0.048
KSO4-	4.687e-07	4.203e-07	-6.329	-6.376	-0.047
Mg	2.435e-03				
Mg+2	2.192e-03	1.450e-03	-2.659	-2.839	-0.180
MgSO4	1.524e-04	1.528e-04	-3.817	-3.816	0.001
MgHCO3+	8.738e-05	7.837e-05	-4.059	-4.106	-0.047
MgCO3	2.743e-06	2.751e-06	-5.562	-5.561	0.001
MgF+	6.412e-07	5.750e-07	-6.193	-6.240	-0.047
MgOH+	2.901e-08	2.601e-08	-7.538	-7.585	-0.047
Mn(2)	3.188e-05				
Mn+2	2.149e-05	1.390e-05	-4.668	-4.857	-0.189
MnHCO3+	6.610e-06	5.929e-06	-5.180	-5.227	-0.047
MnCO3	2.577e-06	2.584e-06	-5.589	-5.588	0.001
MnSO4	1.193e-06	1.196e-06	-5.923	-5.922	0.001
MnCl+	1.351e-08	1.212e-08	-7.869	-7.916	-0.047
MnOH+	2.169e-09	1.945e-09	-8.664	-8.711	-0.047
MnF+	7.855e-10	7.045e-10	-9.105	-9.152	-0.047
MnCl2	1.129e-12	1.132e-12	-11.947	-11.946	0.001
MnCl3-	7.441e-17	6.674e-17	-16.128	-16.176	-0.047
Mn(OH)3-	5.792e-19	5.194e-19	-18.237	-18.284	-0.047
Mn(3)	1.840e-29				
Mn+3	1.840e-29	6.910e-30	-28.735	-29.161	-0.425
Mn(6)	0.000e+00				
MnO4-2	0.000e+00	0.000e+00	-62.551	-62.740	-0.189
Mn(7)	0.000e+00				
MnO4-	0.000e+00	0.000e+00	-70.892	-70.940	-0.047
Na	9.509e-04				
Na+	9.459e-04	8.494e-04	-3.024	-3.071	-0.047
NaSO4-	2.641e-06	2.368e-06	-5.578	-5.626	-0.047
NaHCO3	2.279e-06	2.286e-06	-5.642	-5.641	0.001
NaCO3-	2.373e-08	2.128e-08	-7.625	-7.672	-0.047
NaF	3.570e-09	3.580e-09	-8.447	-8.446	0.001
O(0)	0.000e+00				
O2	0.000e+00	0.000e+00	-53.611	-53.610	0.001
S(-2)	0.000e+00				
HS-	0.000e+00	0.000e+00	-47.197	-47.244	-0.047
H2S	0.000e+00	0.000e+00	-47.276	-47.275	0.001
S5-2	0.000e+00	0.000e+00	-49.813	-49.966	-0.153
S6-2	0.000e+00	0.000e+00	-49.856	-50.001	-0.145
S4-2	0.000e+00	0.000e+00	-50.050	-50.211	-0.161
S-2	0.000e+00	0.000e+00	-53.175	-53.364	-0.189
S3-2	0.000e+00	0.000e+00	-53.513	-53.683	-0.169
S2-2	0.000e+00	0.000e+00	-54.779	-54.956	-0.177
Zn(HS)2	0.000e+00	0.000e+00	-86.514	-86.512	0.001
Fe(HS)2	0.000e+00	0.000e+00	-90.963	-90.962	0.001
AsS(OH)(HS)					
-	0.000e+00	0.000e+00	-93.940	-93.987	-0.047
Zn(HS)3-	0.000e+00	0.000e+00	-132.549	-132.597	-0.047

Fe(HS)3-	0.000e+00	0.000e+00	-136.122	-136.169	-0.047
As3S4(HS)2-	0.000e+00	0.000e+00	-277.962	-278.009	-0.047
S(6)	1.145e-03				
SO4-2	9.135e-04	5.964e-04	-3.039	-3.224	-0.185
MgSO4	1.524e-04	1.528e-04	-3.817	-3.816	0.001
CaSO4	7.460e-05	7.481e-05	-4.127	-4.126	0.001
NaSO4-	2.641e-06	2.368e-06	-5.578	-5.626	-0.047
MnSO4	1.193e-06	1.196e-06	-5.923	-5.922	0.001
KSO4-	4.687e-07	4.203e-07	-6.329	-6.376	-0.047
FeSO4	3.269e-07	3.278e-07	-6.486	-6.484	0.001
ZnSO4	1.394e-08	1.397e-08	-7.856	-7.855	0.001
HSO4-	3.896e-09	3.494e-09	-8.409	-8.457	-0.047
Zn(SO4)2-2	1.139e-10	7.371e-11	-9.943	-10.132	-0.189
CaHSO4+	3.262e-11	2.926e-11	-10.486	-10.534	-0.047
FeHSO4+	1.769e-13	1.587e-13	-12.752	-12.799	-0.047
FeSO4+	9.030e-17	8.098e-17	-16.044	-16.092	-0.047
Fe(SO4)2-	1.129e-18	1.012e-18	-17.947	-17.995	-0.047
FeHSO4+2	2.575e-23	1.666e-23	-22.589	-22.778	-0.189
Zn	3.108e-07				
Zn+2	1.681e-07	1.088e-07	-6.774	-6.964	-0.189
ZnHCO3+	7.305e-08	6.551e-08	-7.136	-7.184	-0.047
ZnCO3	5.063e-08	5.077e-08	-7.296	-7.294	0.001
ZnSO4	1.394e-08	1.397e-08	-7.856	-7.855	0.001
Zn(CO3)2-2	3.924e-09	2.539e-09	-8.406	-8.595	-0.189
ZnOH+	7.701e-10	6.907e-10	-9.113	-9.161	-0.047
Zn(OH)2	2.419e-10	2.425e-10	-9.616	-9.615	0.001
Zn(SO4)2-2	1.139e-10	7.371e-11	-9.943	-10.132	-0.189
ZnCl+	4.306e-11	3.862e-11	-10.366	-10.413	-0.047
ZnF+	1.093e-11	9.803e-12	-10.961	-11.009	-0.047
ZnOHCl	1.023e-11	1.026e-11	-10.990	-10.989	0.001
Zn(OH)3-	1.138e-14	1.021e-14	-13.944	-13.991	-0.047
ZnCl2	8.259e-15	8.281e-15	-14.083	-14.082	0.001
ZnCl3-	2.076e-18	1.862e-18	-17.683	-17.730	-0.047
Zn(OH)4-2	3.327e-20	2.153e-20	-19.478	-19.667	-0.189
ZnCl4-2	2.829e-22	1.831e-22	-21.548	-21.737	-0.189
Zn(HS)2	0.000e+00	0.000e+00	-86.514	-86.512	0.001
Zn(HS)3-	0.000e+00	0.000e+00	-132.549	-132.597	-0.047

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-2.05	-6.38	-4.33	CaSO4
Aragonite	-0.51	-8.79	-8.28	CaCO3
Arsenolite	-19.25	-20.82	-1.57	As2O3
Artinite	-7.44	2.94	10.38	MgCO3:Mg(OH)2:3H2O
As2O5(cr)	-33.46	-25.03	8.43	As2O5
As2S3(am)	-137.46	-183.93	-46.47	As2S3
As_native	-24.22	-37.49	-13.27	As
Bianchite	-8.43	-10.19	-1.76	ZnSO4:6H2O
Birnessite	-16.16	27.44	43.60	MnO2
Bixbyite	-15.38	-15.58	-0.20	Mn2O3
Brucite	-6.16	11.41	17.57	Mg(OH)2
Ca3(AsO4)2:4w	-15.25	-34.16	-18.90	Ca3(AsO4)2:4H2O
Calcite	-0.36	-8.79	-8.43	CaCO3
CH4(g)	-46.60	-49.37	-2.77	CH4
Claudetite	-19.30	-20.82	-1.52	As2O3
CO2(g)	-1.69	-3.02	-1.33	CO2
Dolomite	-0.42	-17.26	-16.84	CaMg(CO3)2
Dolomite(d)	-1.02	-17.26	-16.24	CaMg(CO3)2
Epsomite	-3.85	-6.06	-2.22	MgSO4:7H2O
Fe(OH)2.7Cl0.3	4.37	1.33	-3.04	Fe(OH)2.7Cl0.3

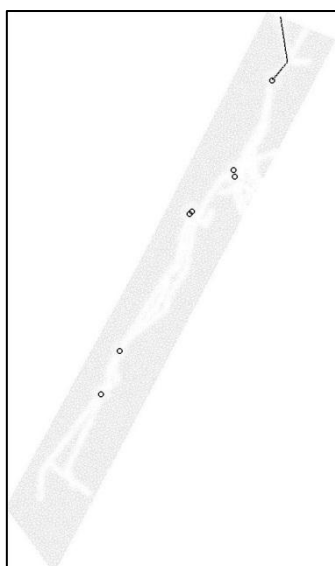
Fe(OH)3(a)	-0.32	4.57	4.89	Fe(OH)3
Fe3(OH)8	-2.26	17.97	20.22	Fe3(OH)8
FeS(ppt)	-41.63	-45.54	-3.92	FeS
Fluorite	-2.69	-13.43	-10.73	CaF2
Goethite	5.18	4.57	-0.61	FeOOH
Goslarite	-8.14	-10.19	-2.05	ZnSO4·7H2O
Greigite	-154.47	-199.51	-45.04	Fe3S4
Gypsum	-1.80	-6.38	-4.59	CaSO4·2H2O
H2(g)	-18.05	-21.16	-3.10	H2
H2O(g)	-1.79	-0.00	1.79	H2O
H2S(g)	-46.40	-47.27	-0.87	H2S
Halite	-8.30	-6.74	1.56	NaCl
Hausmannite	-17.52	46.23	63.74	Mn3O4
Hematite	12.32	9.14	-3.18	Fe2O3
Huntite	-4.92	-34.20	-29.27	CaMg3(CO3)4
Hydromagnesite	-15.12	-22.47	-7.35	Mg5(CO3)4(OH)2·4H2O (K0.77Na0.03H0.2)Fe3(SO4)2(OH)6
Jarosite(ss)	-8.81	-18.64	-9.83	KFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-K	-9.66	-18.02	-8.37	NaFe3(SO4)2(OH)6
Jarosite-Na	-12.88	-17.18	-4.30	(H3O)Fe3(SO4)2(OH)6
JarositeH	-17.33	-21.23	-3.90	FeS
Mackinawite	-40.89	-45.54	-4.65	Fe2O3
Maghemite	2.76	9.14	6.39	MgCO3
Magnesite	-0.61	-8.47	-7.86	Fe3O4
Magnetite	12.87	17.97	5.10	MnOOH
Manganite	-6.92	18.42	25.34	FeSO4·7H2O
Melanterite	-6.30	-8.65	-2.35	Na2SO4·10H2O
Mirabilite	-7.74	-9.37	-1.63	Mn2(SO4)3
Mn2(SO4)3	-63.34	-67.99	-4.66	Mn3(AsO4)2·8H2O
Mn3(AsO4)2·8H2	O -10.55	-39.26	-28.71	MnCl2·4H2O
MnCl2·4H2O	-14.44	-12.20	2.24	MnS
MnS(Green)	-48.93	-44.98	3.96	MnSO4
MnSO4	-11.17	-8.08	3.09	NaHCO3
Nahcolite	-4.74	-5.39	-0.65	Na2CO3·10H2O
Natron	-10.04	-11.77	-1.74	MgCO3·3H2O
Nesquehonite	-3.01	-8.47	-5.46	MnO2
Nsutite	-15.12	27.44	42.56	O2
O2(g)	-50.80	-53.61	-2.81	As2S3
Orpiment	-135.93	-183.93	-48.00	Ca(OH)2
Portlandite	-12.54	11.09	23.64	FeS2
Pyrite	-63.08	-81.86	-18.78	Mn(OH)2
Pyrochroite	-5.81	9.39	15.20	MnO2
Pyrolusite	-15.69	27.44	43.14	AsS
Realgar	-53.03	-73.81	-20.78	MnCO3
Rhodochrosite	0.60	-10.49	-11.09	MnCO3
Rhodochrosite(d)	-0.1	0 -10.49	-10.39	FeAsO4·2H2O
Scorodite	-8.90	-29.15	-20.25	FeCO3
Siderite	-0.23	-11.05	-10.82	FeCO3
Siderite(d)(3)	-0.60	-11.05	-10.45	FeCO3
Smithsonite	-2.71	-12.59	-9.88	ZnCO3
Sphalerite	-35.24	-47.08	-11.84	ZnS
Sulfur	-34.32	-49.56	-15.24	S
Thenardite	-9.20	-9.37	-0.16	Na2SO4
Thermonatrite	-11.97	-11.77	0.20	Na2CO3·H2O
Trona	-16.85	-17.16	-0.31	NaHCO3:Na2CO3:2H2O
Wurtzite	-37.27	-47.08	-9.82	ZnS
Zincite(c)	-4.44	7.28	11.73	ZnO
Zincosite	-13.72	-10.19	3.53	ZnSO4
Zn(OH)2-a	-5.17	7.28	12.45	Zn(OH)2
Zn(OH)2-b	-4.47	7.28	11.75	Zn(OH)2
Zn(OH)2-c	-4.92	7.28	12.20	Zn(OH)2
Zn(OH)2-e	-4.22	7.28	11.50	Zn(OH)2

Zn(OH)2-g	-4.43	7.28	11.71	Zn(OH)2
Zn2(OH)2SO4	-10.40	-2.90	7.50	Zn2(OH)2SO4
Zn2(OH)3Cl	-11.42	3.78	15.20	Zn2(OH)3Cl
Zn3(AsO4)2:2.5	w -18.03	-45.58	-27.55	Zn3(AsO4)2:2.5H2O
Zn3O(SO4)2	-33.78	-13.09	20.69	ZnO:2ZnSO4
Zn4(OH)6SO4	-16.73	11.67	28.40	Zn4(OH)6SO4
Zn5(OH)8Cl2	-23.66	14.84	38.50	Zn5(OH)8Cl2
ZnCl2	-21.80	-14.30	7.50	ZnCl2
ZnCO3:H2O	-2.33	-12.59	-10.26	ZnCO3:H2O
ZnF2	-16.07	-17.23	-1.17	ZnF2
ZnMetal	-37.52	-10.77	26.75	Zn
ZnO(a)	-4.03	7.28	11.31	ZnO
ZnS(a)	-37.93	-47.08	-9.15	ZnS
ZnSO4:H2O	-9.91	-10.19	-0.28	ZnSO4:H2O

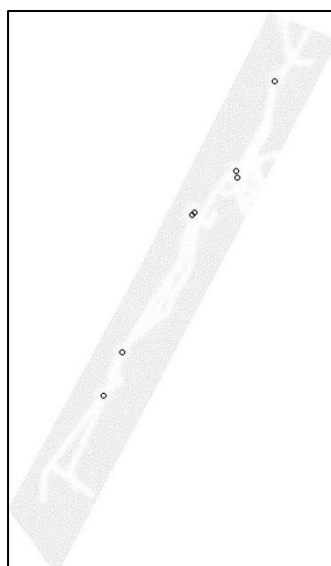
End of simulation.

12.4 Anhang D

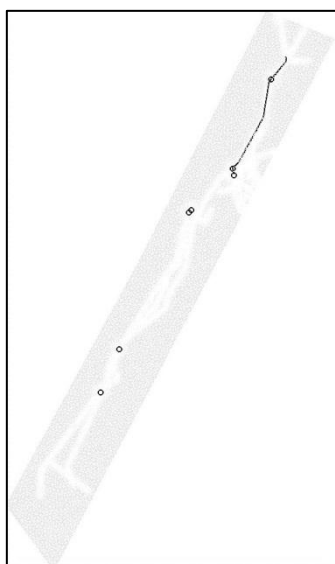
Übersicht über die Position der als DFE modellierten Sohlen auf den verschiedenen Slices



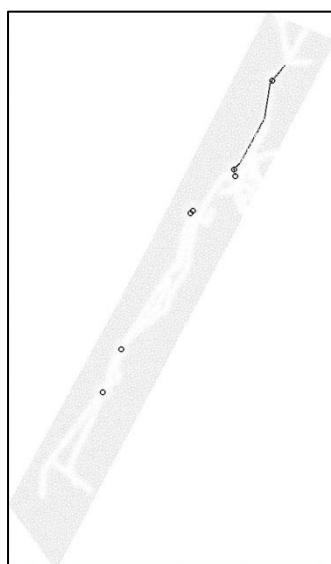
Slice 01



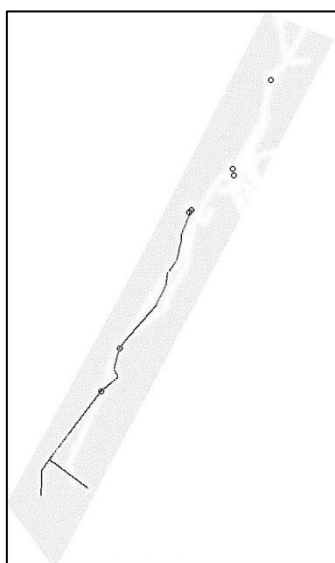
Slice 02



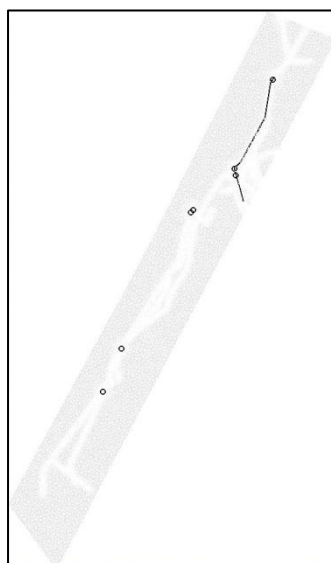
Slice 03



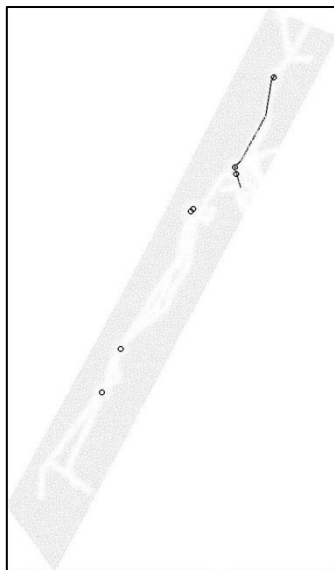
Slice 04



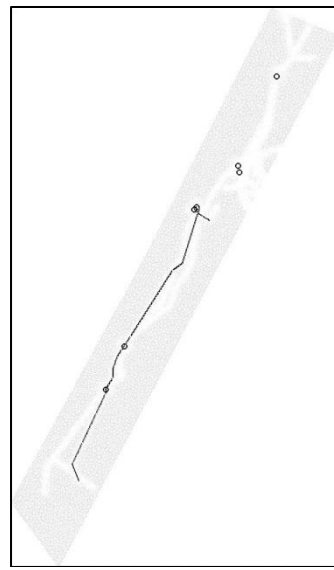
Slice 05



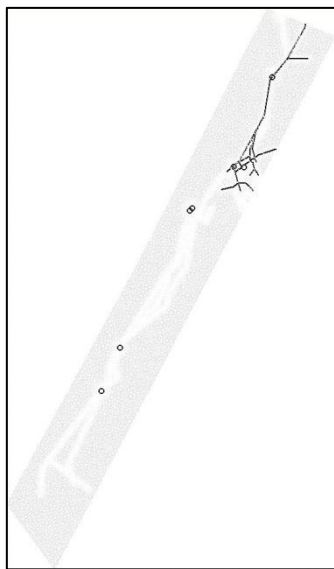
Slice 06



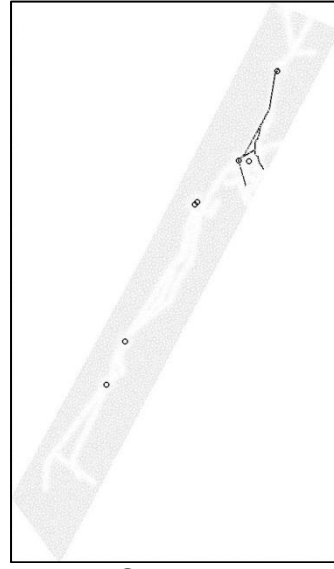
Slice 07



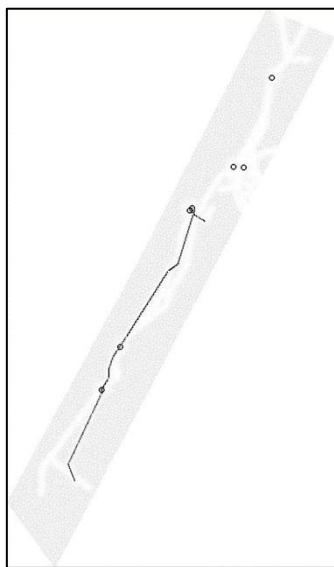
Slice 08



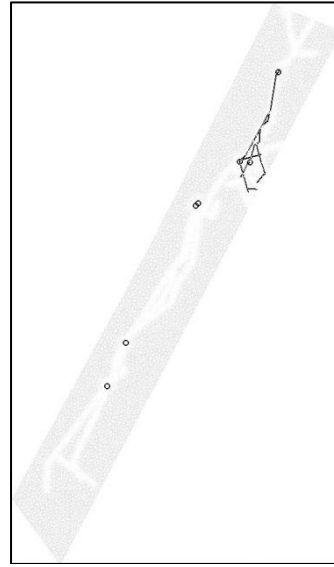
Slice 09



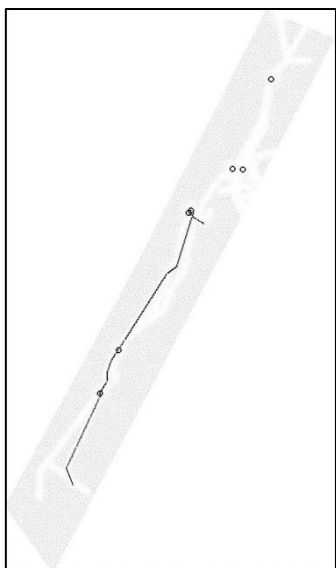
Slice 10



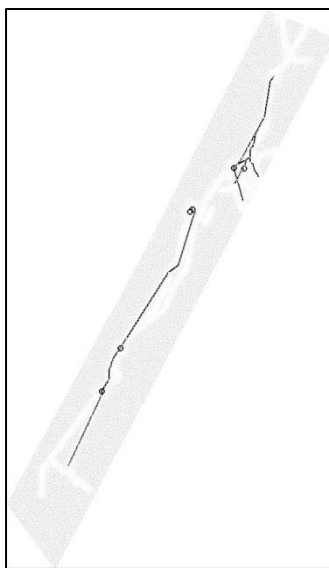
Slice 11



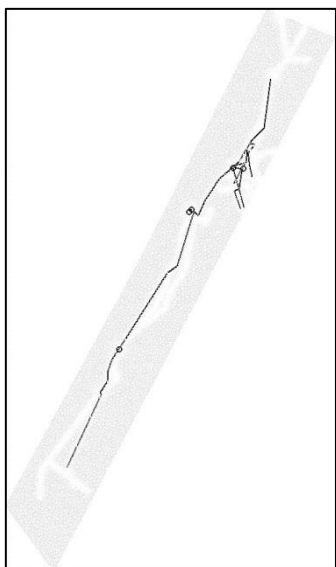
Slice 12



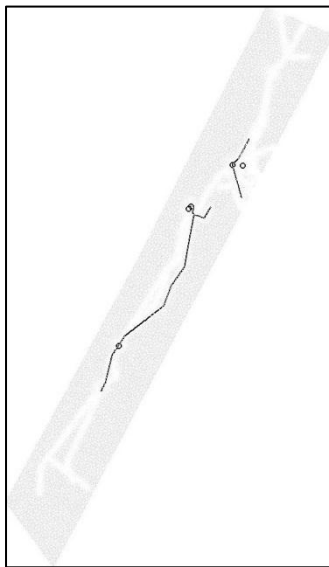
Slice 13



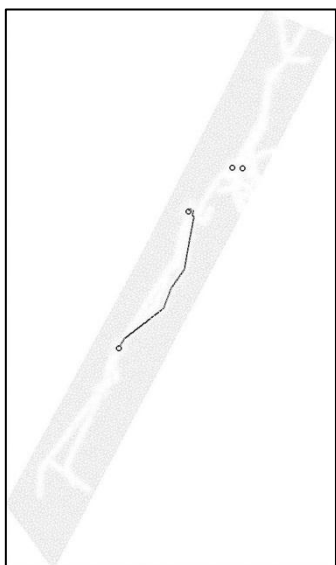
Slice 14



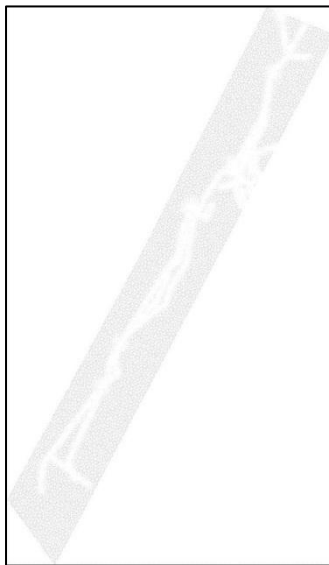
Slice 15



Slice 16



Slice 17



Slice 18 / 19 / 20