

Literatur

- Abbott MB (1966) An introduction to the method of characteristics.-American Elsevier; New York
- Allison JD, Brown DS, Novo-Gradac KJ (1991) MINTEQA2, A geochemical assessment database and test cases for environmental systems: Vers.3.0 user's manual.-Report EPA / 600 / 3-91 / -21. Athens, GA: U S EPA
- Alloway, Ayres (1996) Schadstoffe in der Umwelt.-Spektrum Akademischer Verlag; Heidelberg
- Appelo CAJ, Postma D (1994) Geochemistry, groundwater and pollution.- Balkema; Rotterdam
- Appelo CAJ, Beekman HE and Oosterbaan AWA (1984) Hydrochemistry of springs from dolomite reefs in the southern Alps of Northern Italy: International Association of Hydrology.- Scientific Publication 150: pp 125-138
- Ball JW, Nordstrom DK (1991) User's Manual for WATEQ4F -US Geological Survey Open-File Report pp 91-183
- Bernhardt H, Berth P, Blomeyer KF, Eberle SH, Ernst W, Förstner U, Hamm A, Janicke W, Kandler J, Kanowski S, Kleiser HH, Koppe P, Pogenorth HJ, Reichert JK, Stehfest H (1984) NTA - Studie über die aquatische Verträglichkeit von Nitrilotriacetat (NTA).- Verlag Hans Richarz, Sankt Augustin
- Bohn HL, McNeak BL, O'Connor GA (1979) Soil Chemistry.-Wiley-Interscience; New York
- Bunzl K, Schmidt W, Sansoni B (1976) Kinetics of ion exchange in soil organic matter. IV Adsorption and desorption of Pb^{2+} , Cu^{2+} , Cd^{2+} , Zn^{2+} and Ca^{2+} by peat.-J Soil Sci., 17: 32-41; Oxford
- Cash JR, Karp AH (1990) A Variable Order Runge-Kutta Method for Initial Value Problems with Rapidly Varying Right-Hand Sides: Transactions on Mathematical Software 16, 3: pp 201-222
- Chukhlantsev VG (1956) Solubility products of arsenates.- Journal of Inorganic Chemistry (USSR) 1: pp 1975-1982
- Davies CW (1938) The extent of dissociation of salts in water. VIII. An equation for the mean ionic activity coefficient of an electrolyte in water, and a revision of the dissociation constant of some sulfates.- Jour.Chem.Soc.: pp.2093-2098
- Davies CW (1962) Ion Association.- Butterwoths, London: pp.190
- Davis J, Kent DB (1990) Surface complexation modeling in aqueous geochemistry. In: Hochella M F, White A F (eds) Mineral-Water Interface Geochemistry.-Mineralogical Society of America, Reviews in Mineralogy 23, 5.; Washington D C
- Debye P, Hückel E (1923) Zur Theorie der Elektrolyte.- Phys.Z.; 24: pp. 185-206
- Drever JI (1997) The Geochemistry of natural waters. Surface and groundwater environments, 3rd edition.-Prentice Hall; New Jersey
- DVWK (1990) Methodensammlung zur Auswertung und Darstellung von Grundwasserbeschaffenhheitsdaten.- Verlag Paul Parey; 89
- Dzombak DA, Morel FMM (1990) Surface complexation modeling - Hydrous ferric oxide.- John Wiley & Sons; New York
- Emsley J (1992) The Elements, 2nd edition.-Oxford University Press; New York
- Faure G (1991) Inorganic chemistry - a comprehensive textbook for geology students.- Macmillan Publishing Company New York . Collier Macmillan Canada Toronto - Maxwell Macmillan International New York - Oxford - Singapore - Sydney
- Fehlberg E (1969) Klassische Runge-Kutta-Formeln fünfter und siebenter Ordnung mit Schrittweiten-Kontrolle: Computing 4: pp 93-106
- Fuger J, Khodakovskiy II, Sergejeva EJ, Medvedey VA, Navratil JD (1992) The Chemical

- Thermodynamics of Actinide Ions and Compounds.-Part 12, IAEA; Vienna
- Gaines GL, Thomas HC (1953) Adsorption studies on clay minerals. II A formulation of the thermodynamics of exchange adsorption: *Journal of Chemical Physics*, 21, pp 714-718
- Gapon EN (1933) Theory of exchange adsorption [russisch].-*J.Gen.Chem. (USSR)*, 3: pp 667-669
- Garrels RM, Christ CL (1965) *Solutions, Minerals and Equilibria*.-Jones and Barlett Publishers; Boston [Neuaufgabe: 1990]
- Gildseth W, Habenschuss A, Spedding FH (1972) *J Chem. Eng. Data*, 17: pp 402-409.
- Grenthe I, Fuger J, Konings RJM, Lemire RI, Muller AB, Nguyen-Trung C, Wanner H (1992) *The Chemical Thermodynamics of Uranium*.-NEA/OECD; Paris
- Gueddari M, Mannin C, Perret D, Fritz B, Tardy Y (1983) Geochemistry of brines of the Chottel Jerid in southern Tunisia. Application of Pitzer's equations.-*Chemical Geology*, 39: pp 165-178
- Güntelberg E (1926) Untersuchungen über Ioneninteraktion.-*Z. Phys. Chem.* 123: pp 199-247
- Harvie CE, Weare JH (1980) The prediction of mineral solubilities in natural waters. The Na-K-Mg-Ca-Cl-SO₄-H₂O system from zero to high concentrations at 25°C - *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 44: pp 981-997
- Hem JD (1985) Study and interpretation of the chemical characteristics of natural waters.- *U S Geol. Surv. Water-Supply Paper* 2254, 3. Aufl.
- Holleman W, Wiberg E (1976) *Lehrbuch der Anorganischen Chemie*.-DeGruyter Verlag; Berlin
- Höltling B (1996) *Hydrogeologie*.-5.Aufl., Enke
- Johnson JW, Oelkers EH & Helgeson HC (1992) SUPCRT92: A software package for calculating the standard molal thermodynamic properties of minerals, gases, aqueous species, and reactions from 1 to 5000 bar and 0 to 1000 C - *Computers and Geosciences* 18: pp 899-947
- Käss W (1984) Redoxmessungen im Grundwasser (II).-*Dt. gewässerkd. Mitt.* 28: pp 25-27
- Kharaka YK, Gunter WD, Aggarwal PK, Perkins EH, Debraal JD (1988) SOLMINEQ.88 - A Computer Program for Geochemical Modeling of Water-Rock Interactions.-*Water-Resources Investigation Reports* 88-4227, 420 S.
- Kinzelbach W (1983) Analytische Lösungen der Schadstofftransportgleichung und ihre Anwendung auf Schadensfälle mit flüchtigen Chlorkohlenwasserstoffen.-*Mitt. Inst. f. Wasserbau, Uni Stuttgart* 54: pp 115-200
- Kinzelbach W (1987) *Numerische Methoden zur Modellierung des Transportes von Schadstoffen im Grundwasser*.-Oldenbourg Verlag; München-Wien
- Konikow LF, Bredehoeft JD (1978) Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in groundwater.-*Techniques of Water-Resource Investigations*, TWI 7-C2, U S Geol. Survey; Washington D C
- Kovarik K (2000) *Numerical models in groundwater pollution*.-Springer; Berlin Heidelberg
- Lau LK, Kaufman WJ, Todd DK (1959) Dispersion of a water tracer in radial laminar flow through homogenous porous media.-*Hydraulic lab., University of California; Berkeley*
- Langmuir D (1997) *Aqueous environmental geochemistry*.-Prentice Hall; New Jersey
- Meinrath G (1997) Neuere Erkenntnisse über geochemisch relevante Reaktionen des Urans. *Wissenschaftliche Mitteilungen des Institutes für Geologie der TU Bergakademie Freiberg* Bd.4.; pp 150
- Merkel B (1992) *Modellierung der Verwitterung carbonatischer Gesteine*.-*Berichte-Reports Geol.-Paläont. Inst. Univ. Kiel*, Nr. 55
- Merkel B, Sperling B (1996) *Hydrogeochemische Stoffsysteme, Teil I - DVWK-Schriften*, Bd. 110.; Kommissionsvertrieb Wirtschafts- und Verlagsgesellschaft Gas und Wasser mbH, Bonn
- Merkel B, Sperling B (1998) *Hydrogeochemische Stoffsysteme, Teil II - DVWK-Schriften*, Bd. 117.; Kommissionsvertrieb Wirtschafts- und Verlagsgesellschaft Gas und Wasser mbH, Bonn
- Nordstrom DK, Plummer LN, Langmuir D, Busenberg E, May HM, Jones BF, Parkhurst DL (1990) *Revised Chemical Equilibrium for Major Water-Mineral Reactions and their Limitations*.-ACS Symposium Series
- Parkhurst DL, Appelo CAJ (1999) *User's guide to PHREEQC (Version 2) -- a computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse*

- geochemical calculations.- U S Geological Survey Water-Resources Investigations Report 99-4259: pp 312
- Parkhurst DL (1995) User's guide to PHREEQC - A computer program for speciation, reaction-path, advective-transport, and inverse geochemical calculations.- U S Geol.Survey Water Resources Inv. Rept. 95 - 4227
- Parkhurst DL, Plummer LN, Thorstenson DC (1980) PHREEQE - A computer program for geochemical calculations.-Rev.U S Geol.Survey Water Resources Inv. Rept. 80 - 96
- Pinder GF, Gray WG (1977) Finite element simulation in surface and subsurface hydrology.-Academic Press; New York
- Pitzer KS (1973) Thermodynamics of electrolytes. I Theoretical basis and general equations.-*Jour.of Physical Chemistry*, 77: pp 268-277
- Pitzer KS (1981) Chemistry and Geochemistry of Solutions at high T and P -In: RICKARD & WICKMANN, 295, V 13-14
- Planer-Friedrich B, Armienta MA, Merkel BJ (2001) Origin of arsenic in the groundwater of the Rioverde basin, Mexico; *Env Geol*, 40, 10: pp.1290-1298
- Plummer LN, Busenberg E (1982) The solubility of Calcite, Aragonite and Vaterite in CO₂-H₂O solutions between 0 and 90°C and an evaluation of the aqueous model for the system CaCO₃-CO₂-H₂O. *Geochimica Cosmochimica Acta* 46: pp 1011-1040
- Plummer LN, Wigley TML & Parkhurst DL (1978) The kinetics of calcite dissolution in CO₂-water systems at 5 to 60 C and 0.0 to 1.0 atm CO₂: *American Journal of Science* 278: pp 179-216
- Plummer LN, Parkhurst DL, Fleming GW, Dunkle SA (1988) A computer program incorporating Pitzer's equation for calculation of geochemical reactions in brines. U S Geol.Surv.Water Resour.Inv.Rep.88-4153
- Prickett TA, Naymik TG, Lonquist CG (1981) A „random walk“ solute transport model for selected groundwater quality evaluations. *Illinois State Water Survey Bulletin* 65
- Robins RG (1985) The solubility of barium arsenates: Sherritt's barium arsenate process.-*Metall.Trans.B* 16 B: pp 404-406
- Rösler HJ, Lange H (1972) *Geochemische Tabellen*.- VEB Deutscher Verlag f. Grundstoffindustrie: 674 [Neuauflagen 1975, 1981]
- Sauty JP (1980) An analysis of hydrodispersive transfer in aquifers. *Water Resources. Res.* 16, 1: pp 145-158
- Scheffer F, Schachtschabel P (1982) *Lehrbuch der Bodenkunde*, 11.Aufl.-Enke Verlag; Stuttgart
- Schnitzer M (1986) Binding of humic substances by soil mineral colloids. In: *Interactions of soil Minerals With Natural Organics and Microbes*. In: HUANG P M, SCHNITZER M (Eds).-*Soil. Sci. Soc. Am. Publ. No. 17*, Madison, WI
- Sigg L, Stumm W (1994) *Aquatische Chemie*.-B G Teubner Verlag; Stuttgart
- Silvester KS, Pitzer KS (1978) Thermodynamics of electrolytes. X. Enthalpy and the effect of temperature on the activity coefficients.-*Jour. of Solution Chemistry*, 7: pp 327-337
- Sparks DL (1986) *Soil Physical Chemistry*.- CRC Press Inc., Boca Raton; FL
- Stumm W, Morgan JJ (1996) *Aquatic Chemistry*, 3rd edition.-John Wiley & Sons; New York
- Truesdell AH, Jones BF (1974) WATEQ, a computer program for calculating chemical equilibria of natural waters.-U S Geol. Survey J Research 2: pp 233-48
- Umweltbundesamt (1988/89) *Daten zur Umwelt*.-Erich Schmidt Verlag; Berlin
- Van Cappellen P, Wang Y (1996) Cycling of iron and manganese in surface sediments: *American Journal of Science* 296: pp 197-243
- Van Gaans PFM (1989) A reconstructed, generalized and extended FORTRAN 77 Computer code and database format for the WATEQ aqueous chemical model for element speciation and mineral saturation, for the use on personal computers or mainframes.-*Computers & Geosciences*, 15, No.6.
- Van Genuchten MTh (1985) A general approach for modeling solute transport in structured soils: *IAH Memoirs*.- 17: pp 513-526
- Vanselow AP (1932) Equilibria of the base-exchange reactions of bentonites, permutites, soil colloids and zeolites.- *Soil Sci.* 33
- Wedepohl KH (Hrsg.) (1978) *Handbook of Geochemistry*.- Vol.II/2; Springer, Berlin-Heidelberg-New York

- Whitfield M (1975) An improved specific interaction model for seawater at 25°C and 1 atmosphere pressure.-*Mar. Chemical*, 3: pp 197-205
- Whitfield M (1979) The Extension of Chemical Models for Seawater to include Trace Components at 24 Degrees C and 1 atm Pressure.-*Geochimica et Cosmochimica Acta*, 39: pp 1545-1557
- Wolery TJ (1992a) EQ 3/6, A software package for geochemical modeling of aqueous systems: Package overview and installation guide (Ver.7.0).-UCRL - MA - 110662 Pt I Lawrence; Livermore Natl. Lab
- Wolery TJ (1992b) EQBNR, A computer program for geochemical aqueous speciation-solubility calculations: Theoretical manual, user's guide, and related documentation (Ver.7.0).-UCRL - MA - 110662 Pt I Lawrence; Livermore Natl. Lab

Sachverzeichnis

A

- Abbau organischer Substanz 149, 194
- Absorption 27
- Adsorption 27
- Advektion 65
- aktivierter Komplex 60
- Aktivierungsenergie 61
- Aktivität 9, 109
 - Aktivitätskoeffizient 9, 109
 - Berechnung des Aktivitätskoeffizienten 11
- AMD (acid mine drainage) 157
- Analysenfehler 104, 106, 143, 161, 181
- aquatische Spezies 1
- Aquifere mit doppelter Porosität 69, 158
- Arrhenius Gleichung 60
- Aufbereitung
 - durch Belüftung (Brunnenwasser) 145, 183
 - durch Belüftung (Quellwasser) 183
- Austauschkapazität 155
- Autoprotolyse 22

B

- BASIC-Programm 136
- begrenzende Mineralphase 25
- Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit 57

C

- Ca-EDTA-Komplex 144, 182
- Calcit
 - Calcit-Fällung und Dolomit-Lösung 128, 166
 - Lösung im offenen und geschlossenen System 128, 167
 - Lösung in Abhängigkeit von Temperatur und CO₂-Partialdruck 128, 165
 - Lösung in Abhängigkeit von Temperatur und Druck 7
 - zeitabhängige Lösung (Kinetik) 112
- Carbonat-Gerinne 157, 202
- Chelatkomplexe 40
- Chemisorption 27
- CO₂
 - Niederschlag unter dem Einfluß des Boden-CO₂ 131, 170
 - Partialdrücke im Boden 22, 132, 171
- constant-capacitance-Modell 37
- Coulomb'sche Kräfte 27
- Courant number 91
- Courant-Zahl 72

Crank-Nicholson Verfahren 72

D

Davies Gleichung 11
diffuse double layer Modell 37
Diffusion 65, 119
 Diffusionskoeffizient 67
 Diffusions-kontrollierte Lösung 56
Dispersion 65, 119, 199
 Dispersionskoeffizient 67
Dispersivität 72
Dolomitlösung 128, 166
doppelte Porosität 67, 69, 119, 158
Durchlässigkeit 65

E

EDTA 144, 182
EH-pH-Diagramme 46
 Einordnung natürlicher Wässer 49
 System Fe-O₂-H₂O 47, 137
 System Fe-O₂-H₂O-C 138, 175
 System Fe-O₂-H₂O-CO₂ 47
 System Fe-O₂-H₂O-S 138, 176
EH-Wert 41
 Abhängigkeit des Löslichkeitsproduktes vom \sim 23
 Berechnung des Redoxpotentials aus Teilpotentialen 107
Eisenoxide
 Eigenschaften als Ionenaustauscher 31
 Kationenaustauschkapazität 29
 Sorptionstärke für Schwermetalle 28
end member-Modell 27
Enthalpie 7, 75
Entropie 7
erweiterte Debye-Hückel-Gleichung 11
Evaporation 133, 172
EXCEL-Makro 136

F

Fällung 21
Fe(0)-Wände 147, 188
Fehlberg-Implementation 111
Fehlerabschätzung für den pH-Wert 93
Finite Differenzen 71
Finite Elemente 71
Folgereaktionen 59
fossiles Grundwasser 141, 179
freie Gibbs'sche Energie 7, 44
Freundlich Isotherme 34
Fugazitäts-Diagramme 50
funktionelle Gruppen 36

G

- Gaines-Thomas-Konvention 30
- Gapon Gleichung 30
- Gaslöslichkeit 20, 132, 170
- geschlossenes System 5, 128, 167
- Gibbs'sche freie Energie 7, 44
- Gibbs'sche Phasenregel 8
- Gips
 - Lösung bei 50% Sättigung 127
 - Lösung im Gleichgewicht (Grundwasser) 127, 163
 - Lösung in destilliertem Wasser 109
 - Temperaturabhängigkeit der Lösung (dest. Wasser) 127, 165
 - Temperaturabhängigkeit der Lösung (Grundwasser) 127, 164
- Gitter-Peclet-Zahl 72, 91
- Gleichgewichtskonstante 6, 21, 30, 45, 58, 59, 75, 89
 - ~n-Verfahren 78
- Gleichgewichtsreaktionen 1, 106, 109, 126, 161
- GOUY-CHAPMAN Theorie 37
- Grid-Peclet-Number 72, 91
- Grundwasser 126, 131, 135, 139, 144, 156, 159, 161, 170, 174, 179, 181, 182, 187
 - Einteilung natürlicher Grundwässer 52
- Grundwasserneubildung
 - ohne Berücksichtigung der Verdunstung 172
 - unter Berücksichtigung der Verdunstung 172

H

- Halbwertszeit 55, 58
- Halde 148
- harte Säuren 39
- Hauptelemente 1
- Henry
 - Gesetz 19
 - Konstanten 20
- Henry-Isotherme 34
- heterogene Reaktionen 5
- homogene Reaktionen 5
- Huminstoffe
 - Eigenschaften als Ionenaustauscher 31
 - Kationenaustauschkapazität 29
 - Sorptionstärke für Schwermetalle 28
- Hydrogeochemische Modellierungsprogramme
 - ChemSage 78
 - EQ 3/6 75, 80
 - Minteq 75
 - PhreeqC 75, 79
 - Basic 115
 - Beispiele 125
 - Struktur von PhreeqC2 94
 - Phreeqe 79
 - Vergleich PhreeqC - EQ 3/6 81
 - Wateq4F 75
- Hydrophobe/ hydrophile Stoffe 28

I

idealer Tracer 67, 120, 199
inkongruente Lösung 25, 166
In-situ leaching 158, 204
instationärer Zustand 5
inverse Modellierung 139, 179
Ionenaktivitätsprodukt 21, 23
Ionenaustausch 28
 Ionenaustauscher 31
 Ionenaustauschkapazität 28
 Kationenaustauschkapazität 29
Ionenbilanz 176
Ioneninteraktionstheorie 14
Ionenstärke 11, 14, 20, 28, 32, 46, 75, 93, 104, 106, 109, 161, 176
isoelektrischer Punkt 32
Isomorphie 32
Isotherme 34
Isotope 141, 180

K

Kalkaggressivität 183, 185
Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht 183
Karst
 ~höhlen 132, 171
 ~quelle 155, 200
 ~verwitterung 128, 134
Kationenaustausch 155
 ~kapazität 29
Kd 68
Kd-Konzept 35, 68
Kd-Wert 6, 34, 68
keywords 87, 97
 ADVECTION 119
 charge 96
 EQUILIBRIUM_PHASES 110, 149, 163, 164, 171, 192
 EXCHANGE 120, 131
 EXCHANGE_MASTER_SPECIES 89
 EXCHANGE_SPECIES 89
 GAS_PHASE 128
 INVERSE_MODELING 139
 KINETICS 111, 149, 155, 192, 200, 201, 202
 MIX 146, 177
 PHASES 89
 RATES 89, 111, 149, 155, 192, 200, 202
 REACTION 129, 132, 171, 182, 187, 188, 190
 SAVE_SOLUTION 138, 177, 191
 SELECTED_OUTPUT 105, 129, 136, 149, 174, 175, 177, 187, 192, 203
 SOLUTION_MASTER_SPECIES 88
 SOLUTION_SPECIES 88
 SURFACE_MASTER_SPECIES 89
 SURFACE_SPECIES 89
 TRANSPORT 119, 120, 121, 197, 200, 201
 USE_SOLUTION 138, 177, 191

USER_GRAPH 157, 202
K-Feldspatlösungskinetik 193
Kinetik 55, 89, 91, 111, 148, 190
 Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit 57
 Minerallösung 56
Kluft 156, 201
Kohlensäure-Aggressivität 144, 146
Kolloid
 kolloidgebundener Schadstofftransport 31
Komplexe 1
 außersphärische Komplexe 37, 39
 inersphärische Komplexe 37, 40
 Komplexbildung 38
 Komplexbildungskonstante 38
 Komplexbildungskonstanten verschiedener Hydroxid-, Carbonat- bzw. Sulfatkomplexe 40
konditionelle Konstante 6
Konsistenz 94
Kontamination 22, 38, 52
Konvektion 65
Kopräzipitation 25

L

Ladungsausgleich 143, 181
Langmuir Isotherme 35
Ligand 38
Löslichkeitsprodukt 6, 21, 23
 Abhängigkeit des LP vom Druck 22
 Abhängigkeit des LP vom EH 23
 Abhängigkeit des LP vom Partialdruck 22
 Abhängigkeit des LP von der Komplexbildung 23
 Abhängigkeit des LP von der Temperatur 22
Löslichkeitsprodukt kontrollierte Lösung 56
Lösung 21
Lysimeter 155, 199

M

Mac Innes-Konvention 9
Manganoxide
 Eigenschaften als Ionenaustauscher 31
 Kationenaustauschkapazität 29
 Sorptionstärke für Schwermetalle 28
Massenwirkungsgesetz 5, 9, 21, 30, 38, 109
Mathematische Beschreibung der Sorption 34
Matrixsorption 27
Meerwasser 95, 106, 143, 181
mehrzählige Liganden 40
Metallkationen
 vom Typ A 39
 vom Typ B 39
Methanol 147, 187
Methode der Charakteristiken 71, 73
Mineralneubildung 25
Mischen von Wässern 146, 185

- Mischmineral 25
- Monod
 - Monod-Gleichung 62
 - Monod-Rate 62
- multidentale Liganden 40

- N**
- Nebenelemente 2
- Niederschlag 131, 132, 139, 148, 150, 156, 170, 171
- Nitratreduktion mit Methanol 187
- Normalpotential 44
- Normalwasserstoffelektrode 41
- numerische Dispersion 72, 73, 91

- O**
- Oberflächen
 - ~komplexierung 35
 - ~ladungen 32
 - ~sorption 27
- offenes System 5, 128, 167
- Oszillationseffekte 72, 91
- Oxidation 41

- P**
- Parallelreaktionen 59
- Partialdruck 19
- Partialdruck-Diagramme 50
- Particle Tracking 71
- Pearson-Konzept 39
- Peclet-Zahl 72, 91
- pe-pH-Diagramme 46
 - Einordnung natürlicher Wässer 49
 - System Fe-O₂-H₂O 47, 137
 - System Fe-O₂-H₂O-C 138, 175
 - System Fe-O₂-H₂O-CO₂ 47
 - System Fe-O₂-H₂O-S 138, 176
- permanente Oberflächenladungen 32
- pE-Wert 45
- pH-Anhebung eines sauren Grubenwassers 157, 202
- pH-Anhebung mit Kalk 147, 189
- pHc-Wert 144
- PhreeqC 75
 - Basic innerhalb von PhreeqC2 115
 - Beispiele 125
 - Struktur von PhreeqC2 94
- pH-Wert 22
- Physisorption 27
- piston flow Modell 150
- Pitzer-Gleichung 14
- Point of Zero Charge 32
- Porosität 69, 119, 158
- Potential 64
- Prädominanz-Diagramme 46

Einordnung natürlicher Wässer 49
System Fe-O₂-H₂O 47, 137
System Fe-O₂-H₂O-C 138, 175
System Fe-O₂-H₂O-CO₂ 47
System Fe-O₂-H₂O-S 138, 176

Puffer

Aluminiumhydroxid-Puffer 170
Austauscher-Puffer 170
Carbonat-Puffer 170
Eisen-Hydroxid-Puffer 170
Mangan-Hydroxid-Puffer 170
Puffersysteme im Boden 131, 170
Redoxpuffer 51

Pyrit

Verwitterung (Gleichgewichtsmodellierung) 129, 168
Verwitterung (Kinetik) 148, 190
Verwitterungsrate 114

Q

Quarz-Feldspat-Lösung 148, 192
Quarzlösungskinetik 193
Quellwasser 140, 179

R

random walk 71, 73, 91

Reaktion

0.Ordnung 58
1.Ordnung 58, 69, 151, 159
2.Ordnung 58
3.Ordnung 58

Reaktionsgeschwindigkeit 58, 60

Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit 57

Reaktionskinetik 5

reaktive Wände

aus Calcit 147, 189
aus Dolomit 189
aus Fe(0) 147, 188
aus Magnesit 189

reaktiver Stofftransport 64, 73, 74, 119, 155, 199

Redox

~prozesse 41
~puffer 51
~reaktion 41
~sensitive Elemente 25, 43, 105, 149, 161, 194
Messung des Redoxpotentials 41
teilreduzierte Verhältnisse 52

Reduktion 41

relationale Datenbank 87

Retardation 65

S

Salzwasser-/Süßwasser-Interface 143, 181

Sanierung 147, 187

Sättigungsindex 23, 104, 108, 172, 183, 191, 194
Säulenversuch 119
Säuren
 harte ~ 39
 weiche ~ 39
saurer Grubenwasser 138, 147, 155, 157, 189, 199, 202
Schwefel
 ~quelle 145, 183
 Abscheidung an heißen Schwefel-Quellen 131, 170
Selektivitätskoeffizient 6, 30, 155, 199
Sickerwasser 148, 190
site mixing-Modell 27
solid solutions (Mischminerale) 25
Sorption 27
 Sorptionisothermen 34
Speziesverteilung 104, 107, 145, 161, 183, 190
Spurenelemente 2
Stabilitätskonstante 6
Stalagtiten 132, 171
stationärer Zustand 5
Steinerne Rinne 155, 200
Strömungsmodell 64

T

Thermalwasser 131, 171
Thermodynamische Datenbanken 84, 91
 Konsistenz 94
thermodynamische Gleichgewichtskonstante 6
Tonminerale
 Eigenschaften als Ionenaustauscher 31
 Kationenaustauschkapazität 29, 32
 Sorptionstärke für Schwermetalle 28
 Tonmineralneubildung 25
Transport 64, 119, 155, 199
 ~modelle 65
 ~verhältnisse (ideal) 67
 ~verhältnisse (real) 67
 allgemeine Transportgleichung 34, 67, 68
 Dispersion und Oszillation bei der Lösung der ~gleichung 73
 numerische Methoden der Modellierung 71
Trinkwasser 128, 145
 ~verordnung 144, 146, 185
 ~versorgung 127, 145
 Grenzwerte 127, 163, 164, 183
Tripel-Layer-Modell 37
Tritium-Abbau in der ungesättigten Zone 150, 197

U

Überdüngung 147
Übergangszustand 61
ungesättigte Zone 52, 134, 150, 156, 197
Uran
 Ausfällung von Uranmineralen 195

Laugungs-Bergbau 159
Löslichkeit der Uranspezies 23
Reduktion der Konzentration durch Fe(0)-Wände 147, 188
Reduktion der Konzentration durch Kalkzugabe 130, 168
Veränderung der Uranspezies in Abhängigkeit vom pH-Wert 138, 177

V

van-der-Waals'sche Kräfte 27
Vanselow-Konvention 30
Vant' Hoff-Gleichung 6
variable Oberflächenladungen 32
Verdunstung 133, 172
 ~sberechnung mit PhreeqC2 133
Verkarstung 156, 201
Versauerung 129
Verschneiden von Wässern 145, 185
Verteilungskoeffizient 6, 34

W

Wasseraufbereitung
 durch Belüftung (Brunnenwasser) 145, 183
 durch Belüftung (Quellwasser) 145, 183
Wasserstoffbrückenbindungen 27
WATEQ- Debye-Hückel-Gleichung 11
weiche Säuren 39

Z

Zeitgesetz 58
Zeolithe
 Eigenschaften als Ionenaustauscher 31
 Kationenaustauschkapazität 29
 Sorptionstärke für Schwermetalle 28
Zero Charge 32