
Ludwig_____
Maximilians_____
Universität_____
München_____



Bachelorarbeit

Hydrogeochemische Untersuchung der Grubenwasseraustritte des ehemaligen bayerischen Pechkohlebergbaus

vorgelegt von
cand.-BSc. Bernd Siotka

betreut von

Prof. Dr. Christian Wolkersdorfer

Ludwig-Maximilians-Universität München
Fakultät für Geologie
Lehrstuhl für Hydrogeologie

München, September 2008

„Probleme kann man niemals mit derselben Denkweise lösen, durch die sie entstanden sind.“

Albert Einstein

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht.

München, den 05.09.2008

Bernd Siotka

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich meinem Betreuer, Herrn Dr. Ch. Wolkersdorfer, danken, der mir das Thema für diese Bachelorarbeit angeboten und mich während der dafür notwendigen Geländearbeit sowie bei der nötigen Recherche mit Rat und Tat unterstützt hat und mir wichtige Anregungen gab.

Ein weiterer Dank geht an die Kommilitonen Ana Hensler, Sandra Vogl und Markus Kantioler, die an der Arbeit im Gelände beteiligt gewesen sind, mich fachlich unterstützten, mich anspornten und stets für mich da waren.

Des Weiteren seien hier die Mitarbeiter des Labors des Lehrstuhls für Hydrogeologie dankend erwähnt, welche die Laboranalysen der Wasserproben zuverlässig und präzise durchgeführt haben.

Schließlich möchte ich denjenigen Bewohnern der im Rahmen der Untersuchungen besuchten Kohleregionen für ihre Unterstützung danken, die mich zum Teil persönlich zu Fundstellen geführt haben, die ohne Hilfe eventuell nicht aufgefunden hätten werden können.

Inhaltsverzeichnis

Eidesstattliche Erklärung.....	3
Danksagung	4
1 Einleitung	7
2 Zusammenfassung	10
2.1 Abstract	11
3 Entstehung von Grubenwasser	12
3.1 Chemische und physikalische Grundlagen	12
3.2 Mikrobielle Einflüsse bei der Bildung von saurem Grubenwasser	17
3.3 Auswirkungen von saurem Grubenwasser auf die Umwelt	19
4 Untersuchung der Grubenwässer	20
4.1 Probenahme	20
4.1.1 Lokalisierung der Probenahmestellen	20
4.1.2 Beschriften der Proben	21
4.1.3 Filtrieren der Proben.....	22
4.1.4 Abfüllen und Ansäuern der Proben.....	22
4.2 Vor-Ort-Analytik.....	23
4.2.1 Temperatur	24
4.2.2 pH-Wert.....	24
4.2.3 Sauerstoffgehalt.....	25
4.2.4 Redoxpotenzial.....	27
4.2.5 Elektrische Leitfähigkeit und Gesamtmineralisation	28
4.2.6 Säure- und Basenkapazität	30
5 Ergebnisse und Auswertung.....	34
5.1 Darstellungsarten der Analysendaten.....	34
5.1.1 Piper-Diagramm	34
5.1.2 Balken-Diagramme	36
5.2 Statistische Methoden zur Evaluierung der Ergebnisse	36
5.3 Fehlerdiskussion und Plausibilitätskontrolle.....	39
5.3.1 Ionenbilanz	39
5.3.2 Gemessene und berechnete elektrische Leitfähigkeit	40
5.4 Hydrogeochemische Modellierung mit PHREEQC.....	40
5.4.1 Einleitung	40
5.4.2 Auswertung	41

5.5 Vor-Ort-Parameter	41
5.5.1 Einleitung	41
5.5.2 Temperatur	42
5.5.3 pH-Wert.....	43
5.5.4 Sauerstoff	44
5.5.6 Redoxpotenzial.....	47
5.5.7 Säure- und Basenkapazität	48
5.6 Durchfluss	49
5.7 Wasserinhaltsstoffe	50
5.7.1 Haupt- und Nebenelemente	50
5.7.2 Spurenelemente	57
6 Interpretation, Schlussfolgerungen.....	65
Literaturliste	67
Abkürzungsverzeichnis	70
Abbildungsverzeichnis	71
Tabellenverzeichnis.....	73
Anhang	74
Anhang 1: Tabelle der Wasseranalysedaten aller Messpunkte	75
Anhang 2: Ausgabedatei der Modellierung mit PHREEQC	76
Anhang 3: Karte mit erfassten Stollenmundlöchern (süd)östlich von Miesbach.....	86
Anhang 4: Tabellarisches Kataster der bayerischen Bergwerke	87
Anhang 5: Geologische Übersicht, Profil u. Schichtenschnitt d. Kohlereviers Peißenberg	88
Anhang 6: Geologische Übersicht, Profil u. Schichtenschnitt d. Kohlereviers Penzberg....	89
Anhang 7: Geologische Übersicht, Profil u. Schichtenschnitt d. Kohlereviers Hausham ...	90

1 Einleitung

Entstanden durch die Auffaltung der Molasse während der alpidischen Orogenese liegen die oberbayerischen Pechkohlen, welche im Erdzeitalter des Alttertiärs, dem oberen Oligozän, vor etwa 30 Millionen Jahren aus organischen Sedimenten an der Küste des subalpinen Molassemeeres gebildet wurden, heute in mehreren schuppenförmig hintereinanderliegenden Muldenzügen vor; von Nord nach Süd folgen aufeinander Peißenberger Mulde, Rottenbucher Mulde und Murnauer Mulde. Eine Übersicht der geografischen Lage dieser Muldenzüge bietet Abbildung 1.

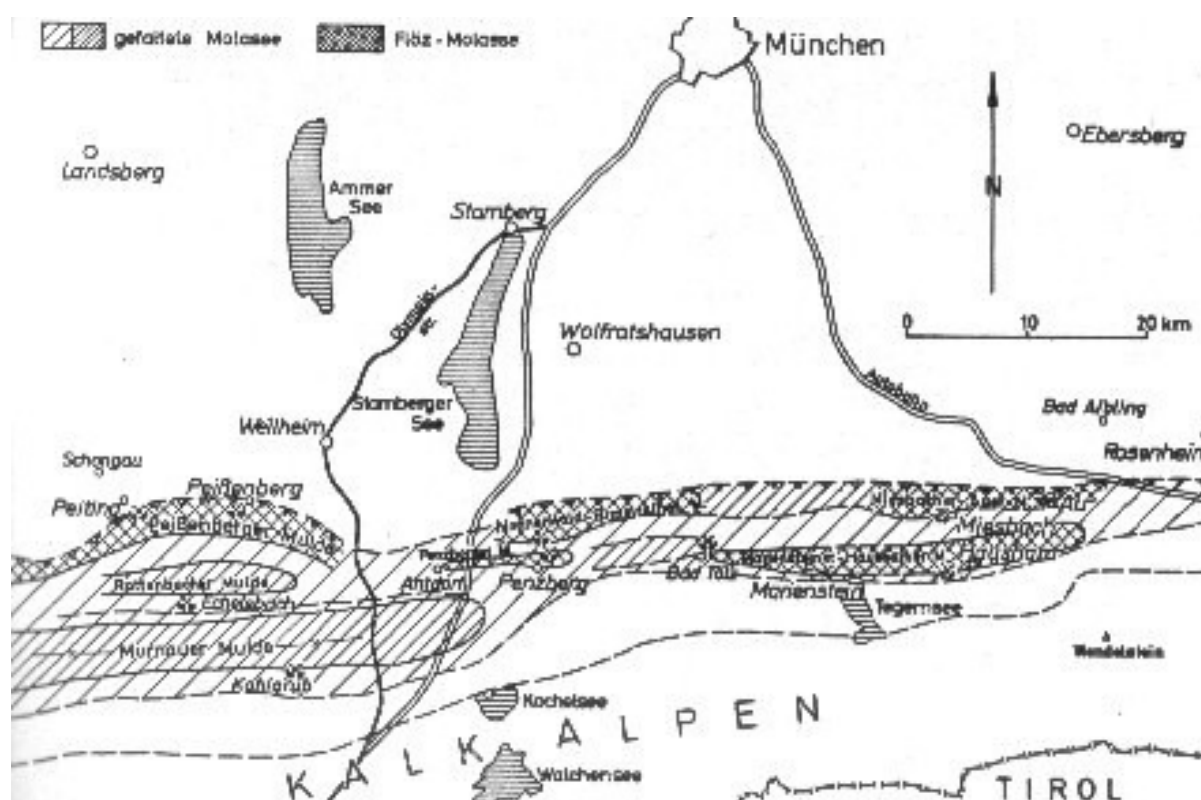


Abb. 1: Übersichtskarte des Zielgebietes „bayerische Pechkohle“ mit den Hauptmuldenzügen (nach GEISSLER, Geologica Bavarica 73)

Genetisch handelt es sich dabei um paralische Glanzbraunkohlen. Anstatt der sonst üblichen Bezeichnung Glanzkohle wurde jedoch regional der Ausdruck Pechkohle zur Unterscheidung von der Stein- und Braunkohle verwendet. Der hohe Gebirgsdruck hat den Inkohlungsprozess derartig verstärkt, dass die Pechkohle einen ähnlichen Kohlenstoffgehalt wie Steinkohle hat. Ein Charakteristikum der Molasse ist der laterale Fazieswechsel mit der Entfernung vom Orogen. So findet man in allen drei Mulden unterschiedliche Sedimente. Der marine

Charakter der Fazies nimmt nicht nur nach Westen ab, sondern geht auch nach Norden in einen brackischen Bereich über (nach SCHOLZ 1996). Der Grund für diesen intensiven Fazieswechsel liegt in den veränderlichen Bedingungen des ehemaligen Küstensaums, in dem die torfbildende Pflanzensubstanz sedimentierte. Auf einer West-Ost-Achse in einem schmalen, über 100 km langen Gürtel aufgereiht, finden sich Vorkommen von Pechkohle und mit ihnen aufgelassene Bergwerke von Peiting über Hohenpeißenberg, Peißenberg, Penzberg, Großweil, Marienstein, Miesbach, Hausham und Hundham bis Au, südlich des Irschenbergs. Geologische Übersichtszeichnungen und Profile der wichtigsten Reviere von den originalen Titelblättern aus dem Archiv des Bayerischen Staatsministeriums für Wirtschaft, Infrastruktur, Verkehr und Technologie wurden dieser Arbeit in Anhang 5 bis 7 beigelegt. Sie bieten einen detaillierten Aufschluss über die geologischen Verhältnisse vor Ort. Schon Ende des 18. Jahrhunderts, aber in der Hauptsache seit der Mitte des 19. bis in die zweite Hälfte des 20. Jahrhunderts hinein wurde in diesen Revieren Pechkohle abgebaut. Mit 1245 Metern unter der Tagesoberfläche wurde in Peißenberg im Jahr 1970 der tiefste Punkt aller oberbayerischen Kohlenreviere erreicht (JUNGK 1975). Als der im Vergleich zu konkurrierenden Revieren relativ aufwendige Abbau der relativ geringmächtigen Flöze nicht mehr wirtschaftlich war, wurde ein Bergwerk nach dem anderen stillgelegt. Die gesicherten Reserven an Kohle waren zu diesem Zeitpunkt noch nicht annähernd erschöpft. So liegen nach verschiedenen Schätzungen derzeit noch zwischen 50 und 100 Millionen Tonnen Pechkohle als stille Reserve in der Faltenmolasse vor.

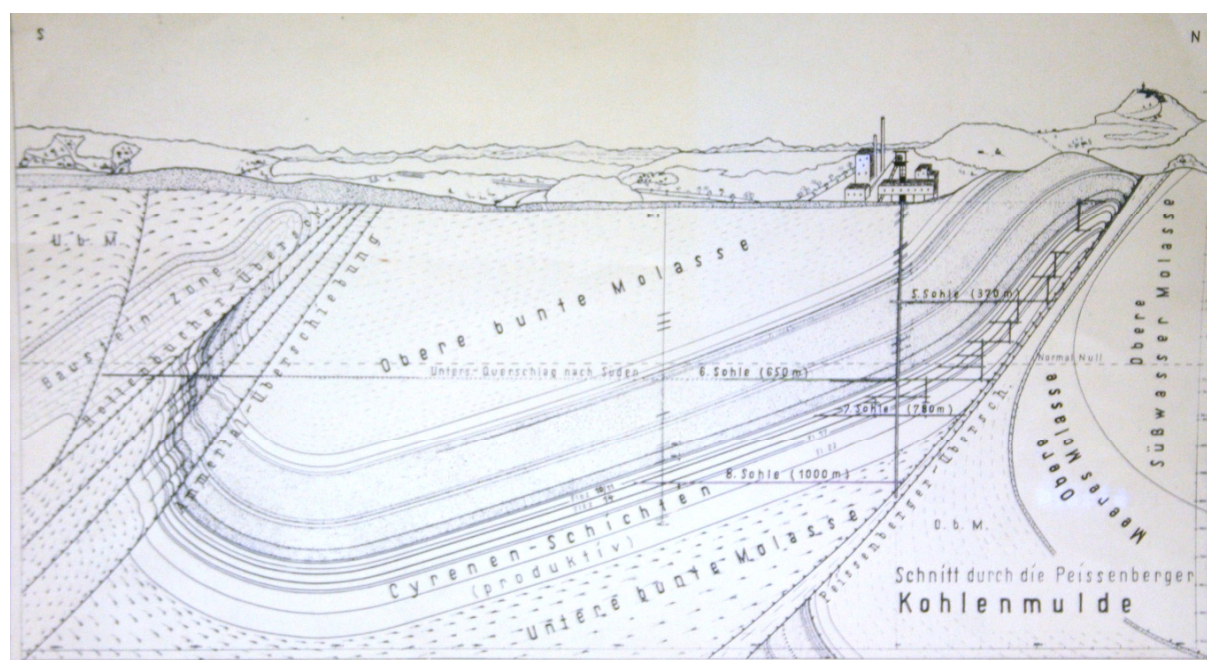


Abb. 2: Originalprofil „Schnitt durch die Peißenberger Kohlenmulde“, Quelle: Archiv des Bayerischen Staatsministeriums für Wirtschaft, Infrastruktur, Verkehr und Technologie (mit freundlicher Genehmigung)

Die Flözmächtigkeiten bewegen sich bestenfalls bei gut einem bis zwei Metern und liegen innerhalb einer Serie brackischer Schichten, der chattischen Brackwassermolasse (frühere Bezeichnung: Cyrenen-Schichten). Die Kohle selbst ist jedoch limnisch-sedimentären Ursprungs, wie auch die Zwischenlagen der Flöze aus „Stinkstein“, einem bituminösen Süßwasserkalk, der als fossile Seekreide gedeutet wird (nach GEISSLER 1975).

Ziel dieser Bachelorarbeit ist es, Grubenwasseraustritte der verschiedenen Pechkohlereviere in Bayern zu erfassen und die Qualität und Quantität des austretenden Wassers analytisch zu dokumentieren. Die im Rahmen der Geländearbeit aufgesuchten Stollen, Mundlöcher und sonstigen Austrittsstellen werden gegebenenfalls beprobt und Vor-Ort-Parameter gemessen sowie an ausgewählten Stellen Durchflüsse bestimmt. Die gesammelten Daten erheben, ebenso wie die Anzahl der aufgesuchten Messstellen, keinerlei Anspruch auf Vollständigkeit. Die Laboranalyse der Wasserproben ermöglicht neben einem Überblick über die Schwere der Kontamination der verschiedenen Lokalitäten auch eine erste Abschätzung des Gefahrenpotenzials der aufgelassenen Bergwerke.

2 Zusammenfassung

Verunreinigte Grubenwässer gehören volumenmäßig mit zu den größten Abfallströmen der Welt und die damit verbundenen Umweltprobleme bestehen schon seit mehreren hundert Jahren. Nichtsdestotrotz nimmt sich die Wissenschaft erst seit wenigen Jahrzehnten der Problematik an und sucht nach Lösungen, um Risiken für Mensch und Natur zu minimieren. In Oberbayern existiert eine Verschmutzung von Grund- und Oberflächenwässern mit kontaminiertem Grubenwasser vornehmlich durch den Abbau von Pechkohle seit dem 18. und bis zur Mitte des 20. Jahrhunderts. Mit Schadstoffen angereichertes Grubenwasser läuft meist unbeachtet in die umgebenden Oberflächengewässer und somit in das Grundwasser. Die Situation würde sich ohne die allseits vorhandenen Karbonate in dieser Region, die entstehende Säure abpuffern, noch drastischer darstellen. Da es bislang kein deutsches Grubenwasserinventar gibt, tragen die unternommenen Investigationen direkt zu einer ersten, inoffiziellen Erfassung von Grubenwasseraustritten in Süddeutschland bei.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden aufgelassene Bergwerke der ehemaligen bayerischen Pechkohlereviere aufgesucht, die dort austretenden Grubenwässer wurden vor Ort analysiert, beprobt und 15 Wasserproben gelangten zur weiteren chemischen Analyse ins Labor. Dadurch gewonnene Fakten konnten untereinander und mit geltenden Grenzwerten für Grundwasser verglichen werden, sodass eine Einschätzung des Risikopotenzials möglich wurde. Zusätzlich wurde eine computergestützte, hydrochemische Modellierung der Proben durchgeführt und ausgewertet.

Die Auswertung der Ergebnisse der geochemischen Untersuchungen lässt es nötig erscheinen, die „Erblast Grubenwasser“ als das anzusprechen, was sie ist: eine von Menschenhand geschaffene Umweltbelastung. Der Aufbau einer zentralen Katalogisierung von vorhandenen Grubenwasseraustrittsstellen sowie eine Behandlung zur Reinigung des Grubenwassers, wo dies nötig und sinnvoll erscheint, sind in einer Vielzahl von Fällen ratsam, insbesondere aber für den Friedrichstollen als größte Gefahr für die Natur in dieser Umfrage, der große Mengen verunreinigten Wassers direkt in den Fluss Leitzach entlässt.

Was eine Behandlung für diese Schadstoffquelle anbelangt, wird eine passive Reinigung nach dem RAPS-Konzept vorgeschlagen. Ein RAPS verbindet ein anaerobes Feuchtgebiet mit einem anoxischen Karbonatkanal. Die Vorteile dieser Art der Wasseraufbereitung sind die Eignung für netto-acidisches Wasser, niedrige Betriebskosten und eine lange Lebensdauer.

2.1 Abstract

Contaminated mine water is one of the largest waste streams in the world in terms of volume and there have been environmental problems connected with it for several hundred years. Nevertheless, science has been taken to the problem only for a few decades, seeking solutions to reduce risks for human beings and nature to a minimum.

In Upper Bavaria, pollution of ground and surface water with contaminated mine water is caused primarily by the mining of hardcoal since the 18th and up to the mid-20th Century. Mine water enriched with pollutants is usually drained in the surrounding surface water and thus into the groundwater. Without the omnipresent carbonates in this region, buffering down the acidity, the situation would get even worse. There is as yet no German mine water inventory, so undertaken investigations contribute directly to a first, unofficial collection of mine water discharges in Southern Germany.

As a part of this work, abandoned mines of the former Bavarian hardcoal districts were visited, where the mine water discharges were analysed on the spot, sampled and a total of 15 water samples were used for further chemical analysis in the laboratory. The facts were obtained and compared with current limits for groundwater, so that an assessment of risks was possible. In addition, a computer-based, hydrochemical modelling of the samples was undertaken and then evaluated.

The results from the analysis of the geochemical studies makes it appear necessary to name the "legacy mine water" what it is: man-made pollution. The establishment of a central catalogue of existing minewater discharges and a treatment to clean mineralized minewater, where necessary and appropriate, is advisable in a variety of cases, especially in regard of the Friedrichstollen as biggest hazard to nature in this survey, which dismisses large quantities of contaminated water directly into the river Leitzach.

In behalf of a treatment for that source of pollution, a Reducing and Alkalinity Producing System called RAPS is suggested. RAPS combines a constructed anaerobic wetland with an Anoxic Limestone Drain, ALD. Advantages of this close-to-nature water treatment system are the suitability for net acidic water, low running costs and a long life span.

3 Entstehung von Grubenwasser

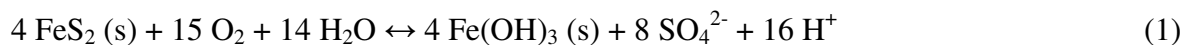
3.1 Chemische und physikalische Grundlagen

Durch den Abbau wirtschaftlich bedeutsamer Minerale werden im Gebirge Hohlräume geschaffen. In diesen kommt es, durch die vertikale und horizontale Ausdehnung der Oxidationszone verbunden mit der Absenkung des Grundwasserspiegels, zur Verwitterung verschiedener Minerale des anstehenden Gesteins. Dies ist möglich, weil die Gesteinsminerale unter den neu geschaffenen Bedingungen thermodynamisch instabil werden. Die wichtigsten auftretenden Verwitterungsprozesse sind die Oxidation von Sulfiden sowie die Lösung von Silikaten und Karbonaten. Ursprung der Genese sauren Grubenwassers ist der Niederschlag. Dieser gelangt über primäre oder sekundäre Wegsamkeiten im Gestein in Form von Sickerwasser in die Bereiche der ausgeerzten Lagerstätte. An den Mineral-Wasser-Kontakten nimmt das Wasser die jeweils löslichen Stoffmengen auf. Somit ist die chemische Zusammensetzung des Grubenwassers von den vorhandenen Mineralparagenesen, den geologischen Verhältnissen, der Hydrologie sowie von der im Bergwerk angewandten Abbautechnologie abhängig (HEDIN et al. 1994).

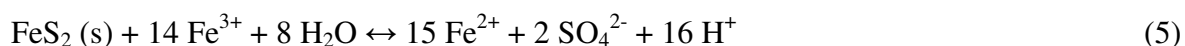
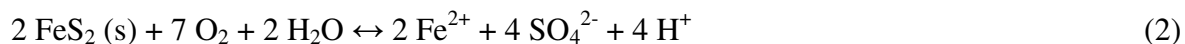
Im Laufe der Entstehung von saurem Grubenwasser können eine Reihe miteinander verknüpfter chemischer Reaktionen stattfinden. Erforderliche Komponenten sind sulfidische Minerale, ein feuchtes Milieu sowie das Vorhandensein eines Oxidationsmittels. Dabei werden die Reaktionen hauptsächlich durch den pH-Wert, die Temperatur, den Sauerstoffgehalt in der Gasphase bzw. wässrigen Phase, den Gehalt der Wassersättigung, die Mineraloberfläche der Sulfide und durch die chemische Aktivierungsenergie bestimmt. Durch das Vorhandensein und die Menge von Säure bildenden und Säure verbrauchenden Mineralen im Gestein wird das Potenzial zur Bildung von Sauerwasser bestimmt.

Im Zuge des Bergbaus werden die sulfidischen Minerale freigelegt und somit chemisch instabil. Durch Wasser- und Sauerstoffeintritt können diese oxidiert werden bzw. sind Verwitterungsprozessen ausgesetzt. Dadurch sind viele verschiedene Metallionen im Grubenwasser auf die Verwitterung von Metallsulfiden und -disulfiden, wie Pyrit (FeS_2), Chalkopyrit (CuFeS_2) und Arsenopyrit (FeAsS), zurückzuführen. Pyrit und das instabilere Markasit nehmen dabei einen hohen Stellenwert ein, da bei deren Verwitterung große Mengen an H^+ -Ionen freigesetzt werden (SIGG & STUMM 1994, HELMS 1995). Andere Metall-Sulfide sind nicht in der Lage, Acidität zu produzieren, bei ihrer Verwitterung werden nur lösliche Metall-Ionen frei (YOUNGER et al. 2002). Der Prozess der Bildung von saurem

Grubenwasser soll am Beispiel der Pyritverwitterung erklärt werden. SCOTT & HAYS (1975) fassen die ablaufenden Prozesse wie folgt zusammen:



In Teilreaktionen kann der Reaktionsablauf wie folgt beschrieben werden:



Kristalliner Pyrit (Glg. 2) reagiert mit Sauerstoff und Wasser, welche sich in Spalten und Klüften sammeln können. Das dabei entstehende zweiwertige Eisen wird, wenn ausreichend gelöster Sauerstoff vorhanden ist, zu dreiwertigem Eisen oxidiert (Glg. 3). Anschließend kann das dreiwertige Eisen zu unlöslichem Eisenhydroxid $\text{Fe}(\text{OH})_3$ hydrolysiert werden (Glg. 4). Das Eisen(III)-hydroxid bildet kolloidale Lösungen. Zum Teil fällt es auch als rostbrauner Niederschlag aus und setzt sich als Schlamm ab. Das ausgefällte Eisen(III)-hydroxid „altert“ unter sukzessiver Abspaltung von Wasser und geht in Hämatit Fe_2O_3 über (BREHM & MEIJERING 1996). Durch die Entstehung von Eisen(III)-hydroxid, wie in Gleichung 4 dargestellt, werden weitere H^+ -Ionen frei, wodurch es zum Absinken des pH-Wertes kommt. Zusätzlich können in Lösung verbliebene Eisen(III)-Ionen durch Pyrit zu Eisen(II)-Ionen reduziert werden (Glg. 5). Dies ist möglich, da Fe^{3+} -Ionen vor allem im sauren Milieu neben Sauerstoff die größte Bedeutung als Oxidationsmittel besitzen (MOSES et al. 1987). Die entstandenen Eisen(II)-Ionen stehen für die Oxidations-Reaktion (Glg. 3) zur Verfügung. Durch diesen Reaktionszyklus werden fortlaufend H^+ -Ionen gebildet, die nicht mehr komplett abgepuffert werden können. Dies hat einen Überschuss an H^+ -Ionen zur Folge, welcher zu einem Absinken des pH-Wertes führt. Eine Verstärkung bzw. Beschleunigung dieser Prozesse kann durch den Einfluss von Mikroorganismen hervorgerufen werden, worauf in Kapitel 3.2 näher eingegangen wird.

Bei den stattfindenden Reaktionen mit dem anstehenden Gestein können unterschiedliche Metalle herausgelöst werden. Ein Teil der Metalle wird in Form von wasserlöslichen

Verbindungen mit dem Grubenwasser ausgetragen (v.a. Cu, Zn, Hg, Cd) und ein weiterer Teil verbleibt in sulfatischer, arsenatischer oder oxidischer Form als Krusten oder Imprägnationen im Gestein zurück (Fe, Bi, W, Sn). Durch die sich im Grubenwasserverlauf ändernden pH- und Eh-Bedingungen kommt es zu elementspezifischen, wechselnden Transportbedingungen. Dabei sind die bei Oberflächenausstritten erfolgenden Reaktionen, wie Verockerung und Sinterbildung, optisch am auffälligsten.

Im Wasser vorkommende Basen können über maßanalytische Titration als Säurekapazität (K_s) und vorkommende Säuren als Basenkapazität (K_b) bestimmt werden. In der Fachliteratur werden diese oft als Acidität (Basenkapazität) und Alkalität (Säurenkapazität) benannt und in mg/L CaCO_3 ($1 \text{ mmol/L} = 50,04 \text{ mg/L CaCO}_3$) angegeben. Nach HEDIN et al. (1994) setzt sich die Acidität im Grubenwasser wie folgt zusammen:

- Protonenacidität, welche über die Menge der freien H^+ -Ionen gemessen wird
- mineralische Acidität, die durch gelöste metallische Verbindungen verursacht wird sowie
- organische Acidität, die durch gelöste organische Verbindungen hervorgerufen wird.

SCOTT & HAYS (1975) charakterisieren saures Grubenwasser durch:

- einen niedrigen pH-Wert
- Acidität > Alkalität, d. h. die vorhandene Alkalität kann nicht alle Protonen neutralisieren
- hohe Gehalte an Eisen und Sulfat
- signifikante Konzentrationen von Al, Ca, Mg und Mn

Nach HEDIN et al. (1994) können Metalle wie Eisen, Aluminium und Mangan folgende Hydrolysereaktionen durchlaufen, bei denen H^+ -Ionen frei werden:



Während der Versauerung kommt es langfristig zu einer deutlichen Verringerung des Säurepuffervermögens sowie zum Absinken des pH-Wertes in Gewässern und Böden. Diese Versauerung ist messbar als Zunahme der Acidität oder Abnahme der Alkalität (SCHWOERBEL 1999). Sauere Wässer können sowohl in Bergwerken, Tagebauen, Berg- und Abraumhalden als auch in Absetzteichen mit Aufbereitungsabgängen entstehen. Bei Nichtanwesenheit von Säure bildenden Mineralen oder durch die Neutralisation von saurem Grubenwasser kann es zur Entstehung von alkalischem Wasser kommen. Alkalisches Grubenwasser ist nach SCOTT & HAYS (1975) gekennzeichnet durch:

- Alkalität > Acidität
- hohe Sulfat-, Kalzium-, Magnesium- und Mangankonzentrationen
- geringe Aluminiumkonzentrationen
- in der Regel pH-Werte > 4,5

Die Hauptquelle der Alkalität des Grubenwassers sind gelöste Karbonate, welche als Bikarbonate (HCO_3^-) oder in dissoziierter Form (CO_3^{2-}) vorkommen können. Nicht selten weisen Wässer mit bikarbonatischer Alkalität ebenfalls erhöhte Metallkonzentrationen auf (HEDIN et al. 1994).

Zu den wichtigsten Mineralen, welche Alkalität erzeugen, zählen Karbonatminerale, zum Beispiel Calcit, Dolomit oder Siderit. Die Auflösung der Karbonate führt zur Bildung von Bikarbonaten (HCO_3^-) und Karbonationen (CO_3^{2-}), welche unter Bildung von Kohlensäure und Kohlendioxid die H^+ -Ionen neutralisieren können. Durch diese Neutralisation kommt es zur Pufferung des pH-Wertes (BREHM & MEIJERING 1996).



Neben Calcit, Dolomit und Siderit tragen weitere Karbonate und Hydroxide zur Abpufferung des pH-Wertes bei. In Tabelle 1 sind ausgewählte Minerale mit den dazugehörigen chemischen Formeln und pH-Pufferbereichen aufgeführt.

Tab. 1: Ausgewählte Mineralphasen, die zur sequentiellen pH-Pufferung beitragen (BLOWES et al.1994; nach WOLKERSDORFER 2008)

Mineral	Formel	pH-Pufferbereich
Kalzit	CaCO_3	6,5 bis 7,5
Dolomit	$\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$	6,5 bis 7,5
Siderit	FeCO_3	4,8 bis 6,3
Mischkarbonate	$(\text{Ca}, \text{Mg}, \text{Fe}, \text{Mn})\text{CO}_3$	4,8 bis 6,3
Gibbsit	$\text{Al}(\text{OH})_3$	4,0 bis 4,3
Ferrihydrit	$\text{Fe}(\text{OH})_3$	< 3,5

In Wasser können Alkalität und Acidität gleichzeitig auftreten, das heißt mineralische Acidität und Alkalität schließen sich nicht aus. Aus diesem Grund sollten beide Parameter bei einer Wasseranalyse über Säure- und Basentitration bestimmt und verglichen werden. Bei pH-Werten < 4,5 liegt keine Alkalität im Wasser vor. Für die Klassifizierung von Grubenwässern gibt es neben der Acidität und der Alkalität weitere ausschlaggebende Parameter. Basierend auf Studien entwickelte schon die Federal Water Pollution Control Administration (FWPCA), ein früheres Kontrollorgan der Vereinigten Staaten von Amerika, das 1970 in der neu geschaffenen Behörde Environmental Protection Agency (EPA) mit Hauptsitz in Washington D.C. aufging, mögliche Klassifizierungsmodelle für Grubenwässer. Die daraus resultierenden Klassen sind in Tabelle 2 dargestellt.

Tab. 2: Klassifizierung von Grubenwässern nach ihren wichtigsten Hauptparametern (SCOTT & HAYS 1975; nach TAMME 2002)

	Klasse 1	Klasse 2	Klasse 3	Klasse 4
	sauer	teilweise oxidiert und/oder neutralisiert	oxidiert, neutralisiert und/oder alkalisch	nicht oxidiert, neutralisiert
pH-Wert	2 - 4,5	3,5 - 6,6	6,5 - 8,5	6,5 - 8,5
Acidität, mmol/L	20 - 300	0 - 20	0	0
Fe^{2+} in mg/L	500 - 10.000	0 - 500	0	50 - 1.000
Fe^{3+} in mg/L	0	0 - 1.000	0	0
Al^{3+} in mg/L	0 - 2.000	0 - 20	0	0
SO_4^{2-} in mg/L	1.000 - 20.000	500 - 10.000	500 - 10.000	500 - 10.000

3.2 Mikrobielle Einflüsse bei der Bildung von saurem Grubenwasser

Mikrobielle Einflüsse spielen bei der Bildung von saurem Grubenwasser eine große Rolle. Acidophile, chemolithoautotrophe Bakterien, wie beispielsweise *Acidithiobacillus ferrooxidans*, *Ferrobacillus ferrooxidans*, *Thiobacillus sulfooxidans* und *Acidithiobacillus thiooxidans*, sind in der Lage, die Sulfidoxidation zu beschleunigen. Die Mikroorganismen oxidieren mit Hilfe von Sauerstoff die Sulfide zu Sulfat sowie freier Schwefelsäure und teilweise das darin gebundene zweiwertige Eisen zum dreiwertigen. *Acidithiobacillus thiooxidans* oxidiert lediglich den Sulfidschwefel, während *Acidithiobacillus ferrooxidans* außerdem noch das Eisen oxidiert (siehe Abb.3).

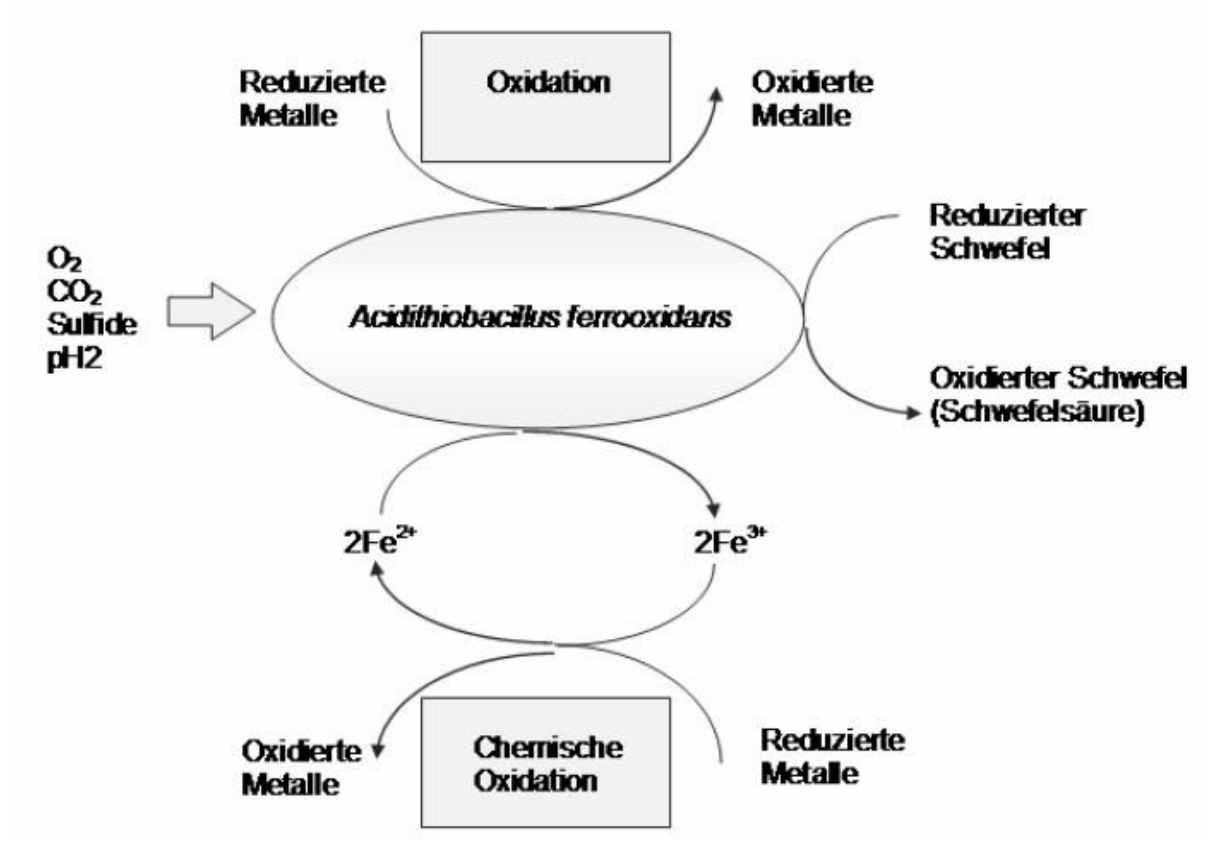


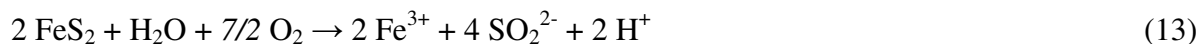
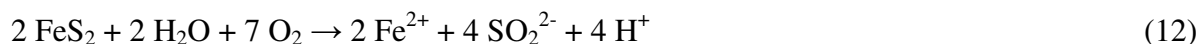
Abb. 3: Vereinfachtes Prinzip der Oxidation von Metallen aus sulfidischen Mineralen durch *Acidithiobacillus ferrooxidans* (WILLSCHER 2001)

Tabelle 3 zeigt eine repräsentative Auswahl von Mikroorganismen, von denen jedoch nur ein Teil aktiv an den Redox-Vorgängen der Minerale (v. a. Pyrit) teilnimmt. Die Mikroben beschleunigen dabei ablaufende Reaktionen, können aber nicht deren Endpunkte oder thermodynamischen Gegebenheiten ändern, aber durch Veränderung der Reaktionsrate ist eine Verschiebung der natürlichen Endpunkte möglich (nach WOLKERSDORFER 2008).

Tab. 3: Acidophile Prokaryonten, die im Grubenwasser auftreten können
(nach WOLKERSDORFER 2008 & HALLBERG/JOHNSON 2005)

Gruppenzuordnung nach Chemismus	Gattung/Spezies der Mikroorganismen	bevorzugte Temperatur in °C	phylogenetische Zugehörigkeit
Eisenoxidierer	<i>Leptospirillum ferrooxidans</i>	< 40	Nitrospira
	<i>Leptospirillum ferriphilum</i>	< 40	Nitrospira
	<i>Leptospirillum thermoferrooxidans</i>	40 - 60	Nitrospira
	“ <i>Thiobacillus ferrooxidans</i> ”	< 40	β -Proteobacteria
	“ <i>Ferrimicrobium acidiphilum</i> ”	< 40	Actinobacteria
	<i>Ferroplasma acidiphilum</i>	< 40	Thermoplasmatales
	“ <i>Ferroplasma acidarmanus</i> ”	< 40	Thermoplasmatales
Schwefeloxidierer	<i>Acidithiobacillus thiooxidans</i>	< 40	β - γ Proteobacteria
	<i>Acidithiobacillus caldus</i>	40 - 60	β - γ Proteobacteria
	<i>Thiomonas cuprina</i>	< 40	β -Proteobacteria
	<i>Hydrogenobaculum acidophilum</i>	40 - 60	Aquificales
Eisen- und Schwefeloxidierer	<i>Acidithiobacillus ferrooxidans</i>	< 40	β - γ Proteobacteria
Eisenreduzierer	<i>Acidiphilium spp.</i>	< 40	α -Proteobacteria
Eisenoxidierer/ -reduzierer	<i>Acidimicrobium ferrooxidans</i>	< 40	Actinobacteria
Eisenoxidierer/ -reduzierer und Schwefeloxidierer	<i>Sulfobacillus spp.</i>	< 40 teils auch 40 - 60	Firmicutes
Heterotrophe	<i>Acidocella spp.</i>	< 40	α -Proteobacteria
Acidophile	<i>Acidisphaera rubrifaciens</i>	< 40	α -Proteobacteria
	<i>Acidobacterium capsulatum</i>	< 40	Acidobacterium
	<i>Acidomonas methanolica</i>	< 40	α -Proteobacteria
	<i>Alicylobacillus spp.</i>	< 40	Firmicutes
	<i>Picrophilus spp.</i>	40 - 60	Thermoplasmatales
	<i>Thermoplasma spp.</i>	40 - 60	Thermoplasmatales

Diese Bakterien oxidieren den Pyrit (FeS_2) folgendermaßen:



Da dabei Schwefelsäure gebildet wird, kann das Milieu erheblich versauern, zumal die Eisen-Ionen im Weiteren noch hydrolysieren können, wodurch zusätzliche Wasserstoff-Ionen frei werden (BREHM & MEIJERING 1996).

Weiterhin wird durch die mikrobielle Oxidation die abiotische Reaktion um das 10- bis 35-Fache beschleunigt. In Tabelle 4 sind die unterschiedlichen Oxidationsraten dargestellt.

Tab. 4: Vergleich der abiotischen und mikrobiologischen Raten für die Oxidation von Fe(II)-Ionen in Wasser und Pyrit (NORDSTROM & SOUTHAM 1997)

Reaktion	abiotische Oxidationsrate	mikrobiologische Oxidationsrate
Oxidation von $\text{Fe}^{2+}(\text{aq})$	$3 \cdot 10^{-12} \text{ mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$5 \cdot 10^{-7} \text{ mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
Oxidation von $\text{FeS}_2(\text{s})$	$0,3 - 3 \cdot 10^{-9} \text{ mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$8,8 \cdot 10^{-8} \text{ mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$

Dadurch wird die katalysierende Wirkung von bestimmten Bakterien deutlich. Sie können zwar Reaktionen beschleunigen, sind aber nicht in der Lage, Reaktionen zu bewirken, die thermodynamisch nicht möglich sind (SIGG & STUMM 1994). Für die optimalen Lebensbedingungen der Bakterien sind folgende Faktoren ausschlaggebend:

- Nahrungsangebot für die Mikroorganismen
- Konzentration an Ammonium, Kohlendioxid, Nitrat, Phosphat und Spurenelementen
- Umwelteinflüsse wie z. B. Insolation, Konvektion, Temperaturwechsel
- Populationsdichte/Wachstumsrate

3.3 Auswirkungen von saurem Grubenwasser auf die Umwelt

Durch das Einleiten von kontaminierten Grubenwässern in Vorfluter und Gewässer kommt es zur Veränderung der Wasserchemie. Je nach Zusammensetzung der Grubenwässer wird die aquatische Lebenswelt unterschiedlich stark beeinflusst. Alkalisches Grubenwasser wirkt

hierbei meist weniger destruktiv auf Flora und Fauna als acidisches Wasser. Die Veränderung der Wasserchemie in Vorflutern und Gewässern ist meist mit einer Verschlechterung der Wasserqualität verbunden. Die Verschlechterung ist dabei durch ein Absinken des pH-Wertes und durch eine Verminderung der Alkalität gekennzeichnet. Weiterhin ist eine Anreicherung von metallischen und nichtmetallischen Ionen zu beobachten (SCOTT & HAYS 1975).

Bestimmend für die aquatische Lebenswelt sind folgende Faktoren:

- pH-Wert
- Sauerstoffgehalt
- Kalkgehalt
- Ammonium- und Ammoniakkonzentration
- Nitrit- und Nitratkonzentration
- Eisenkonzentration
- Schwermetallkonzentration

Das Absinken des pH-Wertes führt z. B. zur Erhöhung der Löslichkeit und der Mobilität von Mangan, Eisen sowie einer Vielzahl toxischer Schwermetalle. Durch die gesteigerte Mobilität besteht die Gefahr, dass Algen und Pflanzen die im Wasser gelösten Schwermetalle in ihr Zellgewebe aufnehmen, was eine Beeinflussung der gesamten Nahrungskette zur Folge hat.

4 Untersuchung der Grubenwässer

4.1 Probenahme

4.1.1 Lokalisierung der Probenahmestellen

Zur Lokalisierung und Aufnahme der Koordinaten der Mess- und Probenahmestellen wurde, wie auch zum vorherigen Aufsuchen vermuteter Stollenmundlöcher nach älteren Kartendaten, das GPS-Gerät Colorado 300 der Firma *GARMIN* verwendet (Abb. 4). Dies hat den Vorteil der höheren Genauigkeit eines satellitengestützten Systems bei der Ortsbestimmung. An jeder Probenahmestelle wurde durch Verwendung der Wegpunktfunktion des Gerätes die exakte Position genommen. Dabei war darauf zu achten, dass die Elektronik des GPS-Gerätes ausreichend Zeit hatte, sich auf die aktuelle Position einzustellen. Ebenso wurden mögliche Positionierungsfehler, z. B. durch Abschattung des Satellitensignals aufgrund von Baumbewuchs, vermieden, wo dies möglich war.



Abb. 4: GARMIN Colorado 300 GPS-Gerät (Herstellerfoto)

Sämtliche Hoch- und Rechtswerte (siehe Anhang 4) der Wegpunkte bzw. deren allgemein gebräuchliche Koordinaten in nördlicher Breite und östlicher Länge wurden dabei im World Geodetic System 1984 (WGS84) bestimmt. Im Internet ist bei *Google Maps* unter der URL:

<http://maps.google.de/maps/ms?msa=0&msid=117030084880334771796.00044b1619c91dd64cfa7&ie=UTF8&z=9>

das Verzeichnis „Stollen Bayern“ (erstellt von Ch. Wolkersdorfer) einzusehen. Eine Auswahl der besuchten Stollen im Raum Miesbach zeigt der Kartenausschnitt in Anhang 3. Auf die Darstellung der Peißenberger Messpunkte in einer Karte wurde in diesem Kontext verzichtet, da aufgrund der Bekanntheit, der leichten Auffindbarkeit und Zugänglichkeit der Mundlöcher dieses Bergwerkes keine Koordinaten ermittelt wurden. Einzige Ausnahme ist der Tiefstollen Peißenberg (TST), wie aus Anhang 4 ersichtlich ist.

4.1.2 Beschriften der Proben

Je umfangreicher die Probenahme ist, desto größer ist das Verwechslungsrisiko bei Transport und Lagerung. Um die eindeutige Identifikation der gewonnenen Proben zu gewährleisten, wurden diese schon vor Befüllung mit einer individuellen Probenbezeichnung beschriftet. Diese setzt sich aus der Trinität von dreistelligem Projektkürzel, vierstelligem Datumskürzel und außerdem einem weiteren dreistelligem Kürzel für die Probenahmelokation zusammen (Bsp.: BSI-2909-TOP).

4.1.3 Filtrieren der Proben

Hauptsächlich um Mikroben aus den Proben zu nehmen, die das Fluid alterieren könnten, wurden die Proben für die Analyse der Hauptelemente vor der Abfüllung filtriert. Dabei kam eine Vakuumhandpumpe der Firma *MITYVAC* (Abb. 5a) in Kombination mit einer Filtratflasche und Filteroberteil der Firma *NALGENE* (Abb. 5b) mit 0,45µm-Filterblättern aus Cellulose-Acetat zum Einsatz.



Abb. 5a: *MITYVAC*-Vakuumhandpumpe (Herstellerfoto) **Abb. 5b:** *NALGENE*-Filterflasche 1 L (Herstellerfoto)

Unter Zuhilfenahme einer Pinzette wurde der Filtereinsatz vor jeder Filtration mit dem Filterblatt bestückt, wobei auf die korrekte Lage sowie Ausrichtung von Ober- und Unterseite zu achten war. Nach dem Montieren der gesamten Filtereinheit wurde die Handpumpe mit einem Schlauch an die Flasche angeschlossen und wiederholt betätigt, um so mittels Vakuum das Filtrat in diese zu ziehen.

4.1.4 Abfüllen und Ansäuern der Proben

Für die chemische Analyse der Hauptelemente wurde das filtrierte Wasser in Kunststoffflaschen mit einem Volumen von 250 mL gefüllt, die zuvor drei Mal mit dem zu beprobenden Wasser gespült wurden. Um eine Veränderung der chemischen Zusammensetzung zu verhindern, wurden die Flaschen für die Hauptelement-Analyse so befüllt, dass sich möglichst keine Luft mehr in den Flaschen befand. In Kunststoffflaschen mit einem Volumen von 100 mL wurde das Wasser für die Analyse der Spurenelemente gefüllt und mit einigen Tropfen konzentrierter Salpetersäure (HNO_3) auf einen pH-Wert $\cong 2$ angesäuert und so konserviert, um ein Ausfallen der Elemente zu vermeiden.

4.2 Vor-Ort-Analytik

Um aussagekräftige Ergebnisse erhalten zu können, wurden folgende physikalische und chemische Parameter vor Ort bestimmt:

- Wassertemperatur in °C
- pH-Wert
- Sauerstoffgehalt in % bzw. in mg/L
- Redoxpotenzial in mV
- elektrische Leitfähigkeit in $\mu\text{S}/\text{cm}$
- Gesamtmineralisation in ppm
- Säure- und Basenkapazität in mmol/L

Eine Bestimmung dieser Parameter ist vor Ort notwendig, da es durch biochemische und chemische Reaktionen zu Verfälschungen bzw. Veränderungen hinsichtlich der Konzentration kommen kann. Insbesondere die Reaktion mit Sauerstoff und Kohlendioxid aus der Umgebungsluft machen die sofortige Bestimmung der obigen Parameter notwendig. Auch der Einfluss von Tageslicht auf die Probe sowie Effekte aufgrund des Durchschüttelns während des Proben transports sind hierbei nicht zu vernachlässigen. Um Messfehler auf ein Minimum zu beschränken, wurde bei der Vor-Ort-Analytik vor jeder Messreihe eine Kalibrierung der Messgeräte (mit Hilfe spezifischer Pufferlösungen) durchgeführt. Bei Messungen mit dem für eine Vielzahl der Messungen verwendeten *MYRON L* Ultrameter 6P (siehe Abb. 6) wurden



Abb. 6: *MYRON L* Ultrameter 6P (Herstellerfoto)

die Messkammern direkt vor der Messung dreifach ausgespült, um eine Verfälschung der Werte durch Rückstände von vorher gemessenen Wässern im Gerät zu vermeiden.

4.2.1 Temperatur

Die Löslichkeit von festen Stoffen und Gasen sowie die Geschwindigkeiten aller chemischen und biologischen Reaktionen (z. B. Zunahme der Löslichkeit mit der Temperaturerhöhung) sind temperaturabhängig. Aus diesem Grund ist die Feststellung der Wassertemperatur während der Probenahme von großer Bedeutung.

Die Temperaturmessung erfolgte größtenteils mit dem *MYRON L* Ultrameter 6P (Messtoleranz 0,1 °C). Im Zusammenhang mit der Temperaturmessung erfolgten die Messungen der Leitfähigkeit, des Redoxpotenzials, der Gesamtmineralisation sowie des pH-Wertes.

4.2.2 pH-Wert

Als pH-Wert wird der negative dekadische Logarithmus der Wasserstoffionen-Aktivität in Lösungen bezeichnet:

$$\text{pH} = -\log\{\text{H}^+\} \quad (14)$$

Der pH-Wert ist somit von den $\{\text{H}^+\}$ - und $\{\text{OH}^-\}$ -Ionenaktivitäten abhängig. In neutralen Lösungen ist die Konzentration an $[\text{H}^+]$ - und $[\text{OH}^-]$ -Ionen gleich, sie haben einen pH-Wert von 7,0. In sauren Lösungen nimmt die $[\text{H}^+]$ -Ionenkonzentration zu, der pH-Wert wird kleiner als 7,0. Umgekehrt ist es in basischen Lösungen, hier nimmt die $[\text{H}^+]$ -Ionenkonzentration ab, das heißt, der pH-Wert wird größer als 7,0.

Der pH-Wert beeinflusst die Löslichkeit und die Ionenkonzentration vieler Stoffe im Wasser (HÖLTING 1996). Nur wenige Ionen, wie die des Natriums, Kaliums, Nitrats und des Chlorids, bleiben über fast alle pH-Stufen gleich löslich. Die Löslichkeiten der meisten Metall-Ionen hängen dagegen stark vom pH-Wert ab. Dazu gehören vor allem Elemente, die je nach Reaktionspartner als Base oder auch als Säure reagieren können (amphotere Elemente). Diese Verbindungen sind in saurem Milieu leicht löslich und fallen bei steigendem pH-Wert als Hydroxid oder Salz aus. Bei fortschreitender Alkalisierung gehen sie unter Bildung von basischen Komplexen wieder in Lösung (HÖLTING 1996).

Die pH-Wert-Messung erfolgte mit dem *MYRON L* Ultrameter 6P. Damit kann der pH-Wert auf 0,01 Einheiten genau bestimmt werden. Eine Kalibrierung mit Standard-Pufferlösungen vor Beginn der Messreihe ist erforderlich (ALBRECHT et al. 1979). Es handelt sich um ein elektrometrisches Messverfahren, welches auf der Messung elektrischer Potenzialdifferenzen im Wasser beruht. Für die Messung ist eine Elektrode notwendig, deren Potenzial von der Wasserstoffionenaktivität abhängt. Meist wird dazu eine Glaselektrode verwendet, die mit einem Elektrolyt von konstantem pH-Wert (Innenelektrolyt) gefüllt ist, sodass ihr Potenzial nur vom pH-Wert der Messlösung (Außenelektrolyt) abhängt. Bei diesem Messverfahren wird immer nur die Potenzialdifferenz zwischen Messelektrode (Glaselektrode) und Bezugselektrode (Silber/Silberchloridelektrode) gemessen.

4.2.3 Sauerstoffgehalt

Der Sauerstoffgehalt nimmt in der Wasserchemie eine zentrale Stellung ein. Er ist entscheidend für biochemische Vorgänge in natürlichen Gewässern. Er wird in mg/L Sättigungskonzentration und in Prozent Sättigungskonzentration angegeben. Die Sättigungskonzentration in mg/L ist besonders von der Wassertemperatur, dem Luftdruck sowie vom Salzgehalt des Wassers abhängig. Bei steigender Temperatur und/oder steigendem Salzgehalt sinkt die Sättigungskonzentration, bei steigendem Luftdruck hingegen wird sie größer. Die Sättigungskonzentration in Prozent ist von diesen Einflussgrößen unabhängig. Die Sauerstoffbilanz eines Gewässers ergibt sich aus der Zufuhr von Sauerstoff aus der Atmosphäre, durch Photosynthese oder durch allochthone Zufuhr (Mischung durch Zuflüsse) abzüglich des Verbrauchs von Sauerstoff durch biologische Oxidation, Abbau und Mineralisation organischer Stoffe (Destruktion) sowie durch Entgasung in die Atmosphäre. Die Messung des Sauerstoffes vor Ort erfolgte elektrometrisch mit Hilfe des Multiparameter-Instrumentes der WTW (Wissenschaftlich-Technische-Werkstätten GmbH, Weilheim) vom Typ MultiLine P4 mit dem Sauerstoffsensor Cellox 325 (siehe Abb. 7). Das Messverfahren beruht auf dem Prinzip der amperometrischen Messzelle nach CLARK. Als Elektrodensystem dienen eine Ag-Anode und eine KCl-Gel-Kathode (CLARK-Sensor). Der Sauerstoff wird an einer Arbeitselektrode (Ag-Anode) elektrochemisch reduziert, wobei sich die in Gleichung 15 und 16 aufgeführten Teilreaktionen abspielen.



Abb. 7: WTW MultiLine P4 Mehrfachparametermessgerät mit Sauerstoffsensor CellOx 325 und pH-Einstabmesskette mit integriertem Temperaturmessfühler SenTix 91T (Herstellerfoto)

Die Elektroden selbst sind durch eine sauerstoffselektive Folienmembran vom zu messenden Medium getrennt. Der durch die Membran diffundierende Sauerstoff erzeugt einen seiner Konzentration proportionalen Strom, der vom Gerät angezeigt wird, wobei Druck- und Temperaturkorrektur automatisch erfolgen, für die Kalibrierung ist der Sauerstoffpartialdruck der Luft ausreichend. Vor jeder Messreihe erfolgte eine Kalibrierung des Gerätes mit angesteckter Sonde, welche auf entsprechenden Tastendruck automatisch ablief. Das Ergebnis der Messung wird entweder in mg/L oder in Prozent der Sättigung als Dissolved Oxygen (D. O.) angegeben (SCHWEDT 1995).



Da durch die Kathodenreaktion Sauerstoff verbraucht wird, muss für die Messung eine Mindestanströmung des Sensors gewährleistet sein. Bei Messungen in Fließgewässern stellt dies kein Problem dar. In stehenden Gewässern oder im Labor kann es durch die notwendige Bewegung der Messelektrode zu Verfälschungen der Ergebnisse kommen (PFEIFFER & PECHER 1997).

4.2.4 Redoxpotenzial

Redoxreaktionen spielen eine essentielle Rolle für sämtliche Wechselwirkungsprozesse in aquatischen Systemen. Sie bestehen aus den beiden Teilreaktionen Oxidation und Reduktion und können durch den Sauerstoff- und Elektronentransfer charakterisiert werden. Bei diesen Reaktionen finden Elektronenübergänge statt. Freie Elektronen treten bei den Reaktionen nicht auf, es können nur Oxidationsreaktionen gekoppelt mit Reduktionsreaktionen stattfinden. Die Quantifizierung der Redoxvorgänge erfolgt durch die Messung der Redoxpotenziale. Bei Redoxreaktionen stellt sich ein Potenzial ein, dessen Betrag vom jeweiligen Redoxpartner abhängig ist (HÖLTING 1996).

In welche Richtung und wie schnell der Prozess abläuft, ist von der Menge der frei werdenden Energie abhängig. Je mehr das Gleichgewicht $\text{Red} \leftrightarrow \text{Ox} + e^-$ auf der oxidierenden Seite liegt, desto stärker elektronegativer ist das Potenzial. Dabei ist die oxidierende Wirkung umso stärker, je positiver das Potenzial ist. Die reduzierende Wirkung ist umso stärker, je negativer das Potenzial ist. Redoxpotenziale lassen sich durch die NERNSTsche Gleichung beschreiben.

$$E = E_0 + 2,3 \cdot \frac{R \cdot T}{Z \cdot F} \cdot \ln \frac{[\text{Ox}]}{[\text{Red}]} \quad (17)$$

mit:	R	Gaskonstante ($8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$)
	F	Faradaykonstante ($96,485 \cdot 10^3 \text{ V}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$)
	Z	Anzahl der ausgetauschten Elektronen
	T	Temperatur in Kelvin
	E_0	Standard-Elektrodenpotenzial in Volt (Normalpotenzial)
	E	Elektrodenpotenzial
	Ox	Aktivität der oxidierten Form des Stoffes
	Red	Aktivität der reduzierten Form des Stoffes

In Fließgewässern wird das Redoxpotenzial durch die Anwesenheit oxidierbarer organischer Stoffe und durch den verfügbaren Sauerstoffanteil bestimmt. Somit ist eine Abnahme des Redoxpotenzials durch Sauerstoff zehrende Prozesse begründet. Die Redoxspannung sollte lediglich als Anhaltspunkt für den Ablauf aerober oder anaerober Prozesse herangezogen werden. Dabei können die Verhältnisse im aquatischen System, je nach gemessener Redoxspannung, wie folgt beschrieben werden:

- Aerobe Verhältnisse im Wasser: Messung einer positiven Redoxspannung
- Anaerobe Verhältnisse im Wasser: Messung einer negativen Redoxspannung (< -200 mV)
- Übergangsverhältnisse: Messung von Werten zwischen 0 und -200 mV

Das Redoxpotenzial wurde mit dem *MYRON L* Ultrameter 6P und wahlweise auch mit dem *WTW MultiLine P4* bestimmt. Das Messprinzip beruht darauf, dass eine in eine Lösung eingetauchte Elektrode entweder Elektronen aufnehmen oder abgeben kann. Die Aufnahme oder Abgabe der Elektronen ist von der Konzentration des Reduktions- bzw. Oxidationsmittels abhängig. An der Elektrode baut sich ein Potenzial auf, das der Oxidations- oder Reduktionsfähigkeit der Lösung entspricht. Über den ermittelten E_H -Wert (Redoxpotenzial) kann der Redoxzustand eines Stoffgemisches angegeben werden. Der E_H -Wert charakterisiert das in Volt ausgedrückte Potenzial eines Redoxsystemes, gemessen gegen eine Normal-Wasserstoffelektrode. Da die Redoxspannung definitionsgemäß auf das Potenzial der Normal-Wasserstoffelektrode bezogen ist, wurden die gemessenen Werte mittels folgender Formel (nach KÖLLE 2003) um das Potenzial der Bezugselektrode korrigiert:

$$E_H(\text{korr.}) = E_H - 0,198 \cdot (T - 25) + \sqrt{(50230,214 - 294,677) \cdot T} \quad (18)$$

mit: T Temperatur in Grad Celsius
 E_H gemessenes Redoxpotenzial in mV
 $E_H(\text{korr.})$ Elektrodenpotenzial

Weiterhin ist festzuhalten, dass bei der Messung des Redoxpotenzials nur ein Mischpotenzial gemessen wird. Es kann demnach nicht auf die Konzentration einzelner Redoxpaare geschlossen werden.

4.2.5 Elektrische Leitfähigkeit und Gesamtmineralisation

Die elektrische Leitfähigkeit beruht auf der Eigenschaft eines Stoffes, elektrischen Strom zu leiten. Sie ist als reziproker Wert des elektrischen Widerstandes definiert. Für Lösungen stellt sie einen Summenparameter der gelösten dissoziierten Stoffe dar. Die in Ionen dissoziierten Inhaltsstoffe des Wassers verleihen ihm seine elektrische Leitfähigkeit. Diese ist abhängig von:

- der Temperatur des Wassers,
- der Konzentration des gelösten Stoffes
- der Art seiner Dissoziation und dem
- Dissoziationsgrad sowie
- von der Wertigkeit und der
- Wanderungsgeschwindigkeit der gebildeten Anionen bzw. Kationen.

Bei gleicher Temperatur sind Unterschiede in der elektrischen Leitfähigkeit verschiedener Wässer eine Funktion von Konzentration, Art und Wertigkeit der gelösten Ionen (MATTHESS 1994). Tabelle 5 stellt spezifische Leitfähigkeiten verschiedener Wässer sowie die höchste gemessene Leitfähigkeit der untersuchten Grubenwässer dar (PFEIFFER & PECHER 1997, SCHWEDT 1995).

Tab. 5: Spezifische und gemessene Leitfähigkeiten verschiedener Wässer (* aus PFEIFFER & PECHER 1997, SCHWEDT 1995; ¹Messwert)

Art des Wassers	Leitfähigkeit in $\mu\text{S}/\text{cm}$
bidestilliertes Wasser *	0,3
Regenwasser *	5 bis 30
Süßwasser *	30 bis 100
Meerwasser *	45.000 bis 55.000
Grubenwasser, Friedrich-Stollen ¹	4884

Die elektrische Leitfähigkeit wurde mit dem *MYRON L* Ultrameter 6P oder mit dem *WTW* MultiLine P4 und der Standard-Leitfähigkeitsmesszelle *WTW* TetraCon 325 gemessen. Das Messprinzip beruht auf der Eigenschaft eines Lösungsmittels (Wasser), elektrischen Strom zu leiten. Die Grundlage der Messung ist die Wanderung von Ionen im elektrischen Feld und ihre Elektrolyse an der Anode bzw. Kathode (PFEIFFER & PECHER 1997). Die ermittelte elektrische Leitfähigkeit lässt aber keine Aussage über die Art der vorhandenen Ionen zu (SCHWEDT 1995). Wenn Salze durch elektrolytische Dissoziation als Ionen vorliegen, kann über die gemessene elektrische Leitfähigkeit ohne großen Aufwand auf den Gesamtgehalt an gelösten Stoffen geschlossen werden. So entsprechen in Näherung $1.000 \mu\text{S}/\text{cm}$ etwa $1.000 \text{ g}/\text{L}$ gelöstem Feststoff (Abdampfrückstand der filtrierten Probe).

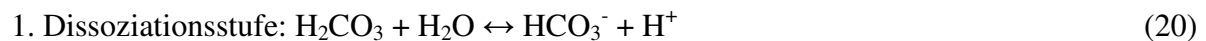
Des Weiteren steht die Gesamtmineralisation, die alle gelösten Feststoffe (Total Dissolved Solids – TDS) einschließt, im Zusammenhang mit der elektrischen Leitfähigkeit. Die Gesamtmineralisation (TDS) wird in ppm oder g/L angegeben.

4.2.6 Säure- und Basenkapazität

Das Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht spielt bei natürlichen Wässern, insbesondere wegen der sehr guten Puffereigenschaften, eine große Rolle. Durch Lösung von CO_2 aus der Luft und Lösung von CO_2 , das bei der Umsetzung von organischer Substanz im A-Horizont des Bodens entsteht, wird im Wasser Kohlensäure gebildet (Glg. 19).



Die gebildete Kohlensäure dissoziiert in zwei Dissoziationsstufen in die Kohlensäurespezies HCO_3^- und CO_3^{2-} :



Der Anteil an H_2CO_3 kann aufgrund seiner Konzentration von $\leq 0,01 \%$ vernachlässigt werden. Somit kann anorganischer Kohlenstoff als CO_2 -Gasmolekül, als HCO_3^- und CO_3^{2-} -Ion auftreten. In welchem Verhältnis die einzelnen Kohlensäurespezies im Wasser vorkommen, hängt vom jeweiligen pH-Wert ab (Abb. 8).

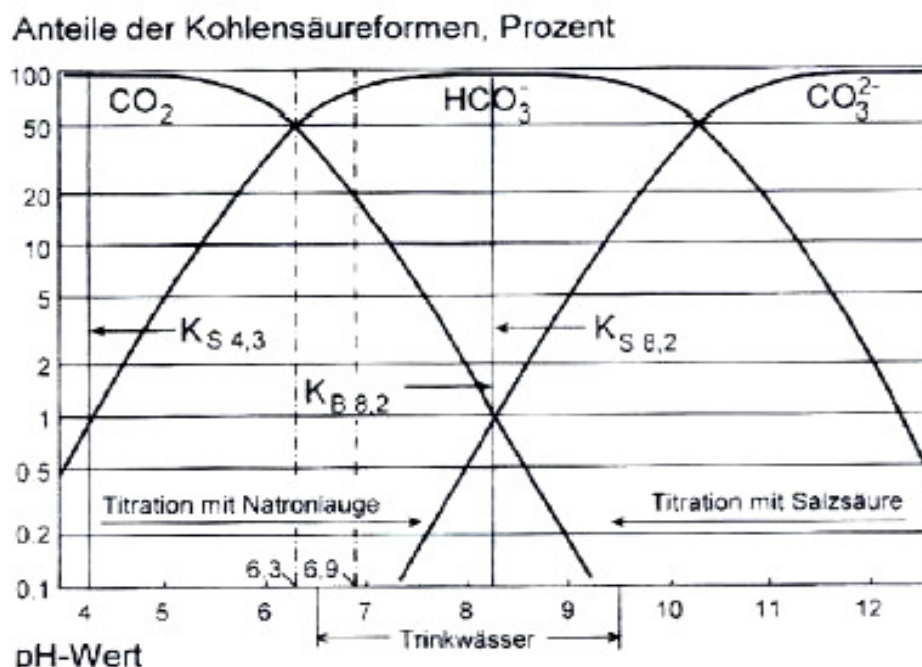


Abb. 8: Komponentenverteilung des anorganischen Kohlenstoffs (aus KÖLLE 2003)

Bei einem pH-Wert < 4 ist nur CO_2 , zwischen pH-Wert 7 und 10 fast nur HCO_3^- und bei einem pH-Wert > 10 überwiegend CO_3^{2-} vorhanden. Zusätzlich wird vorausgesetzt, dass die Konzentrationen anderer schwacher Säuren und Basen (aus anderen Puffersystemen) im

Vergleich zu Kohlensäure und ihren Anionen vernachlässigbar gering sind. Die Bestimmung der Säure- und Basenkapazität dient in der Wasseranalytik als Grundlage zur Berechnung des gelösten Kohlendioxides, der Gehalte an Hydrogenkarbonat- und Karbonationen sowie der Summe des anorganischen Kohlenstoffes (HÜTTER 1992, aus TAMME 2002). Zur Bestimmung der Säurekapazität K_s (4,3) und der Basenkapazität K_b (8,2) wurde ein Digitaltitrator der Firma *HACH LANGE* eingesetzt (siehe Abb.9). Die Genauigkeit des Gerätes liegt bei $\pm 1\%$.



Abb. 9: *HACH LANGE* Digitaltitrator (Herstellerfoto)

Es konnten gelöste starke und schwache Basen maßanalytisch durch Titration mit einer starken Säure ($1,6\text{ N H}_2\text{SO}_4$) bestimmt werden. Starke und schwache Säuren wurden durch die Titration mit einer starken Base ($0,1\text{ N NaOH}$) bestimmt. Jeder der Titranten liegt dabei einsatzfertig in einer auswechselbaren Patrone vor und wird per Knopfdruck oder durch Drehen am Zählrad über den Dosierschlauch in die Probe titriert. Die Schwefelsäure bzw. Natronlauge wird mit der Ausgangslösung (50 mL) unter ständiger Bewegung vermischt und mit Hilfe des pH-Messgerätes (*WTW MultiLine P4* mit temperaturkalibrierter pH-Sonde) wird die Änderung des pH-Wertes gemessen. Der Verbrauch des eingesetzten Titranten ist am mechanischen Zählwerk des Digitaltitrators abzulesen, wobei 800 Einheiten einem Verbrauch von 1 mL entsprechen. Das Zählwerk sollte vor Beginn auf 0 gestellt werden. Bei der Dosierung von Natronlauge wird bei einer bestimmten Konzentration ein Punkt erreicht, an dem das gesamte CO_2 umgesetzt ist. Der anorganische Kohlenstoff besteht nun nahezu ausschließlich aus Hydrogenkarbonat. Der pH-Wert eines solchen Wassers liegt bei $8,2$. Die Basenkapazität bis $8,2$ ist daher ein Maß dafür, wie viel CO_2 die Probe enthalten hat.

Im Gegensatz dazu wird bei der Dosierung der Salzsäure ein Punkt erreicht, an dem das gesamte Hydrogencarbonat umgesetzt ist. Der anorganische Kohlenstoff besteht nun zu einem überwiegenden Teil aus CO_2 . Der pH-Wert eines solchen Wassers liegt bei 4,3. Die Säurekapazität bis pH 4,3 ist also ein Maß dafür, wie viel Hydrogencarbonat die Probe enthalten hat.

4.3 Bestimmung des Durchflusses

An sämtlichen aufgefundenen Wasseraustritten wurden jeweils die Schüttungsmengen erfasst. Je nach Stärke der Schüttung kamen dort verschiedene Verfahren zum Einsatz. Bei zu geringer Schüttung und überall dort, wo es unmöglich erschien, diese durch die folgenden beiden Methoden messtechnisch zu erfassen, wurde stattdessen eine Schätzung vorgenommen.

4.3.1 Volumetrische Messung

Bei der volumetrischen Messung wird die zur Füllung eines Gefäßes mit bekanntem Volumen benötigte Zeit gemessen. Dieses Verfahren eignet sich zur Messung geringer Schüttungsmengen (MATTHESS & UBELL 1983). Als Messbehältnis kam in allen Fällen ein Kunststoffeimer mit einem Volumen von zehn Litern zum Einsatz.

4.3.2 Salzverdünnungsmethode

Bei der Salzverdünnungsmethode mit einmaliger Zugabe (Dirac-Impuls) handelt es sich um ein indirektes Messverfahren. Die Messmethodik beruht auf einem Tracerversuch mit einer Kochsalzlösung (Natriumchloridlösung) als gebräuchlichstem Markierungsstoff mit folgenden Vorteilen:

- Der Markierungsstoff ist im Wasser gut löslich.
- Es ist keine hohe Konzentration im Gewässer erforderlich.
- Der Durchgang der Konzentrationserhöhung ist gut messbar.
- Der Tracer ist sowohl für Gewässer als auch Messpersonal unkritisch.
- Das Verfahren ist kostengünstig in der Anwendung.

Zunächst wird eine gerätespezifische Kalibrierung des Messgerätes für die jeweilige Messstelle durchgeführt. Bei der Verdünnungsmethode wird dem fließenden Wasser an einer Impfstelle eine definierte Masse des Markierungsstoffes (Tracers) zugegeben. Die Zugabe des Salzes („Impfung“) kann einmalig oder kontinuierlich mit konstanter Rate erfolgen, wobei im Rahmen dieser Arbeit nur die einmalige Eingabe zur Ausführung kommt. Am Messort unterhalb der Eingabestelle wird nach einer ausreichenden Fließstrecke, innerhalb derer eine vollständige Durchmischung des Markierungsstoffes mit dem fließenden Wasser erfolgen kann, der Verlauf der Salzkonzentration gemessen und daraus auf den Abfluss rückgeschlossen. Der NaCl-Tracer kann indirekt über die Erhöhung der elektrischen Leitfähigkeit nachgewiesen werden, da diese Größe vom Salzgehalt des Wassers abhängt. Unter der Voraussetzung einer vollständigen Durchmischung ist die Verdünnung des NaCl-Tracers zum Durchfluss des Gewässers proportional. Zudem sollte die gewählte Fließstrecke folgende Eigenschaften aufweisen:

- Der Durchfluss sollte auf der Messstrecke möglichst konstant sein.
- Es sollten im Optimalfall keine Zu- und Abflüsse vorhanden sein.
- Der Fliessgewässerabschnitt sollte keine Strudeltöpfe (Gumpen) aufweisen.



Abb. 10: Salztracer-Messgerät *SOMMER* MST-4 mit Leitfähigkeitsmesssondendublette (Herstellerfoto)

Zum Einsatz kommt das Messgerät MST-4 von *SOMMER* Mess-Systemtechnik GmbH & Co. KG mit Firmensitz in Koblach (Vorarlberg, Österreich), welches über zwei separate Leitfähigkeitsmesssonden verfügt, die simultan arbeiten (siehe Abbildung 10). Mit dieser

Konfiguration ist es möglich, vor Ort eine Plausibilitäts- und Qualitätskontrolle der Messungen durchzuführen.

Weichen die von den Sonden gemessenen Durchflüsse zu stark voneinander ab, deutet dies auf eine unvollständige Durchmischung des Tracers im Gewässer hin und damit auch auf eine fehlerhafte Messung. Systeme mit nur einer Leitfähigkeitsmesssonde können diese häufige Fehlerquelle nicht detektieren.

Auf eine ausführliche Dokumentation der Daten von durchgeführten Durchflussmessungen sowie der dahinter stehenden Theorie wird hier bewusst verzichtet. Die Ergebnisse aller Messungen befinden sich in Anhang 1 und im folgenden Kapitel.

5 Ergebnisse und Auswertung

5.1 Darstellungsarten der Analysendaten

5.1.1 Piper-Diagramm

Im Piper-Diagramm wird das Anionen- und Kationen-Dreieck mit einem Viereckdiagramm kombiniert. Das Piper-Diagramm ist eine Verhältnisdarstellung der Ionenbeziehungen zwischen Kationen und Anionen im Vergleich. Über die grafische Darstellung können Analysen abweichender Zusammensetzung schnell erkannt und identifiziert werden.

Das Piper-Diagramm (Abb. 11) wurde mit dem Programm *GW_CHART* des USGS (United States Geological Survey) erstellt. Es enthält zusätzlich die nachträglich manuell eingefügte Typeneinteilung nach FURTAK & LANGGUTH, 1967:

Normal erdalkalische Wässer

- a) überwiegend hydrogencarbonatisch
- b) hydrogencarbonatisch-sulfatisch
- c) überwiegend sulfatisch

Erdalkalische Wässer mit höherem Alkaligehalt

- d) überwiegend hydrogencarbonatisch
- e) überwiegend sulfatisch/chloridisch

Alkalische Wässer

- f) überwiegend (hydrogen-)carbonatisch
- g) überwiegend sulfatisch/chloridisch

Subtypen normaler, überwiegend hydrogencarbonatischer Wässer nach a)
in Kontakt mit

- 1) überwiegend Ca-Karbonat
- 2) überwiegend Ca-Mg-Karbonat (oder Mischungen von Subtypus 1) und 3))
- 3) überwiegend Dolomit

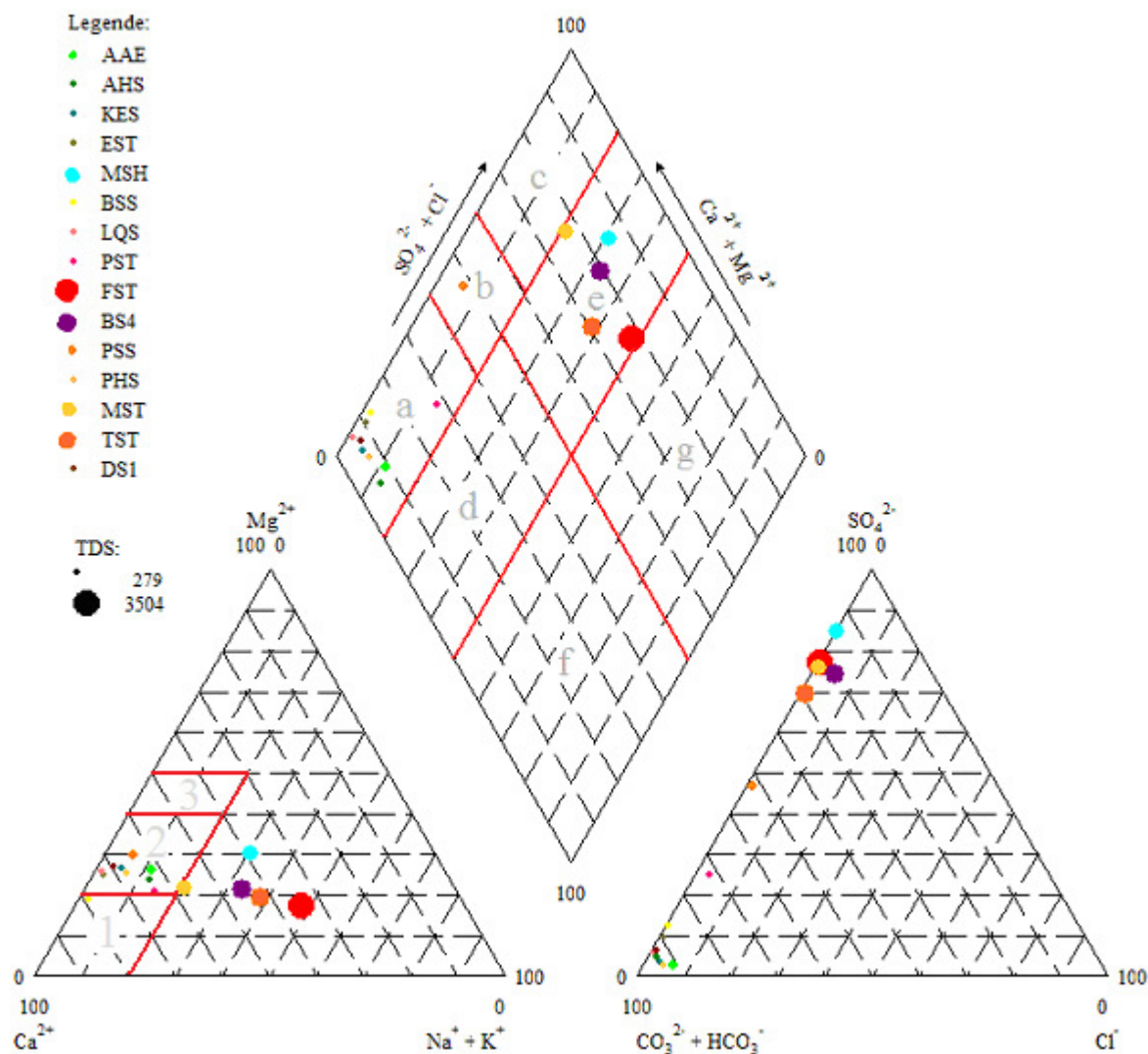


Abb. 11: GW_CHART-Piperdiagramm (nach PIPER, 1944) der untersuchten Messpunkte modifiziert nach FURTAKE & LANGGUTH, 1967; (Größe der Punkte richtet sich nach der Gesamtmineralisation)

Wie aus Abbildung 11 zu ersehen ist, finden sich sämtliche stärker belasteten Grubenwässer im Feld e) der überwiegend sulfatisch/chloridischen, erdalkalischen Wässer mit höherem Alkaligehalt. Die Mehrzahl der Proben zeichnet im Feld a) der normalen, erdalkalischen, überwiegend hydrogencarbonatischen Wässer, wobei von diesen wiederum die Mehrheit zum Subtyp 2) gehört und sich so maßgeblich im Kontakt mit Kalzium- und Magnesiumkarbonat befindet. Lediglich das Grubenwasser des Sulzer Stollens, Peißenberg, befindet sich bei dieser

Betrachtung im Feld b) der normalen, erdalkalischen Wässer mit hydrogencarbonatisch-sulfatischem Chemismus.

Fehlende TDS-Werte in den Datenbeständen der Vor-Ort-Parameter wurden über die lineare Abhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit von der Gesamtmineralisation errechnet. Von diesem Hilfsverfahren betroffen sind die Messpunkte Kemathstollen (KES), Wasserstollen (BS4), alle Peißenberger MP namentlich Sulzer Stollen (PSS), Mittelstollen (MST) und Tiefstollen (TST) sowie der Deisenrieder Stollen (DS1).

5.1.2 Balken-Diagramme

Die Balken-Diagramme für Vor-Ort-Parameter, Hauptionen und Spurenelemente wurden mit dem Programm *EXCEL 2007* der Firma Microsoft ausgearbeitet. Mit wenigen Ausnahmen (z. B. pH-Wert, el. Leitfähigkeit) sind in den 2D- und 3D-Balken-Diagrammen auf der Abszisse jeweils die Kürzel der Messstellen und auf der Ordinate die Messwerte des zu untersuchenden Parameters aufgetragen.

5.2 Statistische Methoden zur Evaluierung der Ergebnisse

Die wasserchemischen Analysen dieser Arbeit enthalten eine Vielzahl von Parametern, die durch unterschiedlichste Prozeduren erarbeitet werden. Die Möglichkeiten, dass sich Fehler einschleichen, sind mannigfaltig. Schon bei der Probenahme, aber auch bei der Probenlagerung (Licht, Temperatur), dem Probentransport und dem zeitlichen Abstand bis hin zum eigentlichen Analyseverfahren können Beeinträchtigungen verschiedenster Art und Weise auftreten, welche die Ergebnisse verfälschen würden. Deshalb müssen diese hinsichtlich ihrer Präzision und Richtigkeit statistisch bewertet und auf Plausibilität überprüft werden (MERKEL & PLANER-FRIEDRICH 2003).

Die Darstellung und Beurteilung der Wasserbeschaffenheit beruht auf Stichproben und Einzelmessungen. Messstellen, an denen die Messungen stattfanden, wurden von der Lage immer möglichst so gewählt, dass sie für die Lokalität umfänglich repräsentativ sind. Durch abwechselnd auftretende Fehler kann es zu einer starken Abweichung der Messwerte in einer Messreihe kommen. Derartig stark abweichende Messwerte werden als Ausreißer bzw. ausreißerverdächtige Werte bezeichnet. Sie verfälschen die Ergebnisse und sollten nicht in die statistischen Berechnungen mit einbezogen werden. Gründe für Ausreißer können auch Fehler im Labor oder bei der Probennahme, Tippfehler und Übertragungsfehler sein.

Zur besseren Einschätzung der Analyseergebnisse dienen statistische Kennwerte. Diese charakterisieren eine Stichprobe oder Messreihe in bündigster Form. Es kann unterschieden werden zwischen Lage- und Streuungskennzahlen. Lokalisationsmaße (Mittelwert) beschreiben die zentrale Tendenz einer Datenverteilung, während Dispersionsmaße (Varianz, Standardabweichung) ihre Breite charakterisieren.

Der Mittelwert \bar{x} ist die summarische Beschreibung umfangreicher Datenreihen unter Berücksichtigung aller Einzelwerte. Er reagiert somit sehr empfindlich auf Ausreißer und Extremwerte. Der Mittelwert wird wie folgt berechnet:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \quad (22)$$

Ein wichtiges Maß für die Streuung von Daten um den Mittelwert ist die Varianz s^2 , bei der alle Werte einzeln betrachtet werden. Die Varianz ergibt sich aus dem Quadrat der Abweichungen vom Mittelwert.

$$s^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 \quad (23)$$

Aus der Varianz ergibt sich die Standardabweichung, welche zur Angabe der Streuung um den Mittelwert dient.

$$s = \sqrt{s^2} \quad (24)$$

Die Streuung um den Mittelwert ist ein Maß für die Genauigkeit und Reproduzierbarkeit einer Mehrfachmessung. Sie wird vor allem durch zufällige Fehler verursacht. Der zufällige Fehler stellt die Abweichung der Messwerte bei mehreren Wiederholungsmessungen des Analyten dar und beeinflusst die Messergebnisse in verschiedenster nicht absehbarer Weise.

Eine weitere Art des Fehlers ist der absolute Fehler. Dieser entsteht etwa durch ungenaue Messmethoden oder falsche Kalibrierungen. Der absolute Fehler ist die Differenz zwischen der gemessenen fehlerhaften Konzentration x und der tatsächlich in der Probe vorhandenen

Konzentration μ . Durch ihn wird die wahrscheinlichste bzw. tatsächliche Konzentration beschrieben, die in der Probe vorkommt (HEINRICHS & HERRMANN 1990).

Zur Verifizierung der Vollständigkeit der Analyse existiert die Plausibilitätsüberprüfung, bei der entweder der Bilanzfehler (Fehler der Ionenbilanz) ermittelt wird oder die Kontrolle erfolgt anhand der elektrischen Leitfähigkeit durch einen Vergleich von Messwert und Rechenergebnis. Im Wasser muss die Anzahl der positiv geladenen Ionen und Komplexe unter Berücksichtigung ihrer Wertigkeit mit denen der negativ geladenen Ionen und Komplexe übereinstimmen. Wenn die Konzentrationen in mg/L vorliegen, müssen diese in mmol(eq)/L umgerechnet werden. Der Bilanzfehler, auch als Ionenbilanzfehler bezeichnet, ergibt sich dann wie folgt:

$$F1(\%) = \frac{\sum Kationen - \sum Anionen}{(\sum Kationen + \sum Anionen)} * 100 \quad (25)$$

In Deutschland empfiehlt unter anderem der DVWK (1992) die Formel:

$$F2(\%) = \frac{\sum Kationen - \sum Anionen}{(\sum Kationen + \sum Anionen) * 0,5} * 100 \quad (26)$$

Analysen mit einem Bilanzfehler (F2) größer als 2 % (Analysen mit größer 2 meq/L Kationen- und Anionensumme) bzw. größer als 5 % (Analysen mit kleiner 2 meq/L Kationen- und Anionensumme) gelten als nicht zuverlässig und sollten als fehlerhaft verworfen werden. In der Formel zur Berechnung des Bilanzfehlers werden meist nur die vier Haupt-Kationen und Anionen in meq/L berücksichtigt. Ohne Berücksichtigung bleibt die Bildung von Komplexen. Verwendet man zur Berechnung dieses Fehlers ein Programm wie *PHREEQC* (siehe auch Kap. 5.4), werden die Komplexe auch mit einbezogen, da die Software den Bilanzfehler aus der Summe aller negativ und positiv geladenen Komplexe berechnet. Die Ergebnisse der Modellierung inklusive der Fehlerberechnung sind ungekürzt in Anhang 2 zu finden. Weiterhin kann der Fehler der Ionenbilanz mit Hilfe der Ionenstärke (Ionic Strength) und des Ladungsgleichgewichtes (Electrical Balance) berechnet werden (Glg. 27). Diese Methode ist nach MERKEL (aus TAMME 2002) den natürlichen hydrogeochemischen Gegebenheiten gut angepasst. Die Ausgangsgrößen (Ionenstärke, Ladungsgleichgewicht) können dabei über eine hydrogeochemische Modellierung ermittelt werden, z. B. mit *PHREEQC*.

$$F3(\%) = \frac{\text{Ladungsgleichgewicht}}{\text{Ionenstärke}} \cdot 100 \quad (27)$$

Eine weitere Plausibilitätsprüfung kann mit Hilfe der elektrischen Leitfähigkeit durchgeführt werden. Zum einen besagt eine Faustregel, dass die elektrische Leitfähigkeit in $\mu\text{S}/\text{cm}$ multipliziert mit 0,7 den Abdampfdruckstand in mg/L ergibt. Der Abdampfdruckstand ist die Summe aller Wasserinhaltsstoffe, wobei die Neben- und Spurenelemente in der Regel nur eine untergeordnete Rolle spielen. Der berechnete Abdampfdruckstand kann dann mit der Gesamtmineralisation (TDS) verglichen werden, welche teilweise vor Ort bestimmt wurde. Überdies kann die gemessene elektrische Leitfähigkeit mit der berechneten Leitfähigkeit verglichen werden. Die Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit geschieht unter Berücksichtigung der ionenspezifischen Leitfähigkeit und der Ionenkonzentration aus den Analysedaten (HÖLTING 1996):

$$\kappa = \sum \lambda \cdot c \quad (28)$$

mit: κ elektrische Leitfähigkeit in $\mu\text{S}/\text{cm}$
 λ spezifische Ionenleitfähigkeit in $\text{S} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot (\text{mol} / \text{Wertigkeit})^{-1}$ für 25°C
 c Ionenkonzentration in $\text{mmol}(\text{eq})/\text{L}$

5.3 Fehlerdiskussion und Plausibilitätskontrolle

5.3.1 Ionenbilanz

Beim Vergleich der Fehlerwerte von Modellierung und Laboranalyse fällt auf, dass diese nur teilweise zu korrelieren sind. Dazu müssten gemäß DVWK (1992) viele Werte verworfen werden, denn Fehler jenseits der Zwei-Prozent-Grenze sollten nicht als Ergebnis akzeptiert werden. Da generell nur wenige Grubenwässer eine ausbalancierte Ionenbilanz aufweisen, wurde in dieser Betrachtung keines der Resultate ausgeschlossen (siehe Tab. 6).

Tab. 6: Fehlerwerte der Ionenbilanz von Modellierung und Analysedaten im Vergleich (Werte des von *PHREEQC* berechneten Fehlers sind auf eine Nachkommastelle gerundet)

MP	AAE	AHS	KES	EST	MSH	BSS	LQS	PST	FST	BS4	PSS	PHS	MST	TST	DS1
Fehler in % (<i>PHREEQC</i>)	6,5	9,9	2,0	4,5	-3,5	5,2	0,3	12,6	-1,6	-9,5	-0,5	-10,7	-9,1	-9,2	-3,0
Fehler in % (Ionenbilanz)	13	1,0	0,0	2,0	-3,0	-3,0	0,0	6,0	4,0	8,0	-2,0	-10,0	-8,0	-9,0	-5,0

5.3.2 Gemessene und berechnete elektrische Leitfähigkeit

Der Vergleich (siehe Tab.7) der gemessenen elektrischen Leitfähigkeit mit der nach Gleichung 28 berechneten elektrischen Leitfähigkeit zeigt, dass alle Rechenwerte höher liegen als die tatsächlich gemessenen.

Tab. 7: Gemessene und berechnete elektrische Leitfähigkeit im Vergleich (berechnete Werte sind ganzzahlig gerundet)

MP	AAE	AHS	KES	EST	MSH	BSS	LQS	PST	FST	BS4	PSS	PHS	MST	TST	DS1
el. LF in $\mu\text{S}/\text{cm}$ (gemessen)	849	748	675	603	2409	560	407	773	4884	3474	1007	568	2480	3200	612
el. LF in $\mu\text{S}/\text{cm}$ (berechnet)	980	850	806	700	3897	710	474	916	7688	6302	1408	703	5032	5624	727
Differenz in %	13	12	16	14	38	21	14	16	36	45	28	19	51	43	16

Weiterhin fällt auf, dass die Differenz zwischen errechnetem und gemessenem Wert umso größer ist, je größer die elektrische Leitfähigkeit absolut ist. Die Differenzen zwischen den Wertepaaren bewegen sich zwischen 12 % (Auer Hauptstollen, AHS) und 51 % (Mittelstollen Peißenberg, MST). Ein Teilbetrag der Abweichungen ist mutmaßlich auf Verdünnungseffekte zurückzuführen, die von den Durchflussmengen bedingt werden.

5.4 Hydrogeochemische Modellierung mit PHREEQC

5.4.1 Einleitung

Um einen Überblick über die Speziesverteilung und die Sättigungsindizes des Wassers zu bekommen, wurde mit den Analysedaten der einzelnen Messpunkte eine Berechnung mit dem Programm *PHREEQC* (für das Betriebssystem *MICROSOFT Windows*) des USGS von D. L. Parkhurst und C. A. J. Appelo durchgeführt. Zu berücksichtigen ist dabei, dass *PHREEQC* bei der Fehlerberechnung die internationale Formel nach Gleichung 24 benutzt, während in Deutschland der DVWK (1992) die Formel in Gleichung 25 empfiehlt. Der Fehler nach DVWK (1992) entspricht damit genau dem Doppelten des errechneten Fehlers der Software. Bei der Betrachtung der Speziesverteilung und den gesättigten bzw. untersättigten Mineralphasen wurde in *PHREEQC* der Datensatz *WATEQ4F* verwendet. Werte, die unterhalb der Bestimmungsgrenze lagen, wurden durch den halben Wert ihrer Grenzkonzentration ersetzt. Die Gesamtheit der Ergebnisse ist in Anlage 2 zusammengefasst.

Nachfolgend soll nur kurz auf die dominierenden Phasen mit einem Sättigungsindex > -1 eingegangen werden, die sich durch die Modellierung ergeben haben.

5.4.2 Auswertung

Eine Gruppe von Stoffen war bei allen Messpunkten dominant. Zu dieser Gruppe gehörten die Minerale bzw. Verbindungen Aragonit (CaCO_3), Baryt (BaSO_4), Kalzit (CaCO_3), Dolomit ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$), Eisenhydroxid ($\text{Fe}(\text{OH})_3$), Goethit (FeOOH) und Hämatit (Fe_2O_3) sowie Otavit (CdCO_3) und mit einer Ausnahme, dem Deisenrieder Stollen, Rhodochrosit (MnCO_3). Ferner traten bei einigen MP auch die Minerale Fluorit (CaF_2), Gips ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), Anhydrit (CaSO_4) und Jarosit ($\text{KFe}_3(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_2$) in der Modellierung mit einem entsprechendem Sättigungsindex hervor.

Alle genannten Eisenverbindungen wurden hierbei stets als stark bis sehr stark übersättigt berechnet, was natürlich schon vorher zu erwarten war. Die restlichen Verbindungen, die größtenteils aus Karbonaten und Sulfaten bestanden, waren meist innerhalb des Intervalls von -1 bis $+1$ des Sättigungsindex zu finden.

5.5 Vor-Ort-Parameter

5.5.1 Einleitung

In diesem Kapitel sind die in der vorliegenden Arbeit bestimmten Vor-Ort-Parameter zusammenfassend dargestellt. Dazu zählen:

- Temperatur,
- pH-Wert,
- Sauerstoffgehalt,
- elektrische Leitfähigkeit und Gesamtmineralisation,
- Redoxpotenzial sowie
- Säure- und Basenkapazität.

Nicht an allen Messpunkten wurden stets alle Parameter aufgenommen. Die Ursachen hierfür sind vielgestaltig. Zum einen stellen Ausfälle der Messgeräte den Grund dar, zum anderen gab es z. B. wegen zu geringen Durchflusses keine Möglichkeit einer Messung. Teils wurden

auch nicht alle Gerätschaften immer an alle Orte mitgenommen oder eine erste Messung machte den jeweiligen Messort unattraktiv für weitere Untersuchungen. Sporadisch wurde aufgrund der Arbeitsteilung bei der Feldarbeit schlichtweg versäumt, manchen Parameter zu erfassen. Auf eine organoleptische Prüfung wurde wegen der niedrigen Wasserqualität an allen aufgesuchten Stellen verzichtet.

5.5.2 Temperatur

Während der Untersuchungen wurde an den einzelnen Messpunkten die Wassertemperatur bestimmt. Dies ist notwendig, da die Temperatur neben den verschiedenen physikalischen Eigenschaften und Vorgängen auch die chemischen und biochemischen Reaktionen beeinflusst.

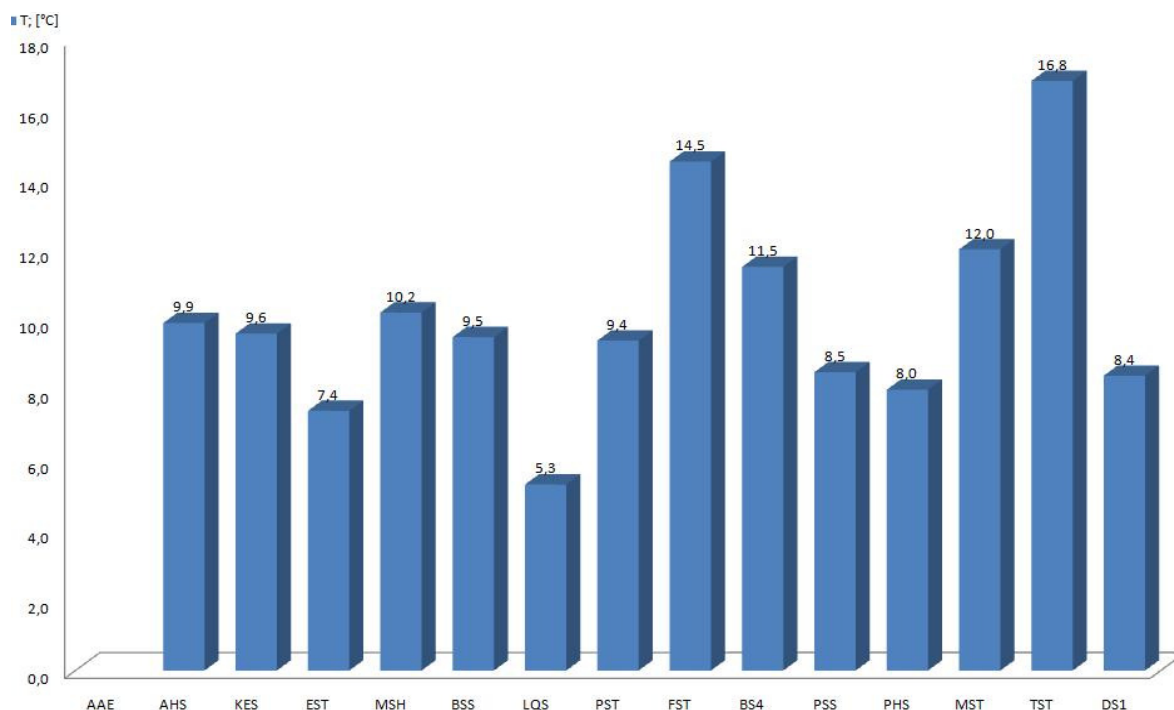


Abb. 12: Vergleich der gemessenen Temperaturen der Messpunkte

Im Vergleich (siehe Abb. 12) zeigt sich, dass die Mehrzahl der Messwerte um einen Durchschnittswert von etwa 9 °C liegt. Maximal- bzw. Minimalwerte wurden im Tiefstollen Peißenberg (16,8 °C), am Friedrichstollen (14,5 °C) und beim Leitzach Querschlag (5,3 °C) gemessen. Diese Extremwerte lassen sich aber gut durch die Messung im Bergwerk (TST, Abb. 13), den durch großen Durchfluss raschen Transport aus dem Bergwerk (FST) und die relativ lange Abkühlstrecke unter Tage (LQS) erklären.



Abb. 13: Probenahmestelle Tiefstollen Peißenberg (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

5.5.3 pH-Wert

Der pH-Wert des austretenden Grubenwassers an den einzelnen Messstellen liegt mit Werten zwischen 6,7 und 8,3 noch im neutralen Bereich (siehe Abb. 14). Das sauerste Grubenwasser wurde am Friedrichstollen vorgefunden. Die basischsten Werte stammen vom Hauptstollen Peißenberg und der Halde Marienstein. Alle Werte liegen im Bereich des Karbonatpuffers.

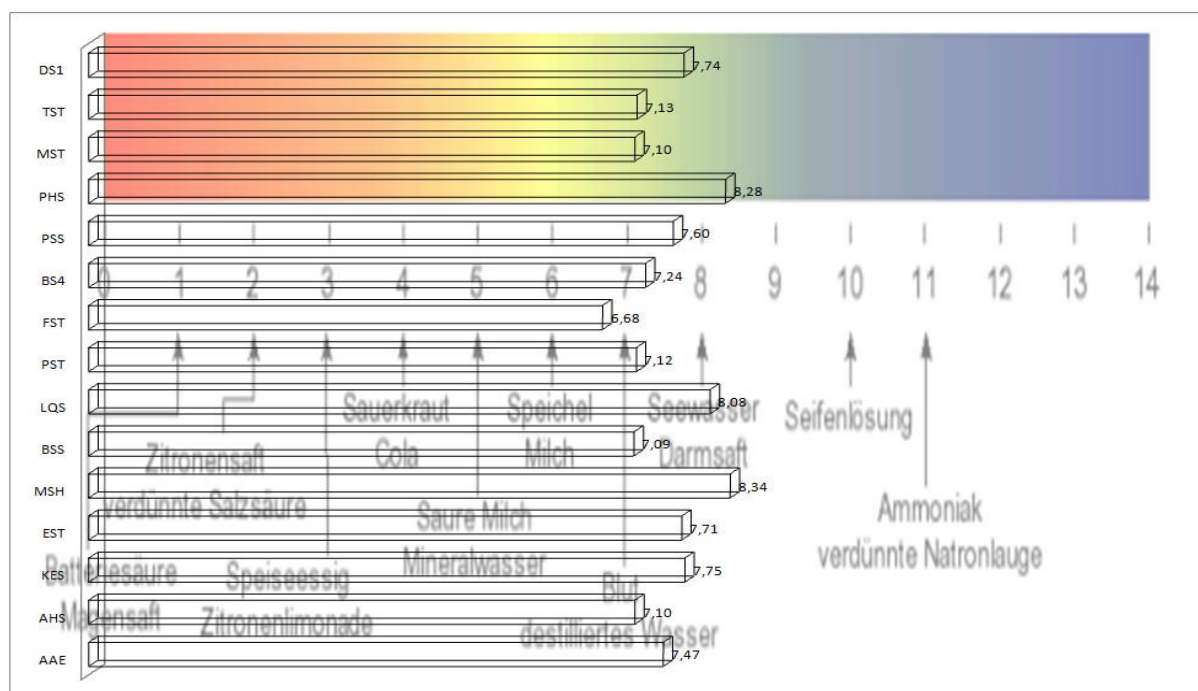


Abb. 14: Vergleich der gemessenen pH-Werte der Messpunkte mit bekannten Flüssigkeiten des Alltags

Wie in Kapitel 4.2.2 erwähnt, bestimmt der pH-Wert die Löslichkeit vieler Elemente und Spezies im Wasser, wozu auch die Metall-Ionen von z. B. Eisen, Mangan, Magnesium und Aluminium gehören. Bei einem sauren pH-Wert der Wässer sind die meisten Metall-Ionen als Kationen löslich. Kommt es zu einem Anstieg des pH-Wertes, fallen diese als Hydroxide oder Salze aus. So erfolgt eine Ausfällung von Fe(III)-Ionen ab einem pH-Wert von 3, eine von Fe(II)-Ionen ab einem pH-Wert von 5,1 und somit an allen aufgesuchten Messpunkten, z. B. also auch am Phillipstollen (siehe Abb. 15).



Abb. 15: Ausgefälltes Eisenhydroxid im Grubenwasser des Phillipstollens (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

5.5.4 Sauerstoff

Früher wurde Sauerstoff für die Bildung von Säuren verantwortlich gemacht und so hat der Chemiker Antoine Laurent de Lavoisier 1779 den Namen Oxygenium (Säurebildner) für das Element vorgeschlagen. Tatsächlich entstehen die meisten anorganischen Säuren bei der Lösung von Nichtmetalloxiden in Wasser, das ja aus Wasserstoff und Sauerstoff besteht. Der Sauerstoffgehalt eines Wassers bestimmt im Wesentlichen dessen Redoxpotenzial. Anhand des Sauerstoffgehaltes können Aussagen über das Oxidationsvermögen des Wassers sowie der damit verbundenen Lösung und Ausfällung von Stoffen gemacht werden. Des Weiteren ist dieser umgekehrt proportional zur Temperatur und Ionenstärke eines Wassers.

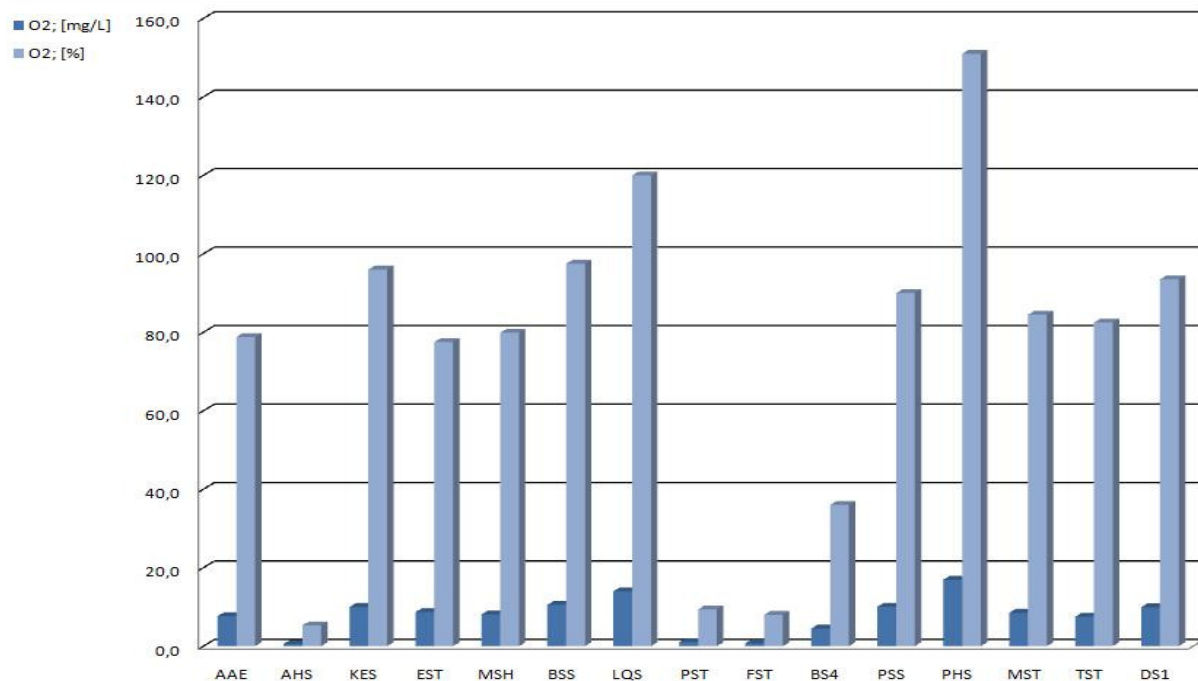


Abb. 16: Vergleich der absoluten und prozentualen Sauerstoffsättigung der Messpunkte

Um die Sauerstoffsituation besser beurteilen zu können, wurde die Sauerstoffkonzentration auch in die prozentuale Sauerstoffsättigung in Abhängigkeit von der Temperatur umgerechnet. Abbildung 16 zeigt, dass die Mehrzahl der Messpunkte eine relativ hohe Sauerstoffsättigung zwischen knapp 80 % und 100 %, in zwei Fällen auch deutlich mehr aufwies. Im Gegensatz dazu war im Grubenwasser des Auer Hauptstollens, Friedrichstollens, Phillipstollens und des Wasserstollens eine extrem niedrige Sauerstoffsättigung zu verzeichnen.

5.5.5 Elektrische Leitfähigkeit und Gesamtmineralisation

Die elektrische Leitfähigkeit ist ein Summenparameter für gelöste, dissoziierte Stoffe. Die Größe der Leitfähigkeit hängt von der Konzentration und dem Dissoziationsgrad der Ionen sowie von der Temperatur und der Wanderungsgeschwindigkeit im Medium ab. Über die Art der Ladungsträger selbst kann eine Messung der Leitfähigkeit keine Aussage machen. Durch die Messung der elektrischen Leitfähigkeit kann der Lösungsinhalt, also der Gehalt an dissoziierten Ionen einer Wasserprobe, orientierend bestimmt werden. Der Lösungsinhalt ist auf die Verwitterungs- und Lösungsprozesse sowie auf den Einfluss stark mineralisierter Grubenwässer zurückzuführen.

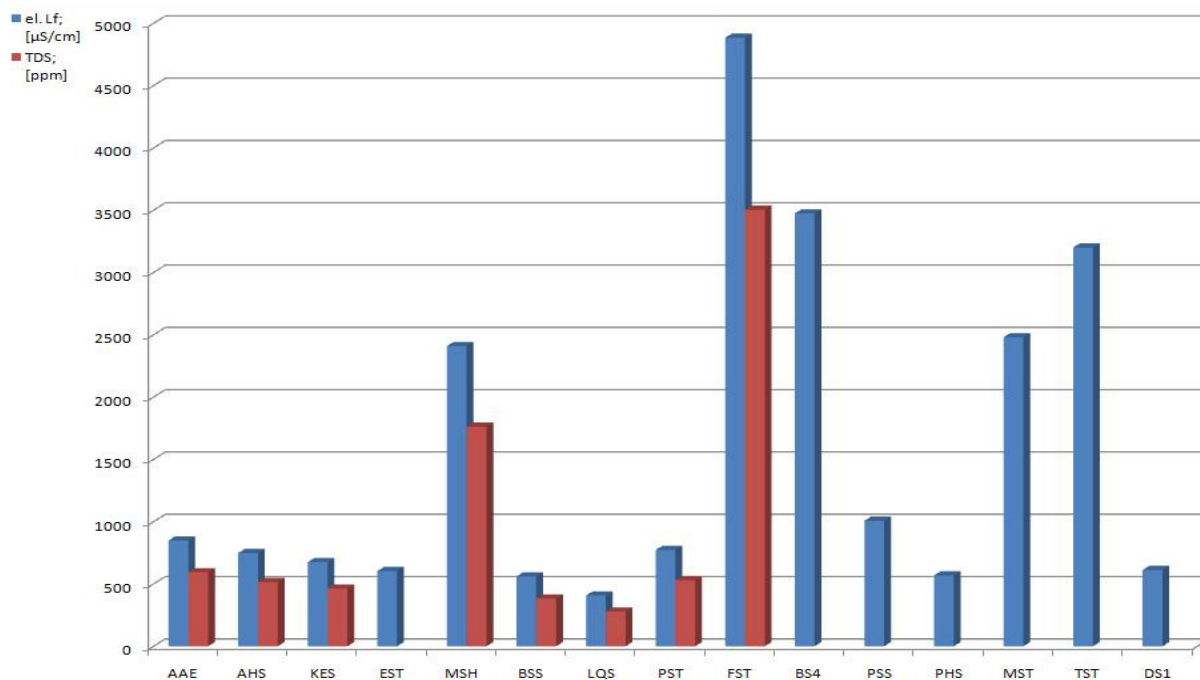


Abb. 17: Vergleich der elektrischen Leitfähigkeit mit der Gesamtmineralisation (wo gemessen) der Messpunkte

Mit einem Blick auf Abbildung 17 wird eine Korrelation zwischen elektrischer Leitfähigkeit und Gesamtmineralisation deutlich, wobei das Grubenwasser des Friedrichstollens (FST, Abb. 18) die höchsten, das des Leitzach Querschlag (LQS) die niedrigsten Werte einnimmt.



Abb. 18: Offene Belüftungstreppe nach dem Auslassventil des Friedrichstollens (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

5.5.6 Redoxpotenzial

Die Messung des Redoxpotenzials dient als Anhaltspunkt für das Auftreten aerober und/oder anaerober Prozesse. Es wird durch den im Wasser vorhandenen Sauerstoff bestimmt und beeinflusst zusammen mit dem pH-Wert die Löslichkeit von redoxsensitiven Elementen, wie beispielsweise Eisen. Eine Gegenüberstellung der bestimmten Redoxpotenziale mit den Oxidations- und Reduktionsbereichen (SIGG & STUMM, 1994) ist Abbildung 19 zu entnehmen. Bei diesem Vergleich sind bei Eisen oxidierende Prozesse zu erwarten, da diese überwiegend im positiven mV-Bereich liegen. Dies bestätigt sich durch die Ausfällungen von z. B. FeOOH , welche in Form von rötlichen bis ockerfarbenen Belägen bzw. Rückständen nahezu an allen Messstellen erkennbar sind.

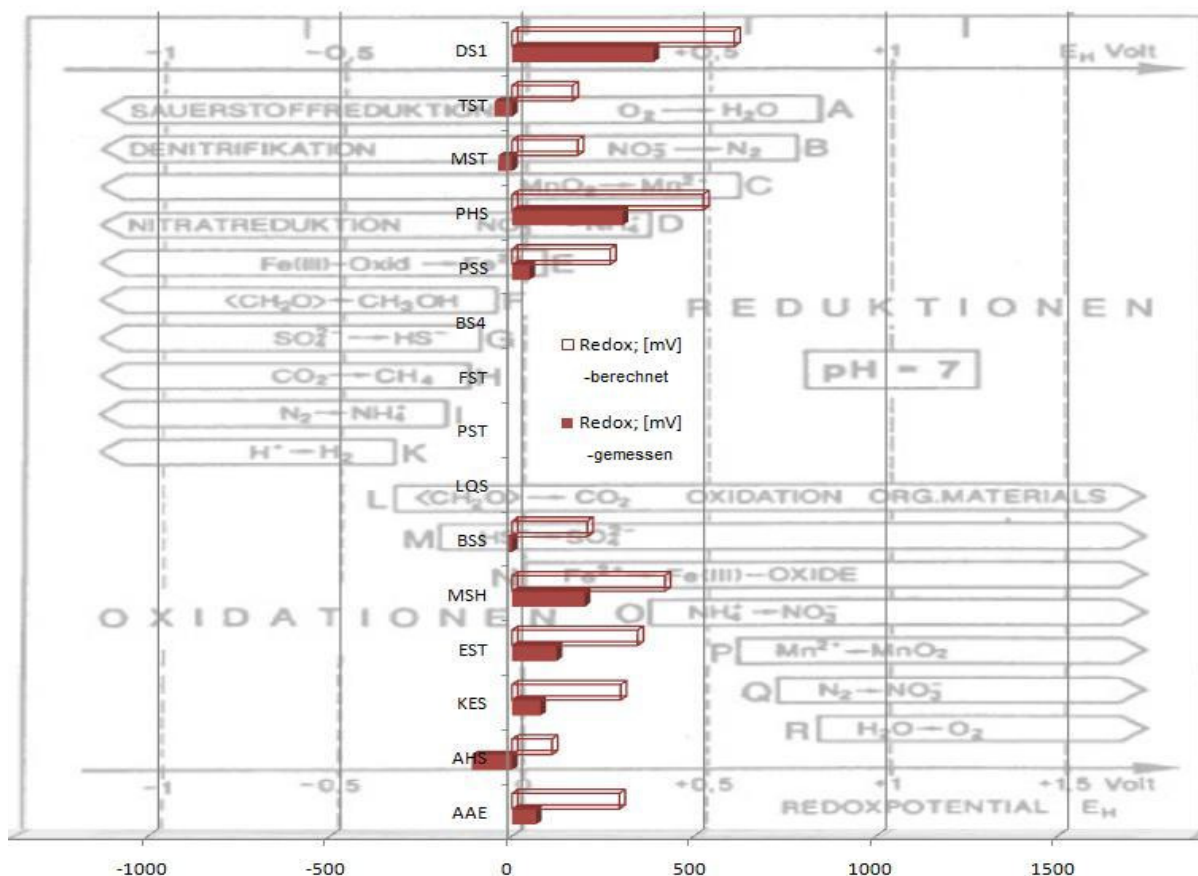


Abb. 19: Vergleich der gemessenen und korrigierten Redoxpotenziale von Messstellen mit den Bereichen des Redoxpotenzials nach SIGG & STUMM 1994

Das höchste Redoxpotenzial zeigt bei den vorliegenden Messergebnissen der Deisenrieder Stollen (DS1), wobei sich die Ablagerungen im Mundloch des Stollens allerdings, wie in Abbildung 20 zu sehen ist, auf ein Minimum beschränken.



Abb. 20: Absente Ausfällungen von Eisenverbindungen im Deisenrieder Stollen (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

5.5.7 Säure- und Basenkapazität

Die Bestimmung der Säure- und Basenkapazität dient in der Wasseranalytik als Grundlage zur Berechnung des gelösten Kohlendioxides, der Gehalte an Hydrogencarbonat- und Carbonat-Ionen sowie der Summe des anorganischen Kohlenstoffs (HÜTTER 1994). Die Titrationsendpunkte sind so definiert, als wäre Kohlensäure die einzige in der Wasserprobe vorhandene schwache Säure und ihre Anionen die einzigen schwachen Basen. Dabei handelt es sich um eine willkürliche Annahme, die aber bei vielen natürlichen Wässern zutrifft.

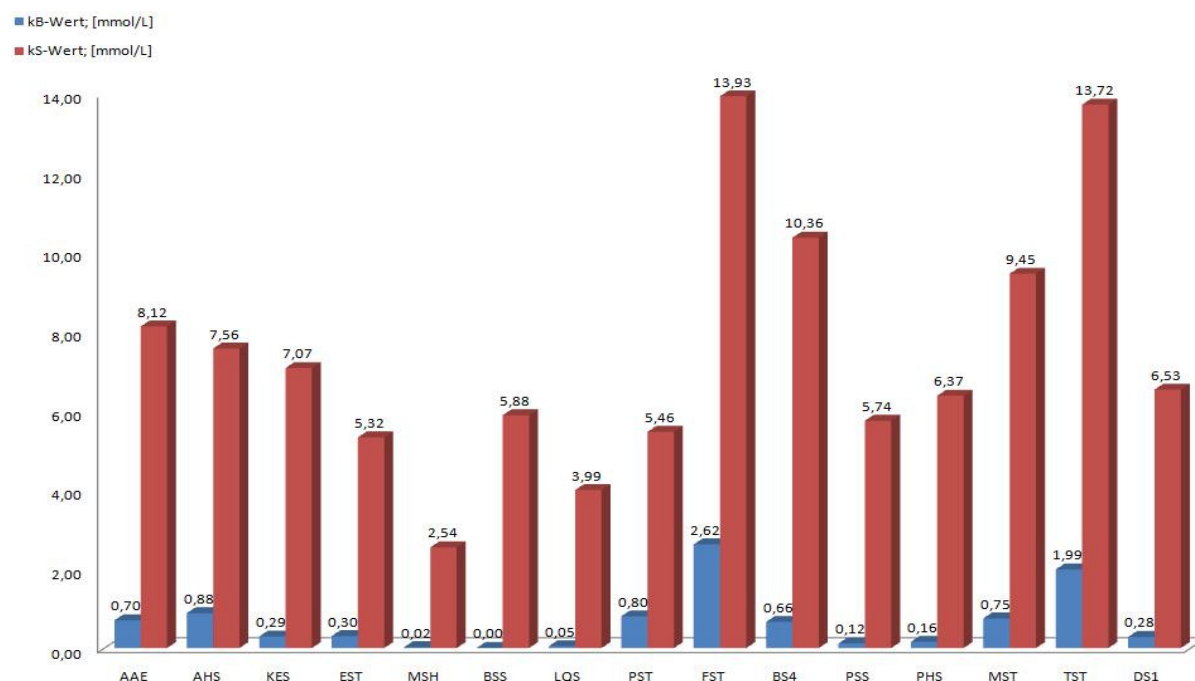


Abb. 21: Vergleich der Säure- und Basenkapazitäten aller Messpunkte

Bei den Titrationen erreichten die Grubenwässer von Friedrichstollen (FST) und Tiefstollen Peißenberg (TST) die beiden höchsten Wertepaare, während das Haldenwasser der Halde Marienstein (MSH, Abb. 22) die geringste Säure- und Basenkapazität aufweist. Der K_b -Wert des Bärenschützstollens wurde im Feldbuch nicht dokumentiert, entfällt hier daher und wurde in Abbildung 21 auf Null gesetzt.



Abb. 22: Die Halde des ehemaligen Zement- und Kohlebergwerks Marienstein (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

5.6 Durchfluss

Um die Quantität an anfallendem Grubenwasser zu erfassen, wurden die in Kapitel 4.3 aufgeschlüsselten Methoden angewandt. Damit wird eine komparative Betrachtung der gesammelten Schüttungsmengen möglich.

Wie auch aus Abbildung 23 hervorgeht, gibt es beim direkten Vergleich der einzelnen Schüttungsmengen aller Messorte insgesamt sechs Stellen, die nennenswerte Einzelwerte besitzen. Alle kleineren Durchflüsse zusammengekommen kommen nur knapp über zwei Prozent des Gesamtwertes. Nahezu drei Viertel (!) des austretenden Grubenwassers in dieser Untersuchung treten aus dem Friedrichstollen aus. Bei über zwei Kubikmeter Wasser pro Minute, die dem Endstück des alten Regelventils dort entweichen, kann davon ausgegangen werden, dass im Inneren des Grubengebäudes ein erheblicher Staupegel ansteht. Eine Undichtigkeit der Firste (Decke), der Stöße (Seiten) und der Sohle (Boden) des Stollens ist durch den Wasserdruck langfristig nicht auszuschließen. Diffuse, unkontrollierbare Austritte von Grubenwasser in der unmittelbaren Umgebung wären die Folge.

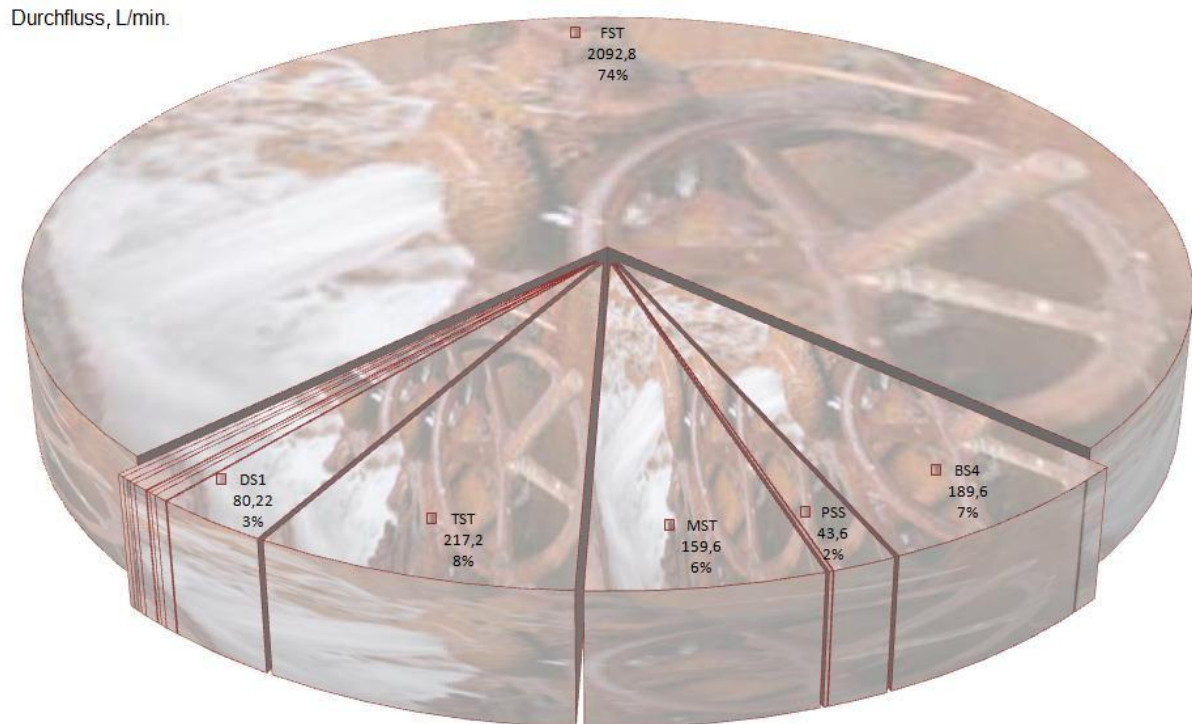


Abb. 23: Vergleich der Durchflüsse der Messpunkte (geringfügige Schüttungen vernachlässigt)

5.7 Wasserinhaltsstoffe

5.7.1 Haupt- und Nebenelemente

Zu den Haupt- und Nebenelementen zählen Natrium, Kalium, Kalzium, Magnesium, Eisen, Nitrat, Chlorid, Sulfat und Fluorid. Diese Stoffe wurden analytisch bestimmt und werden im Folgenden näher betrachtet.

Natrium

Von den Kationen kommen die Natriumionen (Na^+) am häufigsten vor. Sie sind in allen Wässern zu finden, zum Teil in sehr hohen Konzentrationen. Diese hohen Konzentrationen sind durch die hohe Häufigkeit der Natriumverbindungen sowie durch deren gute Löslichkeit und begrenzte Adsorptionsfähigkeit an Tonmineralen und anderen Bodensorbenten begründet. Natriumionen entstammen vor allem den silikatischen Mineralen, anthropogen gelangen sie über Abwässer oder Düngemittel in das Grund- und damit auch in das Grubenwasser. In Abbildung 24 lässt sich eine lineare Kopplung von Natrium und Kalium erkennen, sofern der Ausnahmewert des Kaliums beim Messpunkt Halde Marienstein (MSH) außer Acht gelassen wird.

Kalium

Kaliumionen (K^+) werden bei der Verwitterung von Kalifeldspäten und anderen Kalisilikaten freigesetzt. Durch den Einsatz von Kali-Düngern und -Salzen sowie die bei seiner Produktion entstehenden Abwässer der Kaliindustrie werden diese Ionen im Wasser auch anthropogen angereichert. Obwohl die Kalisalze eine gute Löslichkeit im Wasser besitzen, beträgt der Anteil der Kaliumionen im Allgemeinen nur 10 % des Gehaltes an Natriumionen. Dies ist der guten Absorptionsfähigkeit von Böden und Gesteinen für die Kalium-Ionen zuzurechnen. Das Verhältnis zwischen Natrium- und Kalium-Konzentration liegt bei Wässern, deren Summe Natrium und Kalium 10 mg/L überschreitet, im Allgemeinen bei 2:1 bis 10:1 (DVWK 110, 1996). Abbildung 22 zeigt, dass dieses Verhältnisfenster nicht ohne weiteres auf jedes Grubenwasser zutrifft. Die Messpunkte MSH, FST, MST und TST fallen aus dem Regelverhältnis. Bei der Halde Marienstein (MSH) wird es durch die höchste Kalium-Konzentration im gesamten Messfeld von 195 mg/L sogar umgekehrt.

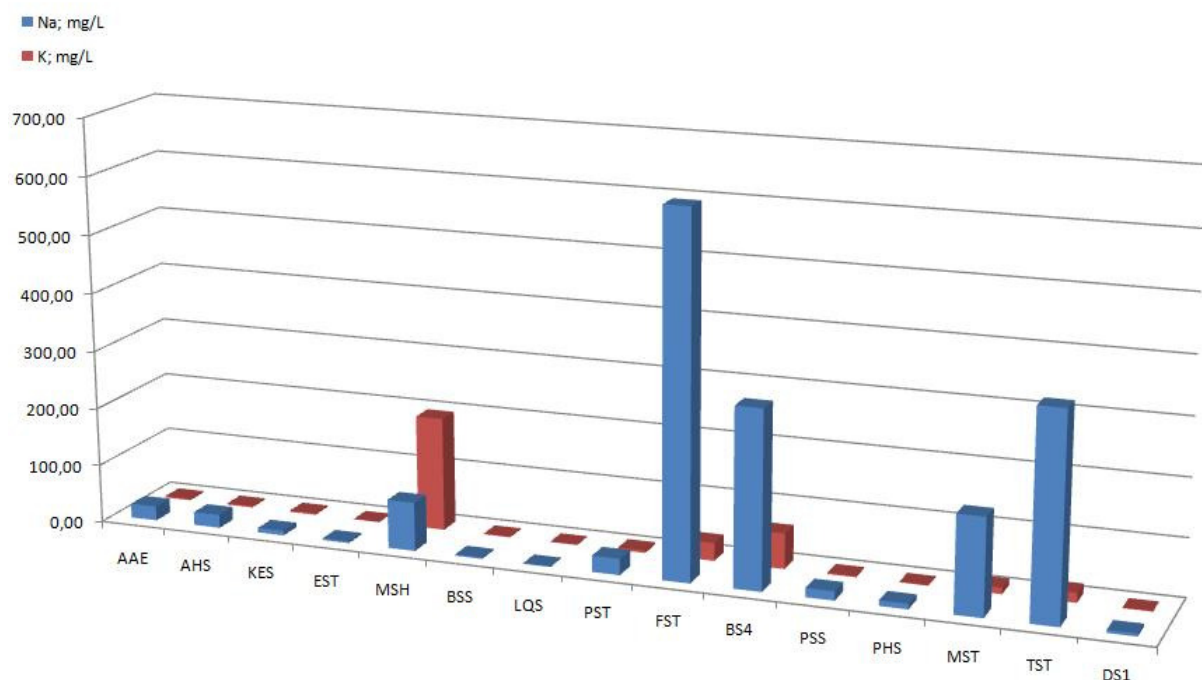


Abb. 24: Vergleich der Konzentrationen von Natrium und Kalium der Messpunkte

Kalzium

Kalziumionen (Ca^{2+}) gehören zu den Hauptinhaltsstoffen natürlicher Gewässer. Es wird bei der Verwitterung kalziumhaltiger Minerale wie Pyroxen, Plagioklas und Amphibol freigesetzt und/oder aus Karbonaten und Sulfaten herausgelöst. Anthropogen gelangen sie auch durch die Nutzung von Düngemitteln oder, wie auch Magnesium, aus abgelagertem Bauschutt in die

Gewässer. Abbildung 25 zeigt eine (teilweise starke) Erhöhung der Kalziumkonzentration bei nahezu jedem zweiten Messpunkt.

Magnesium

Als Begleiter des Kalziums ist in natürlichen Wässern fast immer Magnesium (Mg^{2+}) enthalten, wobei die Konzentration im Allgemeinen niedriger als die des Kalziums ist. Dies liegt an der geringen geochemischen Häufigkeit des Magnesiums. Auch beeinflusst das Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht unter anderem die Löslichkeit von Kalzium und Magnesium. Das Verhältnis von Ca^{2+} zu Mg^{2+} ist üblicherweise 4 bis 5:1. Dieses Verhältnis wird an den meisten Messstellen auch erreicht. Der Bärenschützstollen (BSS) bildet mit einem Verhältnis von etwa 7:1 die einzige Ausnahme dieser Regel.

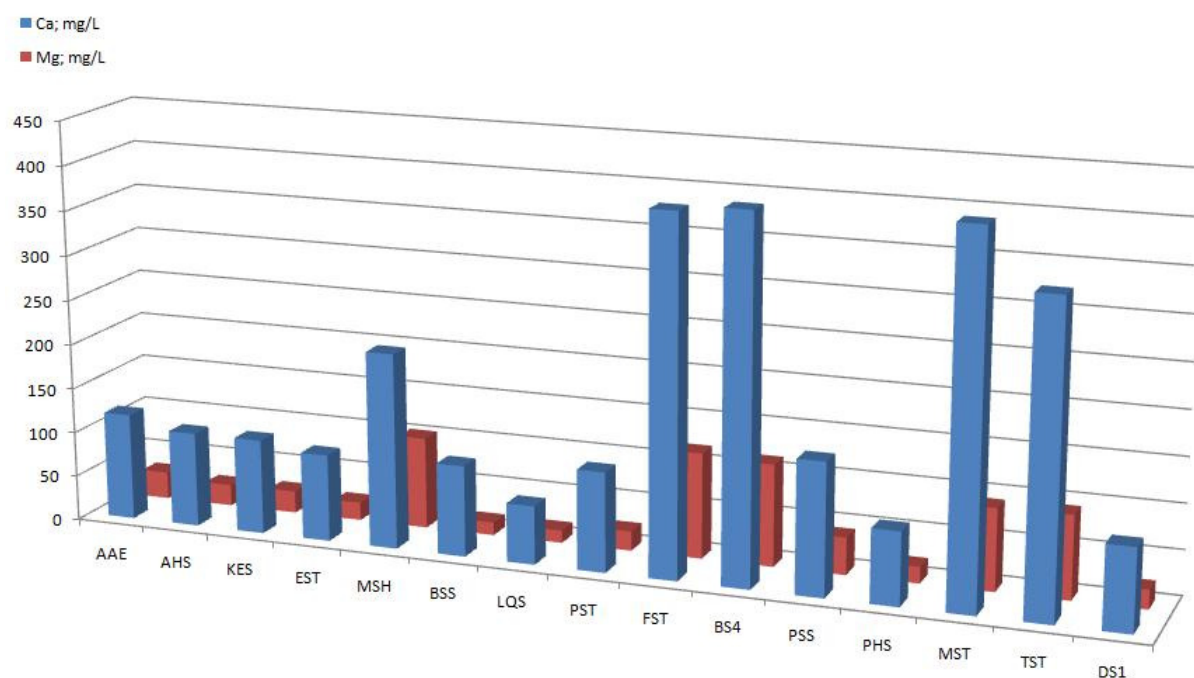


Abb. 25: Vergleich der Konzentrationen von Kalzium und Magnesium der Messpunkte

Eisen

Das im Wasser vorliegende Eisen kann als Eisen(II)- und Eisen(III)-Spezies vorliegen. In Gegenwart von oxidierenden und reduzierenden Stoffen wandelt es sich leicht ineinander um und bildet ein empfindlich reagierendes Redoxpaar. Da Eisen ein redoxsensitives Element darstellt, ist die Speziesverteilung von den vorherrschenden pH- E_H -Bedingungen abhängig. Bei höheren Redoxpotenzialen und/oder höheren Sauerstoffkonzentrationen überwiegt Fe^{3+} , wohingegen bei einem Überangebot von organischen Stoffen der Anteil an Fe^{2+} größer ist (BREHM & MEIJERING 1996). Im Verlauf der wasserchemischen Untersuchungen wurden die

Konzentrationen an Eisen (gesamt) in den filtrierten Wasserproben bestimmt, die für jede Messstelle der Abbildung 26 entnommen werden können. Auffällig sind deutlich höhere Konzentrationen von Eisen bei Friedrichstollen (FST) und Mittelstollen Peißenberg (MST).

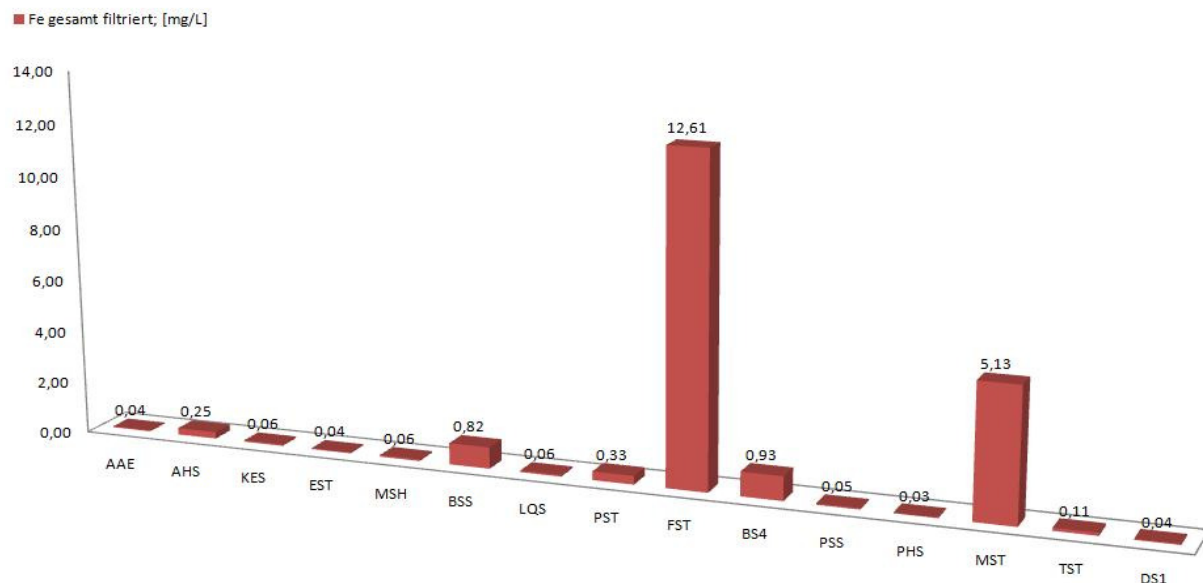


Abb. 26: Vergleich der Konzentrationen von Eisen (gesamt) in den filtrierten Proben der Messpunkte

Durch die noch höhere Konzentration des Eisens im unfiltrierten Grubenwasser des Friedrichstollens kommt es zur Veränderung der Wasserchemie in der Leitzach. Eine rötlich-braune Färbung des Flussbettes und Wassers nach der Einmündung des Friedrichstollens in den Vorfluter ist dort gut sichtbar (siehe Abb. 27).



Abb. 27: Eintrag von Grubenwasser des Friedrichstollens in den Vorfluter Leitzach (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

Die natürliche Verringerung der Eisenkonzentration im weiteren Verlauf der Leitzach ist neben der Oxidation (z. B. durch Mikroorganismen) mit anschließender Ausfällung auch auf die Absorption des gelösten Eisens an anorganischen Kolloiden (Tonminerale) und Partikeln sowie Bindung durch Ionenaustausch zurückzuführen.

Nitrat

Nitrat (NO_3^-) ist in der Biosphäre und Hydrosphäre allgegenwärtig als die dominierende anorganische Stickstoffverbindung neben dem gelösten Luftstickstoff. Zufuhr von Nitrat in das Wasser erfolgt über den Niederschlag, über Düngung und durch die Zersetzung von Pflanzenresten. Ferner erfolgt der Eintrag geogen über die Verwitterung von Gesteinen, die Stickstoff enthalten. Es handelt sich jedoch nur um geringfügige Werte von selten mehr als 1 mg/L.

Die Halde Marienstein (MSH) und der Eckersbergerstollen (EST) weisen erhöhte Konzentrationen von Nitrat auf (Abb. 28). Vier weitere MP pendeln sich bei Werten über 6 bis 7 mg/L ein. Die übrigen Messwerte liegen (teilweise weit) unter 2 mg/L, in den Grubenwässern des Friedrichstollens (FST) und des Mittelstollens Peißenberg (MST) ist Nitrat nicht nachweisbar.

Trotz der Konzentrationsunterschiede liegen alle Werte, bis auf das Haldenwasser, noch im Bereich der natürlichen Nitratkonzentrationen, welche zwischen 1 mg/L NO_3^- (Gebirge) und 20 mg/L NO_3^- (Flachland) liegen (DVWK 110, 1996).

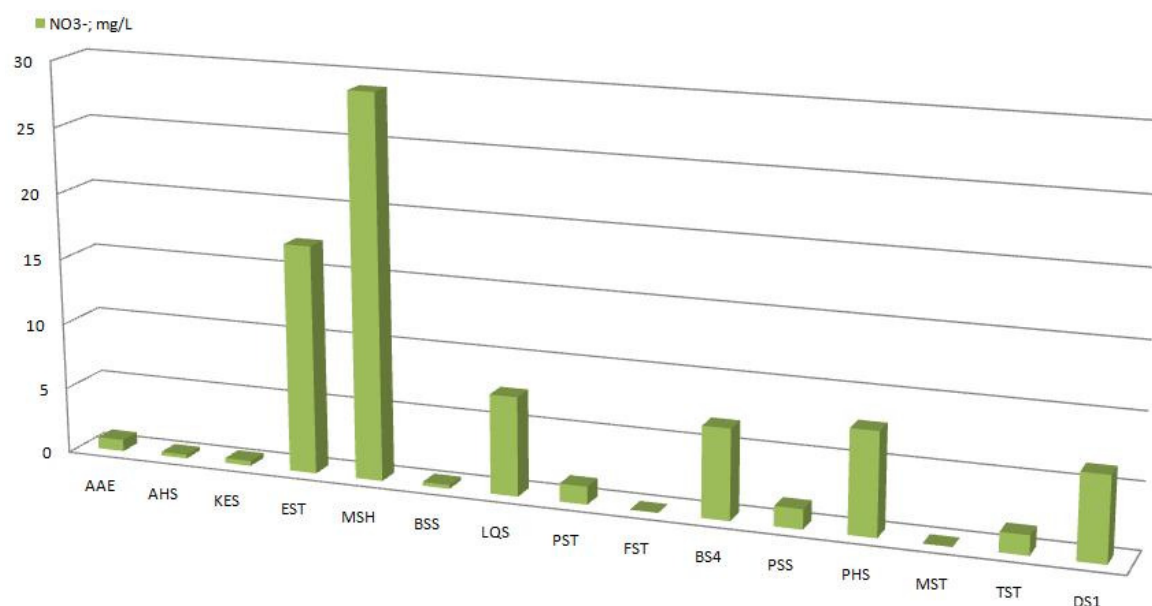


Abb. 28: Vergleich der Nitrat-Konzentrationen der Messpunkte

Chlorid

Chloride sind im Allgemeinen sehr gut löslich und mobil, so dass Chloridionen (Cl^-) fast überall im Wasser detektierbar sind. Ein hoher Chloridgehalt kann anthropogen durch häusliche und industrielle Abwässer und chloridhaltige Dünger verursacht werden. Ferner kann er auch geogen, z. B. durch Salzlagerstätten, bedingt sein. Chlorid wird durch biologische Prozesse nicht tangiert und weder in Abwasserreinigungsanlagen noch in Gewässern abgebaut. Eine Eigenschaft der Chloride ist die mangelnde Bereitschaft, mineralisch oder adsorptiv gebunden aus einer Lösung wieder auszuscheiden. Durch diese Eigenschaft liegt Chlorid im Wasser der einzelnen Messpunkte zu fast 100 % in Form freier Ionen vor, was sich durch die hydrogeochemische Modellierung bestätigte.

Wässer aus chloridarmen Gesteinen weisen meist einen Chloridgehalt von weniger als 30 mg/L auf, während höhere Konzentrationen durch die Zumischung stärker mineralisierter Wässer oder durch anthropogene Verunreinigungen auftreten (DVWK 110, 1996).

Dieser Wert wird, wie aus Abbildung 29 ersichtlich, auch nur an einem Messpunkt überschritten. Der Wasserstollen (BS4) führt Grubenwasser mit knapp 100 mg/L Chlorid zutage. Aufgrund dieses Höchstwertes kann eine Beimengung von aus dem Deponiekörper ausgewaschenem Chlorid der den Stollen und die Halde überlagernden Hausmülldeponie zum Grubenwasser als wahrscheinlich gelten.

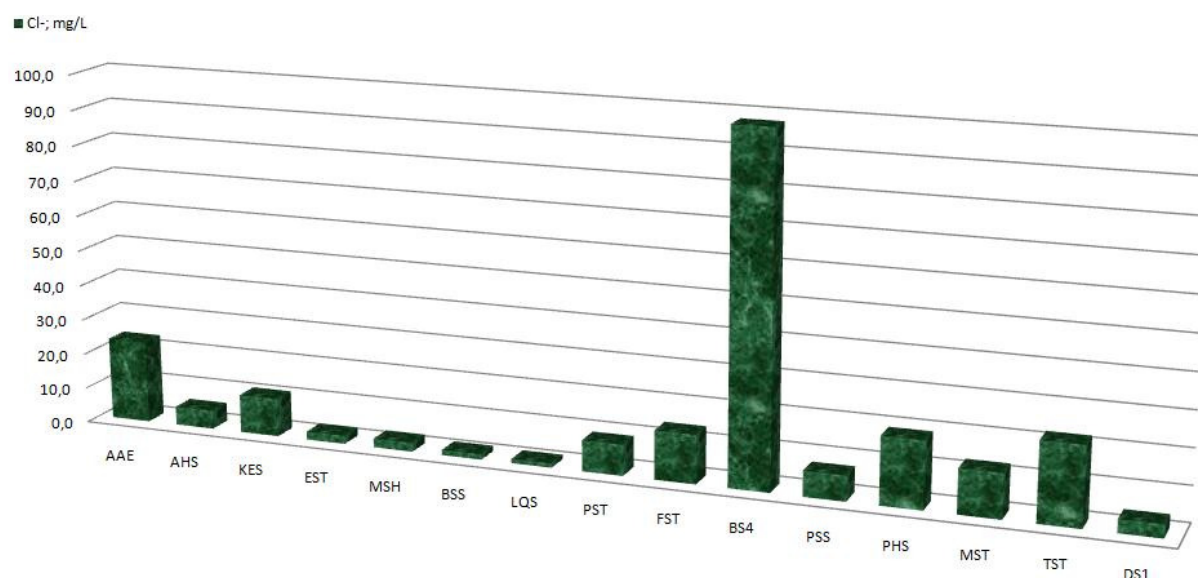


Abb. 29: Vergleich der Chlorid-Konzentrationen der Messpunkte

Sulfat

Sulfationen (SO_4^{2-}) sind in vielen Wässern in zum Teil hohen Konzentrationen enthalten. In Oberflächenwässern treten Konzentrationen bis 100 mg/L und höher auf. Der natürliche

Eintrag von Sulfat in die Gewässer erfolgt aus der Atmosphäre über den Niederschlag durch die Auflösung von Gips. Biologische Quellen sind (bakterielle) Sulfatbildungen aus Sulfid und schwefelhaltigen Bestandteilen aus der Biomasse (z. B. Proteine). In Grubenwässern können die Sulfationen durch die Verwitterung der Sulfide, überwiegend Pyrit, vorkommen. Weiterhin ist ein Eintrag über Düngemittel und durch den Abbau organischer Substanz möglich. Das Sulfation kann als freies SO_4^{2-} -Ion im Wasser vorkommen oder Komplexe mit zum Beispiel Ca zu CaSO_4 , Mg zu MgSO_4 oder mit Na zu NaSO_4 bilden. Dies ist möglich, da Sulfationen eine starke Tendenz zur Komplexbildung aufweisen. Die Komplexe mit Kalzium und Natrium gehören in natürlichen Wässern zu den bedeutsamsten Spezies. Dabei weist der Ca-Komplex den höchsten Anteil auf und der Na-Komplex den geringsten. Die höchsten Anteile besitzen jedoch die freien Sulfationen, Abbildung 30 weist fünf MP mit hohen Konzentrationen davon aus. Auch in diesem Vergleich steht das Grubenwasser des Friedrichstollens (FST) mit einem Sulfat-Gehalt von über 2334 mg/L vor allen anderen Messwerten.

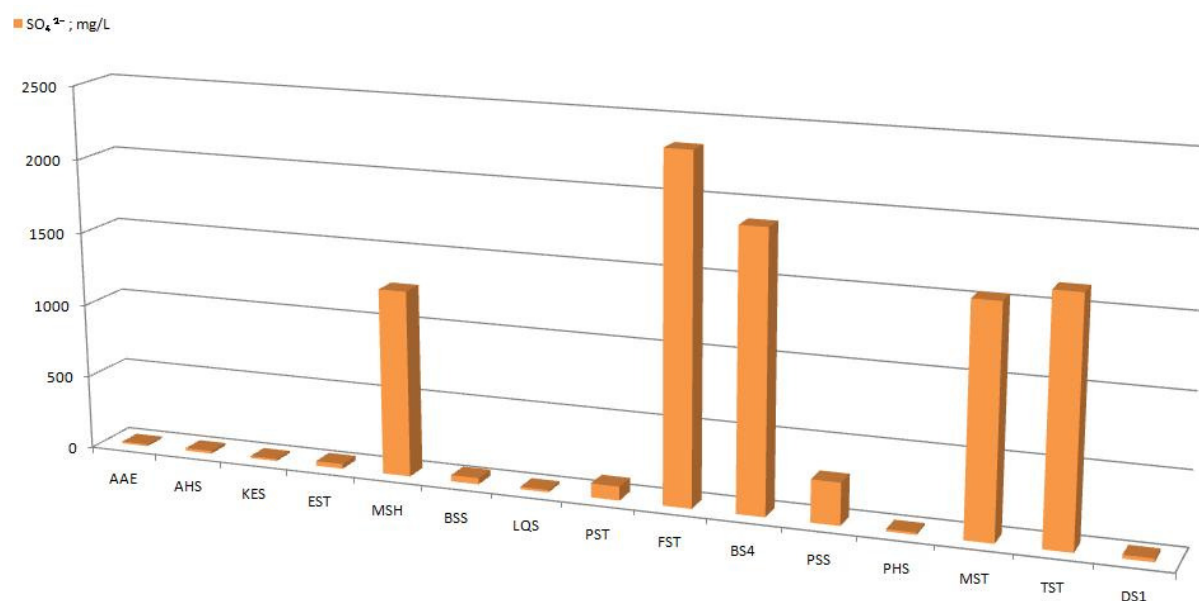


Abb. 30: Vergleich der Sulfat-Konzentrationen der Messpunkte

Fluorid

In natürlichen Gewässern tritt Fluorid (F^-) nur in geringen Konzentrationen auf, die meistens unter 0,5 mg/L liegen. Allerdings können in Grundwässern, die als Mineralwässer genutzt werden, Konzentrationen bis über 60 mg/L erreicht werden. Diese Ionen geraten geogen durch Lösung in der ungesättigten Zone und im Aquifer in die Hydrosphäre sowie anthropogen durch industrielle Abwässer und den Einsatz fluorhaltiger Pflanzenschutzmittel. Die Konzentrationen sind wahrscheinlich nicht durch heutige anthropogene Belastungen

bedingt, sondern durch die Mineralisationen in den Stollen oder Halden. In wässriger Lösung liegt Fluor überwiegend als F^- vor. Dies bestätigte auch die hydrogeochemische Modellierung im Bereich aller Messpunkte. Weitere in den Wässern vorliegende Komplexe sind Komplexe mit Magnesium zu MgF^+ und Kalzium zu CaF^+ , welche jedoch zusammen weniger als 10 % ausmachen. Diese Komplexbildung ist abhängig von den Konzentrationen an Kalzium und Magnesium.

Die Abflüsse von Friedrichstollen (FST) und der Halde Marienstein (MSH) besitzen mit Werten um 1 mg/L die höchsten Anteile an Fluorid und würden damit – zumindest was diesen Parameter angeht – noch als Trinkwasser (laut TrinkwV 2001) durchgehen. Im Wasser des Leitzach Querschlags (LQS) liegt Fluorid unter der Nachweisgrenze, alle anderen MP zeigen mehr oder weniger normal hohe Konzentrationen (siehe Abb. 31).

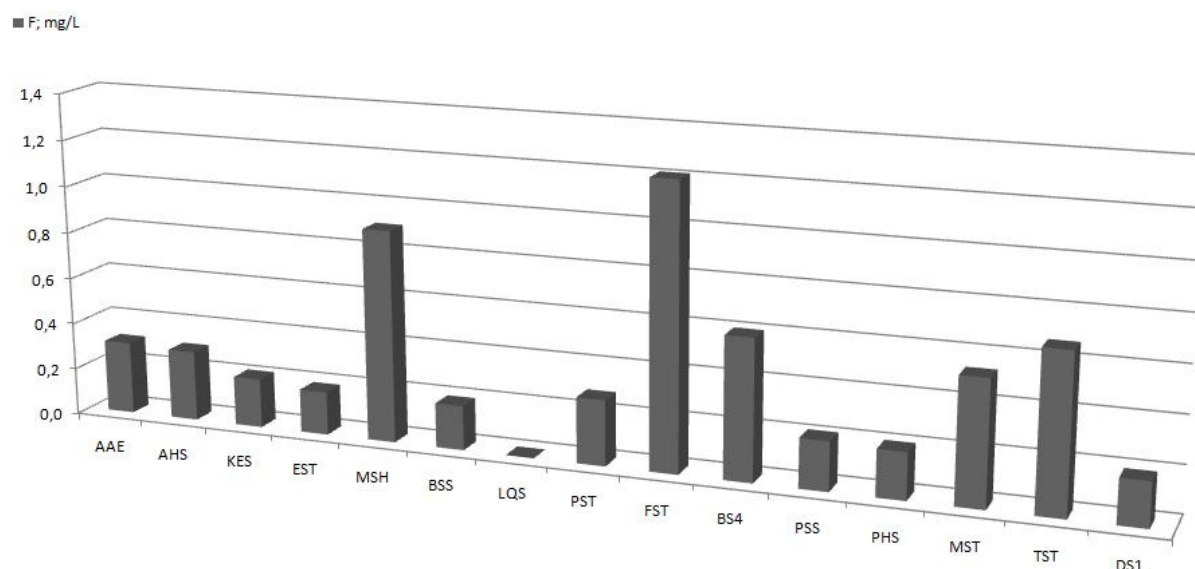


Abb. 31: Vergleich der Fluorid-Konzentrationen der Messpunkte

5.7.2 Spurenelemente

Elemente, die in der oberen Erdkruste mit weniger als dem hundertsten Teil eines Gewichtsprozents auftreten, werden in der Geochemie als Spurenelemente bezeichnet. Häufig handelt es sich dabei um Schwermetalle. Solche Spurenstoffe sind in zahllosen Mineralen und Gesteinen vorhanden und können durch Verwitterungs- und Lösungsreaktionen mobilisiert werden. Zu den untersuchten Spurenelementen, auf welche die Proben im Labor analysiert wurden, gehören Arsen, Barium, Strontium, Cadmium, Zink, Kupfer, Mangan, Kobalt und Nickel. In Tabelle 8 sind (außer Strontium) die Prüf- und Maßnahmenschwellenwerte dieser Elemente aufgelistet.

Tab. 8: Prüf- und Maßnahmenschwellenwerte für einige Stoffe bei der Untersuchung von Grundwasser (aus LAWA, 1994)

Element	Abk.	Prüfwert in µg/l	Maßnahmenschwellenwert in µg/l
Arsen	(As)	2 - 10	20 - 60
Barium	(Ba)	100 - 200	400 - 600
Cadmium	(Cd)	1 - 5	10 - 20
Kobalt	(Co)	20 - 50	100 - 250
Kupfer	(Cu)	20 - 50	100 - 250
Mangan	(Mn)	15 - 50	100 - 250
Nickel	(Ni)	15 - 50	100 - 250
Zink	(Zn)	100 - 300	500 - 2000

Arsen

Arsen (As) kommt in der Regel nur als Spurenelement mit Konzentrationen meist deutlich unter 0,1 mg/L vor. Oft tritt es in Konzentrationen im Bereich $< 10 \mu\text{g/L}$ auf, örtlich können aber auch Konzentrationen von $> 1 \text{mg/L}$ auftreten. Nach LAWA (1994) liegt der Prüfwert für Arsen bei 2 bis 10 $\mu\text{g/L}$, der Maßnahmenschwellenwert bei 20 bis 60 $\mu\text{g/L}$.

Die Arsenkonzentrationen der beprobten Lokalisationen liegen im μg -Bereich, meist innerhalb des Prüfwertbereiches. Zwei Messwerte in Abbildung 32 sind besonders hoch und nicht mehr innerhalb dieses Bereichs, der des Friedrichstollens (FST) und der des Wasserstollens (BS4).

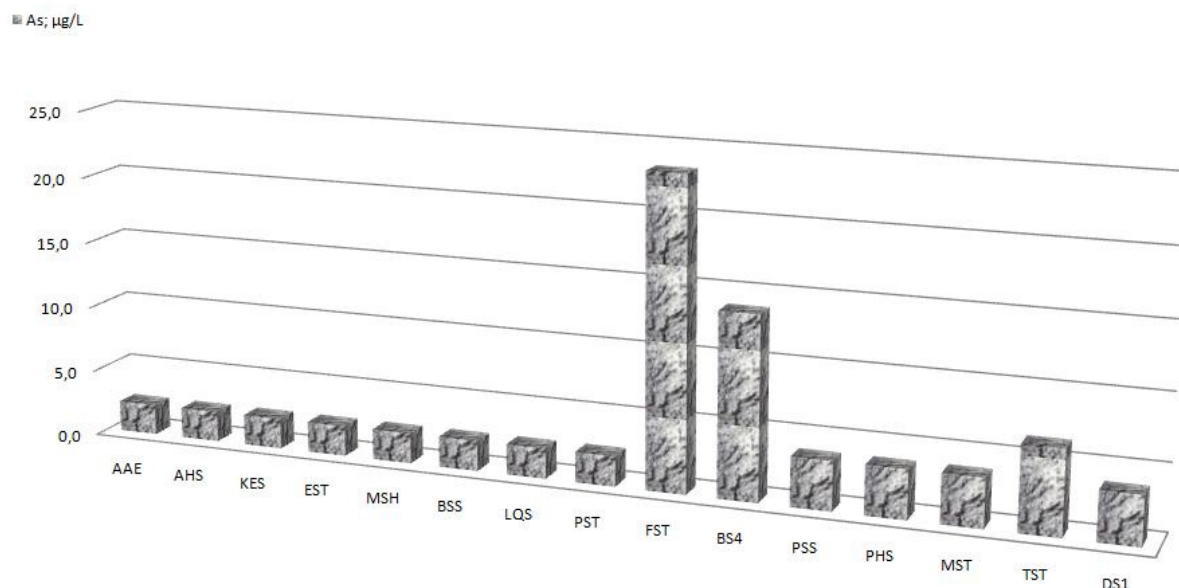


Abb. 32: Vergleich der Arsen-Konzentrationen der Messpunkte

Barium

Barium (Ba) tritt in der Regel nur in Spuren von $< 0,1 \text{mg/L}$ auf. Der Grund dafür ist, dass Barium aus der wässrigen Lösung durch Tonminerale, Hydroxide und organisches Material

sorbiert wird (DVWK 117, 1998). Jedoch können auch höhere Konzentrationen im Bereich von einigen mg/L auftreten. Typische Konzentrationen in Flüssen reichen von wenigen µg/L bis ca. 200 µg/L (DVWK 117, 1998). Nach LAWA (1994) sind ein Prüfwert für Barium von 100 bis 200 µg/L und ein Maßnahmenschwellenwert von 400 bis 600 µg/L festgelegt.

Abbildung 31 zeigt, dass alle Messwerte für Barium innerhalb dieser Wertebereiche zu finden sind. Einzig das Grubenwasser des Alten Auer Erbstollens (AAE) übertrifft den maximalen Maßnahmenschwellenwert um 40 µg/L.

Im Grubenwasser der einzelnen Messpunkte sind freie Ba^{2+} -Ionen die dominierende Spezies, was mit Hilfe der hydrogeochemischen Modellierung bestätigt werden konnte. Es werden auch Barium-Sulfat-Komplexe gebildet, deren Anteil aber sehr viel geringer ist.

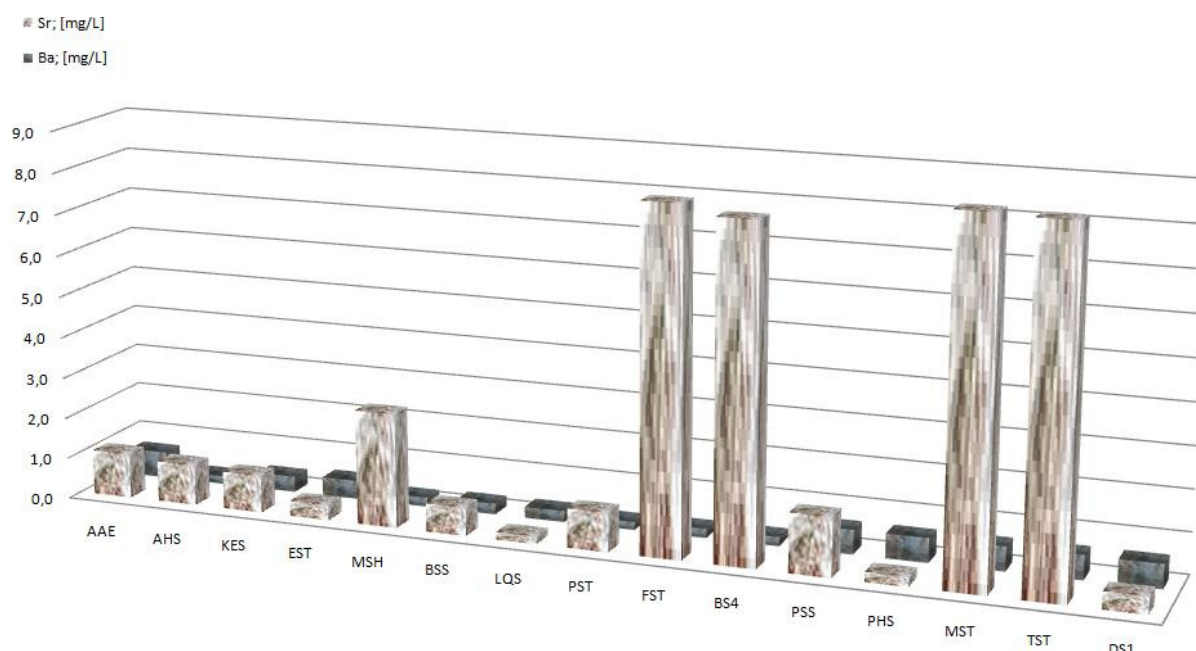


Abb. 33: Vergleich der schwereren Erdalkalimetalle Barium und Strontium der Messpunkte

Strontium

Strontium (Sr) ist in seinem Sorptions-Verhalten dem des Kalziums ähnlich. Es wird an der Oberfläche von Tonmineralen und Huminstoffen gebunden, kann allerdings von anderen Metallen, wie zum Beispiel Kalzium und Magnesium, relativ leicht verdrängt werden. Außerdem ist Strontium nur in geringen Mengen in den Gesteinen enthalten und damit auch in entsprechend geringeren Konzentrationen im Aquifer. Die Sr-Gehalte liegen in Flüssen im Durchschnitt bei 68,5 µg/L (DVWK 117, 1998).

Sämtliche Wasserproben der Betrachtung überschreiten diesen Wert um ein Vielfaches. Bei den vier generell am stärksten belasteten Grubenwässern des Friedrichstollens (FST), des Wasserstollens (BS4), des Mittel- und Tiefstollens Peißenberg (MST/TST) treten mehr als

hundertfach überhöhte Gehalte an Strontium auf. Auch im Wasser der Halde Marienstein (MSH) kann eine 40-fache Menge dieses Elementes nachgewiesen werden (siehe Abb. 33).

Cadmium

Der Eintrag des Schwermetalls Cadmium (Cd) in Gewässer kann direkt über Abwässer und Niederschläge erfolgen oder indirekt durch Auslösung aus verwitterten Gesteinen und Böden (DVWK 117, 1998). In winzigen Mengen kommt Cadmium heute nahezu überall vor. Die Cadmium-Verteilung ist eine anthropogene Folge der Emission aus Industrieanlagen, insbesondere Zinkhütten, Eisen- und Stahlwerken, aber auch aus Müllverbrennungsanlagen und Braunkohlekraftwerken. Im Wasser wird dessen Mobilität in Abhängigkeit vom pH-Wert durch die Löslichkeit der Verbindungen sowie durch Komplexbildung bestimmt. Mit Chlorid- und Sulfationen kann es Komplexe bilden, mit Manganoxiden ausfallen sowie an Mineraloberflächen sorbiert werden (MATTHESS 1994). Bei höheren pH-Werten ($\text{pH} > 8$) tritt Cadmium als $\text{Cd}(\text{OH})_2(aq)$ und $\text{Cd}(\text{OH})_3^-$ auf und bei pH-Werten kleiner 8 als freie Cd^{2+} -Ionen. In Regionen, die nicht explizit durch Cadmium belastet sind, treten in den Seen und Flüssen Cadmium-Konzentrationen kleiner $0,1 \mu\text{g/L}$ auf. In Grubenwässern sind höhere Konzentrationen keine Seltenheit.

Der Prüfwert, den die LAWA (1994) empfiehlt, liegt zwischen 1 und $5 \mu\text{g/L}$ und der Maßnahmenschwellenwert liegt zwischen 10 und $20 \mu\text{g/L}$. Die Konzentrationen des Wassers im Untersuchungsgebiet weisen Gehalte auf, die im Bereich bzw. unter dem Prüfwert der LAWA (1994) liegen und somit als unbedenklich gelten dürften (siehe auch Abbildung 34).

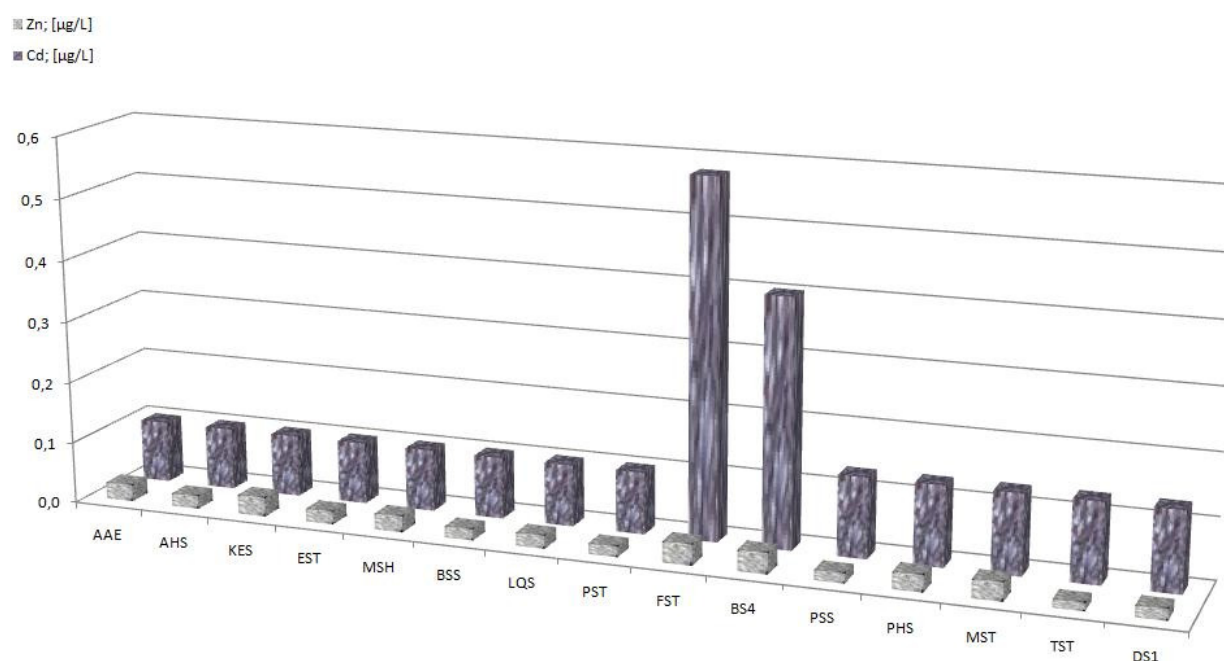


Abb. 34: Vergleich der Übergangsmetalle Zink und Cadmium der Messpunkte

Zink

Der Zinkgehalt (Zn) variiert im Allgemeinen zwischen 0 und 449 µg/L, liegt aber meist unter 10 µg/L. Geogen ist Zinkblende (Sphalerit, ZnS) das häufigste und wichtigste Zn-Erzmineral (MATTHES & OKRUSCH 2005), wobei die Löslichkeit von Zink aus seinen Verbindungen nur eine untergeordnete Rolle bei der Distribution in der Biosphäre spielt. In LAWA (1994) wird für Zink ein Prüfwert von 100 bis 300 µg/L sowie ein Maßnahmenschwellenwert von 500 bis 2.000 µg/L vorgegeben. Die Zn-Konzentrationen des Grubenwassers unterbieten den von der LAWA (1994) vorgegebenen Prüfwert um mehr als den Faktor 1000, so dass auch hier Unbedenklichkeit herrscht.

Kupfer

Kupfer (Cu) ist ein Schwermetall, das zu den lebenswichtigen Spurenelementen von Pflanzen, Tieren und Menschen gehört. Der anthropogene Eintrag von Kupfer ins Fluvial- und Limnion resultiert vor allem durch industrielle Abwassereinleitungen sowie durch kupferhaltige Algizide und Fungizide. Kupfer tritt in natürlichen Gewässern in der Regel nur in Spuren auf, mit Konzentrationen kleiner als 0,1 mg/L. In Fließgewässern beträgt die Cu-Konzentration zwischen 1 bis 7 µg/L, erhöhte Gehalte können jedoch in Grubenwässern und in den Abläufen von Halden auftreten (MATTHESS 1994). Die Lösung von Kupfer wird durch Adsorption und Desorption als auch durch Komplexbildung beeinflusst. Kupfer wird z. B. an Tonminerale, Fe- und Al-oxide und -hydroxide und/oder an organische Partikel gebunden. Abbildung 35 zeigt unterschiedlich hohe Konzentrationen bei den einzelnen Messpunkten, alle Werte liegen jedoch im nicht erhöhten Bereich zwischen 1 bis 6 µg/L.

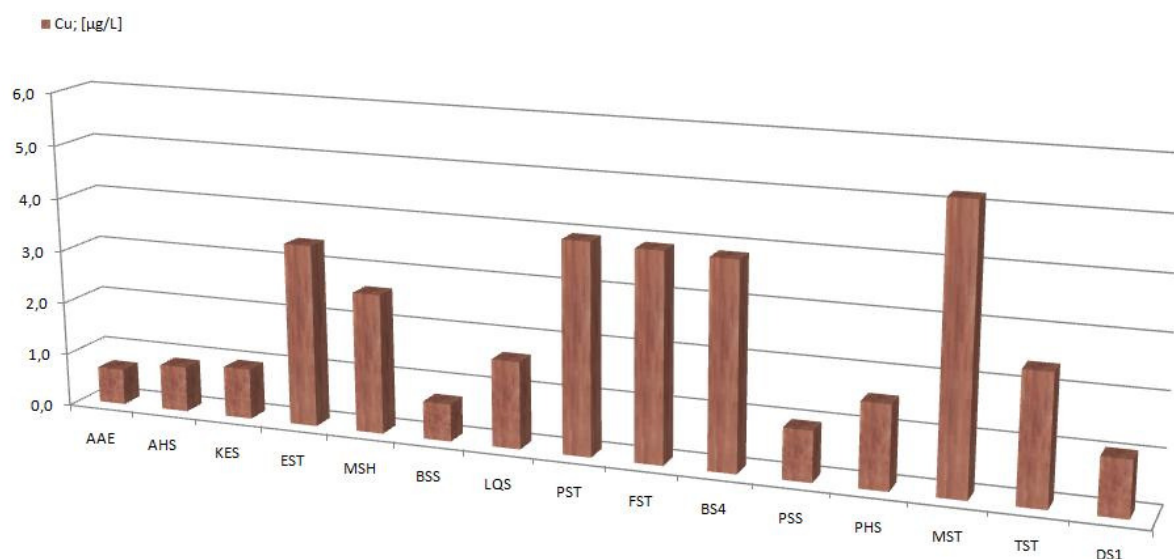


Abb. 35: Vergleich der Konzentrationen von Kupfer der Messpunkte

Mangan

Elementares Mangan (Mn) ist relativ unbeständig. Aufgrund der geringen Löslichkeit der Mn(II)- und Mn(IV)-Verbindungen ist Mangan nur in geringen Mengen im Wasser enthalten. Mangan weist in seinen chemischen Charakteristika Ähnlichkeiten mit denen des Kalziums auf und kann dieses in biologischen Systemen auch vertreten. Mangan ist häufig gemeinsam mit Eisen anzutreffen und ähnelt diesem nach WORCH (1997) ebenfalls in seinen Eigenschaften. Dies bezieht sich im Wasser vor allem auf die zweiwertigen Eisen- und Mangan-Ionen, welche oft geologischen Ursprungs sind. Da es sich bei Mangan ebenfalls um ein redoxsensitives Element handelt, wird seine Löslichkeit auch durch die pH- und Eh-Verhältnisse bestimmt. Bei pH-Werten < 7 ist zum Beispiel das zweiwertige Mangan-Ion die dominante Spezies. In den Analysen liegen die mittleren pH-Werte im Bereich zwischen 6,6 und 8,4 also meist nicht in dem Bereich, in dem das Mn^{2+} -Ion dominant ist. Neben den Mn^{2+} -Ionen treten in wesentlich geringeren Anteilen auch Chlorid- und Sulfat-Komplexe auf. Die Durchschnittswerte für Flüsse liegen bei maximal 0,05 mg/L (DVWK 110, 1996). Abbildung 36 belegt, dass die meisten MP sich an diesem Wert orientieren. Signifikante Erhöhungen der Konzentrationen liegen vor beim Bärenschützstollen (BSS), beim Friedrichstollen (FST), beim Wasserstollen (BS4) sowie beim Mittel- und Tiefstollen Peißenberg (MST/TST). Die zuletzt genannten Positionen sind mit 0,5 bzw. 0,23 mg/L auch die beiden höchsten gemessenen Werte.

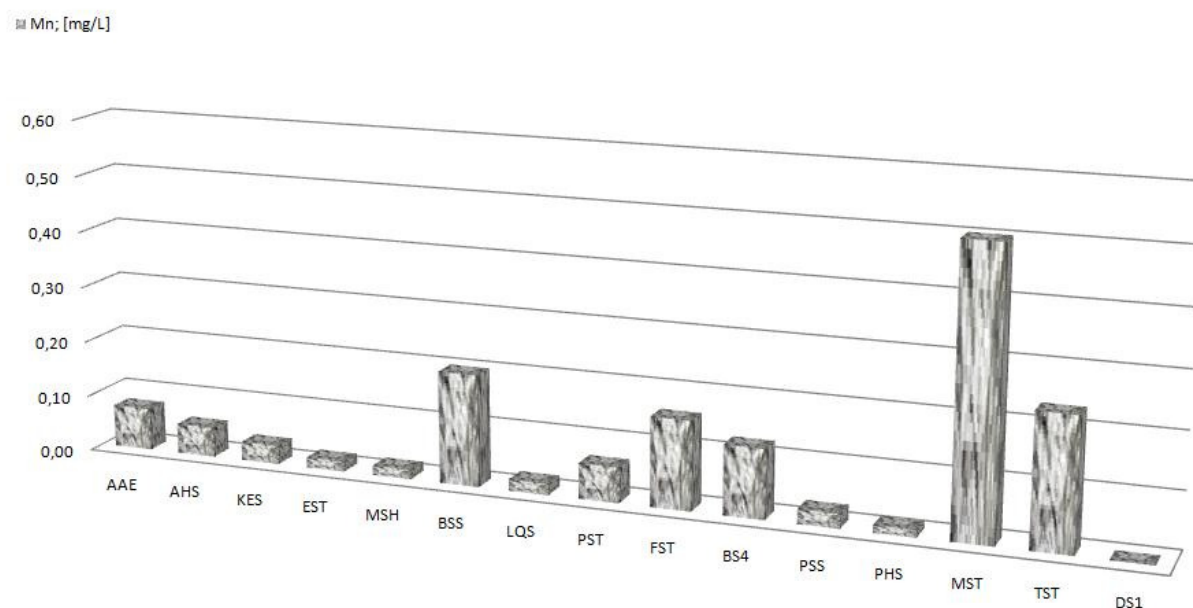


Abb. 36: Vergleich der Konzentrationen von Mangan der Messpunkte

Kobalt

Kobalt (Co) tritt im Flusswasser in sehr geringen Mengen mit mittleren Konzentrationen von $0,19 \mu\text{g/L}$ auf (DVWK 117, 1998). Diese geringen Konzentrationen sind durch die Sorption an Fe- und Mn-Oxiden und dessen geringer Löslichkeit begründet. Nach LAWA (1994) liegt der Prüfwert für Kobalt zwischen 20 und $50 \mu\text{g/L}$, der Maßnahmenschwellenwert zwischen 100 und $200 \mu\text{g/L}$. Somit liegen die Werte von Friedrichstollen (FST), Wasserstollen (BS4) und Mittelstollen Peißenberg (MST, Abb. 38) beträchtlich jenseits dieser Schwelle (Abb. 37).

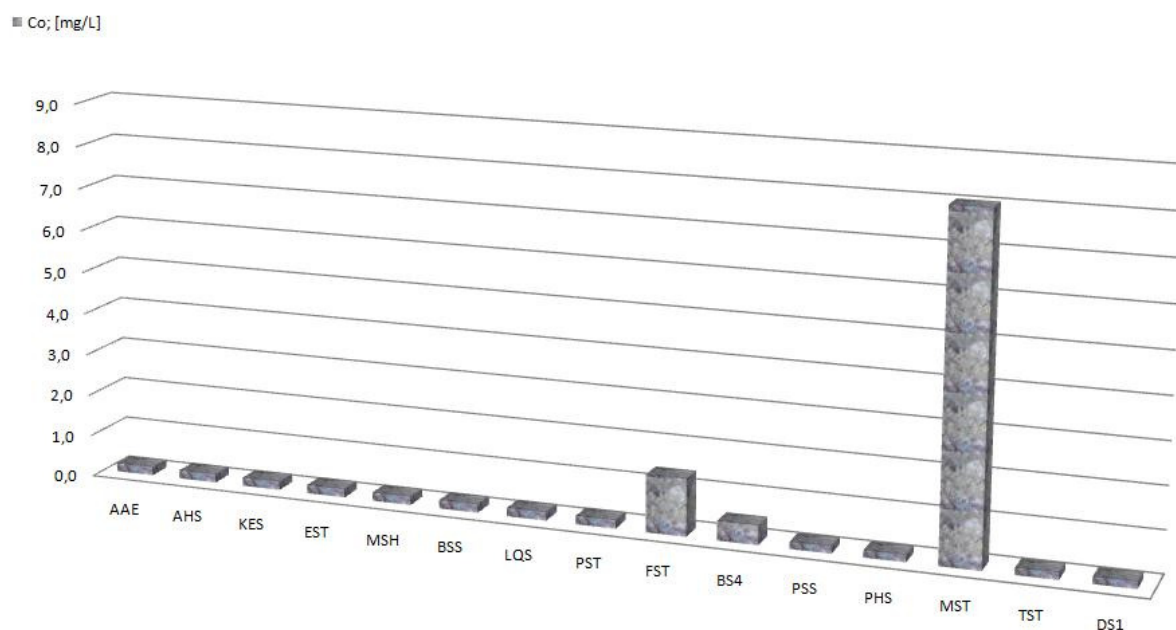


Abb. 37: Vergleich der Konzentrationen von Kobalt der Messpunkte



Abb. 38: Ortsbrust des Mittelstollens Peißenberg mit Ausfällungen von Eisenoxiden (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

Nickel

Konzentrationen von Nickel (Ni) liegen im $\mu\text{g/L}$ -Bereich ($0,3 \mu\text{g/L}$), was den geogenen Eintrag betrifft. Erhöhte Nickelgehalte deuten auf eine Abwassereinleitung hin (WORCH 1997). Nach LAWA (1994) liegen der Prüfwert zwischen 15 und $50 \mu\text{g/L}$ und der Maßnahmenschwellenwert zwischen 200 und $250 \mu\text{g/L}$.

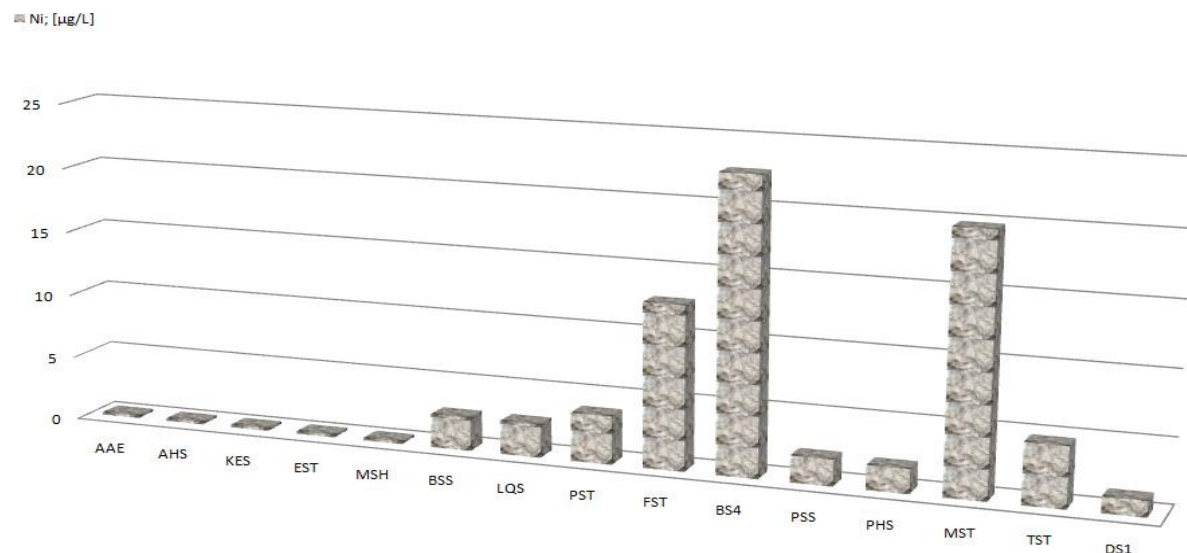


Abb. 39: Vergleich der Konzentrationen von Nickel der Messpunkte

In Abbildung 39 ist zu sehen, dass der Prüfwert der LAWA (1994) von keinem der beprobten Grubenwässer überschritten wird. Die beiden höchsten Werte von Wasserstollen (BS4) mit $22,61 \mu\text{g/L}$ und Mittelstollen Peißenberg (MST, Abb. 40) mit $19,79 \mu\text{g/L}$ liegen im Bereich.



Abb. 40: Drainage des Mittelstollens Peißenberg mit deutlicher Verockerung (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

6 Interpretation, Schlussfolgerungen

Analytische Methoden, die während der Feldarbeit und später durch dritte Hand im Labor der Ludwig-Maximilians-Universität München angewandt wurden, erlauben einen vertieften Einblick in die Wasserchemie der im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Austrittsstellen von Grubenwasser. Unter Zuhilfenahme der dadurch gewonnenen Informationen können die nachfolgenden Schlussfolgerungen zur Einschätzung der Situation und des möglichen Handlungsbedarfs getroffen werden.

Das in dieser Arbeit untersuchte Grubenwasser weist teilweise stark erhöhte Konzentrationen an den analysierten Wasserinhaltsstoffen auf, die zum Teil über den von der LAWA festgelegten Werten liegen. Dafür sollte der Vollständigkeit halber vorweg geschickt werden, dass bei weitem nicht alle aufgefundenen Stollen auch Wasser führten bzw. einige Stollen sehr geringe Schüttungen hervorbrachten und so aus der reinen Wasseruntersuchung herausfielen (siehe auch Anhang 3 und Anhang 4). Ein Ausbleiben von oberflächlichen Grubenwasseraustritten schließt dabei selbstverständlich eine eventuelle unterirdische Infiltration des Grundwassers und damit dessen Verunreinigung nicht aus.

Der durch die Karbonatpufferung, verursacht durch die allgegenwärtige Dominanz von Kalkgesteinen in der Region, relativ neutrale pH-Wert als „Master-Variable“ täuscht nur kurz über den veränderten Chemismus der untersuchten Proben hinweg. Ohne die begünstigende Abpufferung der entstehenden Säure durch die geologischen Gegebenheiten („natural attenuation“) würde sich die Gesamtsituation ungleich drastischer darstellen. So würde der pH-Wert eines Grubenwassers z. B. im kristallin dominiertem Umfeld einer Grundgebirgsmasse weit im sauren Bereich liegen.

Die Konzentrationsunterschiede sind bei den Haupt- und Nebenelementen vor allem bei Natrium, Kalium, Kalzium, Magnesium, Eisen, Chlorid, Sulfat und Nitrat zu beobachten. Bei den Spurenelementen betrifft dies Arsen, Barium, Mangan, Strontium, Kobalt und Nickel. Die Konzentrationsunterschiede bei den austretenden Grubenwässern reichen von einigen µg/L (Spurenelemente) bis zu mehreren 100 mg/L (Hauptelemente). Beispielsweise ist der Arsengehalt des Grubenwassers im Friedrichstollen (FST) mit einer Konzentration von 23,26 µg/L mehr als 11 Mal so hoch wie die untere Prüfwertintervallgrenze laut LAWA von 2 µg/L, der Sulfatgehalt mit 2.334 mg/L ca. 10 Mal höher als der Geringfügigkeitsschwellenwert der LAWA für Grundwasserverunreinigungen.

Chemische Eigenschaften und Schadstofffracht des dort austretenden Grubenwassers und die damit verursachte Belastung durch direkte Einleitung in die Leitzach, die gegen das Ziel des Gewässerschutzes in Bayern verstößt, macht eine Behandlung der Bergwerkswässer nötig.

Dabei sind durch Gewährspersonen bezeugte Ausbruchereignisse in der Vergangenheit, durch Loslösung von Niederschlägen mit darauffolgendem Massensterben der heimischen Fische durch Verstopfung ihrer Kiemen, noch gar nicht in die Betrachtung mit einbezogen. Aufgrund der Wasserbeschaffenheit ist die Reinigung mit einem „Reducing and Alkalinity Producing System“, RAPS, ratsam. Bei einem RAPS handelt es sich um eine Kombination aus einem anaeroben Feuchtgebiet und einem geschlossenen Karbonatkanal. Die Vorzüge dieses naturnahen Wasserbehandlungssystems liegen in der Eignung für Wasser mit hoher Basenkapazität (netto-acidisch), dem für ein passives System geringen Platzbedarf, den niedrigen Betriebskosten und der langen Lebensdauer.

Aufgrund der räumlichen Gegebenheiten ist für die Behandlung des aus dem Friedrichstollen austretenden Wassers der Bau einer ca. 1,5 km langen, geschlossenen Überführungsstrecke bis zur Ortschaft Leitzach und eines sich anschließenden RAPS nötig, aus dem das Wasser über eine Kaskade in ein anaerobes Feuchtgebiet strömt und von dort aus in die Leitzach eingeleitet wird. Eine direkte Vorortbehandlung scheidet aufgrund der Enge des Flusstals aus, da dort keinerlei Platz für eine Anlage zur Verfügung steht. Wegen der unmittelbaren Nähe der Stollen Leitzach Querschlag (LQS) sowie Phillipstollen (PST) wäre eine Integration dieser Verunreinigungsquellen in das Konzept nur billig und sinnvoll.

So könnten 75 % der in dieser Arbeit erfassten Grubenwassermengen mit nur einem Projekt auf ein ökologisch annehmbares Qualitätsniveau gebracht werden. Auch im Sinne der europäischen Wasserrahmenrichtlinie wäre die Realisierung eines solchen Konzeptes zuträglich, um den aufgestellten Güteanforderungen zu entsprechen.

Literaturliste

BREHM J. & MEIJERING M. (1996): Fließgewässerkunde: Einführung in die Ökologie der Quellen, Bäche und Flüsse; 3. überarbeitete Auflage; Wiesbaden, Quelle und Meyer, (Biologische Arbeitsbücher; 36), 302 S.

FURTAK H. & LANGGUTH H.R. (1967): Zur hydrochemischen Kennzeichnung von Grundwässern und Grundwassertypen mittels Kennzahlen. International Association of Hydrogeology, S. 89-96

GEISSLER P. (1975): Räumliche Veränderung und Zusammensetzung der Flöze in den Kohlenbergwerken Hausham und Penzberg, S. 61-106 – In: SCHMIDT-KALER H. (Redaktion): Geologica Bavarica 73 – Die oberbayerische Pechkohle; Bayer. Geologisches Landesamt; München, 142 S.

HEDIN, R. S., NAIRN, R. W., & R. L. P. KLEINMANN (1994): Passive treatment of coal mine drainage. – Bureau of Mines Circular No. 9389, S. 1-35

HEINRICHS H. & HERRMANN A.G. (1990): Praktikum der Analytischen Geochemie; Springer Berlin Heidelberg

HELMS W. (1995): Sauerwasser im Erzbergbau – Entstehung, Vermeidung und Behandlung.; Bergbau, 46 (2), S. 65-71;

HÖLTING B. (1995): Hydrogeologie: Eine Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie, 5. Auflage, Enke Stuttgart

HÜTTER L.A. (1994): Wasser und Wasseruntersuchung, 6. erw. u. überarbeitete Auflage, Salle u. Sauerländer, 246 S.

JUNGK G. (1975): Der Kohlenbergbau am Hohenpeißenberg., S. 25-35 – In: SCHMIDT-KALER H. (Redaktion): Geologica Bavarica 73 – Die oberbayerische Pechkohle; Bayer. Geologisches Landesamt; München, 142 S.

KÖLLE W. (2003): Wasseranalysen – richtig beurteilt, 2. aktualisierte und erweiterte Auflage, Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 424 S.

LAWA LÄNDERARBEITSGEMEINSCHAFT WASSER (1994): Empfehlungen für die Erkundung, Bewertung und Behandlung von Grundwasserschäden. LAWA, Arbeitskreis Grundwassergüte, Stuttgart, Länderarbeitsgemeinschaft Wasser

LAWA LÄNDERARBEITSGEMEINSCHAFT WASSER (1998): Beurteilung der Wasserbeschaffenheit von Fließgewässern in der Bundesrepublik Deutschland. Chemische Gewässergüteklassifikation, Berlin, 34 S.

MATTHESS, G. (1994): Die Beschaffenheit des Grundwassers; 3. Auflage; Gebrüder Borntraeger; Berlin, Stuttgart, 499 S.

MATTHESS, G. & UBELL K. (1983): Lehrbuch der Hydrogeologie – Band 1 Allgemeine Hydrogeologie – Grundwasserhaushalt, Gebrüder Borntraeger; Berlin, Stuttgart, 438 S.

MATTHES S. & OKRUSCH M. (2005): Mineralogie – Eine Einführung in die spezielle Mineralogie, Petrologie und Lagerstättenkunde, 7. Auflage, Springer; Berlin, Heidelberg, New York, 526 S.

MERKEL B.J. & PLANER-FRIEDRICH B. (2002): Grundwasserchemie – Praxisorientierter Leitfaden zur numerischen Modellierung von Beschaffenheit, Kontamination und Sanierung aquatischer Systeme; Springer; Berlin, Heidelberg, New York, 219 S.

MOSES C.O.; NORDSTROM D.K.; HERMAN J.S.; MILLS A.L. (1987): Aqueous pyrite oxidation by dissolved oxygen and by ferric iron, *Geochimica et Cosmochimica Acta* 51

PFEIFFER S. & PECHER K. (1997): Experimentelle aquatische Chemie.; Heidelberg, Berlin, Oxford: Spektrum, Akademischer Verlag, 177 S.

SCHWEDT G. (1995): Mobile Umweltanalytik: Schnelltestverfahren und Vor-Ort-Messtechnik., 1. Auflage, Würzburg: Vogel, 187 S.

SCHWOERBEL, J. (1999): Einführung in die Limnologie. - 8. Auflage, G. Fischer; Stuttgart, Jena, Lübeck, Ulm, 465 S.

SCOTT R.L. & HAYS R.M.: Inactive and abandoned underground mines – water pollution prevention and control, prepared for Office of Water and Harzardous Materials, US Environmental Protection Agency Washington, D.C. 20460, reproduced by National Technical Information Service; US Department of Commerce Springfield; VA 22161, 339 S.

SIGG L. & STUMM W. (1994): Aquatische Chemie – eine Einführung in die Chemie wässriger Lösungen und natürlicher Wässer, 3. vollständig überarbeitete Auflage; Teubner; Zürich, 498 S.

WILLSCHER, S. (2001): Lösungsansätze zur Minderung der Umweltbelastung durch saure Grubenwässer: I. Maßnahmen zu deren Minimierung und Verfahren der aktiven Behandlung. – Vom Wasser 97. Band, Wiley-VCH; S. 145 – 166

WOLKERSDORFER, CH. (2008): Water Management at Abandoned Flooded Underground Mines, Fundamentals, Tracer Tests, Modelling, Water Treatment, Springer; Berlin Heidelberg, 465 S.

WORCH E. (1997): Wasser und Wasserinhaltsstoffe; eine Einführung in die Hydrochemie, Teubner, Stuttgart Leipzig, 205 S.

YOUNGER, P.L.; BANWART, S.A. & HEDIN, R.S. (2002): Mine Water – Hydrology, Pollution, Remediation; Kluver Academic Publisher

Unpublizierte Literatur:

MERKEL B. & PLANER-FRIEDRICH B. (2003) Integrierte Datenauswertung Hydrogeologie; unveröffentlichtes Manuskript der TU Bergakademie Freiberg, Lehrstuhl für Hydrogeologie; Freiberg, 61 S.

MOCHE, M. Untersuchungen zum Anheftungsverhalten von Eisen oxidierenden Bakterien: Speziesvariation und Aufwuchsmaterialien; unveröffentlichtes Manuskript der TU Bergakademie Freiberg, Fakultät für Geowissenschaften, 11 S.

SCHOLZ, H. (1996): Exkursion Alpenvorland; unveröffentlichtes Exkursionsprotokoll; 5 S.

TAMME S. (2002): Naturnahe Reinigung kontaminierter Bergwerkswässer – Bemessung und Entwurf eines konstruierten Feuchtgebietes bei Gernrode/Harz, Diplomarbeit der TU Bergakademie Freiberg, Lehrstuhl für Hydrogeologie; Freiberg, 131 S.

Abkürzungsverzeichnis

Abb.	Abbildung
ALD	Anoxic Limestone Drain
aq.	aquatisch
DIN	Deutsches Institut für Normung e.V.
DOC	gelöster organisch gebundener Kohlenstoff (Dissolved Organic Carbon)
D.O.	gelöster Sauerstoff (Dissolved Oxygen)
GPS	Globales Positionsbestimmungs-System (Global Positioning System)
k_b	Basenkapazität
k_s	Säurekapazität
LAWA	Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Wasser
MP	Messpunkt
nb	nicht bestimmt
nn	nicht nachweisbar
Ox	Oxidation
RAPS	Reducing and Alkalinity Producing System
Red	Reduktion
s.	solid
SI	Sättigungsindex
Tab.	Tabelle
TDS	Gesamtmineralisation (Total Dissolved Solids)
URL	Adresse zur Ressourcenidentifikation im Internet (Uniform Resource Locator)
WGS84	weltweites geodätisches Koordinatensystem (World Geodetic System 1984)

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1: Übersichtskarte des Zielgebietes „Bayerische Pechkohle“ mit den Hauptmuldenzügen (aus der Geologica Bavarica 73)

Abb. 2: Originalprofil „Schnitt durch die Peißenberger Kohlenmulde“, Quelle: Archiv des Bayerischen Staatsministeriums für Wirtschaft, Infrastruktur, Verkehr und Technologie (mit freundlicher Genehmigung)

Abb. 3: Vereinfachtes Prinzip der Oxidation von Metallen aus sulfidischen Mineralen durch *Acidithiobacillus ferrooxidans* (WILLSCHER 2001)

Abb. 4: *GARMIN* Colorado 300 GPS-Gerät (Herstellerfoto)

Abb. 5a: *MITYVAC*-Vakuumhandpumpe (Herstellerfoto)

Abb. 5b: *NALGENE*-Filterflasche 1 L (Herstellerfoto)

Abb. 6: *MYRON L* Ultrameter 6P (Herstellerfoto)

Abb. 7: *WTW* MultiLine P4 Mehrfachparametermessgerät mit Sauerstoffsensoren CelloX 325 und pH-Einstabmesskette mit integriertem Temperaturmessfühler SenTix 91T (Herstellerfoto)

Abb. 8: Komponentenverteilung des anorganischen Kohlenstoffs (aus KÖLLE 2003)

Abb. 9: *HACH LANGE* Digitaltitrator (Herstellerfoto)

Abb. 10: Salztracer-Messgerät *SOMMER* MST-4 mit Leitfähigkeitsmesssondendublette (Herstellerfoto)

Abb. 11: *GW_CHART*-Piperdiagramm (nach PIPER, 1944) der untersuchten Messpunkte modifiziert nach FURTAK & LANGGUTH, 1967;

Abb. 12: Vergleich der gemessenen Temperaturen der Messpunkte

Abb. 13: Probenahmestelle Tiefstollen Peißenberg (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

Abb. 14: Vergleich der gemessenen pH-Werte der Messpunkte mit bekannten Flüssigkeiten des Alltags

Abb. 15: Ausgefälltes Eisenhydroxid im Grubenwasser des Phillipstollens (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

Abb. 16: Vergleich der absoluten und prozentualen Sauerstoffsättigung der Messpunkte

Abb. 17: Vergleich der elektrischen Leitfähigkeit mit der Gesamtmineralisation (wo gemessen) der Messpunkte

Abb. 18: Offene Belüftungstreppe nach dem Auslassventil des Friedrichstollens (Foto: Ch. Wolkersdorfer)

Abb. 19: Vergleich der gemessenen und korrigierten Redoxpotenziale von Messstellen mit den Bereichen des Redoxpotenzials nach SIGG & STUMM 1994

Abb. 20: Absente Ausfällungen von Eisenverbindungen im Deisenrieder Stollen
(Foto: Ch. Wolkersdorfer)

Abb. 21: Vergleich der Säure- und Basenkapazitäten aller Messpunkte

Abb. 22: Die Halde des ehemaligen Zement- und Kohlebergwerks Marienstein
(Foto: Ch. Wolkersdorfer)

Abb. 23: Vergleich der Durchflüsse der Messpunkte (geringfügige Schüttungen vernachlässigt)

Abb. 24: Vergleich der Konzentrationen von Natrium und Kalium der Messpunkte

Abb. 25: Vergleich der Konzentrationen von Kalzium und Magnesium der Messpunkte

Abb. 26: Vergleich der Konzentrationen von Eisen (gesamt) in den filtrierten Proben der Messpunkte

Abb. 27: Eintrag von Grubenwasser des Friedrichstollens in den Vorfluter Leitzach
(Foto: Ch. Wolkersdorfer)

Abb. 28: Vergleich der Nitrat-Konzentrationen der Messpunkte

Abb. 29: Vergleich der Chlorid-Konzentrationen der Messpunkte

Abb. 30: Vergleich der Sulfat-Konzentrationen der Messpunkte

Abb. 31: Vergleich der Fluorid-Konzentrationen der Messpunkte

Abb. 32: Vergleich der Arsen-Konzentrationen der Messpunkte

Abb. 33: Vergleich der schwereren Erdalkalimetalle Barium und Strontium der Messpunkte

Abb. 34: Vergleich der Übergangsmetalle Zink und Cadmium der Messpunkte

Abb. 35: Vergleich der Konzentrationen von Kupfer der Messpunkte

Abb. 36: Vergleich der Konzentrationen von Mangan der Messpunkte

Abb. 37: Vergleich der Konzentrationen von Kobalt der Messpunkte

Abb. 38: Ortsbrust des Mittelstollens Peißenberg mit Ausfällungen von Eisenoxiden
(Foto: Ch. Wolkersdorfer)

Abb. 39: Vergleich der Konzentrationen von Nickel der Messpunkte

Abb. 40: Drainage des Mittelstollens Peißenberg mit deutlicher Verockerung
(Foto: Ch. Wolkersdorfer)

Tabellenverzeichnis

- Tab. 1: Ausgewählte Mineralphasen, die zur sequentiellen pH-Pufferung beitragen
(BLOWES et al. 1994, nach WOLKERSDORFER 1995)
- Tab. 2: Klassifizierung von Grubenwässern nach ihren wichtigsten Hauptparametern
(SCOTT & HAYS 1975, nach TAMME 2002)
- Tab. 3: Acidophile Prokaryonten, die im Grubenwasser auftreten können
(nach WOLKERSDORFER 2008 & HALLBERG/JOHNSON 2005)
- Tab. 4: Vergleich der abiotischen und mikrobiologischen Raten für die Oxidation von
Fe(II)-Ionen in Wasser und Pyrit (NORDSTROM & SOUTHAM 1997)
- Tab. 5: Spezifische und gemessene Leitfähigkeiten verschiedener Wässer
(* aus PFEIFFER & PECHER 1997, SCHWEDT 1995; ¹ Messwert)
- Tab. 6: Fehlerwerte der Ionenbilanz von Modellierung und Analysedaten im Vergleich
(Werte des von *PHREEQC* berechneten Fehlers auf eine Nachkommastelle gerundet)
- Tab. 7: Gemessene und berechnete elektrische Leitfähigkeit im Vergleich
(berechnete Werte sind ganzzahlig gerundet)
- Tab. 8: Prüf- und Maßnahmenschwellenwerte für einige Stoffe bei der Untersuchung von
Grundwasser (aus LAWA 1994)

Anhang

Anhang 1: Tabelle der Wasseranalysedaten aller Messpunkte

nn : nicht nachweisbar, < : unterhalb der Nachweisgrenze, -- : kein Messwert vorhanden

Probennummer	ESB-1804-AAE	ESB-1804-AHS	ESB-1804-KES	ESB-1804-EST	ESB-1904-MSH	ESB-2004-BSS	ESB-2404-LQS	ESB-2404-PST	ESB-2404-FST	ESB-2704-BS4	ESB-0805-PSS	ESB-0805-PHS	ESB-0805-MST	ESB-0805-TST	ESB-2905-DS1
Bezeichnung	Alter Auer Erbstollen	Auer Hauptstollen	Kemathstollen	Eckersbergerstollen	Marienstein Halde	Bärenschützstollen	Leitzach Querschlag	Phillipstollen	Friedrichstollen	Wasserstollen	Peißenberg Sulzer Stollen	Peißenberg Hauptstollen	Peißenberg Mittelstollen	Peißenberg Tiefstollen	Deisenrieder Stollen
Q, L/min	10,3	5	3,14	1	12	4,81	7,35	5	2092,8	189,6	43,6	2,6	159,6	217,2	80,22
Datum, Uhrzeit	18.04.2008, 12:00	18.04.2008, 12:00	18.04.2008, 15:00	18.04.2008, 14:35	20.04.2008, 11:35	20.04.2008, 15:19	24.04.2008, 11:00	24.04.2008, 09:41	24.04.2008, 13:05	27.04.2008, 17:30	08.05.2008, 12:00	08.05.2008, 12:00	08.05.2008, 12:00	08.05.2008, 12:00	29.05.2008, 12:00
T, °C	--	9,9	9,6	7,4	10,2	9,5	5,3	9,4	14,5	11,5	8,5	8,0	12,0	16,8	8,4
pH	7,47	7,10	7,75	7,71	8,34	7,09	8,08	7,12	6,68	7,24	7,60	8,28	7,10	7,13	7,74
el. Lf, µS/cm	849	748	675	603	2409	560	407	773	4884	3474	1007	568	2480	3200	612
Redox, mV	-66	-111	87	122	200	-14	--	--	--	--	48	304	-38	-48	389
Redox, mV	163	110	308	345	420	207	--	--	--	--	270	526	181	166	611
O ₂ , mg/L	7,7	0,6	10,0	8,7	8,1	10,6	14	1,02	0,72	4,50	10,05	16,92	8,52	7,50	9,93
O ₂ , %	79	5	96	78	80	98	120	9,4	8,0	36,0	90,0	151,0	84,5	82,5	93,5
TDS, ppm	--	515	463	--	1762	383	279	530	3504	--	--	--	--	--	--
Fe ges.filt. mg/L	<0,05	0,25	0,06	<0,05	0,06	0,82	0,06	0,33	12,61	0,93	0,05	<0,04	5,13	0,11	0,04
k _B -Wert Acidität	280	353	117	121	9	--	19	321	1047	264	47	4	300	794	113
k _S -Wert Alkalität	116	108	101	133	1017	84	57	78	199	148	82	91	135	196	261
M H ₂ SO ₄	2,8	2,8	2,8	1,6	0,1	2,8	2,8	2,8	2,8	2,8	2,8	2,8	2,8	2,8	1,0
M NaOH	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	1,6	0,1	0,1	0,1
k _B -Wert, mmol/L	0,70	0,88	0,29	0,30	0,02	0,00	0,05	0,80	2,62	0,66	0,12	0,16	0,75	1,99	0,28
k _S -Wert, mmol/L	8,12	7,56	7,07	5,32	2,54	5,88	3,99	5,46	13,93	10,36	5,74	6,37	9,45	13,72	6,53
Na, mg/L	24,60	22,70	7,94	3,22	83,50	2,49	1,00	28,00	620,00	304,50	15,64	9,41	165,80	351,80	4,94
K, mg/L	2,8	2,5	2,6	0,8	195,0	1,3	0,7	3,9	30,7	60,9	2,3	0,9	10,8	16,7	1,0
Ca, mg/L	119,100	105,500	105,500	96,900	217,300	101,200	65,100	110,800	396,700	403,500	147,200	81,500	406,400	341,900	91,800
Mg, mg/L	30,1	23,7	24,6	20,0	101,9	14,4	13,9	21,8	117,4	113,3	41,5	18,3	91,2	92,8	21,5
Sr, mg/L	1,090	0,990	0,910	0,370	2,770	0,690	0,180	0,950	8,260	8,020	1,430	0,240	8,560	8,510	0,420
Ba, mg/L	0,640	<0,2	0,380	0,450	0,220	0,260	0,270	<0,2	0,220	0,220	<0,6	<0,6	<0,6	<0,6	<0,6
HCO ₃ , mg/L	495,45	461,28	431,38	324,60	155,13	358,77	243,45	333,15	849,95	632,12	350,23	388,67	576,60	837,14	398,13
Cl ⁻ , mg/L	23,335	5,260	10,830	2,300	2,495	1,510	1,200	8,805	13,775	97,765	7,195	19,000	12,590	22,345	3,775
SO ₄ ²⁻ , mg/L	12,495	17,455	13,715	32,01	1261	41,99	16,545	94,445	2334,46	1883,55	285,900	14,695	1543,1	1640,3	24,585
NO ₃ ⁻ , mg/L	0,88	0,28	0,365	17,285	29,015	0,28	7,495	1,355	nn	6,835	1,505	7,78	nn	1,485	6,395
F, mg/L	0,3	0,3	0,2	0,2	0,9	0,2	nn	0,3	1,2	0,6	0,2	0,2	0,5	0,7	0,2
As, µg/L	<2,4	<2,4	<2,4	<2,4	<2,4	<2,4	<2,4	<2,4	23,260	13,75	<3,8	<3,8	<3,8	6,37	<3,8
Al, mg/L	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3	<0,3
Cr, µg/L	0,344	0,353	0,185	0,372	6,050	0,318	0,314	0,269	0,683	0,739	0,441	0,426	0,29	0,273	0,301
Ni, µg/L	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	2,61	2,59	3,75	12,66	22,61	2,06	1,89	19,79	4,7	1,24
Cu, µg/L	0,675	0,857	0,95	3,42	2,62	<0,7	1,63	3,94	3,89	3,85	0,944	1,56	5,2	2,4	1,04
Zn, µg/L	0,027	0,021	0,031	0,021	0,026	0,018	0,021	0,017	0,034	0,034	0,016	0,027	0,030	0,013	0,018
Cd, µg/L	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,577	0,401	<0,13	<0,13	<0,13	<0,13	<0,13
Co, mg/L	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	<0,2	1,360	0,46	<0,17	<0,17	8,03	<0,17	<0,17
Mn, mg/L	0,08	0,05	0,03	0,02	0,02	0,20	0,02	0,06	0,16	0,12	0,03	0,01	0,50	0,23	<0,01
Fe, meq/L	0,000	0,013	0,003	0,000	0,003	0,044	0,003	0,018	0,677	0,050	0,003	0,000	0,276	0,006	0,002
Na, meq/L	1,070	0,987	0,345	0,140	3,632	0,108	0,043	1,218	26,968	13,245	0,680	0,409	7,212	15,302	0,215
Ca, meq/L	5,943	5,265	5,265	4,836	10,844	5,050	3,249	5,529	19,796	20,136	7,346	4,067	20,280	17,062	4,581
Ba, meq/L	0,009	nn	0,006	0,007	0,003	0,004	0,004	nn	0,003	0,003	nn	nn	nn	nn	nn
Sr, meq/L	0,025	0,023	0,021	0,008	0,063	0,016	0,004	0,022	0,189	0,183	0,033	0,005	0,195	0,194	0,010
K, meq/L	0,072	0,063	0,065	0,019	4,987	0,033	0,018	0,099	0,785	1,558	0,058	0,022	0,277	0,427	0,025
Mg, meq/L	2,477	1,950	2,024	1,646	8,385	1,185	1,140	1,790	9,661	9,323	3,415	1,506	7,505	7,636	1,769
HCO ₃ , meq/L	8,120	7,560	7,070	5,320	2,543	5,880	3,990	5,460	13,930	10,360	5,740	6,370	9,450	13,720	6,525
F, meq/L	0,016	0,016	0,011	0,010	0,048	0,010	0,000	0,015	0,064	0,032	0,011	0,011	0,028	0,035	0,010
Cl ⁻ , meq/L	0,658	0,148	0,305	0,065	0,070	0,043	0,034	0,248	0,389	2,758	0,203	0,536	0,355	0,630	0,106
NO ₃ ⁻ , meq/L	0,014	0,005	0,006	0,279	0,468	0,005	0,121	0,022	0,000	0,110	0,024	0,125	0,000	0,024	0,103
SO ₄ ²⁻ , meq/L	0,260	0,363	0,286	0,666	26,254	0,874	0,344	1,966	48,604	39,216	5,952	0,306	32,128	34,151	0,512
Anionen	9,069	8,092	7,678	6,340	29,383	6,811	4,489	7,711	62,986	52,475	11,931	7,348	41,961	48,561	7,256
Kationen	9,596	8,302	7,729	6,656	27,918	6,440	4,462	8,676	58,080	44,498	11,535	6,009	35,745	40,627	6,602
Fehler, A/K	3%	1%	0%	2%	-3%	-3%	0%	6%	-4%	-8%	-2%	-10%	-8%	-9%	-5%

Anhang 2: Ausgabedatei der Modellierung mit PHREEQC

<p>Input file: C:\Users\BitBenno\AppData\Local\Temp\phreeq000.tmp</p> <p>Output file: C:\Users\BitBenno\Desktop\Bachelorarbeit\BStM\Modellierung\esh.out</p> <p>Database file: C:\Program Files\Phreeqc\Databases\phreeq.dat</p> <p>Reading data base:</p> <p>SOLUTION_MASTER_SPECIES SOLUTION_SPECIES PHASES EXCHANGE_MASTER_SPECIES EXCHANGE_SPECIES SURFACE_MASTER_SPECIES SURFACE_SPECIES RATES END</p>	<p>Initial solution 1. ESB-1804-AAE</p> <p>-----Solution composition-----</p> <table> <tr> <th>Elements</th><th>Molality</th><th>Moles</th></tr> <tr><td>Ba</td><td>4.663e-06</td><td>4.663e-06</td></tr> <tr><td>C</td><td>8.125e-03</td><td>8.125e-03</td></tr> <tr><td>F</td><td>2.974e-03</td><td>2.974e-03</td></tr> <tr><td>Cd</td><td>4.452e-07</td><td>4.452e-07</td></tr> <tr><td>Cl</td><td>6.587e-04</td><td>6.587e-04</td></tr> <tr><td>Cu</td><td>1.063e-08</td><td>1.063e-08</td></tr> <tr><td>Fe</td><td>1.580e-05</td><td>1.580e-05</td></tr> <tr><td>Fe(3)</td><td>4.480e-08</td><td>4.480e-08</td></tr> <tr><td>K</td><td>7.166e-05</td><td>7.166e-05</td></tr> <tr><td>Mg</td><td>1.239e-03</td><td>1.239e-03</td></tr> <tr><td>Mn</td><td>1.457e-06</td><td>1.457e-06</td></tr> <tr><td>N(5)</td><td>1.420e-05</td><td>1.420e-05</td></tr> <tr><td>Na</td><td>1.071e-03</td><td>1.071e-03</td></tr> <tr><td>Si(6)</td><td>1.302e-04</td><td>1.302e-04</td></tr> <tr><td>Zn</td><td>4.133e-10</td><td>4.133e-10</td></tr> </table> <p>-----Description of solution-----</p> <p>pH = 7.470 pe = 4.000 Activity of water = 1.000 Ionic strength = 1.283e-02 Mass of water (kg) = 1.000e+00 Total alkalinity (eq/kg) = 7.499e-03 Total CO2 (mol/kg) = 8.125e-03 Temperature (deg C) = 9.000 Electrical balance (eq) = 1.133e-03 Percent error, 100*(Ca-Ani)/(Ca+Ani) = 6.48</p> <p>Iterations = 9 Total H = 1.110199e+02 Total O = 5.553050e+01</p> <p>-----Distribution of species-----</p> <table> <tr> <th>Species</th><th>Molality</th><th>Log Activity</th><th>Log Molality</th><th>Log Activity</th><th>Gamma</th></tr> <tr><td>OH-</td><td>8.853e-08</td><td>7.893e-08</td><td>-7.053</td><td>-7.103</td><td>-0.050</td></tr> <tr><td>H+</td><td>3.735e-08</td><td>3.388e-08</td><td>-7.428</td><td>-7.470</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>H2O</td><td>5.551e+01</td><td>9.998e-01</td><td>1.744</td><td>-0.000</td><td>0.000</td></tr> <tr><td>Ba</td><td>4.663e-06</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>Ba+2</td><td>4.442e-06</td><td>2.867e-06</td><td>-5.352</td><td>-5.543</td><td>-0.190</td></tr> <tr><td>BaHCO3+</td><td>1.210e-07</td><td>1.082e-07</td><td>-6.917</td><td>-6.966</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>BasO4</td><td>9.403e-08</td><td>9.431e-08</td><td>-7.027</td><td>-7.025</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>BaCO3</td><td>6.502e-09</td><td>6.521e-09</td><td>-8.187</td><td>-8.186</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>BaOH+</td><td>3.207e-12</td><td>2.867e-12</td><td>-11.494</td><td>-11.543</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>C(4)</td><td>0.000e+00</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>CH4</td><td>0.000e+00</td><td>0.000e+00</td><td>-68.310</td><td>-68.308</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>C(4)</td><td>8.125e-03</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>HCO3-</td><td>7.257e-03</td><td>6.513e-03</td><td>-2.139</td><td>-2.186</td><td>-0.047</td></tr> <tr><td>CO2</td><td>6.544e-04</td><td>6.564e-04</td><td>-3.184</td><td>-3.183</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaHCO3+</td><td>1.198e-04</td><td>1.075e-04</td><td>-3.922</td><td>-3.969</td><td>-0.047</td></tr> <tr><td>MgHCO3+</td><td>6.222e-05</td><td>5.562e-05</td><td>-4.206</td><td>-4.255</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaCO3</td><td>1.503e-05</td><td>1.508e-05</td><td>-7.823</td><td>-7.820</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CO3-2</td><td>9.535e-06</td><td>6.070e-06</td><td>-5.029</td><td>-5.217</td><td>-0.188</td></tr> <tr><td>NaHCO3</td><td>3.488e-06</td><td>3.498e-06</td><td>-5.457</td><td>-5.456</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>MgCO3</td><td>3.441e-06</td><td>3.451e-06</td><td>-5.463</td><td>-5.462</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>MnHCO3+</td><td>2.416e-07</td><td>3.168e-07</td><td>-6.451</td><td>-6.499</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>MnCO3</td><td>2.624e-07</td><td>2.631e-07</td><td>-6.581</td><td>-6.580</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>BaHCO3+</td><td>1.210e-07</td><td>1.082e-07</td><td>-6.917</td><td>-6.966</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaHCO3+</td><td>5.462e-08</td><td>4.883e-08</td><td>-7.263</td><td>-7.311</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>NaCO3</td><td>5.147e-08</td><td>4.602e-08</td><td>-7.288</td><td>-7.337</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>BaCO3</td><td>6.502e-09</td><td>6.521e-09</td><td>-8.187</td><td>-8.186</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaCO3</td><td>1.140e-09</td><td>1.143e-09</td><td>-8.943</td><td>-8.942</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>ZnCO3</td><td>1.262e-10</td><td>1.266e-10</td><td>-9.899</td><td>-9.898</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>ZnHCO3+</td><td>9.585e-11</td><td>8.599e-11</td><td>-10.018</td><td>-10.067</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaCO3(3)2</td><td>3.434e-11</td><td>2.194e-11</td><td>-10.464</td><td>-10.659</td><td>-0.195</td></tr> <tr><td>ZnCO3(3)2</td><td>2.571e-11</td><td>1.643e-11</td><td>-10.590</td><td>-10.784</td><td>-0.195</td></tr> <tr><td>Ca</td><td>2.974e-03</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>Ca+2</td><td>2.818e-03</td><td>1.828e-03</td><td>-2.550</td><td>-2.738</td><td>-0.188</td></tr> <tr><td>CaHCO3+</td><td>1.198e-04</td><td>1.075e-04</td><td>-3.922</td><td>-3.969</td><td>-0.047</td></tr> <tr><td>CaSO4</td><td>2.038e-05</td><td>2.044e-05</td><td>-4.691</td><td>-4.689</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaCO3</td><td>1.503e-05</td><td>1.508e-05</td><td>-7.823</td><td>-7.820</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaF+</td><td>1.614e-07</td><td>1.443e-07</td><td>-6.792</td><td>-6.841</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaOH+</td><td>1.001e-08</td><td>8.952e-09</td><td>-7.909</td><td>-8.048</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaHSO4+</td><td>3.842e-12</td><td>3.435e-12</td><td>-11.415</td><td>-11.464</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>Cd</td><td>4.452e-07</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>Cd+2</td><td>3.711e-07</td><td>2.371e-07</td><td>-6.431</td><td>-6.625</td><td>-0.195</td></tr> <tr><td>CaHCO3+</td><td>5.462e-08</td><td>4.883e-08</td><td>-7.263</td><td>-7.311</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaCl+</td><td>1.406e-08</td><td>1.257e-08</td><td>-7.852</td><td>-7.901</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaSO4</td><td>4.034e-09</td><td>4.046e-09</td><td>-8.394</td><td>-8.393</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaCO3</td><td>1.140e-09</td><td>1.143e-09</td><td>-8.943</td><td>-8.942</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaOH+</td><td>1.857e-10</td><td>1.661e-10</td><td>-9.731</td><td>-9.780</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaCO3(3)2</td><td>3.434e-11</td><td>2.194e-11</td><td>-10.464</td><td>-10.659</td><td>-0.195</td></tr> <tr><td>CaCl2</td><td>2.884e-11</td><td>2.893e-11</td><td>-10.540</td><td>-10.539</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaSO4(2)</td><td>5.054e-12</td><td>3.229e-12</td><td>-11.296</td><td>-11.491</td><td>-0.195</td></tr> <tr><td>CaH2O2</td><td>9.191e-13</td><td>9.218e-13</td><td>-12.037</td><td>-12.035</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaCl3</td><td>9.298e-15</td><td>8.313e-15</td><td>-14.032</td><td>-14.080</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaOH(3)</td><td>3.413e-18</td><td>3.052e-18</td><td>-17.467</td><td>-17.515</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaOH(4)2</td><td>1.256e-24</td><td>8.025e-25</td><td>-23.901</td><td>-24.096</td><td>-0.195</td></tr> <tr><td>Cl</td><td>6.587e-04</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>Cl-</td><td>6.586e-04</td><td>5.875e-04</td><td>-3.181</td><td>-3.231</td><td>-0.050</td></tr> <tr><td>ClO4-</td><td>1.406e-08</td><td>1.257e-08</td><td>-7.852</td><td>-7.901</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>MnCl+</td><td>1.461e-09</td><td>1.306e-09</td><td>-8.835</td><td>-8.884</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaCl2</td><td>2.884e-11</td><td>2.893e-11</td><td>-10.540</td><td>-10.539</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaCl3</td><td>3.340e-13</td><td>3.350e-13</td><td>-12.476</td><td>-12.475</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>ZnCl+</td><td>8.770e-14</td><td>7.840e-14</td><td>-13.057</td><td>-13.106</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CaCl3</td><td>9.298e-15</td><td>8.313e-15</td><td>-14.032</td><td>-14.080</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>MnCl2</td><td>6.062e-17</td><td>5.420e-17</td><td>-16.217</td><td>-16.266</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>ZnCl2</td><td>4.493e-17</td><td>4.506e-17</td><td>-16.347</td><td>-16.346</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>FeCl+2</td><td>6.788e-19</td><td>4.336e-19</td><td>-18.168</td><td>-18.363</td><td>-0.195</td></tr> <tr><td>ZnCl3</td><td>3.002e-20</td><td>2.684e-20</td><td>-19.523</td><td>-19.571</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>FeCl2+</td><td>2.175e-21</td><td>1.945e-21</td><td>-20.662</td><td>-20.711</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>FeCl+2</td><td>1.082e-23</td><td>6.912e-24</td><td>-22.966</td><td>-23.160</td><td>-0.195</td></tr> <tr><td>FeCl3</td><td>1.139e-25</td><td>1.143e-25</td><td>-24.943</td><td>-24.942</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>Cu(1)</td><td>2.674e-11</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>Cu+</td><td>2.674e-11</td><td>2.375e-11</td><td>-10.573</td><td>-10.624</td><td>-0.052</td></tr> <tr><td>Cu(2)</td><td>1.060e-08</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>CuOH(2)</td><td>9.611e-09</td><td>9.640e-09</td><td>-8.017</td><td>-8.016</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>Cu+2</td><td>8.102e-10</td><td>5.300e-10</td><td>-9.091</td><td>-9.276</td><td>-0.184</td></tr> <tr><td>CuOH+</td><td>1.751e-10</td><td>1.564e-10</td><td>-9.757</td><td>-9.806</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CuSO4</td><td>6.300e-12</td><td>6.319e-12</td><td>-11.201</td><td>-11.199</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CuOH(3)-</td><td>1.917e-14</td><td>1.714e-14</td><td>-13.717</td><td>-13.766</td><td>-0.049</td></tr> <tr><td>CuOH(4)2</td><td>1.579e-19</td><td>1.009e-19</td><td>-18.802</td><td>-18.996</td><td>-0.195</td></tr> </table>	Elements	Molality	Moles	Ba	4.663e-06	4.663e-06	C	8.125e-03	8.125e-03	F	2.974e-03	2.974e-03	Cd	4.452e-07	4.452e-07	Cl	6.587e-04	6.587e-04	Cu	1.063e-08	1.063e-08	Fe	1.580e-05	1.580e-05	Fe(3)	4.480e-08	4.480e-08	K	7.166e-05	7.166e-05	Mg	1.239e-03	1.239e-03	Mn	1.457e-06	1.457e-06	N(5)	1.420e-05	1.420e-05	Na	1.071e-03	1.071e-03	Si(6)	1.302e-04	1.302e-04	Zn	4.133e-10	4.133e-10	Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma	OH-	8.853e-08	7.893e-08	-7.053	-7.103	-0.050	H+	3.735e-08	3.388e-08	-7.428	-7.470	-0.042	H2O	5.551e+01	9.998e-01	1.744	-0.000	0.000	Ba	4.663e-06					Ba+2	4.442e-06	2.867e-06	-5.352	-5.543	-0.190	BaHCO3+	1.210e-07	1.082e-07	-6.917	-6.966	-0.049	BasO4	9.403e-08	9.431e-08	-7.027	-7.025	0.001	BaCO3	6.502e-09	6.521e-09	-8.187	-8.186	0.001	BaOH+	3.207e-12	2.867e-12	-11.494	-11.543	-0.049	C(4)	0.000e+00					CH4	0.000e+00	0.000e+00	-68.310	-68.308	0.001	C(4)	8.125e-03					HCO3-	7.257e-03	6.513e-03	-2.139	-2.186	-0.047	CO2	6.544e-04	6.564e-04	-3.184	-3.183	0.001	CaHCO3+	1.198e-04	1.075e-04	-3.922	-3.969	-0.047	MgHCO3+	6.222e-05	5.562e-05	-4.206	-4.255	-0.049	CaCO3	1.503e-05	1.508e-05	-7.823	-7.820	0.001	CO3-2	9.535e-06	6.070e-06	-5.029	-5.217	-0.188	NaHCO3	3.488e-06	3.498e-06	-5.457	-5.456	0.001	MgCO3	3.441e-06	3.451e-06	-5.463	-5.462	0.001	MnHCO3+	2.416e-07	3.168e-07	-6.451	-6.499	-0.049	MnCO3	2.624e-07	2.631e-07	-6.581	-6.580	0.001	BaHCO3+	1.210e-07	1.082e-07	-6.917	-6.966	-0.049	CaHCO3+	5.462e-08	4.883e-08	-7.263	-7.311	-0.049	NaCO3	5.147e-08	4.602e-08	-7.288	-7.337	-0.049	BaCO3	6.502e-09	6.521e-09	-8.187	-8.186	0.001	CaCO3	1.140e-09	1.143e-09	-8.943	-8.942	0.001	ZnCO3	1.262e-10	1.266e-10	-9.899	-9.898	0.001	ZnHCO3+	9.585e-11	8.599e-11	-10.018	-10.067	-0.049	CaCO3(3)2	3.434e-11	2.194e-11	-10.464	-10.659	-0.195	ZnCO3(3)2	2.571e-11	1.643e-11	-10.590	-10.784	-0.195	Ca	2.974e-03					Ca+2	2.818e-03	1.828e-03	-2.550	-2.738	-0.188	CaHCO3+	1.198e-04	1.075e-04	-3.922	-3.969	-0.047	CaSO4	2.038e-05	2.044e-05	-4.691	-4.689	0.001	CaCO3	1.503e-05	1.508e-05	-7.823	-7.820	0.001	CaF+	1.614e-07	1.443e-07	-6.792	-6.841	-0.049	CaOH+	1.001e-08	8.952e-09	-7.909	-8.048	-0.049	CaHSO4+	3.842e-12	3.435e-12	-11.415	-11.464	-0.049	Cd	4.452e-07					Cd+2	3.711e-07	2.371e-07	-6.431	-6.625	-0.195	CaHCO3+	5.462e-08	4.883e-08	-7.263	-7.311	-0.049	CaCl+	1.406e-08	1.257e-08	-7.852	-7.901	-0.049	CaSO4	4.034e-09	4.046e-09	-8.394	-8.393	0.001	CaCO3	1.140e-09	1.143e-09	-8.943	-8.942	0.001	CaOH+	1.857e-10	1.661e-10	-9.731	-9.780	-0.049	CaCO3(3)2	3.434e-11	2.194e-11	-10.464	-10.659	-0.195	CaCl2	2.884e-11	2.893e-11	-10.540	-10.539	0.001	CaSO4(2)	5.054e-12	3.229e-12	-11.296	-11.491	-0.195	CaH2O2	9.191e-13	9.218e-13	-12.037	-12.035	0.001	CaCl3	9.298e-15	8.313e-15	-14.032	-14.080	-0.049	CaOH(3)	3.413e-18	3.052e-18	-17.467	-17.515	-0.049	CaOH(4)2	1.256e-24	8.025e-25	-23.901	-24.096	-0.195	Cl	6.587e-04					Cl-	6.586e-04	5.875e-04	-3.181	-3.231	-0.050	ClO4-	1.406e-08	1.257e-08	-7.852	-7.901	-0.049	MnCl+	1.461e-09	1.306e-09	-8.835	-8.884	-0.049	CaCl2	2.884e-11	2.893e-11	-10.540	-10.539	0.001	CaCl3	3.340e-13	3.350e-13	-12.476	-12.475	0.001	ZnCl+	8.770e-14	7.840e-14	-13.057	-13.106	-0.049	CaCl3	9.298e-15	8.313e-15	-14.032	-14.080	-0.049	MnCl2	6.062e-17	5.420e-17	-16.217	-16.266	-0.049	ZnCl2	4.493e-17	4.506e-17	-16.347	-16.346	0.001	FeCl+2	6.788e-19	4.336e-19	-18.168	-18.363	-0.195	ZnCl3	3.002e-20	2.684e-20	-19.523	-19.571	-0.049	FeCl2+	2.175e-21	1.945e-21	-20.662	-20.711	-0.049	FeCl+2	1.082e-23	6.912e-24	-22.966	-23.160	-0.195	FeCl3	1.139e-25	1.143e-25	-24.943	-24.942	0.001	Cu(1)	2.674e-11					Cu+	2.674e-11	2.375e-11	-10.573	-10.624	-0.052	Cu(2)	1.060e-08					CuOH(2)	9.611e-09	9.640e-09	-8.017	-8.016	0.001	Cu+2	8.102e-10	5.300e-10	-9.091	-9.276	-0.184	CuOH+	1.751e-10	1.564e-10	-9.757	-9.806	-0.049	CuSO4	6.300e-12	6.319e-12	-11.201	-11.199	0.001	CuOH(3)-	1.917e-14	1.714e-14	-13.717	-13.766	-0.049	CuOH(4)2	1.579e-19	1.009e-19	-18.802	-18.996	-0.195	<p>Initial solution 6. ESB-2004-BSS</p> <p>-----Solution composition-----</p> <table> <tr> <th>Elements</th><th>Molality</th><th>Moles</th></tr> <tr><td>Ba</td><td>1.894e-06</td><td>1.894e-06</td></tr> <tr><td>C</td><td>5.883e-03</td><td>5.883e-03</td></tr> <tr><td>F</td><td>5.551e+01</td><td>5.551e+01</td></tr> <tr><td>Cd</td><td>4.451e-07</td><td>4.451e-07</td></tr> <tr><td>Cl</td><td>4.261e-05</td><td>4.261e-05</td></tr> <tr><td>Cu</td><td>5.511e-10</td><td>5.511e-10</td></tr> <tr><td>Fe</td><td>1.053e-05</td><td>1.053e-05</td></tr> <tr><td>Fe(3)</td><td>1.460e-05</td><td>1.460e-05</td></tr> <tr><td>K</td><td>3.326e-05</td><td>3.326e-05</td></tr> <tr><td>Mg</td><td>5.926e-04</td><td>5.926e-04</td></tr> <tr><td>Mn</td><td>3.642e-06</td><td>3.642e-06</td></tr> <tr><td>N(5)</td><td>1.518e-06</td><td>1.518e-06</td></tr> <tr><td>Na</td><td>1.084e-04</td><td>1.084e-04</td></tr> <tr><td>Si(6)</td><td>4.373e-04</td><td>4.373e-04</td></tr> <tr><td>Zn</td><td>2.755e-10</td><td>2.755e-10</td></tr> </table> <p>-----Description of solution-----</p> <p>pH = 7.090 pe = 4.000 Activity of water = 1.000 Ionic strength = 9.130e-03 Mass of water (kg) = 1.000e+00 Total alkalinity (eq/kg) = 4.463e-03 Total CO2 (mol/kg) = 5.883e-03 Temperature (deg C) = 9.500 Electrical balance (eq) = 6.096e-04 Percent error, 100*(Ca-Ani)/(Ca+Ani) = 5.23</p> <p>Iterations = 11 Total H = 1.110178e+02 Total O = 5.552463e+01</p> <p>-----Distribution of species-----</p> <table> <tr> <th>Species</th><th>Molality</th><th>Log Activity</th><th>Log Molality</th><th>Log Activity</th><th>Gamma</th></tr> <tr><td>H+</td><td>8.853e-08</td><td>8.128e-08</td><td>-7.053</td><td>-7.090</td><td>-0.037</td></tr> <tr><td>OH-</td><td>3.798e-08</td><td>3.442e-08</td><td>-7.420</td><td>-7.463</td><td>-0.043</td></tr> <tr><td>H2O</td><td>5.551e+01</td><td>9.998e-01</td><td>1.744</td><td>-0.000</td><td>0.000</td></tr> <tr><td>Ba</td><td>1.894e-06</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>Ba+2</td><td>1.718e-06</td><td>1.176e-06</td><td>-5.765</td><td>-5.930</td><td>-0.164</td></tr> <tr><td>BasO4</td><td>1.428e-07</td><td>1.431e-07</td><td>-6.845</td><td>-6.844</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>BaHCO3+</td><td>3.299e-08</td><td>2.995e-08</td><td>-7.482</td><td>-7.524</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>BaCO3</td><td>5.757e-10</td><td>5.793e-10</td><td>-9.120</td><td>-9.120</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>BaOH+</td><td>5.400e-13</td><td>4.903e-13</td><td>-12.268</td><td>-12.310</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>C(4)</td><td>0.000e+00</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>CH4</td><td>0.000e+00</td><td>0.000e+00</td><td>-65.144</td><td>-65.143</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>C(4)</td><td>5.883e-03</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>HCO3-</td><td>4.751e-03</td><td>4.326e-03</td><td>-2.323</td><td>-2.364</td><td>-0.041</td></tr> <tr><td>CO2</td><td>1.032e-03</td><td>1.034e-03</td><td>-2.986</td><td>-2.986</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaHCO3+</td><td>7.128e-05</td><td>6.491e-05</td><td>-4.147</td><td>-4.188</td><td>-0.041</td></tr> <tr><td>MgHCO3+</td><td>2.058e-05</td><td>1.868e-05</td><td>-4.687</td><td>-4.729</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>CaCO3</td><td>3.788e-06</td><td>3.806e-06</td><td>-5.420</td><td>-5.420</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CO3-2</td><td>2.481e-06</td><td>1.706e-06</td><td>-5.605</td><td>-5.768</td><td>-0.163</td></tr> <tr><td>MnHCO3+</td><td>7.593e-07</td><td>6.893e-07</td><td>-6.120</td><td>-6.162</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>MgCO3</td><td>4.929e-07</td><td>4.939e-07</td><td>-6.307</td><td>-6.306</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>MnCO3</td><td>2.234e-07</td><td>2.236e-07</td><td>-6.617</td><td>-6.616</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>NaHCO3</td><td>2.385e-07</td><td>2.388e-07</td><td>-6.623</td><td>-6.622</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaHCO3+</td><td>3.964e-08</td><td>3.599e-08</td><td>-7.402</td><td>-7.444</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>BaHCO3+</td><td>3.299e-08</td><td>2.995e-08</td><td>-7.482</td><td>-7.524</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>NaCO3</td><td>5.055e-09</td><td>3.657e-09</td><td>-7.232</td><td>-7.274</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>BaCO3</td><td>5.757e-10</td><td>5.793e-10</td><td>-9.120</td><td>-9.120</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaCO3</td><td>3.557e-10</td><td>3.564e-10</td><td>-9.449</td><td>-9.448</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>ZnHCO3+</td><td>6.680e-11</td><td>6.064e-11</td><td>-10.175</td><td>-10.217</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>ZnCO3</td><td>3.781e-11</td><td>3.789e-11</td><td>-10.422</td><td>-10.421</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaCO3(3)2</td><td>2.531e-12</td><td>1.632e-12</td><td>-11.548</td><td>-11.716</td><td>-0.168</td></tr> <tr><td>ZnCO3(3)2</td><td>2.035e-12</td><td>1.382e-12</td><td>-11.692</td><td>-11.860</td><td>-0.168</td></tr> <tr><td>Ca</td><td>2.526e-03</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>Ca+2</td><td>2.383e-03</td><td>1.638e-03</td><td>-2.623</td><td>-2.786</td><td>-0.163</td></tr> <tr><td>CaHCO3+</td><td>7.128e-05</td><td>6.491e-05</td><td>-4.147</td><td>-4.188</td><td>-0.041</td></tr> <tr><td>CaSO4</td><td>6.793e-05</td><td>6.807e-05</td><td>-4.168</td><td>-4.167</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaCO3</td><td>3.798e-06</td><td>3.806e-06</td><td>-5.420</td><td>-5.420</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaF+</td><td>9.955e-08</td><td>9.037e-08</td><td>-7.002</td><td>-7.044</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>CaOH+</td><td>2.683e-09</td><td>3.343e-09</td><td>-8.434</td><td>-8.476</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>CaHSO4+</td><td>3.035e-11</td><td>2.755e-11</td><td>-10.518</td><td>-10.560</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>Cd</td><td>4.451e-07</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>Cd+2</td><td>3.873e-07</td><td>2.630e-07</td><td>-6.412</td><td>-6.580</td><td>-0.168</td></tr> <tr><td>CaHCO3+</td><td>3.964e-08</td><td>3.599e-08</td><td>-7.402</td><td>-7.444</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>CaCl+</td><td>1.662e-08</td><td>1.666e-08</td><td>-7.779</td><td>-7.778</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CaClO4</td><td>1.012e-09</td><td>9.186e-10</td><td>-8.995</td><td>-9.037</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>CaCO3</td><td>3.557e-10</td><td>3.564e-10</td><td>-9.449</td><td>-9.448</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CdOH+</td><td>8.818e-11</td><td>8.051e-11</td><td>-10.055</td><td>-10.097</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>CaSO4(2)</td><td>7.213e-11</td><td>4.896e-11</td><td>-10.142</td><td>-10.310</td><td>-0.168</td></tr> <tr><td>CdCl(3)2</td><td>2.831e-12</td><td>1.923e-12</td><td>-11.548</td><td>-11.716</td><td>-0.168</td></tr> <tr><td>CdOH(2)</td><td>1.774e-13</td><td>1.778e-13</td><td>-12.751</td><td>-12.750</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CdCl2</td><td>1.390e-13</td><td>1.393e-13</td><td>-12.857</td><td>-12.856</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>CdCl3</td><td>2.923e-15</td><td>2.653e-15</td><td>-14.704</td><td>-14.752</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>CdOH(3)</td><td>2.703e-19</td><td>2.459e-19</td><td>-18.568</td><td>-18.610</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>CdOH(4)2</td><td>3.960e-26</td><td>2.696e-26</td><td>-25.402</td><td>-25.570</td><td>-0.168</td></tr> <tr><td>Cl</td><td>4.261e-05</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>Cl-</td><td>4.261e-05</td><td>3.862e-05</td><td>-4.370</td><td>-4.413</td><td>-0.043</td></tr> <tr><td>ClO4-</td><td>1.012e-09</td><td>9.186e-10</td><td>-8.995</td><td>-9.037</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>MnCl+</td><td>3.098e-10</td><td>2.813e-10</td><td>-9.509</td><td>-9.551</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>CdCl2</td><td>1.390e-13</td><td>1.393e-13</td><td>-12.857</td><td>-12.856</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>ZnCl+</td><td>6.199e-15</td><td>5.627e-15</td><td>-14.208</td><td>-14.254</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>MnCl2</td><td>4.732e-15</td><td>4.742e-15</td><td>-14.325</td><td>-14.324</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>FeCl+2</td><td>1.201e-16</td><td>8.157e-17</td><td>-15.920</td><td>-16.088</td><td>-0.168</td></tr> <tr><td>CdCl3</td><td>2.923e-18</td><td>2.653e-18</td><td>-17.534</td><td>-17.576</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>ZnCl2</td><td>2.127e-19</td><td>2.131e-19</td><td>-18.672</td><td>-18.671</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>FeCl+2</td><td>5.556e-20</td><td>5.046e-20</td><td>-19.255</td><td>-19.297</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>FeCl2+</td><td>2.603e-20</td><td>2.363e-20</td><td>-19.585</td><td>-19.627</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>FeCl+2</td><td>9.223e-24</td><td>8.373e-24</td><td>-23.035</td><td>-23.077</td><td>-0.042</td></tr> <tr><td>FeCl+2</td><td>9.107e-26</td><td>9.126e-26</td><td>-25.041</td><td>-25.040</td><td>0.001</td></tr> <tr><td>ZnCl+2</td><td>2.096e-28</td><td>1.424e-28</td><td>-27.679</td><td>-27.847</td><td>-0.168</td></tr> <tr><td>Cu(1)</td><td>5.689e-12</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>Cu+</td><td>5.689e-12</td><td>5.140e-12</td><td>-11.245</td><td>-11.289</td><td>-0.044</td></tr> <tr><td>Cu(2)</td><td>5.454e-10</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> <tr><td>CuOH(2)</td><td>5.399e-10</td><td>3.607e-10</td></tr></table>	Elements	Molality	Moles	Ba	1.894e-06	1.894e-06	C	5.883e-03	5.883e-03	F	5.551e+01	5.551e+01	Cd	4.451e-07	4.451e-07	Cl	4.261e-05	4.261e-05	Cu	5.511e-10	5.511e-10	Fe	1.053e-05	1.053e-05	Fe(3)	1.460e-05	1.460e-05	K	3.326e-05	3.326e-05	Mg	5.926e-04	5.926e-04	Mn	3.642e-06	3.642e-06	N(5)	1.518e-06	1.518e-06	Na	1.084e-04	1.084e-04	Si(6)	4.373e-04	4.373e-04	Zn	2.755e-10	2.755e-10	Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma	H+	8.853e-08	8.128e-08	-7.053	-7.090	-0.037	OH-	3.798e-08	3.442e-08	-7.420	-7.463	-0.043	H2O	5.551e+01	9.998e-01	1.744	-0.000	0.000	Ba	1.894e-06					Ba+2	1.718e-06	1.176e-06	-5.765	-5.930	-0.164	BasO4	1.428e-07	1.431e-07	-6.845	-6.844	0.001	BaHCO3+	3.299e-08	2.995e-08	-7.482	-7.524	-0.042	BaCO3	5.757e-10	5.793e-10	-9.120	-9.120	0.001	BaOH+	5.400e-13	4.903e-13	-12.268	-12.310	-0.042	C(4)	0.000e+00					CH4	0.000e+00	0.000e+00	-65.144	-65.143	0.001	C(4)	5.883e-03					HCO3-	4.751e-03	4.326e-03	-2.323	-2.364	-0.041	CO2	1.032e-03	1.034e-03	-2.986	-2.986	0.001	CaHCO3+	7.128e-05	6.491e-05	-4.147	-4.188	-0.041	MgHCO3+	2.058e-05	1.868e-05	-4.687	-4.729	-0.042	CaCO3	3.788e-06	3.806e-06	-5.420	-5.420	0.001	CO3-2	2.481e-06	1.706e-06	-5.605	-5.768	-0.163	MnHCO3+	7.593e-07	6.893e-07	-6.120	-6.162	-0.042	MgCO3	4.929e-07	4.939e-07	-6.307	-6.306	0.001	MnCO3	2.234e-07	2.236e-07	-6.617	-6.616	0.001	NaHCO3	2.385e-07	2.388e-07	-6.623	-6.622	0.001	CaHCO3+	3.964e-08	3.599e-08	-7.402	-7.444	-0.042	BaHCO3+	3.299e-08	2.995e-08	-7.482	-7.524	-0.042	NaCO3	5.055e-09	3.657e-09	-7.232	-7.274	-0.042	BaCO3	5.757e-10	5.793e-10	-9.120	-9.120	0.001	CaCO3	3.557e-10	3.564e-10	-9.449	-9.448	0.001	ZnHCO3+	6.680e-11	6.064e-11	-10.175	-10.217	-0.042	ZnCO3	3.781e-11	3.789e-11	-10.422	-10.421	0.001	CaCO3(3)2	2.531e-12	1.632e-12	-11.548	-11.716	-0.168	ZnCO3(3)2	2.035e-12	1.382e-12	-11.692	-11.860	-0.168	Ca	2.526e-03					Ca+2	2.383e-03	1.638e-03	-2.623	-2.786	-0.163	CaHCO3+	7.128e-05	6.491e-05	-4.147	-4.188	-0.041	CaSO4	6.793e-05	6.807e-05	-4.168	-4.167	0.001	CaCO3	3.798e-06	3.806e-06	-5.420	-5.420	0.001	CaF+	9.955e-08	9.037e-08	-7.002	-7.044	-0.042	CaOH+	2.683e-09	3.343e-09	-8.434	-8.476	-0.042	CaHSO4+	3.035e-11	2.755e-11	-10.518	-10.560	-0.042	Cd	4.451e-07					Cd+2	3.873e-07	2.630e-07	-6.412	-6.580	-0.168	CaHCO3+	3.964e-08	3.599e-08	-7.402	-7.444	-0.042	CaCl+	1.662e-08	1.666e-08	-7.779	-7.778	0.001	CaClO4	1.012e-09	9.186e-10	-8.995	-9.037	-0.042	CaCO3	3.557e-10	3.564e-10	-9.449	-9.448	0.001	CdOH+	8.818e-11	8.051e-11	-10.055	-10.097	-0.042	CaSO4(2)	7.213e-11	4.896e-11	-10.142	-10.310	-0.168	CdCl(3)2	2.831e-12	1.923e-12	-11.548	-11.716	-0.168	CdOH(2)	1.774e-13	1.778e-13	-12.751	-12.750	0.001	CdCl2	1.390e-13	1.393e-13	-12.857	-12.856	0.001	CdCl3	2.923e-15	2.653e-15	-14.704	-14.752	-0.042	CdOH(3)	2.703e-19	2.459e-19	-18.568	-18.610	-0.042	CdOH(4)2	3.960e-26	2.696e-26	-25.402	-25.570	-0.168	Cl	4.261e-05					Cl-	4.261e-05	3.862e-05	-4.370	-4.413	-0.043	ClO4-	1.012e-09	9.186e-10	-8.995	-9.037	-0.042	MnCl+	3.098e-10	2.813e-10	-9.509	-9.551	-0.042	CdCl2	1.390e-13	1.393e-13	-12.857	-12.856	0.001	ZnCl+	6.199e-15	5.627e-15	-14.208	-14.254	-0.042	MnCl2	4.732e-15	4.742e-15	-14.325	-14.324	0.001	FeCl+2	1.201e-16	8.157e-17	-15.920	-16.088	-0.168	CdCl3	2.923e-18	2.653e-18	-17.534	-17.576	-0.042	ZnCl2	2.127e-19	2.131e-19	-18.672	-18.671	0.001	FeCl+2	5.556e-20	5.046e-20	-19.255	-19.297	-0.042	FeCl2+	2.603e-20	2.363e-20	-19.585	-19.627	-0.042	FeCl+2	9.223e-24	8.373e-24	-23.035	-23.077	-0.042	FeCl+2	9.107e-26	9.126e-26	-25.041	-25.040	0.001	ZnCl+2	2.096e-28	1.424e-28	-27.679	-27.847	-0.168	Cu(1)	5.689e-12					Cu+	5.689e-12	5.140e-12	-11.245	-11.289	-0.044	Cu(2)	5.454e-10					CuOH(2)	5.399e-10	3.607e-10
Elements	Molality	Moles																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Ba	4.663e-06	4.663e-06																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
C	8.125e-03	8.125e-03																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
F	2.974e-03	2.974e-03																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Cd	4.452e-07	4.452e-07																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Cl	6.587e-04	6.587e-04																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Cu	1.063e-08	1.063e-08																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Fe	1.580e-05	1.580e-05																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Fe(3)	4.480e-08	4.480e-08																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
K	7.166e-05	7.166e-05																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Mg	1.239e-03	1.239e-03																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Mn	1.457e-06	1.457e-06																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
N(5)	1.420e-05	1.420e-05																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Na	1.071e-03	1.071e-03																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Si(6)	1.302e-04	1.302e-04																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Zn	4.133e-10	4.133e-10																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
OH-	8.853e-08	7.893e-08	-7.053	-7.103	-0.050																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
H+	3.735e-08	3.388e-08	-7.428	-7.470	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
H2O	5.551e+01	9.998e-01	1.744	-0.000	0.000																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Ba	4.663e-06																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
Ba+2	4.442e-06	2.867e-06	-5.352	-5.543	-0.190																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BaHCO3+	1.210e-07	1.082e-07	-6.917	-6.966	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BasO4	9.403e-08	9.431e-08	-7.027	-7.025	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BaCO3	6.502e-09	6.521e-09	-8.187	-8.186	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BaOH+	3.207e-12	2.867e-12	-11.494	-11.543	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
C(4)	0.000e+00																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
CH4	0.000e+00	0.000e+00	-68.310	-68.308	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
C(4)	8.125e-03																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
HCO3-	7.257e-03	6.513e-03	-2.139	-2.186	-0.047																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CO2	6.544e-04	6.564e-04	-3.184	-3.183	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaHCO3+	1.198e-04	1.075e-04	-3.922	-3.969	-0.047																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MgHCO3+	6.222e-05	5.562e-05	-4.206	-4.255	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3	1.503e-05	1.508e-05	-7.823	-7.820	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CO3-2	9.535e-06	6.070e-06	-5.029	-5.217	-0.188																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
NaHCO3	3.488e-06	3.498e-06	-5.457	-5.456	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MgCO3	3.441e-06	3.451e-06	-5.463	-5.462	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MnHCO3+	2.416e-07	3.168e-07	-6.451	-6.499	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MnCO3	2.624e-07	2.631e-07	-6.581	-6.580	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BaHCO3+	1.210e-07	1.082e-07	-6.917	-6.966	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaHCO3+	5.462e-08	4.883e-08	-7.263	-7.311	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
NaCO3	5.147e-08	4.602e-08	-7.288	-7.337	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BaCO3	6.502e-09	6.521e-09	-8.187	-8.186	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3	1.140e-09	1.143e-09	-8.943	-8.942	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnCO3	1.262e-10	1.266e-10	-9.899	-9.898	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnHCO3+	9.585e-11	8.599e-11	-10.018	-10.067	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3(3)2	3.434e-11	2.194e-11	-10.464	-10.659	-0.195																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnCO3(3)2	2.571e-11	1.643e-11	-10.590	-10.784	-0.195																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Ca	2.974e-03																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
Ca+2	2.818e-03	1.828e-03	-2.550	-2.738	-0.188																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaHCO3+	1.198e-04	1.075e-04	-3.922	-3.969	-0.047																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaSO4	2.038e-05	2.044e-05	-4.691	-4.689	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3	1.503e-05	1.508e-05	-7.823	-7.820	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaF+	1.614e-07	1.443e-07	-6.792	-6.841	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaOH+	1.001e-08	8.952e-09	-7.909	-8.048	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaHSO4+	3.842e-12	3.435e-12	-11.415	-11.464	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Cd	4.452e-07																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
Cd+2	3.711e-07	2.371e-07	-6.431	-6.625	-0.195																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaHCO3+	5.462e-08	4.883e-08	-7.263	-7.311	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCl+	1.406e-08	1.257e-08	-7.852	-7.901	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaSO4	4.034e-09	4.046e-09	-8.394	-8.393	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3	1.140e-09	1.143e-09	-8.943	-8.942	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaOH+	1.857e-10	1.661e-10	-9.731	-9.780	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3(3)2	3.434e-11	2.194e-11	-10.464	-10.659	-0.195																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCl2	2.884e-11	2.893e-11	-10.540	-10.539	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaSO4(2)	5.054e-12	3.229e-12	-11.296	-11.491	-0.195																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaH2O2	9.191e-13	9.218e-13	-12.037	-12.035	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCl3	9.298e-15	8.313e-15	-14.032	-14.080	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaOH(3)	3.413e-18	3.052e-18	-17.467	-17.515	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaOH(4)2	1.256e-24	8.025e-25	-23.901	-24.096	-0.195																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Cl	6.587e-04																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
Cl-	6.586e-04	5.875e-04	-3.181	-3.231	-0.050																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ClO4-	1.406e-08	1.257e-08	-7.852	-7.901	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MnCl+	1.461e-09	1.306e-09	-8.835	-8.884	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCl2	2.884e-11	2.893e-11	-10.540	-10.539	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCl3	3.340e-13	3.350e-13	-12.476	-12.475	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnCl+	8.770e-14	7.840e-14	-13.057	-13.106	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCl3	9.298e-15	8.313e-15	-14.032	-14.080	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MnCl2	6.062e-17	5.420e-17	-16.217	-16.266	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnCl2	4.493e-17	4.506e-17	-16.347	-16.346	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
FeCl+2	6.788e-19	4.336e-19	-18.168	-18.363	-0.195																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnCl3	3.002e-20	2.684e-20	-19.523	-19.571	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
FeCl2+	2.175e-21	1.945e-21	-20.662	-20.711	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
FeCl+2	1.082e-23	6.912e-24	-22.966	-23.160	-0.195																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
FeCl3	1.139e-25	1.143e-25	-24.943	-24.942	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Cu(1)	2.674e-11																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
Cu+	2.674e-11	2.375e-11	-10.573	-10.624	-0.052																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Cu(2)	1.060e-08																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
CuOH(2)	9.611e-09	9.640e-09	-8.017	-8.016	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Cu+2	8.102e-10	5.300e-10	-9.091	-9.276	-0.184																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CuOH+	1.751e-10	1.564e-10	-9.757	-9.806	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CuSO4	6.300e-12	6.319e-12	-11.201	-11.199	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CuOH(3)-	1.917e-14	1.714e-14	-13.717	-13.766	-0.049																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CuOH(4)2	1.579e-19	1.009e-19	-18.802	-18.996	-0.195																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Elements	Molality	Moles																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Ba	1.894e-06	1.894e-06																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
C	5.883e-03	5.883e-03																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
F	5.551e+01	5.551e+01																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Cd	4.451e-07	4.451e-07																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Cl	4.261e-05	4.261e-05																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Cu	5.511e-10	5.511e-10																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Fe	1.053e-05	1.053e-05																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Fe(3)	1.460e-05	1.460e-05																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
K	3.326e-05	3.326e-05																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Mg	5.926e-04	5.926e-04																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Mn	3.642e-06	3.642e-06																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
N(5)	1.518e-06	1.518e-06																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Na	1.084e-04	1.084e-04																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Si(6)	4.373e-04	4.373e-04																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Zn	2.755e-10	2.755e-10																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							
Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
H+	8.853e-08	8.128e-08	-7.053	-7.090	-0.037																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
OH-	3.798e-08	3.442e-08	-7.420	-7.463	-0.043																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
H2O	5.551e+01	9.998e-01	1.744	-0.000	0.000																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Ba	1.894e-06																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
Ba+2	1.718e-06	1.176e-06	-5.765	-5.930	-0.164																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BasO4	1.428e-07	1.431e-07	-6.845	-6.844	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BaHCO3+	3.299e-08	2.995e-08	-7.482	-7.524	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BaCO3	5.757e-10	5.793e-10	-9.120	-9.120	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BaOH+	5.400e-13	4.903e-13	-12.268	-12.310	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
C(4)	0.000e+00																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
CH4	0.000e+00	0.000e+00	-65.144	-65.143	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
C(4)	5.883e-03																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
HCO3-	4.751e-03	4.326e-03	-2.323	-2.364	-0.041																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CO2	1.032e-03	1.034e-03	-2.986	-2.986	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaHCO3+	7.128e-05	6.491e-05	-4.147	-4.188	-0.041																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MgHCO3+	2.058e-05	1.868e-05	-4.687	-4.729	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3	3.788e-06	3.806e-06	-5.420	-5.420	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CO3-2	2.481e-06	1.706e-06	-5.605	-5.768	-0.163																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MnHCO3+	7.593e-07	6.893e-07	-6.120	-6.162	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MgCO3	4.929e-07	4.939e-07	-6.307	-6.306	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MnCO3	2.234e-07	2.236e-07	-6.617	-6.616	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
NaHCO3	2.385e-07	2.388e-07	-6.623	-6.622	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaHCO3+	3.964e-08	3.599e-08	-7.402	-7.444	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BaHCO3+	3.299e-08	2.995e-08	-7.482	-7.524	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
NaCO3	5.055e-09	3.657e-09	-7.232	-7.274	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
BaCO3	5.757e-10	5.793e-10	-9.120	-9.120	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3	3.557e-10	3.564e-10	-9.449	-9.448	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnHCO3+	6.680e-11	6.064e-11	-10.175	-10.217	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnCO3	3.781e-11	3.789e-11	-10.422	-10.421	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3(3)2	2.531e-12	1.632e-12	-11.548	-11.716	-0.168																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnCO3(3)2	2.035e-12	1.382e-12	-11.692	-11.860	-0.168																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Ca	2.526e-03																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
Ca+2	2.383e-03	1.638e-03	-2.623	-2.786	-0.163																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaHCO3+	7.128e-05	6.491e-05	-4.147	-4.188	-0.041																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaSO4	6.793e-05	6.807e-05	-4.168	-4.167	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3	3.798e-06	3.806e-06	-5.420	-5.420	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaF+	9.955e-08	9.037e-08	-7.002	-7.044	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaOH+	2.683e-09	3.343e-09	-8.434	-8.476	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaHSO4+	3.035e-11	2.755e-11	-10.518	-10.560	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Cd	4.451e-07																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
Cd+2	3.873e-07	2.630e-07	-6.412	-6.580	-0.168																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaHCO3+	3.964e-08	3.599e-08	-7.402	-7.444	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCl+	1.662e-08	1.666e-08	-7.779	-7.778	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaClO4	1.012e-09	9.186e-10	-8.995	-9.037	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaCO3	3.557e-10	3.564e-10	-9.449	-9.448	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CdOH+	8.818e-11	8.051e-11	-10.055	-10.097	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CaSO4(2)	7.213e-11	4.896e-11	-10.142	-10.310	-0.168																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CdCl(3)2	2.831e-12	1.923e-12	-11.548	-11.716	-0.168																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CdOH(2)	1.774e-13	1.778e-13	-12.751	-12.750	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CdCl2	1.390e-13	1.393e-13	-12.857	-12.856	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CdCl3	2.923e-15	2.653e-15	-14.704	-14.752	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CdOH(3)	2.703e-19	2.459e-19	-18.568	-18.610	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CdOH(4)2	3.960e-26	2.696e-26	-25.402	-25.570	-0.168																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Cl	4.261e-05																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
Cl-	4.261e-05	3.862e-05	-4.370	-4.413	-0.043																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ClO4-	1.012e-09	9.186e-10	-8.995	-9.037	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MnCl+	3.098e-10	2.813e-10	-9.509	-9.551	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CdCl2	1.390e-13	1.393e-13	-12.857	-12.856	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnCl+	6.199e-15	5.627e-15	-14.208	-14.254	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
MnCl2	4.732e-15	4.742e-15	-14.325	-14.324	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
FeCl+2	1.201e-16	8.157e-17	-15.920	-16.088	-0.168																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
CdCl3	2.923e-18	2.653e-18	-17.534	-17.576	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnCl2	2.127e-19	2.131e-19	-18.672	-18.671	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
FeCl+2	5.556e-20	5.046e-20	-19.255	-19.297	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
FeCl2+	2.603e-20	2.363e-20	-19.585	-19.627	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
FeCl+2	9.223e-24	8.373e-24	-23.035	-23.077	-0.042																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
FeCl+2	9.107e-26	9.126e-26	-25.041	-25.040	0.001																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
ZnCl+2	2.096e-28	1.424e-28	-27.679	-27.847	-0.168																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Cu(1)	5.689e-12																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
Cu+	5.689e-12	5.140e-12	-11.245	-11.289	-0.044																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																				
Cu(2)	5.454e-10																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								
CuOH(2)	5.399e-10	3.607e-10																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																							

SOLUTION 6 ESB-2004-BSS

units
temp 9.5
pH 7.09
Ca 101.2
Mg 14.4
K 13
Na 2.49
C 358.77 as HCO3
S(6) 41.99 as SO4
N(5) 0.28 as NO3
Cl 1.510
F 0.2
Mn 0.2
Fe(3) 0.82
Zn 0.000018
Cu 0.000035
Cd 0.05
Ba 0.260

SOLUTION 7 ESB-2004-LQS

units
temp 5.3
pH 8.08
Ca 65.1
Mg 13.9
K 0.7
Na 1.0
C 243.45 as HCO3
S(6) 16.545 as SO4
N(5) 7.495 as NO3
Cl 1.2
F 0.0
Mn 0.02
Fe(3) 0.06
Zn 0.000021
Cu 0.00163
Cd 0.05
Ba 0.270

SOLUTION 8 ESB-2004-PST

units
temp 9.4
pH 7.12
Ca 110.8
Mg 21.8
K 3.9
Na 28.0
C 333.15 as HCO3
S(6) 94.445 as SO4
N(5) 1.355 as NO3
Cl 8.805
F 0.3
Mn 0.06
Fe(3) 0.13
Zn 0.000017
Cu 0.00394
Cd 0.05
Ba 0.01

SOLUTION 9 ESB-2004-FST

units
temp 14.5
pH 6.68
Ca 396.7
Mg 117.4
K 30.7
Na 620.0
C 849.95 as HCO3
S(6) 2334.46 as SO4
N(5) 0.0 as NO3
Cl 13.775
F 1.2
Mn 0.16
Fe(3) 12.61
Zn 0.000034
Cu 0.00389
Cd 0.577
Ba 0.22

SOLUTION 10 ESB-2704-B54

units
temp 11.5
pH 7.24
Ca 403.5
Mg 113.3
K 60.9
Na 304.5
C 632.12 as HCO3
S(6) 1883.55 as SO4
N(5) 6.835 as NO3
Cl 97.765
F 0.6
Mn 0.12
Fe(3) 0.93
Zn 0.000034
Cu 0.00385
Cd 0.401
Ba 0.220

SOLUTION 11 ESB-0805-PSS

units
temp 8.5
pH 7.60
Ca 147.2
Mg 41.5
K 2.3
Na 15.64
C 350.23 as HCO3
S(6) 285.9 as SO4
N(5) 1.505 as NO3
Cl 7.195
F 0.2
Mn 0.03
Fe(3) 0.05
Zn 0.000016
Cu 0.000944
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 12 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 13 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 14 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 15 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 16 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 17 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 18 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 19 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 20 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 21 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 22 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 23 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 24 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 25 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 26 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 27 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 28 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 29 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 30 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 31 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 32 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 33 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 34 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 35 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 36 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 37 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 38 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 39 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 40 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 41 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 42 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 43 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 44 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 45 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 46 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 47 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 48 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 49 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 50 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 51 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 52 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 53 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 54 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 55 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 56 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 57 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 58 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 59 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 60 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 61 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 62 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 63 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 64 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 65 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 66 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 67 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 68 ESB-0805-PH5

units
temp 8.0
pH 8.28
Ca 81.5
Mg 18.3
K 0.9
Na 9.41
C 388.67 as HCO3
S(6) 14.695 as SO4
N(5) 7.78 as NO3
Cl 19.0
F 0.2
Mn 0.01
Fe(3) 0.02
Zn 0.000027
Cu 0.00156
Cd 0.065
Ba 0.3

SOLUTION 69 ESB-0805

SOLUTION 13 ESB-0805-MST	units mg/l	Initial solution 2. ESB-1804-AHS			Initial solution 7. ESB-2404-LQS			Initial solution 12. ESB-0805-PHS					
	temp 12.0	-----Solution composition-----			-----Solution composition-----			-----Solution composition-----					
	pH 7.10	Elements Molality Moles			Elements Molality Moles			Elements Molality Moles					
	Ca 406.4	Ba	1.384e-06	1.384e-06	Ba	1.967e-06	1.967e-06	Ba	2.186e-06	2.186e-06			
	Mg 91.2	C	7.564e-03	7.564e-03	C	3.991e-03	3.991e-03	C	6.373e-03	6.373e-03			
	K 10.8	Ci	2.634e-03	2.634e-03	Ci	1.625e-03	1.625e-03	Ca	2.035e-03	2.035e-03			
	Na 165.8	Cd	4.451e-07	4.451e-07	Cd	4.450e-07	4.450e-07	Cd	5.786e-07	5.786e-07			
	S(6) 1543.1 as SO4	Cl	1.485e-04	1.485e-04	Cl	3.386e-05	3.386e-05	Cl	5.362e-04	5.362e-04			
	N(5) 0.0 as NO3	Cu	1.349e-08	1.349e-08	Cu	2.566e-08	2.566e-08	Cu	2.456e-08	2.456e-08			
	Cl 12.59	F	1.580e-05	1.580e-05	Fe(3)	1.075e-06	1.075e-06	F	1.053e-05	1.053e-05			
SOLUTION 14 ESB-0805-TST	units mg/l	Description of solution-----			Description of solution-----			Description of solution-----					
	temp 16.8	pH = 7.100			pH = 8.080			pH = 8.280					
	pH 7.13	pe = 4.000			pe = 4.000			pe = 4.000					
	Ca 341.9	Activity of water = 1.000			Activity of water = 1.000			Activity of water = 1.000					
	Mg 92.8	Ionic strength = 1.090e-02			Ionic strength = 6.567e-03			Ionic strength = 9.174e-03					
	K 16.7	Mass of water (kg) = 1.000e+00			Mass of water (kg) = 1.000e+00			Mass of water (kg) = 1.000e+00					
	Na 351.8	Total alkalinity (eq/kg) = 6.296e-03			Total alkalinity (eq/kg) = 3.935e-03			Total alkalinity (eq/kg) = 6.401e-03					
	CO3 837.14 as HCO3	Total CO2 (mol/kg) = 7.564e-03			Total CO2 (mol/kg) = 3.991e-03			Total CO2 (mol/kg) = 6.373e-03					
	S(6) 1640.3 as SO4	Temperature (deg C) = 9.900			Temperature (deg C) = 5.300			Temperature (deg C) = 8.000					
	N(5) 1.485 as NO3	Electrical balance (eq) = 1.452e-03			Electrical balance (eq) = 2.700e-05			Electrical balance (eq) = -1.365e-03					
SOLUTION 15 ESB-2905-DS1	units mg/l	Percent error, 100*(Ca+Aln)/(Ca+Aln) = 9.91			Percent error, 100*(Ca+Aln)/(Ca+Aln) = 0.31			Percent error, 100*(Ca+Aln)/(Ca+Aln) = -10.66					
	temp 8.4	Iterations = 9			Iterations = 9			Iterations = 9					
	pH 7.74	Total H = 1.110187e+02			Total H = 1.110163e+02			Total H = 1.110186e+02					
	Ca 91.8	Total O = 5.552838e+01			Total O = 5.551915e+01			Total O = 5.552624e+01					
	Mg 21.5	Distribution of species-----			Distribution of species-----			Distribution of species-----					
	K 1.0	Species Molality Activity Molality Activity Gamma			Species Molality Activity Molality Activity Gamma			Species Molality Activity Molality Activity Gamma					
	Na 4.94	H+	8.705e-08	7.943e-08	-7.060	-7.100	-0.040	OH-	5.139e-07	4.656e-07	-6.289	-6.332	-0.043
	CO3 398.13 as HCO3	H2O	4.061e-08	3.649e-08	-7.391	-7.438	-0.046	H+	5.716e-09	5.248e-09	-8.243	-8.280	-0.037
	S(6) 24.585 as SO4	Ba	1.384e-06	1.384e-06	1.384e-06	1.384e-06	1.384e-06	H2O	5.551e-01	9.999e-01	1.744	-0.000	0.000
	Na(5) 16.345 as NO3	Ba2+	1.310e-06	8.703e-07	-5.883	-6.060	-0.178	Ba2+	2.059e-06	1.410e-06	-5.686	-5.851	-0.164
TITLE	Erbslotten Bayern	BasO4	4.175e-08	4.185e-08	-7.379	-7.378	0.001	BasO4	6.154e-08	6.167e-08	-7.211	-7.210	0.001
	Beginning of initial solution calculations.	BaHCO3+	3.193e-08	2.876e-08	-7.496	-7.541	-0.045	BaHCO3+	4.817e-08	4.373e-08	-7.317	-7.359	-0.042
		BaCO3	7.495e-10	7.514e-10	-9.125	-9.124	0.001	BaCO3	1.667e-08	1.670e-08	-7.778	-7.777	0.001
		BaOH+	4.121e-13	3.712e-13	-12.385	-12.430	-0.045	BaOH+	1.003e-11	9.103e-12	-10.999	-11.041	-0.042
		C(4)	0.000e+00	0.000e+00	-65.188	-65.187	0.001	C(4)	0.000e+00	0.000e+00	-75.516	-75.515	0.001
		CH4	0.000e+00	0.000e+00	-73.489	-73.488	0.001	CH4	0.000e+00	0.000e+00	-75.516	-75.515	0.001
		C(4)	7.564e-03	7.564e-03	7.564e-03	7.564e-03	7.564e-03	C(4)	6.373e-03	6.373e-03	6.373e-03	6.373e-03	6.373e-03
		HCO3-	6.134e-03	5.545e-03	-2.212	-2.256	-0.044	HCO3-	6.066e-03	5.524e-03	-2.217	-2.258	-0.041
		CO2	1.280e-03	1.283e-03	-2.893	-2.892	0.001	CO2	8.808e-05	8.827e-05	-4.055	-4.054	0.001
		CaHCO3+	9.502e-05	8.589e-05	-4.022	-4.066	-0.044	CaHCO3+	6.904e-05	6.287e-05	-4.161	-4.202	-0.041
-----		MgHCO3+	4.277e-05	3.852e-05	-4.369	-4.414	-0.045	CaCO3	5.654e-05	5.666e-05	-4.248	-4.247	0.001
		CaCO3	5.155e-06	5.168e-06	-5.288	-5.287	0.001	CO3-2	4.602e-05	3.226e-05	-4.329	-4.491	-0.163
		CO3-2	3.390e-06	2.265e-06	-5.470	-5.645	-0.176	MgHCO3+	3.308e-05	3.003e-05	-4.480	-4.522	-0.042
		NaHCO3	2.762e-06	2.769e-06	-5.559	-5.558	0.001	MgCO3	1.148e-05	1.150e-05	-4.940	-4.939	0.001
		MgCO3	1.058e-06	1.061e-06	-5.976	-5.974	0.001	NaHCO3	1.150e-06	1.152e-06	-5.939	-5.939	0.001
		MgHCO3+	2.241e-07	2.019e-07	-6.649	-6.605	-0.045	MgCO3	1.021e-07	1.023e-07	-6.991	-6.990	0.001
		MgCO3	7.236e-08	7.345e-08	-7.135	-7.134	0.001	NaCO3	9.885e-08	9.874e-08	-7.708	-7.707	0.001
		CaHCO3+	4.938e-08	4.448e-08	-7.306	-7.352	-0.045	CaHCO3+	6.291e-08	5.711e-08	-7.201	-7.243	-0.042
		BaHCO3+	3.193e-08	2.876e-08	-7.496	-7.541	-0.045	BaHCO3+	4.817e-08	4.373e-08	-7.317	-7.359	-0.042
		NaCO3	1.863e-08	1.678e-08	-7.730	-7.735	-0.045	MgHCO3+	2.166e-08	1.967e-08	-7.664	-7.706	-0.042
-----		BaCO3	7.495e-10	7.514e-10	-9.125	-9.124	0.001	BaCO3	1.667e-08	1.670e-08	-7.778	-7.777	0.001
		CaCO3	4.549e-10	4.561e-10	-9.342	-9.341	0.001	CaCO3	8.360e-09	8.378e-09	-8.078	-8.077	0.001
		ZnHCO3+	8.928e-11	8.041e-11	-10.049	-10.095	-0.045	CaCO3(2-)	1.258e-09	8.546e-10	-8.900	-9.068	-0.168
		CaCO3(2-)	5.189e-11	5.202e-11	-10.285	-10.284	0.001	ZnCO3(2-)	1.718e-10	1.167e-10	-9.765	-9.933	-0.168
		ZnCO3(2-)	4.959e-12	3.264e-12	-11.305	-11.486	-0.182	ZnCO3(3-)	1.689e-10	1.692e-10	-9.772	-9.772	0.001
		ZnCO3(5-2)	3.824e-12	2.517e-12	-11.417	-11.599	-0.182	Ca	2.035e-03	2.035e-03	2.035e-03	2.035e-03	2.035e-03
		Ca	2.634e-03	2.634e-03	2.634e-03	2.634e-03	2.634e-03	Ca	2.035e-03	2.035e-03	2.035e-03	2.035e-03	2.035e-03
		Ca+2	2.506e-03	1.672e-03	-2.601	-2.777	-0.176	Ca+2	1.890e-03	1.299e-03	-2.724	-2.887	-0.163
		CaHCO3+	9.502e-05	8.589e-05	-4.022	-4.066	-0.044	CaHCO3+	6.904e-05	6.287e-05	-4.161	-4.202	-0.041
		CaSO4	2.752e-05	2.759e-05	-4.599	-4.599	0.001	CaSO4	5.654e-05	5.666e-05	-4.248	-4.247	0.001
-----		CaCO3	5.155e-06	5.168e-06	-5.288	-5.287	0.001	CaSO4	1.906e-05	1.910e-05	-4.720	-4.719	0.001
		CaF+	1.522e-07	1.371e-07	-6.818	-6.863	-0.045	CaF+	7.576e-08	6.878e-08	-7.121	-7.163	-0.042
		CaOH+	3.878e-09	3.493e-09	-8.411	-8.457	-0.045	CaOH+	4.523e-08	4.106e-08	-7.345	-7.387	-0.042
		CaHSO4+	1.216e-11	1.095e-11	-10.915	-10.961	-0.045	CaHSO4+	5.453e-13	4.932e-13	-12.265	-12.307	-0.042
		Cd	4.451e-07	4.451e-07	4.451e-07	4.451e-07	4.451e-07	Cd	5.786e-07	5.786e-07	5.786e-07	5.786e-07	5.786e-07
		Cd+2	3.854e-07	2.537e-07	-6.414	-6.596	-0.182	Cd+2	4.814e-07	3.270e-07	-6.318	-6.486	-0.168
		CaHCO3+	4.938e-08	4.448e-08	-7.306	-7.352	-0.045	CaHCO3+	6.291e-08	5.711e-08	-7.201	-7.243	-0.042
		CaSO4	6.554e-09	6.370e-09	-7.197	-7.196	0.001	CaSO4	1.574e-08	1.429e-08	-7.426	-7.427	-0.042
		CaCl+	3.404e-09	3.066e-09	-8.468	-8.513	-0.045	CaCl+	3.860e-09	3.378e-09	-8.078	-8.077	0.001
		CaCO3	4.549e-10	4.561e-10	-9.342	-9.341	0.001	CaCO3	7.535e-09	7.369e-09	-8.134	-8.133	0.001
-----		CaOH+	9.065e-11	8.165e-11	-10.043	-10.088	-0.045	CaOH+	1.499e-09	1.361e-09	-8.824	-8.867	-0.042
		CaCO3(2-)	1.122e-11	7.386e-12	-10.950	-11.132	-0.182	CaCO3(2-)	1.258e-09	8.546e-10	-8.900	-9.068	-0.168
		CaCO3(3-2)	4.959e-12	3.264e-12	-11.305	-11.486	-0.182	CaOH(2)	5.290e-11	3.011e-11	-10.277	-10.276	0.001
		CaCl2	1.605e-12	1.609e-12	-11.795	-11.793	0.001	CaCl2	2.703e-11	2.709e-11	-10.568	-10.567	0.001
		CaOH(2)	1.791e-13	1.795e-13	-12.747	-12.746	0.001	CaSO4(2-)	1.159e-11	7.872e-12	-10.936	-11.104	-0.168
		CaCl3	1.184e-16	1.066e-16	-15.927	-15.972	-0.045	CaCl3	6.974e-15	6.331e-15	-14.157	-14.199	-0.042
		CaOH(3-)	2.815e-19	2.535e-19	-18.531	-18.596	-0.045	CaOH(3-)	1.248e-15	1.135e-15	-14.904	-14.946	-0.042
		CaOH(4-2)	3.814e-26	2.844e-26	-25.364	-25.546	-0.182	CaOH(4-2)	2.833e-21	1.924e-21	-20.548	-20.716	-0.168
		Cl	1.485e-04	1.485e-04	1.485e-04	1.485e-04	1.485e-04	Cl	5.362e-04	5.362e-04	5.362e-04	5.362e-04	5.362e-04
		Cl-	1.485e-04	1.335e-04	-3.828	-3.875	-0.046	Cl-	5.362e-04	4.860e-04	-3.271	-3.313	-0.043
-----		CaCl+	3.404e-09	3.066e-09	-8.468	-8.513	-0.045	CaCl+	3.860e-09	3.378e-09	-8.078	-8.077	0.001
		MnCl+	2.466e-10	2.221e-10	-9.608	-9.653	-0.045	MnCl+	8.711e-11	8.090e-11	-10.060	-10.102	-0.042
		ZnCl2	1.605e-12	1.609e-12	-11.795	-11.793	0.001	ZnCl2	2.703e-11	2.709e-11	-10.568	-10.567	0.001
		ZnCl+	2.278e-14	2.052e-14	-13.642	-13.688	-0.045	ZnCl+	1.711e-14	1.553e-14	-13.767	-13.809	-0.042
		MnCl2	1.291e-14	1.294e-14	-13.889	-13.888	0.001	MnCl2	1.674e-14	1.678e-14	-13.776	-13.775	0.001
		FeCl+2	1.185e-16	7.799e-17	-15.926	-16.108	-0.042	FeCl+2	8.974e-16	6.313e-16	-14.153	-14.195	-0.042
		MnCl2	1.184e-16	1.066e-16	-15.927	-15.972	-0.045	ZnCl2	7.335e-18	7.138e-18	-17.135	-17.134	0.001
		ZnCl2	2.684e-18	2.690e-18	-17.571	-17.570	0.001	MnCl3	2.473e-18	2.245e-18	-17.607	-17.649	-0.042
		MnCl3	5.281e-19	4.757e-19	-18.277	-18.323	-0.045	FeCl2+2	2.426e-20	1.648e-20	-19.615	-19.783	-0.168
		FeCl+2	8.546e-20	7.497e-20	-19.908	-19.914	0.001	Zn					

		<p>Mg 9.755e-04</p> <p>Mg+2 9.219e-04 6.193e-04 -3.035 -3.208 -0.173</p> <p>MgHCO3+ 4.277e-05 3.852e-05 -4.369 -4.414 -0.045</p> <p>MgSO4 9.224e-06 9.247e-06 -5.035 -5.034 0.001</p> <p>MgCO3 1.058e-06 1.061e-06 -5.976 -5.974 0.001</p> <p>MgF+ 4.644e-07 4.183e-07 -6.333 -6.379 -0.045</p> <p>MgOH+ 7.472e-09 6.730e-09 -8.127 -8.172 -0.045</p> <p>Mn(2) 9.107e-07</p> <p>Mn+2 6.078e-07 4.086e-07 -6.216 -6.389 -0.173</p> <p>MnHCO3+ 2.241e-07 2.019e-07 -6.649 -6.695 -0.045</p> <p>MnCO3 7.326e-08 7.345e-08 -7.135 -7.134 0.001</p> <p>MnSO4 5.134e-09 5.147e-09 -8.290 -8.288 0.001</p> <p>MnCl+ 2.466e-10 2.221e-10 -9.608 -9.653 -0.045</p> <p>MnF+ 4.280e-11 3.855e-11 -10.369 -10.414 -0.045</p> <p>MnOH+ 4.013e-11 3.615e-11 -10.397 -10.442 -0.045</p> <p>MnCl2 1.291e-14 1.294e-14 -13.889 -13.888 0.001</p> <p>Mn(NO3)2 2.763e-17 2.770e-17 -16.559 -16.558 0.001</p> <p>MnCl3- 5.281e-19 4.575e-19 -18.277 -18.323 -0.045</p> <p>Mn(3) 3.170e-29</p> <p>Mn+3 3.170e-29 1.237e-29 -28.499 -28.908 -0.409</p> <p>N(5) 4.519e-06</p> <p>NO3- 4.519e-06 4.054e-06 -5.345 -5.392 -0.047</p> <p>Mn(NO3)2 2.763e-17 2.770e-17 -16.559 -16.558 0.001</p> <p>Na 9.880e-04</p> <p>Na+ 9.848e-04 8.881e-04 -3.007 -3.052 -0.045</p> <p>NaHCO3 2.762e-06 2.769e-06 -5.559 -5.558 0.001</p> <p>NaSO4 4.287e-07 3.861e-07 -6.368 -6.413 -0.045</p> <p>NaCO3- 1.863e-08 1.678e-08 -7.730 -7.775 -0.045</p> <p>NaF 6.952e-09 6.696e-09 -8.158 -8.157 0.001</p> <p>NaOH 7.367e-11 7.385e-11 -10.133 -10.132 0.001</p> <p>O(0) 0.000e+00</p> <p>O2 0.000e+00 0.000e+00 -46.952 -46.951 0.001</p> <p>S(6) 1.818e-04</p> <p>SO4-2 1.446e-04 9.595e-05 -3.840 -4.018 -0.178</p> <p>CaSO4 2.752e-05 2.759e-05 -4.560 -4.559 0.001</p> <p>MgSO4 9.224e-06 9.247e-06 -5.035 -5.034 0.001</p> <p>NaSO4- 4.287e-07 3.861e-07 -6.368 -6.413 -0.045</p> <p>BasO4 4.175e-08 4.185e-08 -7.379 -7.378 0.001</p> <p>KSO4 3.260e-08 2.936e-08 -7.487 -7.532 -0.045</p> <p>CaSO4 6.554e-09 6.370e-09 -8.197 -8.196 0.001</p> <p>MnSO4 5.134e-09 5.147e-09 -8.290 -8.288 0.001</p> <p>HSO4- 6.048e-10 5.447e-10 -9.218 -9.264 -0.045</p> <p>CaSO4 4.728e-11 4.740e-11 -10.325 -10.324 0.001</p> <p>CaHSO4+ 1.216e-11 1.095e-11 -10.915 -10.961 -0.045</p> <p>Ca(SO4)2-2 1.122e-11 7.386e-12 -10.950 -11.132 -0.182</p> <p>ZnSO4 2.287e-12 2.293e-12 -11.641 -11.640 0.001</p> <p>FeSO4+ 2.632e-14 2.370e-14 -13.580 -13.625 -0.045</p> <p>Zn(SO4)2-2 3.070e-15 2.021e-15 -14.513 -14.694 -0.182</p> <p>Fe(SO4)2- 5.191e-17 4.676e-17 -16.285 -16.330 -0.045</p> <p>FeHSO4+2 8.007e-21 5.270e-21 -20.097 -20.078 -0.182</p> <p>Zn+2 3.215e-10</p> <p>Zn+2 1.734e-10 1.152e-10 -9.761 -9.939 -0.178</p> <p>ZnHCO3+ 9.828e-11 8.041e-11 -10.049 -10.095 -0.045</p> <p>ZnCO3 5.189e-11 5.202e-11 -10.285 -10.284 0.001</p> <p>Zn(CO3)2-2 3.824e-12 2.517e-12 -11.417 -11.599 -0.182</p> <p>ZnSO4 2.287e-12 2.293e-12 -11.641 -11.640 0.001</p> <p>ZnOH+ 5.292e-13 4.758e-13 -12.277 -12.323 -0.045</p> <p>Zn(OH)2 2.292e-13 2.298e-13 -12.640 -12.639 0.001</p> <p>ZnCl+ 2.278e-14 2.052e-14 -13.642 -13.688 -0.045</p> <p>Zn(SO4)2-2 3.070e-15 2.021e-15 -14.513 -14.694 -0.182</p> <p>Zn(OH)3- 1.015e-17 9.145e-18 -16.993 -17.039 -0.045</p> <p>ZnCl2 2.684e-18 2.690e-18 -17.571 -17.570 0.001</p> <p>ZnCl3- 4.065e-22 3.662e-22 -21.391 -21.436 -0.045</p> <p>Zn(OH)4-2 2.772e-23 1.824e-23 -22.557 -22.739 -0.182</p> <p>ZnCl4-2 3.280e-26 2.159e-26 -25.484 -25.666 -0.182</p>
		<p>Mg 5.719e-04</p> <p>Mg+2 5.459e-04 3.967e-04 -3.263 -3.402 -0.139</p> <p>MgHCO3+ 1.695e-05 1.560e-05 -4.771 -4.807 -0.036</p> <p>MgSO4 5.718e-06 5.727e-06 -5.243 -5.242 0.001</p> <p>MgCO3 3.322e-3 3.327e-06 -5.479 -5.478 0.001</p> <p>MgOH+ 2.801e-08 2.578e-08 -7.553 -7.589 -0.036</p> <p>Mn(2) 3.642e-07</p> <p>Mn+2 1.874e-07 1.363e-07 -6.727 -6.865 -0.138</p> <p>MnCO3 1.286e-07 1.288e-07 -6.891 -6.890 0.001</p> <p>MnHCO3+ 4.635e-08 4.266e-08 -7.334 -7.370 -0.036</p> <p>MnSO4 1.716e-09 1.718e-09 -8.766 -8.765 0.001</p> <p>MnOH+ 8.200e-11 7.546e-11 -10.086 -10.122 -0.036</p> <p>MnCl+ 1.878e-11 1.728e-11 -10.726 -10.762 -0.036</p> <p>Mn(NO3)2 7.000e-15 7.011e-15 -14.155 -14.154 0.001</p> <p>MnCl2 2.344e-16 2.348e-16 -15.630 -15.629 0.001</p> <p>MnCl3- 2.187e-21 2.013e-21 -20.660 -20.696 -0.036</p> <p>Mn(3) 4.086e-30</p> <p>Mn+3 4.086e-30 1.935e-30 -29.389 -29.713 -0.325</p> <p>N(5) 1.209e-04</p> <p>NO3- 1.209e-04 1.110e-04 -3.918 -3.955 -0.037</p> <p>Mn(NO3)2 7.000e-15 7.011e-15 -14.155 -14.154 0.001</p> <p>Na 4.351e-05</p> <p>Na+ 4.341e-05 3.998e-05 -4.362 -4.398 -0.036</p> <p>NaHCO3 7.883e-08 7.895e-08 -7.103 -7.103 0.001</p> <p>NaSO4 2.018e-08 1.858e-08 -7.695 -7.731 -0.036</p> <p>NaCO3- 3.320e-09 3.055e-09 -8.479 -8.515 -0.036</p> <p>NaOH 3.171e-11 3.175e-11 -10.499 -10.498 0.001</p> <p>O(0) 0.000e+00</p> <p>O2 0.000e+00 0.000e+00 -44.751 -44.750 0.001</p> <p>S(6) 1.723e-04</p> <p>SO4-2 1.470e-04 1.060e-04 -3.833 -3.975 -0.142</p> <p>CaSO4 1.949e-05 1.952e-05 -4.710 -4.710 0.001</p> <p>MgSO4 5.718e-06 5.727e-06 -5.243 -5.242 0.001</p> <p>BasO4 7.135e-08 7.146e-08 -7.147 -7.146 0.001</p> <p>NaSO4- 2.019e-08 1.858e-08 -7.695 -7.731 -0.036</p> <p>KSO4 9.217e-09 8.483e-09 -8.035 -8.071 -0.036</p> <p>CaSO4 7.670e-09 7.681e-09 -8.115 -8.115 0.001</p> <p>MnSO4 1.716e-09 1.718e-09 -8.766 -8.765 0.001</p> <p>HSO4- 6.295e-11 5.793e-11 -10.201 -10.237 -0.036</p> <p>Ca(SO4)2-2 1.416e-11 1.016e-11 -10.349 -10.393 -0.144</p> <p>CaSO4 1.576e-12 1.578e-12 -11.802 -11.802 0.001</p> <p>ZnSO4 1.277e-12 1.279e-12 -11.894 -11.893 0.001</p> <p>CaHSO4+ 8.505e-13 7.827e-13 -12.070 -12.106 -0.036</p> <p>Zn(SO4)2-2 1.808e-15 1.297e-15 -14.743 -14.887 -0.144</p> <p>FeSO4+ 2.805e-17 2.501e-17 -16.552 -16.588 -0.036</p> <p>Fe(SO4)2- 5.991e-20 5.513e-20 -19.222 -19.259 -0.036</p> <p>FeHSO4+2 6.839e-25 6.196e-25 -24.064 -24.208 -0.144</p> <p>Zn 3.214e-10</p> <p>ZnCO3 1.434e-10 1.437e-10 -9.843 -9.843 0.001</p> <p>Zn+2 8.388e-11 6.054e-11 -10.076 -10.218 -0.142</p> <p>Zn(CO3)2-2 5.093e-11 3.653e-11 -10.293 -10.437 -0.144</p> <p>ZnHCO3+ 2.908e-11 2.676e-11 -10.536 -10.572 -0.036</p> <p>Zn(OH)2 1.100e-11 1.101e-11 -10.959 -10.958 0.001</p> <p>ZnOH+ 1.751e-12 1.611e-12 -11.757 -11.793 -0.036</p> <p>ZnSO4 1.277e-12 1.279e-12 -11.894 -11.893 0.001</p> <p>Zn(OH)3- 4.550e-15 4.187e-15 -14.342 -14.378 -0.036</p> <p>ZnCl+ 2.174e-15 2.001e-15 -14.663 -14.699 -0.036</p> <p>Zn(SO4)2-2 1.808e-15 1.297e-15 -14.743 -14.887 -0.144</p> <p>Zn(OH)4-2 1.112e-19 7.977e-20 -18.954 -19.098 -0.144</p> <p>ZnCl2 5.981e-20 5.990e-20 -19.223 -19.223 0.001</p> <p>ZnCl3- 2.003e-24 1.843e-24 -23.698 -23.734 -0.036</p> <p>ZnCl4-2 3.392e-29 2.433e-29 -28.470 -28.614 -0.144</p>
		<p>Mg 7.531e-04</p> <p>Mg+2 7.020e-04 4.852e-04 -3.154 -3.314 -0.160</p> <p>MgHCO3+ 3.308e-05 3.003e-05 -4.480 -4.522 -0.042</p> <p>MgCO3 1.148e-05 1.150e-05 -4.940 -4.939 0.001</p> <p>MgSO4 6.225e-06 6.238e-06 -5.206 -5.205 0.001</p> <p>MgF+ 2.559e-07 2.141e-07 -6.627 -6.669 -0.042</p> <p>MgOH+ 2.759e-08 6.590e-08 -7.139 -7.181 -0.042</p> <p>Mn(2) 1.821e-07</p> <p>Mn+2 1.021e-07 1.023e-07 -6.991 -6.990 0.001</p> <p>MnCO3 5.775e-08 3.994e-08 -7.238 -7.399 -0.160</p> <p>MnHCO3+ 2.166e-08 1.967e-08 -7.664 -7.706 -0.042</p> <p>MnSO4 4.385e-10 4.394e-10 -9.358 -9.357 0.001</p> <p>MnCl+ 8.711e-11 7.908e-11 -10.060 -10.102 -0.042</p> <p>MnOH+ 4.956e-11 4.499e-11 -10.305 -10.347 -0.042</p> <p>MnF+ 2.818e-12 2.559e-12 -11.550 -11.592 -0.042</p> <p>MnCl2 1.674e-14 1.678e-14 -13.776 -13.775 0.001</p> <p>Mn(NO3)2 2.132e-15 2.136e-15 -14.671 -14.670 0.001</p> <p>MnCl3- 2.473e-18 2.245e-18 -17.607 -17.649 -0.042</p> <p>Mn(3) 2.118e-30</p> <p>Mn+3 2.118e-30 8.871e-31 -29.674 -30.052 -0.378</p> <p>N(5) 1.255e-04</p> <p>NO3- 1.255e-04 1.136e-04 -3.901 -3.945 -0.043</p> <p>Mn(NO3)2 2.132e-15 2.136e-15 -14.671 -14.670 0.001</p> <p>Na 4.095e-04</p> <p>Na+ 4.081e-04 3.709e-04 -3.389 -3.431 -0.042</p> <p>NaHCO3 1.150e-06 1.152e-06 -5.939 -5.939 0.001</p> <p>NaSO4 1.594e-07 1.447e-07 -6.798 -6.840 -0.042</p> <p>NaCO3- 9.885e-08 8.974e-08 -7.005 -7.047 -0.042</p> <p>NaF 1.972e-09 1.976e-09 -8.705 -8.704 0.001</p> <p>NaOH 4.658e-10 4.668e-10 -9.332 -9.331 0.001</p> <p>O(0) 0.000e+00</p> <p>O2 0.000e+00 0.000e+00 -42.935 -42.934 0.001</p> <p>S(6) 1.531e-04</p> <p>SO4-2 1.275e-04 8.725e-05 -3.894 -4.059 -0.165</p> <p>CaSO4 1.906e-05 1.910e-05 -4.720 -4.719 0.001</p> <p>MgSO4 6.225e-06 6.238e-06 -5.206 -5.205 0.001</p> <p>NaSO4- 1.594e-07 1.447e-07 -6.798 -6.840 -0.042</p> <p>BasO4 6.154e-08 6.167e-08 -7.211 -7.210 0.001</p> <p>KSO4 1.029e-08 9.396e-09 -7.988 -8.030 -0.042</p> <p>CaSO4 7.353e-09 7.366e-09 -8.134 -8.133 0.001</p> <p>MnSO4 4.385e-10 4.394e-10 -9.358 -9.357 0.001</p> <p>HSO4- 3.480e-11 3.159e-11 -10.458 -10.500 -0.042</p> <p>Ca(SO4)2-2 1.159e-11 7.872e-12 -10.956 -11.104 -0.168</p> <p>CaHSO4+ 5.435e-13 4.932e-13 -12.265 -12.307 -0.042</p> <p>CaSO4 5.071e-13 5.081e-13 -12.295 -12.294 0.001</p> <p>ZnSO4 4.671e-13 4.681e-13 -12.331 -12.330 0.001</p> <p>Zn(SO4)2-2 5.616e-16 3.814e-16 -15.251 -15.419 -0.168</p> <p>FeSO4+ 1.406e-18 1.276e-18 -17.852 -17.894 -0.042</p> <p>Fe(SO4)2- 2.501e-21 2.271e-21 -20.602 -20.644 -0.042</p> <p>FeHSO4+2 2.792e-26 1.897e-26 -25.554 -25.722 -0.168</p> <p>Zn 4.133e-10</p> <p>ZnCO3 1.718e-10 1.167e-10 -9.765 -9.933 -0.168</p> <p>ZnCO3 1.689e-10 1.692e-10 -9.772 -9.772 0.001</p> <p>Zn+2 3.839e-11 2.629e-11 -10.416 -10.580 -0.164</p> <p>ZnHCO3+ 2.014e-11 1.828e-11 -10.696 -10.738 -0.042</p> <p>Zn(OH)2 1.198e-11 1.201e-11 -10.921 -10.920 0.001</p> <p>ZnOH+ 1.541e-12 1.396e-12 -11.812 -11.854 -0.042</p> <p>ZnSO4 4.671e-13 4.681e-13 -12.331 -12.330 0.001</p> <p>ZnCl+ 1.711e-14 1.553e-14 -13.767 -13.809 -0.042</p> <p>Zn(OH)3- 7.972e-15 7.237e-15 -14.098 -14.140 -0.042</p> <p>Zn(SO4)2-2 5.616e-16 3.814e-16 -15.251 -15.419 -0.168</p> <p>ZnCl2 7.335e-18 7.350e-18 -17.135 -17.134 0.001</p> <p>Zn(OH)4-2 3.217e-19 2.185e-19 -18.492 -18.660 -0.168</p> <p>ZnCl3- 3.962e-21 3.597e-21 -20.402 -20.444 -0.042</p> <p>ZnCl4-2 1.118e-24 7.595e-25 -23.951 -24.119 -0.168</p>
		<p>-----Saturation indices-----</p> <p>Phase SI log IAP log KT</p> <p>Anhydrite -2.46 -6.79 -4.34 CaSO4</p> <p>Aragonite 0.17 -8.42 -8.25 CaCO3</p> <p>Barite 0.17 -10.08 -10.25 BaSO4</p> <p>Calcite -0.01 -8.42 -8.41 CaCO3</p> <p>Ca(OH)2 -6.05 7.60 13.65 Ca(OH)2</p> <p>CaSO4 -11.09 -10.61 0.48 CaSO4</p> <p>CH4(g) -62.48 -65.19 -2.70 CH4</p> <p>CO2(g) -1.62 -2.89 -1.27 CO2</p> <p>Dolomite -0.55 -17.28 -16.72 CaMg(CO3)2</p> <p>Fe(OH)3(a) 2.91 7.81 4.89 Fe(OH)3</p> <p>Fluorite -1.71 -12.51 -10.80 CaF2</p> <p>Goethite 8.24 7.81 -0.43 FeOOH</p> <p>Gypsum -2.20 -6.79 -4.59 CaSO4.2H2O</p> <p>H2(g) -22.13 23.48 45.61 H2</p> <p>H2O(g) -1.92 -0.00 1.92 H2O</p> <p>Halite -8.47 -6.93 1.55 NaCl</p> <p>Hausmannite -19.33 45.63 64.97 Mn3O4</p> <p>Hematite 18.41 15.61 -2.80 Fe2O3</p> <p>Jarosite-K -2.17 -10.16 -7.99 KFe3(SO4)2(OH)6</p> <p>Margarite -6.43 18.91 25.34 MnOOH</p> <p>O2(g) -44.19 -46.95 -2.76 O2</p> <p>Opavite -0.14 -12.24 -12.10 CaCO3</p> <p>Pyrochroite -7.39 7.81 15.20 Mn(OH)2</p> <p>Pyrolusite -13.92 30.01 43.93 MnO2.H2O</p> <p>Rhodochroite -0.96 -12.03 -11.07 MnCO3</p> <p>Smithsonite -5.75 -15.58 -9.83 ZnCO3</p> <p>Witherite -3.07 -11.71 -8.63 BaCO3</p> <p>Zn(OH)2(e) -7.24 4.26 11.50 Zn(OH)2</p>
		<p>-----Saturation indices-----</p> <p>Phase SI log IAP log KT</p> <p>Anhydrite -2.58 -6.92 -4.34 CaSO4</p> <p>Aragonite 0.36 -7.87 -8.24 CaCO3</p> <p>Barite 0.50 -9.85 -10.35 BaSO4</p> <p>Calcite 0.52 -7.87 -8.40 CaCO3</p> <p>Ca(OH)2 -4.03 9.62 13.65 Ca(OH)2</p> <p>CaSO4 -11.18 -10.52 0.66 CaSO4</p> <p>CH4(g) -70.83 -73.49 -2.65 CH4</p> <p>CO2(g) -2.82 -4.02 -1.20 CO2</p> <p>Dolomite 0.40 -16.20 -16.60 CaMg(CO3)2</p> <p>Fe(OH)3(a) 2.90 7.79 4.89 Fe(OH)3</p> <p>Goethite 8.04 7.79 -0.25 FeOOH</p> <p>Gypsum -2.32 -6.92 -4.60 CaSO4.2H2O</p> <p>H2(g) -24.08 22.37 46.46 H2</p> <p>H2O(g) -2.05 -0.00 2.05 H2O</p> <p>Halite -10.44 8.91 1.53 NaCl</p> <p>Hausmannite -14.21 52.04 66.25 Mn3O4</p> <p>Hematite 17.99 15.58 -2.41 Fe2O3</p> <p>Jarosite-K -6.02 -13.61 -7.59 KFe3(SO4)2(OH)6</p> <p>Margarite -3.97 21.37 25.34 MnOOH</p> <p>O2(g) -42.03 -44.75 -2.72 O2</p> <p>Opavite 0.63 -11.47 -12.10 CaCO3</p> <p>Pyrochroite -5.91 9.29 15.20 Mn(OH)2</p> <p>Pyrolusite -11.30 33.45 44.76 MnO2.H2O</p> <p>Rhodochroite -0.73 -11.79 -11.06 MnCO3</p> <p>Smithsonite -5.37 -15.14 -9.77 ZnCO3</p> <p>Witherite -2.12 -10.80 -8.67 BaCO3</p> <p>Zn(OH)2(e) -5.56 5.94 11.50 Zn(OH)2</p>
		<p>-----Saturation indices-----</p> <p>Phase SI log IAP log KT</p> <p>Anhydrite -2.61 -6.95 -4.34 CaSO4</p> <p>Aragonite 0.87 -7.38 -8.25 CaCO3</p> <p>Barite 0.38 -9.91 -10.29 BaSO4</p> <p>Calcite 1.03 -7.38 -8.40 CaCO3</p> <p>Ca(OH)2 -3.58 10.07 13.65 Ca(OH)2</p> <p>CaSO4 -11.10 -10.54 0.55 CaSO4</p> <p>CH4(g) -72.83 -75.31 -2.68 CH4</p> <p>CO2(g) -2.82 -4.05 -1.24 CO2</p> <p>Dolomite 1.49 -15.18 -16.67 CaMg(CO3)2</p> <p>Fe(OH)3(a) 2.25 7.14 4.89 Fe(OH)3</p> <p>Fluorite -2.13 -12.95 -10.83 CaF2</p> <p>Goethite 7.50 7.14 -0.36 FeOOH</p> <p>Gypsum -2.35 -6.95 -4.60 CaSO4.2H2O</p> <p>H2(g) -24.49 21.47 45.96 H2</p> <p>H2O(g) -1.97 -0.00 1.97 H2O</p> <p>Halite -8.29 6.74 1.54 NaCl</p> <p>Hausmannite -13.45 52.04 65.49 Mn3O4</p> <p>Hematite 16.92 14.28 -2.64 Fe2O3</p> <p>Jarosite-K -8.40 -16.22 -7.82 KFe3(SO4)2(OH)6</p> <p>Margarite -3.90 21.44 25.34 MnOOH</p> <p>O2(g) -40.19 -42.93 -2.75 O2</p> <p>Opavite 1.12 -10.98 -12.10 CaCO3</p> <p>Pyrochroite -6.04 9.16 15.20 Mn(OH)2</p> <p>Pyrolusite -10.54 33.72 44.27 MnO2.H2O</p> <p>Rhodochroite -0.82 -11.89 -11.07 MnCO3</p> <p>Smithsonite -5.26 -15.07 -9.81 ZnCO3</p> <p>Witherite -1.69 -10.34 -8.65 BaCO3</p> <p>Zn(OH)2(e) -5.52 5.98 11.50 Zn(OH)2</p>

Initial solution 3.	ESB-1804-KES	Initial solution 8.	ESB-2404-PST	Initial solution 13.	ESB-0805-MST												
Solution composition		Solution composition		Solution composition													
Elements	Molality	Moles	Elements	Molality	Moles												
Ba	2.769e-06	2.769e-06	Ba	7.286e-08	7.286e-08	Ba	2.191e-06	2.191e-06									
C	7.074e-03	7.074e-03	C	5.463e-03	5.463e-03	C	9.476e-03	9.476e-03									
Ca	2.634e-01	2.634e-01	Ca	2.766e-03	2.766e-03	Ca	1.017e-02	1.017e-02									
Cd	4.451e-07	4.451e-07	Cd	4.451e-07	4.451e-07	Cd	5.799e-07	5.799e-07									
Cl	3.057e-04	3.057e-04	Cl	2.485e-04	2.485e-04	Cl	3.561e-04	3.561e-04									
Cu	1.496e-08	1.496e-08	Cu	6.204e-08	6.204e-08	Cu	8.206e-08	8.206e-08									
F	1.053e-05	1.053e-05	F	1.580e-05	1.580e-05	F	2.639e-05	2.639e-05									
Fe(3)	1.075e-06	1.075e-06	Fe(3)	5.913e-06	5.913e-06	Fe(3)	9.212e-05	9.212e-05									
K	6.653e-05	6.653e-05	K	9.980e-05	9.980e-05	K	2.770e-04	2.770e-04									
Mg	1.012e-03	1.012e-03	Mg	8.972e-04	8.972e-04	Mg	3.762e-03	3.762e-03									
Mn	5.464e-07	5.464e-07	Mn	1.093e-06	1.093e-06	Mn	9.127e-06	9.127e-06									
N(5)	5.890e-06	5.890e-06	N(5)	2.187e-05	2.187e-05	N(5)	9.127e-06	9.127e-06									
Na	3.456e-04	3.456e-04	Na	1.219e-03	1.219e-03	Na	7.232e-03	7.232e-03									
S(6)	1.429e-04	1.429e-04	S(6)	9.837e-04	9.837e-04	S(6)	1.611e-02	1.611e-02									
Zn	4.745e-10	4.745e-10	Zn	2.602e-10	2.602e-10	Zn	4.602e-10	4.602e-10									
Description of solution		Description of solution		Description of solution													
pH = 7.750 pe = 4.000 Activity of water = 1.000 Ionic strength = 1.087e-02 Mass of water (kg) = 1.000e+00 Total alkalinity (eq/kg) = 6.812e-03 Total CO2 (mol/kg) = 7.074e-03 Temperature (deg C) = 9.600 Electrical balance (eq) = 2.939e-04 Percent error, 100*(Ca+An)/(Ca+An) = 2.01 Iterations = 10 Total H = 1.110192e+02 Total O = 5.552772e+01		pH = 7.120 pe = 4.000 Activity of water = 1.000 Ionic strength = 1.140e-02 Mass of water (kg) = 1.000e+00 Total alkalinity (eq/kg) = 4.576e-03 Total CO2 (mol/kg) = 5.463e-03 Temperature (deg C) = 9.400 Electrical balance (eq) = 1.825e-03 Percent error, 100*(Ca+An)/(Ca+An) = 12.60 Iterations = 9 Total H = 1.110270e+02 Total O = 5.552572e+01		pH = 7.100 pe = 4.000 Activity of water = 0.999 Ionic strength = 5.007e-02 Mass of water (kg) = 1.000e+00 Total alkalinity (eq/kg) = 8.140e-03 Total CO2 (mol/kg) = 9.476e-03 Temperature (deg C) = 12.000 Electrical balance (eq) = -5.254e-03 Percent error, 100*(Ca+An)/(Ca+An) = -9.05 Iterations = 9 Total H = 1.110270e+02 Total O = 5.552791e+01													
Distribution of species		Distribution of species		Distribution of species													
Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma	Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma	Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	1.766e-07	1.587e-07	-6.753	-6.799	-0.046	H+	8.326e-08	7.586e-08	-7.080	-7.120	-0.040	H+	9.276e-08	7.943e-08	-7.033	-7.100	-0.067
H+	1.949e-08	1.778e-08	-7.710	-7.750	-0.040	OH-	4.075e-08	3.655e-08	-7.390	-7.437	-0.047	OH-	5.384e-08	4.387e-08	-7.269	-7.358	-0.089
H2O	5.551e+01	9.998e-01	1.744	-0.000	0.000	H2O	5.551e+01	9.998e-01	1.744	-0.000	0.000	H2O	5.551e+01	9.993e-01	1.744	-0.000	0.000
Ba	2.769e-06					Ba	7.286e-08					Ba	2.191e-06				
Ba+2	2.627e-06	1.747e-06	-5.800	-5.758	-0.177	Ba+2	6.129e-08	4.041e-08	-7.213	-7.393	-0.181	Ba+2	1.217e-06	1.231e-06	-5.915	-5.910	0.005
BaHCO3+	6.800e-08	6.126e-08	-7.168	-7.213	-0.045	BaSO4	1.048e-08	1.051e-08	-7.980	-7.978	0.001	Ba+2	9.514e-07	4.479e-07	-6.022	-6.349	-0.327
BasO4	6.598e-08	6.614e-08	-7.181	-7.180	0.001	BaHCO3+	1.061e-09	9.540e-10	-8.974	-9.020	-0.046	BaHCO3+	2.209e-08	1.822e-08	-7.656	-7.740	-0.084
BaCO3	7.094e-09	7.112e-09	-8.149	-8.148	0.001	BaCO3	2.580e-11	2.587e-11	-10.588	-10.587	0.001	BaCO3	4.876e-10	4.933e-10	-9.312	-9.307	0.005
BaOH+	3.694e-12	3.328e-12	-11.432	-11.478	-0.045	BaOH+	2.008e-14	1.805e-14	-13.697	-13.744	-0.046	BaOH+	2.315e-12	1.909e-13	-12.635	-12.719	-0.084
C(4)	0.000e+00					C(4)	0.000e+00					C(4)	0.000e+00				
CH4	0.000e+00	0.000e+00	-70.962	-70.961	0.001	CH4	0.000e+00	0.000e+00	-65.431	-65.429	0.001	CH4	0.000e+00	0.000e+00	-65.451	-65.446	0.005
C(4)	7.074e-03					C(4)	5.463e-03					C(4)	9.476e-03				
HCO3-	6.570e-03	5.940e-03	-2.182	-2.226	-0.044	HCO3-	4.640e-03	4.024e-03	-2.351	-2.395	-0.045	HCO3-	7.681e-03	6.388e-03	-2.115	-2.195	-0.080
CO2	3.091e-04	3.099e-04	-3.510	-3.509	0.001	CO2	8.970e-04	8.994e-04	-3.047	-3.046	0.001	CO2	1.397e-03	1.413e-03	-2.855	-2.850	0.005
CaHCO3+	1.002e-04	9.063e-05	-3.999	-4.043	-0.044	CaHCO3+	6.846e-05	6.193e-05	-4.163	-4.208	-0.045	CaHCO3+	2.459e-04	2.045e-04	-3.609	-3.689	-0.080
MgHCO3+	4.733e-05	4.264e-05	-4.325	-4.370	-0.045	MgHCO3+	2.761e-05	2.482e-05	-4.559	-4.605	-0.046	MgHCO3+	1.085e-04	8.948e-05	-3.965	-4.048	-0.084
CaCO3	2.425e-05	2.431e-05	-4.615	-4.614	0.001	CaCO3	3.878e-06	3.889e-06	-5.411	-5.410	0.001	CaHCO3+	2.065e-05	2.089e-05	-4.685	-4.680	0.005
CO3-2	1.607e-05	1.074e-05	-4.794	-4.969	-0.175	CO3-2	2.558e-06	1.695e-06	-5.592	-5.771	-0.179	CaCO3	1.238e-05	1.253e-05	-4.907	-4.902	0.005
MgCO3	5.162e-06	5.175e-06	-5.287	-5.286	0.001	NaHCO3	2.465e-06	2.471e-06	-5.608	-5.607	0.001	CO3-2	5.786e-06	2.767e-06	-5.238	-5.580	-0.320
NaHCO3	1.035e-06	1.038e-06	-5.985	-5.984	0.001	MgCO3	6.983e-07	7.001e-07	-6.156	-6.155	0.001	MgCO3	2.662e-06	2.693e-06	-5.575	-5.570	0.005
MnCO3	1.583e-07	1.587e-07	-6.801	-6.800	0.001	MnCO3	2.076e-07	1.866e-07	-6.683	-6.729	-0.046	MnHCO3+	1.704e-06	1.405e-06	-5.768	-5.852	-0.084
MnHCO3+	1.093e-07	9.850e-08	-6.961	-7.007	-0.045	CaHCO3+	6.987e-08	7.006e-08	-7.156	-7.155	0.001	CaCO3	5.364e-07	5.426e-07	-6.271	-6.265	0.005
BaHCO3+	6.800e-08	6.126e-08	-7.168	-7.213	-0.045	CaHCO3+	3.437e-08	3.090e-08	-7.464	-7.510	-0.046	NaCO3	1.831e-07	1.510e-07	-6.737	-6.821	-0.084
CaHCO3+	1.012e-03	1.012e-03	-3.057	-3.057	0.000	NaCO3	1.671e-08	1.503e-08	-7.777	-7.823	-0.046	CaHCO3+	3.477e-08	2.867e-08	-7.459	-7.543	-0.084
NaCO3	3.039e-08	2.738e-08	-7.517	-7.563	-0.045	BaHCO3+	1.061e-09	9.540e-10	-8.974	-9.020	-0.046	BaHCO3+	2.209e-08	1.822e-08	-7.656	-7.740	-0.084
BaCO3	7.094e-09	7.112e-09	-8.149	-8.148	0.001	CaCO3	3.268e-08	3.269e-08	-9.483	-9.483	0.001	BaCO3	4.876e-10	4.933e-10	-9.312	-9.307	0.005
CaCO3	2.122e-09	2.127e-09	-8.673	-8.672	0.001	ZnHCO3+	5.748e-11	5.167e-11	-10.240	-10.287	-0.046	CaCO3	3.084e-10	3.120e-10	-9.511	-9.506	0.005
ZnCO3	1.916e-10	1.920e-10	-9.718	-9.717	0.001	ZnCO3	3.441e-11	3.450e-11	-10.463	-10.462	0.001	ZnHCO3+	8.990e-11	7.414e-11	-10.046	-10.130	-0.084
CaCO3(2)-2	1.096e-10	7.221e-11	-9.960	-10.141	-0.181	BaCO3	2.580e-11	2.587e-11	-10.588	-10.587	0.001	ZnCO3	5.032e-11	5.090e-11	-10.298	-10.293	0.005
ZnHCO3+	7.441e-11	6.704e-11	-10.128	-10.174	-0.045	CaCO3(2)-2	2.683e-12	1.752e-12	-11.571	-11.756	-0.185	ZnCO3(2)-2	6.513e-12	3.012e-12	-11.186	-11.521	-0.335
ZnCO3(2)-2	6.692e-11	4.408e-11	-10.174	-10.356	-0.181	CaCO3(2)-2	1.914e-12	1.250e-12	-11.718	-11.903	-0.185	CaCO3(2)-2	5.904e-12	2.750e-12	-11.229	-11.564	-0.335
Ca	2.634e-03					Ca	2.766e-03					Ca	1.017e-02				
Ca+2	2.488e-03	1.661e-03	-2.604	-2.780	-0.175	Ca+2	2.544e-03	1.685e-03	-2.594	-2.773	-0.179	Ca+2	6.802e-03	3.264e-03	-2.167	-2.486	-0.319
CaHCO3+	1.002e-04	9.063e-05	-3.999	-4.043	-0.044	CaSO4	1.492e-04	1.496e-04	-3.826	-3.825	0.001	CaSO4	3.108e-03	3.144e-03	-2.508	-2.503	0.005
CaCO3	2.425e-05	2.431e-05	-4.615	-4.614	0.001	CaHCO3+	6.846e-05	6.193e-05	-4.163	-4.208	-0.045	CaHCO3+	2.459e-04	2.045e-04	-3.609	-3.689	-0.080
CaSO4	2.146e-05	2.151e-05	-4.668	-4.667	0.001	CaCO3	3.878e-06	3.889e-06	-5.411	-5.410	0.001	CaCO3	1.238e-05	1.253e-05	-4.907	-4.902	0.005
CaF+	9.955e-08	9.004e-08	-7.000	-7.046	-0.045	CaF+	1.519e-07	1.365e-07	-6.819	-6.865	-0.046	CaOH+	4.968e-07	4.097e-07	-6.304	-6.388	-0.084
CaOH+	1.720e-08	1.550e-08	-7.764	-7.810	-0.045	CaOH+	4.100e-09	3.686e-09	-8.387	-8.433	-0.046	CaOH+	8.263e-09	6.814e-09	-8.083	-8.167	-0.084
CaHSO4+	2.116e-12	1.906e-12	-11.674	-11.720	-0.045	CaHSO4+	6.280e-11	5.655e-11	-10.202	-10.248	-0.046	CaHSO4+	1.541e-09	1.271e-09	-8.812	-8.896	-0.084
Cd	4.451e-07					Cd	4.451e-07					Cd	5.799e-07				
Cd+2	3.787e-07	2.494e-07	-6.422	-6.603	-0.181	Cd+2	3.718e-07	2.428e-07	-6.430	-6.615	-0.185	Cd+2	3.069e-07	1.419e-07	-6.513	-6.698	-0.335
CaHCO3+	5.201e-08	4.685e-08	-7.284	-7.329	-0.045	CaHCO3+	3.437e-08	3.090e-08	-7.464	-7.510	-0.046	CaSO4	2.041e-07	2.065e-07	-6.600	-6.685	0.005
CaCl+	6.883e-09	6.201e-09	-8.762	-8.807	-0.045	CaSO4	3.276e-08	3.269e-08	-9.483	-9.483	0.001	CaHCO3+	3.477e-08	2.867e-08	-7.459	-7.543	-0.084
CaSO4	4.908e-09	4.921e-09	-8.309	-8.308	0.001	CdCl+	5.443e-09	4.893e-09	-8.264	-8.310	-0.046	CaSO4(2)-2	2.916e-08	1.349e-08	-7.535	-7.870	-0.335
CaCO3	2.122e-09	2.127e-09	-8.673	-8.672	0.001	CdCO3	3.260e-10	3.269e-10	-9.487	-9.486	0.001	CdCl+	4.566e-09	3.765e-09	-8.340	-8.424	-0.084
CaOH+	3.883e-10	3.498e-10	-9.411	-9.456	-0.045	CdCO3	3.165e-10	2.067e-10	-9.500	-9.585	-0.185	CaCO3	3.084e-10	3.120e-10	-9.511	-9.506	0.005
CaCO3(2)-2	1.096e-10	7.221e-11	-9.960	-10.141	-0.181	CaOH+	8.736e-11	7.853e-11	-10.059	-10.105	-0.046	CaCO3	6.574e-11	5.426e-11	-10.182	-10.266	-0.084
CaSO4(2)-2	6.834e-12	4.502e-12	-11.165	-11.347	-0.181	CdCl2	4.269e-12	4.280e-12	-11.370	-11.369	0.001	CaSO4(2)-2	5.904e-12	2.750e-12	-11.229	-11.564	-0.335
CaCl2	6.675e-12	6.692e-12	-11.176	-11.174	0.001	CaCO3(2											

81

Initial solution 4. ESB-1804-EST	Initial solution 9. ESB-2404-FST	Initial solution 14. ESB-0805-TST
-----Solution composition-----		
Elements Molality Moles	Elements Molality Moles	Elements Molality Moles
Ba 3.278e-06 3.278e-06	Ba 1.609e-06 1.609e-06	Ba 2.192e-06 2.192e-06
C 5.322e-03 5.322e-03	C 1.399e-02 1.399e-02	C 1.376e-02 1.376e-02
Ca 2.419e-03 2.419e-03	Ca 9.941e-03 9.941e-03	Ca 8.559e-03 8.559e-03
Cd 4.451e-07 4.451e-07	Cd 5.156e-06 5.156e-06	Cd 5.802e-07 5.802e-07
Cl 6.491e-05 6.491e-05	Cl 3.903e-04 3.903e-04	Cl 6.324e-04 6.324e-04
Cu 5.385e-09 5.385e-09	Cu 6.148e-08 6.148e-08	Cu 3.789e-08 3.789e-08
F 1.053e-05 1.053e-05	F 6.344e-05 6.344e-05	F 3.697e-05 3.697e-05
Fe(3) 4.479e-08 4.479e-08	Fe(3) 2.268e-04 2.268e-04	Fe(3) 1.976e-06 1.976e-06
K 2.047e-05 2.047e-05	K 7.886e-04 7.886e-04	K 4.285e-04 4.285e-04
Mg 8.230e-04 8.230e-04	Mg 4.850e-03 4.850e-03	Mg 3.830e-03 3.830e-03
Mn 3.642e-07 3.642e-07	Mn 2.925e-06 2.925e-06	Mn 4.200e-06 4.200e-06
N(5) 2.789e-04 2.789e-04		N(5) 2.403e-05 2.403e-05
Na 1.401e-04 1.401e-04	Na 2.709e-02 2.709e-02	Na 1.535e-02 1.535e-02
S(6) 3.334e-04 3.334e-04	S(6) 2.441e-02 2.441e-02	S(6) 1.713e-02 1.713e-02
Zn 3.214e-10 3.214e-10	Zn 5.224e-10 5.224e-10	Zn 1.995e-10 1.995e-10
-----Description of solution-----		
pH = 7.710	pH = 6.680	pH = 7.130
pe = 4.000	pe = 4.000	pe = 4.000
Activity of water = 1.000	Activity of water = 0.999	Activity of water = 0.999
Ionic strength = 9.470e-03	Ionic strength = 7.358e-02	Ionic strength = 5.561e-02
Mass of water (kg) = 1.000e+00	Mass of water (kg) = 1.000e+00	Mass of water (kg) = 1.000e+00
Total alkalinity (eq/kg) = 5.081e-03	Total alkalinity (eq/kg) = 9.925e-03	Total alkalinity (eq/kg) = 1.205e-02
Total CO2 (mol/kg) = 5.322e-03	Total CO2 (mol/kg) = 1.399e-02	Total CO2 (mol/kg) = 1.376e-02
Temperature (deg C) = 7.400	Temperature (deg C) = 14.500	Temperature (deg C) = 16.800
Electrical balance (eq) = 5.510e-04	Electrical balance (eq) = -1.490e-03	Electrical balance (eq) = -6.429e-03
Percent error, 100*(Cat-An)/(Cat+An) = 4.50	Percent error, 100*(Cat-An)/(Cat+An) = -1.61	Percent error, 100*(Cat-An)/(Cat+An) = -9.21
Iterations = 9	Iterations = 10	Iterations = 10
Total H = 1.110175e+02	Total H = 1.110228e+02	Total H = 1.110244e+02
Total O = 5.552408e+01	Total O = 5.564220e+01	Total O = 5.561436e+01
-----Distribution of species-----		
Species Molality Log Activity Molality Log Activity Gamma	Species Molality Log Activity Molality Log Activity Gamma	Species Molality Log Activity Molality Log Activity Gamma
OH- 1.311e-07 1.187e-07 -6.882 -6.926 -0.043	H+ 2.486e-07 2.089e-07 -6.604 -6.680 -0.076	OH- 8.750e-08 7.058e-08 -7.058 -7.151 -0.093
H2O 2.126e-08 1.950e-08 -7.672 -7.710 -0.038	OH- 2.623e-08 2.066e-08 -7.581 -7.685 -0.104	H+ 8.709e-08 7.413e-08 -7.060 -7.130 -0.070
Ca 3.278e-06	H2O 5.551e+01 9.987e-01 1.744 -0.001 0.000	H2O 5.551e+01 9.991e-01 1.744 -0.000 0.000
Ba+2 3.027e-06 2.063e-06 -5.519 -5.686 -0.167	Ba 1.609e-06	Ba 2.192e-06
BSO4 1.900e-07 1.904e-07 -6.721 -6.720 0.001	Ba+2 6.197e-07 2.604e-07 -6.208 -6.584 -0.377	Ba+2 9.366e-07 4.260e-07 -6.028 -6.371 -0.342
BaHCO3+ 5.618e-08 5.093e-08 -7.250 -7.293 -0.043	BaHCO3+ 1.695e-08 1.359e-08 -7.771 -7.867 -0.096	BaHCO3+ 3.640e-08 2.976e-08 -7.439 -7.526 -0.088
BaCO3 5.166e-09 5.177e-09 -8.287 -8.286 0.001	BaCO3 1.430e-10 1.455e-10 -9.845 -9.837 0.007	BaCO3 9.152e-10 9.270e-10 -9.039 -9.033 0.006
BaOH+ 3.953e-12 3.584e-12 -11.403 -11.446 -0.043	BaOH+ 5.259e-14 4.218e-14 -13.279 -13.375 -0.096	BaOH+ 2.380e-13 1.946e-13 -12.623 -12.711 -0.088
C(4) 0.000e+00	C(4) 0.000e+00	C(4) 0.000e+00
CH4 0.000e+00 0.000e+00 -70.383 -70.382 0.001	CH4 0.000e+00 0.000e+00 -61.976 -61.969 0.007	CH4 0.000e+00 0.000e+00 -66.272 -66.267 0.006
C(4) 5.322e-03	C(4) 1.399e-02	C(4) 1.376e-02
HCO3- 4.929e-03 4.483e-03 -2.307 -2.348 -0.041	HCO3- 9.365e-03 7.579e-03 -2.029 -2.120 -0.092	HCO3- 1.144e-02 9.432e-03 -1.942 -2.025 -0.086
CO2 2.694e-04 2.700e-04 -3.570 -3.569 0.001	CO2 4.128e-03 4.198e-03 -2.384 -2.377 0.007	CO2 1.754e-03 1.777e-03 -2.756 -2.750 0.004
CaHCO3+ 6.640e-05 6.039e-05 -4.178 -4.219 -0.041	CaHCO3+ 2.586e-04 2.093e-04 -3.587 -3.679 -0.092	CaHCO3+ 3.223e-04 2.658e-04 -3.492 -3.575 -0.084
MgHCO3+ 2.958e-05 2.682e-05 -4.529 -4.572 -0.043	MgHCO3+ 1.411e-04 1.131e-04 -3.851 -3.946 -0.096	MgHCO3+ 1.517e-04 1.240e-04 -3.819 -3.907 -0.088
CaCO3 1.459e-05 1.462e-05 -4.836 -4.835 0.001	NaHCO3 8.783e-05 8.933e-05 -4.056 -4.049 0.007	NaHCO3 3.686e-05 6.408e-05 -4.195 -4.189 0.006
CO3-2 1.011e-05 6.918e-06 -4.995 -5.160 0.165	CaCO3 4.940e-06 5.024e-06 -5.306 -5.299 0.007	CaCO3 1.839e-05 1.863e-05 -4.735 -4.730 0.006
MgCO3 2.685e-06 2.691e-06 -5.571 -5.570 0.001	CO3-2 3.112e-06 1.335e-06 -5.507 -5.874 -0.368	CO3-2 1.073e-05 4.965e-06 -4.969 -5.304 -0.335
NaHCO3 3.189e-07 3.196e-07 -6.496 -6.495 0.001	MgCO3 1.408e-06 1.432e-06 -5.851 -5.844 0.007	MgCO3 4.771e-06 4.832e-06 -5.321 -5.316 0.006
MnHCO3+ 8.102e-08 8.120e-08 -7.091 -7.090 0.001	MnHCO3+ 5.745e-07 4.608e-07 -6.241 -6.336 -0.096	MnHCO3+ 9.832e-07 8.038e-07 -6.007 -6.095 -0.088
MnHCO3+ 6.511e-08 5.903e-08 -7.186 -7.229 -0.043	NaCO3 2.753e-07 3.010e-07 -6.426 -6.521 -0.096	NaCO3 9.015e-07 7.369e-07 -6.045 -6.133 -0.088
BaHCO3+ 5.618e-08 5.093e-08 -7.250 -7.293 -0.043	CaHCO3+ 2.963e-07 2.376e-07 -6.528 -6.624 -0.096	MnCO3 3.723e-07 3.771e-07 -6.429 -6.424 0.006
CaHCO3+ 4.102e-08 3.719e-08 -7.387 -7.430 -0.043	MnCO3 7.114e-08 7.235e-08 -7.148 -7.141 0.007	CaHCO3+ 4.741e-08 3.876e-08 -7.324 -7.412 -0.088
NaCO3 7.013e-09 6.358e-09 -8.154 -8.197 -0.043	BaHCO3+ 1.695e-08 1.359e-08 -7.771 -7.867 -0.096	BaHCO3+ 3.640e-08 2.976e-08 -7.439 -7.526 -0.088
BaCO3 5.166e-09 5.177e-09 -8.287 -8.286 0.001	CaCO3 9.152e-09 9.270e-09 -9.039 -9.033 0.006	CaCO3 9.152e-10 9.270e-10 -9.039 -9.033 0.006
CaCO3 1.459e-09 1.462e-09 -8.842 -8.841 0.001	CaCO3 1.430e-10 1.455e-10 -9.845 -9.837 0.007	CaCO3 5.060e-10 5.125e-10 -9.296 -9.290 0.006
ZnCO3 1.148e-10 1.151e-10 -9.940 -9.939 0.001	ZnHCO3+ 1.086e-10 8.709e-11 -9.964 -10.060 -0.096	ZnHCO3+ 4.620e-11 3.777e-11 -10.335 -10.423 -0.088
ZnHCO3+ 5.190e-11 4.705e-11 -10.285 -10.327 -0.043	ZnCO3 2.391e-11 2.432e-11 -10.621 -10.614 0.007	ZnCO3 3.111e-11 3.151e-11 -10.507 -10.502 0.006
CaHCO3(2) 4.668e-11 3.154e-11 -10.331 -10.501 -0.170	CaHCO3(2) 1.073e-11 6.440e-12 -10.969 -11.353 -0.383	CaHCO3(2) 1.802e-11 8.048e-12 -10.744 -11.094 -0.350
CaHCO3(2) 2.519e-11 1.702e-11 -10.599 -10.769 -0.170	CaHCO3(2) 1.677e-12 4.941e-13 -11.775 -12.159 -0.383	ZnCO3(2) 7.491e-12 3.345e-12 -11.125 -11.476 -0.350
Ca 2.419e-03	Ca 9.941e-03	Ca 8.559e-03
Ca+2 2.290e-03 1.566e-03 -2.640 -2.805 -0.165	Ca+2 6.124e-03 2.646e-03 -2.213 -2.577 -0.364	Ca+2 5.520e-03 2.565e-03 -2.258 -2.591 -0.333
CaHCO3+ 6.640e-05 6.039e-05 -4.178 -4.219 -0.041	CaSO4 2.553e-03 3.613e-03 -2.449 -2.442 0.007	CaSO4 2.697e-03 2.732e-03 -2.569 -2.564 0.006
CaSO4 4.823e-05 4.833e-05 -4.017 -4.016 0.001	CaHCO3+ 2.586e-04 2.093e-04 -3.587 -3.679 -0.092	CaHCO3+ 3.223e-04 2.658e-04 -3.492 -3.575 -0.084
CaCO3 1.459e-05 1.462e-05 -4.836 -4.835 0.001	CaCO3 4.940e-06 5.024e-06 -5.306 -5.299 0.007	CaCO3 1.839e-05 1.863e-05 -4.735 -4.730 0.006
CaF+ 8.963e-08 8.126e-08 -7.048 -7.090 -0.043	CaF+ 1.015e-06 8.141e-07 -5.994 -6.089 -0.096	CaF+ 6.149e-07 5.027e-07 -6.211 -6.299 -0.086
CaOH+ 1.470e-08 1.332e-08 -7.833 -7.875 -0.043	CaHSO4+ 4.904e-09 3.939e-09 -8.309 -8.405 -0.096	CaOH+ 7.017e-09 5.736e-09 -8.154 -8.241 -0.088
CaHSO4+ 5.089e-12 4.614e-12 -11.293 -11.336 -0.043	CaOH+ 2.618e-09 2.092e-09 -8.582 -8.678 -0.096	CaHSO4+ 1.521e-09 1.080e-09 -8.879 -8.967 -0.088
Cd 4.451e-07	Cd 5.156e-06	Cd 5.802e-07
Cd+2 3.883e-07 2.624e-07 -6.411 -6.581 -0.170	Cd+2 2.396e-06 9.915e-07 -5.621 -6.004 -0.383	Cd+2 2.909e-07 1.299e-07 -6.536 -6.886 -0.350
CaHCO3+ 4.102e-08 3.719e-08 -7.387 -7.430 -0.043	CaSO4 1.993e-06 2.072e-06 -5.701 -5.693 0.007	CaSO4 2.030e-07 2.056e-07 -6.693 -6.687 0.006
CaSO4 1.241e-08 1.243e-08 -8.017 -8.016 0.001	CaHSO4(2) 4.458e-07 1.792e-07 -6.745 -6.745 -0.383	CaHCO3+ 4.741e-08 3.876e-08 -7.324 -7.412 -0.088
CaCl+ 1.525e-09 1.383e-09 -8.817 -8.859 -0.043	CaHCO3+ 2.963e-07 2.376e-07 -6.528 -6.624 -0.096	CaSO4(2) 3.070e-08 1.371e-08 -7.513 -7.863 -0.350
CaCO3 1.459e-09 1.462e-09 -8.842 -8.841 0.001	CaCl+ 3.508e-08 2.813e-08 -7.455 -7.551 -0.096	CaCl+ 7.542e-09 6.166e-09 -8.122 -8.210 -0.088
CaOH+ 3.083e-10 2.795e-10 -9.511 -9.554 -0.043	CaCO3 1.034e-09 1.052e-09 -8.986 -8.979 0.007	CaCO3 5.060e-10 5.125e-10 -9.296 -9.290 0.006
CaHCO3(2) 4.668e-11 3.154e-11 -10.331 -10.501 -0.170	CaOH+ 2.190e-10 1.795e-10 -9.659 -9.755 -0.096	CaOH+ 9.535e-11 7.796e-11 -10.021 -10.108 -0.088
CaHCO3(2) 2.519e-11 1.702e-11 -10.599 -10.769 -0.170	CaCl2 3.413e-11 3.472e-11 -10.467 -10.459 0.007	CaHCO3(2) 1.802e-11 8.048e-12 -10.744 -11.094 -0.350
CaOH(2) 3.075e-12 3.082e-12 -11.512 -11.511 0.001	CaHCO3(2) 1.073e-11 4.401e-12 -10.969 -11.353 -0.383	CaOH(2) 1.257e-11 1.273e-11 -10.901 -10.895 0.006
CaCl2 3.154e-13 3.161e-13 -12.501 -12.500 0.001	CaOH(2) 9.950e-14 1.012e-13 -13.002 -12.995 0.007	CaOH(2) 1.041e-13 1.054e-13 -12.983 -12.977 0.006
CaOH(2) 1.955e-17 1.773e-17 -16.709 -16.751 -0.043	CaCl2 7.143e-15 5.729e-15 -14.146 -14.242 -0.096	CaCl2 4.424e-15 3.617e-15 -14.354 -14.442 -0.088
CaHCO3+ 9.752e-18 8.842e-18 -17.011 -17.053 -0.043	CaOH(3) 6.676e-20 5.282e-20 -19.170 -19.265 -0.096	CaOH(3) 1.950e-19 1.594e-19 -18.710 -18.797 -0.088
CaOH(2) 9.752e-18 8.842e-18 -17.011 -17.053 -0.043	CaOH(2) 5.588e-27 2.312e-27 -26.253 -26.636 -0.383	CaOH(2) 4.287e-26 1.951e-26 -25.368 -25.718 -0.350
CaOH(2) 9.752e-18 8.842e-18 -17.011 -17.053 -0.043	Cl 3.903e-04	Cl 6.324e-04
Cl 6.491e-05	Cl- 3.902e-04 3.081e-04 -3.409 -3.511 -0.103	Cl- 6.324e-04 5.111e-04 -3.199 -3.292 -0.092
Cl- 6.491e-05 5.875e-05 -4.188 -4.231 -0.043	Cl- 3.508e-08 2.813e-08 -7.455 -7.551 -0.096	Cl- 7.542e-09 6.166e-09 -8.122 -8.210 -0.088
Cl+ 1.525e-09 1.383e-09 -8.817 -8.859 -0.043	MnCl+ 1.068e-09 8.563e-10 -8.972 -9.067 -0.096	MnCl+ 2.435e-09 1.991e-09 -8.614 -8.701 -0.088
MnCl+ 3.154e-13 3.161e-13 -12.501 -12.500 0.001	CaCl2 3.413e-11 3.472e-11 -10.467 -10.459 0.007	CaCl2 1.257e-11 1.273e-11 -10.901 -10.895 0.006
CaCl2 3.154e-13 3.161e-13 -12.501 -12.500 0.001	CaCl2 3.413e-11 3.472e-11 -10.467 -10.459 0.007	CaCl2 1.257e-11 1.273e-11 -10.901 -10.895 0.006
ZnCl+ 6.737e-15 5.779e-15 -14.196 -14.238 -0.043	FeCl+2 1.303e-13 5.391e-14 -12.885 -13.268 -0.383	MnCl2 4.384e-13 4.441e-13 -12.538 -12.533 0.006
MnCl+ 9.048e-16 9.086e-16 -15.017 -15.042 0.001	CaCl2 1.132e-13 1.152e-13 -12.947 -12.939 0.007	CaHCO3+ 3.698e-14 3.017e-14 -14.233 -14.520 -0.350
CaCl2 1.525e-09 1.383e-09 -8.817 -8.859 -0.043	ZnCl+ 5.841e-14 4.684e-14 -13.254 -13.259 0.006	CaCl2 4.424e-15 3.617e-15 -14.354 -14.442 -0.088
CaCO3 1.459e-09 1.462e-09 -8.842 -8.841 0.001	CaCl2 1.430e-10 1.455e-10 -9.845 -9.837 0.007	CaCl2 1.257e-11 1.273e-11 -10.901 -10.895 0.006
CaCO3 1.459e-09 1.462e-09 -8.842 -8.841 0.001	CaCl2 1.430e-10 1.455e-10 -9.845 -9.837 0.007	CaCl2 1.257e-11 1.273e-11 -10.901 -10.895 0.006
FeCl+2 1.728e-20 1.167e-20 -19.763 -19.933 -0.170	FeCl+2 1.728e-20 1.167e-20 -19.763 -19.933 -0.170	MnCl+ 7.646e-17 6.251e-17 -16.117 -16.204 -0.088
MnCl+ 1.618e-20 1.467e-20 -19.791 -19.833 -0.043	ZnCl2 1.422e-17 1.447e-17 -16.847 -16.840 0.007	ZnCl2 1.541e-17 1.561e-17 -16.812 -16.807 0.006
ZnCl+ 2.142e-23 1.945e-23 -22.669 -22.712 -0.043	MnCl2 1.210e-17 9.742e-18 -16.914 -17.010 -0.096	FeCl+2 2.047e-17 1.615e-17 -16.889 -16.876 -0.088
FeCl+2 1.728e-20 1.167e-20 -19.763 -19.933 -0.170	ZnCl+ 5.841e-14 4.684e-14 -13.254 -13.259 0.006	FeCl+2 2.047e-17 1.615e-17 -16.889 -16.876 -0.088
FeCl+2 1.728e-20 1.167e-20 -19.763 -19.933 -0.170	FeCl3 3.174e-21 3.228e-21 -20.498 -20.491 0.007	FeCl3 8.443e-24 8.551e-24 -23.074 -23.068 0.006
ZnCl+2 7.299e-28 4.932e-28 -27.137 -27.307 -0.170	FeCl+2 1.604e-24 6.638e-25 -25.795 -24.178 -0.383	ZnCl+2 4.563e-24 2.038e-24 -23.341 -23.691 -0.350
ZnCl+2 7.299e-28 4.932e-28 -27.137 -27.307 -0.170	Ca(1) 8.829e-10	Ca(1) 3.218e-10
Ca(1) 4.621e-12	Ca+ 8.829e-10 6.835e-10 -9.054 -9.165 -0.111	Ca+ 3.218e-10 2.560e-10 -9.492 -9.592 -0.099
Ca+ 4.621e-12 4.169e-12 -11.335 -11.380 -0.045	Cu(2) 6.060e-08	Cu(2) 3.757e-08
Cu(2) 5.380e-09		

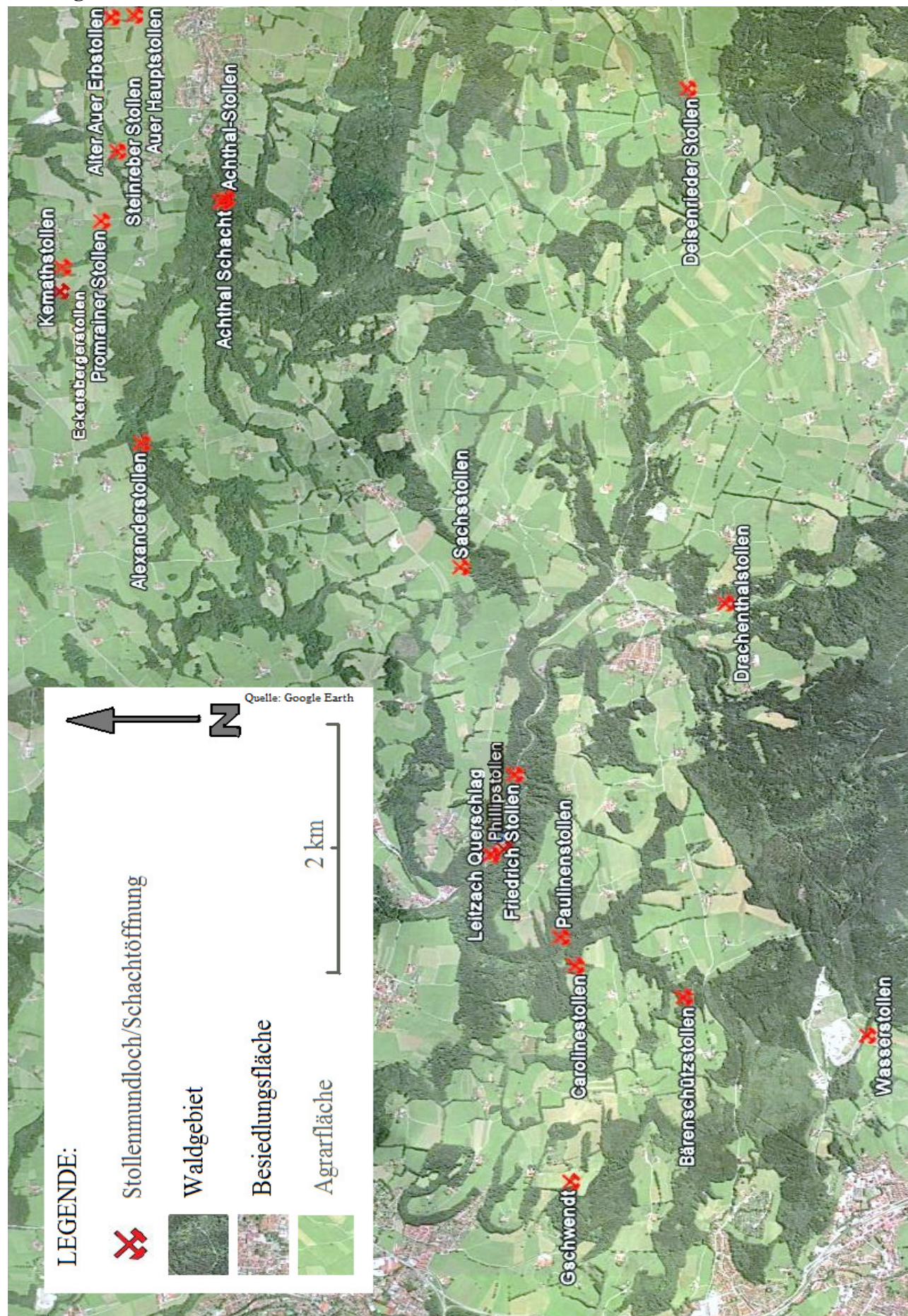
		<p>Mg 8.230e-04</p> <p>Mg+2 7.763e-04 5.341e-04 -3.110 -3.272 -0.162</p> <p>MgHCO3+ 2.958e-05 2.682e-05 -4.529 -4.572 -0.043</p> <p>MgSO4 1.422e-05 1.425e-05 -4.847 -4.846 0.001</p> <p>MgCO3 2.685e-06 2.691e-06 -5.571 -5.570 0.001</p> <p>MgF+ 2.556e-07 2.318e-07 -6.592 -6.635 -0.043</p> <p>MgOH+ 2.026e-08 1.837e-08 -7.693 -7.736 -0.043</p> <p>Mn(2) 3.642e-07</p> <p>Mn+2 2.146e-07 1.478e-07 -6.668 -6.830 -0.162</p> <p>MnCO3 8.102e-08 8.120e-08 -7.091 -7.090 0.001</p> <p>MnHCO3+ 6.511e-08 5.903e-08 -7.186 -7.229 -0.043</p> <p>MnSO4 3.381e-09 3.388e-09 -8.471 -8.470 0.001</p> <p>MnOH+ 4.676e-11 4.239e-11 -10.330 -10.373 -0.043</p> <p>MnCl+ 3.900e-11 3.536e-11 -10.409 -10.451 -0.043</p> <p>MnF+ 1.039e-11 9.422e-12 -10.983 -11.026 -0.043</p> <p>Mn(NO3)2 3.887e-14 3.895e-14 -13.410 -13.409 0.001</p> <p>MnCl2 9.048e-16 9.068e-16 -15.043 -15.042 0.001</p> <p>MnCl3 1.618e-20 1.467e-20 -19.791 -19.833 -0.043</p> <p>Mn(3) 7.181e-30</p> <p>Mn+3 7.181e-30 2.973e-30 -29.144 -29.527 -0.383</p> <p>N(5) 2.789e-04</p> <p>NO3 2.789e-04 2.520e-04 -3.555 -3.599 -0.044</p> <p>Mn(NO3)2 2.887e-14 3.895e-14 -13.410 -13.409 0.001</p> <p>Na 1.401e-04</p> <p>Na+ 1.397e-04 1.268e-04 -3.855 -3.897 -0.042</p> <p>NaHCO3 3.189e-07 3.196e-07 -6.496 -6.495 0.001</p> <p>NaSO4 1.147e-07 1.040e-07 -6.941 -6.983 -0.043</p> <p>NaCO3 7.013e-09 6.358e-09 -8.154 -8.197 -0.043</p> <p>NaF 6.710e-10 6.272e-10 -9.173 -9.172 0.001</p> <p>NaOH 4.286e-11 4.295e-11 -10.368 -10.367 0.001</p> <p>O(0) 0.000e+00</p> <p>O2 0.000e+00 0.000e+00 -45.439 -45.438 0.001</p> <p>S(6) 3.334e-04</p> <p>SO4-2 2.706e-04 1.842e-04 -3.568 -3.735 -0.167</p> <p>CaSO4 4.823e-05 4.833e-05 -4.317 -4.316 0.001</p> <p>MgSO4 1.422e-05 1.425e-05 -4.847 -4.846 0.001</p> <p>BaSO4 1.900e-07 1.904e-07 -6.721 -6.720 0.001</p> <p>NaSO4 1.147e-07 1.040e-07 -6.941 -6.983 -0.043</p> <p>KSO4 1.907e-08 1.729e-08 -7.720 -7.762 -0.043</p> <p>CaSO4 1.244e-08 1.245e-08 -7.906 -7.905 0.001</p> <p>MnSO4 3.381e-09 3.388e-09 -8.471 -8.470 0.001</p> <p>HSO4 2.703e-10 2.451e-10 -9.568 -9.611 -0.043</p> <p>CaSO4(2-2) 4.167e-11 2.816e-11 -10.380 -10.550 -0.170</p> <p>CaHSO4+ 5.089e-12 4.614e-12 -11.293 -11.336 -0.043</p> <p>CaSO4 3.121e-12 3.127e-12 -11.506 -11.505 0.001</p> <p>ZnSO4 3.111e-12 3.118e-12 -11.507 -11.506 0.001</p> <p>ZnSO4(2-2) 7.980e-15 5.392e-15 -14.098 -14.268 -0.170</p> <p>FeSO4+ 1.753e-17 1.590e-17 -16.756 -16.799 -0.043</p> <p>FeSO4(2-) 6.570e-20 5.956e-20 -19.182 -19.225 -0.043</p> <p>FeHSO4(2-) 1.304e-24 8.813e-25 -23.885 -24.055 -0.170</p> <p>Zn 3.214e-10</p> <p>Zn+2 1.224e-10 8.337e-11 -9.912 -10.079 -0.167</p> <p>ZnCO3 1.148e-10 1.151e-10 -9.940 -9.939 0.001</p> <p>ZnHCO3+ 5.190e-11 4.705e-11 -10.285 -10.327 -0.043</p> <p>ZnCO3(2-2) 2.519e-11 1.702e-11 -10.599 -10.769 -0.170</p> <p>ZnSO4 3.111e-12 3.118e-12 -11.507 -11.506 0.001</p> <p>ZnOH(2) 2.754e-12 2.760e-12 -11.560 -11.559 0.001</p> <p>ZnOH+ 1.251e-12 1.134e-12 -11.903 -11.945 -0.043</p> <p>ZnSO4(2-2) 7.980e-15 5.392e-15 -14.098 -14.268 -0.170</p> <p>ZnCl+ 6.373e-15 5.779e-15 -14.196 -14.238 -0.043</p> <p>ZnOH(3-) 4.936e-16 4.475e-16 -15.307 -15.349 -0.043</p> <p>ZnCl2 3.290e-19 3.297e-19 -18.483 -18.482 0.001</p> <p>ZnOH(4-2) 5.383e-21 3.637e-21 -20.269 -20.439 -0.170</p> <p>ZnCl3 2.143e-23 1.943e-23 -22.669 -22.712 -0.043</p> <p>ZnCl4-2 7.299e-28 4.932e-28 -27.137 -27.307 -0.170</p>
		<p>-----Saturation indices-----</p> <p>Phase SI log IAP log KT</p> <p>Anhydrite -2.20 -6.54 -4.34 CaSO4</p> <p>Aragonite 0.28 -7.97 -8.24 CaCO3</p> <p>Barite 0.88 -9.42 -10.30 BaSO4</p> <p>Calcite 0.44 -7.97 -8.40 CaCO3</p> <p>Ca(OH)2 -4.81 8.84 13.65 Ca(OH)2</p> <p>CaSO4 -10.89 -10.32 0.58 CaSO4</p> <p>CH4(g) -67.70 -70.38 -72.68 CH4</p> <p>CO2(g) -2.34 -3.57 -1.23 CO2</p> <p>Dolomite 0.26 -16.40 -16.66 CaMg(CO3)2</p> <p>Fe(OH)3(a) 1.31 6.21 4.89 Fe(OH)3</p> <p>Fluorite -2.04 -12.88 -10.84 CaF2</p> <p>Goethite 6.54 6.21 -0.33 FeOOH</p> <p>Gypsum -1.94 -6.54 -4.60 CaSO4.2H2O</p> <p>H2(g) -23.35 22.72 46.07 H2</p> <p>H2O(g) -1.99 -0.00 1.99 H2O</p> <p>Halite -9.67 8.13 1.54 NaCl</p> <p>Hausmannite -16.47 49.19 65.66 Mn3O4</p> <p>Hematite 15.00 12.41 -2.59 Fe2O3</p> <p>Jarosite-K -8.94 -16.71 -7.77 KFe3(SO4)2(OH)6</p> <p>Margarite -5.04 20.30 25.34 MnOOH</p> <p>O2(g) -42.70 -45.44 -2.74 O2</p> <p>Olavite 0.36 -11.74 -12.10 CaCO3</p> <p>Pyrochroite -6.61 8.59 15.20 Mn(OH)2</p> <p>Pyrolusite -12.36 32.01 44.37 MnO2.H2O</p> <p>Rhodochroite -0.93 -11.99 -11.06 MnCO3</p> <p>Smithsonite -5.44 -15.24 -9.80 ZnCO3</p> <p>Witherite -2.19 -10.85 -8.65 BaCO3</p> <p>Zn(OH)2(e) -6.16 5.34 11.50 Zn(OH)2</p>
		<p>Mg 4.850e-03</p> <p>Mg+2 2.961e-03 1.321e-03 -2.529 -2.879 -0.351</p> <p>MgSO4 1.742e-03 1.772e-03 -2.759 -2.751 0.007</p> <p>MgHCO3+ 1.411e-04 1.131e-04 -3.851 -3.946 -0.096</p> <p>MgF+ 2.679e-06 2.202e-06 -5.391 -5.486 -0.096</p> <p>MgCO3 1.408e-06 1.432e-06 -5.851 -5.844 0.007</p> <p>MgOH+ 1.070e-08 8.580e-09 -7.971 -8.067 -0.096</p> <p>Mn(2) 2.925e-06</p> <p>Mn+2 1.544e-06 6.822e-07 -5.811 -6.166 -0.355</p> <p>MnSO4 7.341e-07 7.467e-07 -6.134 -6.127 0.007</p> <p>MnHCO3+ 5.745e-07 4.608e-07 -6.241 -6.336 -0.096</p> <p>MnCO3 7.114e-08 7.235e-08 -7.148 -7.141 0.007</p> <p>MnCl+ 1.068e-09 8.563e-10 -8.972 -9.067 -0.096</p> <p>MnF+ 2.679e-10 2.109e-10 -9.572 -9.668 -0.096</p> <p>MnOH+ 4.304e-11 3.452e-11 -10.366 -10.462 -0.096</p> <p>MnCl2 1.132e-13 1.152e-13 -12.946 -12.939 0.007</p> <p>MnCl3 1.219e-17 9.774e-18 -16.914 -17.010 -0.096</p> <p>Mn(3) 3.132e-28</p> <p>Mn+3 3.132e-28 4.301e-29 -27.504 -28.366 -0.862</p> <p>Na 2.709e-02</p> <p>Na+ 2.607e-02 2.096e-02 -1.584 -1.679 -0.095</p> <p>NaSO4 9.260e-04 7.427e-04 -3.033 -3.129 -0.096</p> <p>NaHCO3 8.783e-05 8.933e-05 -4.056 -4.049 0.007</p> <p>NaF 5.399e-07 5.491e-07 -6.268 -6.260 0.007</p> <p>NaCO3- 3.753e-07 3.010e-07 -6.426 -6.521 -0.096</p> <p>NaOH 6.509e-10 6.620e-10 -9.187 -9.179 0.007</p> <p>O(0) 0.000e+00</p> <p>O2 0.000e+00 0.000e+00 -46.975 -46.968 0.007</p> <p>S(6) 2.441e-02</p> <p>SO4-2 1.815e-02 7.575e-03 -1.741 -2.121 -0.379</p> <p>CaSO4 3.553e-03 3.613e-03 -2.449 -2.442 0.007</p> <p>MgSO4 1.742e-03 1.772e-03 -2.759 -2.751 0.007</p> <p>NaSO4 9.260e-04 7.427e-04 -3.033 -3.129 -0.096</p> <p>KSO4 3.276e-05 2.627e-05 -4.485 -4.581 -0.096</p> <p>CaSO4 1.993e-06 2.027e-06 -5.701 -5.693 0.007</p> <p>BaSO4 9.721e-07 9.867e-07 -6.012 -6.005 0.007</p> <p>MnSO4 7.341e-07 7.467e-07 -6.134 -6.127 0.007</p> <p>CaSO4(2-2) 4.348e-07 1.799e-07 -6.362 -6.745 -0.383</p> <p>HSO4 1.541e-07 1.256e-07 -6.812 -6.908 -0.096</p> <p>CaSO4 2.034e-08 2.068e-08 -7.692 -7.684 0.007</p> <p>CaHSO4+ 4.904e-09 3.933e-09 -8.309 -8.405 -0.096</p> <p>FeSO4+ 6.658e-10 5.340e-10 -9.177 -9.272 -0.096</p> <p>ZnSO4 1.466e-10 1.491e-10 -9.834 -9.827 0.007</p> <p>FeSO4(2-) 1.058e-10 8.862e-11 -9.976 -10.072 -0.096</p> <p>ZnSO4(2-2) 2.412e-11 9.980e-12 -10.618 -11.001 -0.383</p> <p>FeHSO4(2-) 7.381e-16 3.054e-16 -15.132 -15.515 -0.383</p> <p>Zn 5.224e-10</p> <p>Zn+2 2.172e-10 9.128e-11 -9.663 -10.040 -0.377</p> <p>ZnSO4 1.466e-10 1.491e-10 -9.834 -9.827 0.007</p> <p>ZnHCO3+ 1.086e-10 8.709e-11 -9.964 -10.060 -0.096</p> <p>ZnSO4(2-2) 2.412e-11 9.980e-12 -10.618 -11.001 -0.383</p> <p>ZnCO3 2.723e-11 2.426e-11 -10.621 -10.614 0.007</p> <p>ZnCO3(2-2) 1.677e-12 6.941e-13 -11.775 -12.159 -0.383</p> <p>ZnOH+ 2.613e-13 2.095e-13 -12.583 -12.679 -0.096</p> <p>ZnCl+ 5.841e-14 4.684e-14 -13.234 -13.329 -0.096</p> <p>ZnOH(2) 2.582e-14 2.626e-14 -13.588 -13.581 0.007</p> <p>ZnCl2 1.422e-17 1.447e-17 -16.847 -16.840 0.007</p> <p>ZnOH(3-) 4.949e-19 3.969e-19 -18.306 -18.401 -0.096</p> <p>ZnCl3 5.842e-21 4.685e-21 -20.233 -20.329 -0.096</p> <p>ZnCl4-2 1.604e-24 6.638e-25 -23.795 -24.178 -0.383</p> <p>ZnOH(4-2) 7.267e-25 3.007e-25 -24.139 -24.522 -0.383</p>
		<p>-----Saturation indices-----</p> <p>Phase SI log IAP log KT</p> <p>Anhydrite -0.36 -4.70 -4.33 CaSO4</p> <p>Aragonite -0.18 -8.45 -8.28 CaCO3</p> <p>Barite 1.45 -8.70 -10.15 BaSO4</p> <p>Calcite -0.02 -8.45 -8.43 CaCO3</p> <p>Ca(OH)2 -6.29 7.36 13.65 Ca(OH)2</p> <p>CaSO4 -8.42 -8.12 0.29 CaSO4</p> <p>CH4(g) -59.22 -61.97 -2.75 CH4</p> <p>CO2(g) -1.04 -2.38 -1.33 CO2</p> <p>Dolomite -0.37 -17.21 -16.84 CaMg(CO3)2</p> <p>Fe(OH)3(a) 4.06 8.95 4.89 Fe(OH)3</p> <p>Fluorite -0.53 -11.26 -10.73 CaF2</p> <p>Goethite 9.56 8.95 -0.61 FeOOH</p> <p>Gypsum -0.11 -4.70 -4.59 CaSO4.2H2O</p> <p>H2(g) -21.30 23.48 44.79 H2</p> <p>H2O(g) -1.79 -0.00 1.79 H2O</p> <p>Halite -6.75 -5.19 1.56 NaCl</p> <p>Hausmannite -20.78 42.94 63.72 Mn3O4</p> <p>Hematite 21.09 17.90 -3.18 Fe2O3</p> <p>Jarosite-K 7.72 -0.65 -8.37 KFe3(SO4)2(OH)6</p> <p>Margarite -7.47 17.87 25.34 MnOOH</p> <p>O2(g) -44.16 -46.97 -2.81 O2</p> <p>Olavite 0.22 -11.88 -12.10 CaCO3</p> <p>Pyrochroite -8.01 7.19 15.20 Mn(OH)2</p> <p>Pyrolusite -14.57 28.55 43.12 MnO2.H2O</p> <p>Rhodochroite -0.95 -12.04 -11.09 MnCO3</p> <p>Smithsonite -6.03 -15.91 -9.88 ZnCO3</p> <p>Witherite -3.86 -12.46 -8.60 BaCO3</p> <p>Zn(OH)2(e) -8.18 3.32 11.50 Zn(OH)2</p>
		<p>Mg 3.830e-03</p> <p>Mg+2 2.427e-03 1.157e-03 -2.615 -2.937 -0.322</p> <p>MgSO4 1.245e-03 1.261e-03 -2.905 -2.899 0.006</p> <p>MgHCO3+ 1.517e-04 1.240e-04 -3.819 -3.907 -0.088</p> <p>MgCO3 4.771e-06 4.832e-06 -5.321 -5.316 0.006</p> <p>MgF+ 2.198e-06 1.797e-06 -5.658 -5.745 -0.088</p> <p>MgOH+ 2.234e-08 2.643e-08 -7.490 -7.578 -0.088</p> <p>Mn(2) 4.200e-06</p> <p>Mn+2 2.017e-06 9.561e-07 -5.695 -6.019 -0.324</p> <p>MnHCO3+ 9.832e-07 8.038e-07 -6.007 -6.095 -0.088</p> <p>MnSO4 8.255e-07 8.362e-07 -6.083 -6.078 0.006</p> <p>MnCO3 3.723e-07 3.771e-07 -6.429 -6.424 0.006</p> <p>MnCl+ 2.435e-09 1.991e-09 -8.614 -8.701 -0.088</p> <p>MnF+ 2.217e-10 1.812e-10 -9.654 -9.742 -0.088</p> <p>MnOH+ 2.038e-10 1.666e-10 -9.691 -9.778 -0.088</p> <p>MnCl2 4.384e-13 4.441e-13 -12.358 -12.353 0.006</p> <p>Mn(NO3)2 1.419e-15 1.438e-15 -14.848 -14.842 0.006</p> <p>MnCl3 7.646e-17 6.251e-17 -16.117 -16.204 -0.088</p> <p>Mn(3) 5.288e-28</p> <p>Mn+3 5.288e-28 8.624e-29 -27.277 -28.064 -0.788</p> <p>N(5) 2.403e-05</p> <p>NO3 2.403e-05 1.925e-05 -4.619 -4.716 -0.096</p> <p>Mn(NO3)2 1.419e-15 1.438e-15 -14.848 -14.842 0.006</p> <p>Na 1.535e-02</p> <p>Na+ 1.488e-02 1.219e-02 -1.827 -1.914 -0.086</p> <p>NaSO4 4.094e-04 3.346e-04 -3.388 -3.475 -0.088</p> <p>NaHCO3 6.386e-05 6.648e-05 -4.195 -4.189 0.006</p> <p>NaCO3 9.015e-07 7.369e-07 -6.045 -6.133 -0.088</p> <p>NaF 1.898e-07 1.922e-07 -6.722 -6.716 0.006</p> <p>NaOH 1.072e-09 1.086e-09 -8.970 -8.964 0.006</p> <p>O(0) 0.000e+00</p> <p>O2 0.000e+00 0.000e+00 -44.360 -44.355 0.006</p> <p>S(6) 1.713e-02</p> <p>SO4-2 1.276e-02 5.776e-03 -1.894 -2.238 -0.344</p> <p>CaSO4 2.697e-03 2.732e-03 -2.569 -2.564 0.006</p> <p>MgSO4 1.245e-03 1.261e-03 -2.905 -2.899 0.006</p> <p>NaSO4 4.094e-04 3.346e-04 -3.388 -3.475 -0.088</p> <p>KSO4 1.434e-05 1.173e-05 -4.843 -4.931 -0.088</p> <p>CaSO4 1.218e-06 1.233e-06 -5.914 -5.909 0.006</p> <p>MnSO4 8.255e-07 8.362e-07 -6.083 -6.078 0.006</p> <p>CaSO4 2.030e-07 2.056e-07 -6.693 -6.687 0.006</p> <p>HSO4 4.285e-08 3.503e-08 -7.368 -7.456 -0.088</p> <p>CaSO4(2-2) 3.070e-08 1.371e-08 -7.513 -7.863 -0.350</p> <p>CaSO4 5.796e-09 5.871e-09 -8.237 -8.231 0.006</p> <p>CaHSO4+ 1.321e-09 1.080e-09 -8.879 -8.967 -0.088</p> <p>ZnSO4 3.985e-11 4.036e-11 -10.400 -10.394 0.006</p> <p>ZnSO4(2-2) 4.528e-12 2.022e-12 -11.344 -11.694 -0.350</p> <p>FeSO4+ 3.053e-13 2.496e-13 -12.515 -12.603 -0.088</p> <p>FeSO4(2-) 3.733e-14 3.052e-14 -13.428 -13.515 -0.088</p> <p>FeHSO4(2-) 1.125e-19 5.024e-20 -18.949 -19.299 -0.350</p> <p>Zn 1.995e-10</p> <p>Zn+2 6.993e-11 3.818e-11 -10.155 -10.497 -0.342</p> <p>ZnHCO3+ 4.620e-11 3.776e-11 -10.335 -10.423 -0.088</p> <p>ZnSO4 3.985e-11 4.036e-11 -10.400 -10.394 0.006</p> <p>ZnCO3 3.111e-11 3.151e-11 -10.507 -10.502 0.006</p> <p>ZnCO3(2-2) 7.491e-12 3.345e-12 -11.125 -11.476 -0.350</p> <p>ZnSO4(2-2) 4.528e-12 2.022e-12 -11.344 -11.694 -0.350</p> <p>ZnOH+ 3.033e-13 2.479e-13 -12.518 -12.606 -0.088</p> <p>ZnOH(2) 7.181e-14 7.273e-14 -13.144 -13.138 0.006</p> <p>ZnCl+ 3.690e-14 3.017e-14 -13.433 -13.520 -0.088</p> <p>ZnCl2 1.541e-17 1.561e-17 -16.812 -16.807 0.006</p> <p>ZnOH(3-) 3.792e-18 3.100e-18 -17.421 -17.509 -0.088</p> <p>ZnCl3 1.041e-20 8.507e-21 -19.983 -20.070 -0.088</p> <p>ZnOH(4-2) 1.482e-23 6.621e-24 -22.829 -23.179 -0.350</p> <p>ZnCl4-2 4.563e-24 2.038e-24 -23.341 -23.691 -0.350</p>

Initial solution 5. ESB-1904-MSH					
-----Solution composition-----					
Elements	Molality	Moles			
Ba	1.605e-06	1.605e-06			
C	2.548e-03	2.548e-03			
Ca	5.433e-03	5.433e-03			
Cd	4.458e-07	4.458e-07			
Cl	7.052e-05	7.052e-05			
Cu	4.131e-09	4.131e-09			
F	4.747e-05	4.747e-05			
Fe(3)	1.077e-06	1.077e-06			
K	4.997e-03	4.997e-03			
Mg	4.200e-03	4.200e-03			
Mn	3.648e-07	3.648e-07			
N(5)	4.689e-04	4.689e-04			
Na	3.639e-03	3.639e-03			
S(6)	1.315e-02	1.315e-02			
Zn	3.986e-10	3.986e-10			
-----Description of solution-----					
pH = 8.340					
pe = 4.000					
Activity of water = 0.999					
Ionic strength = 3.938e-02					
Mass of water (kg) = 1.000e+00					
Total alkalinity (eq/kg) = 2.605e-03					
Total CO2 (mol/kg) = 2.548e-03					
Temperature (deg C) = 10.200					
Electrical balance (eq) = -1.591e-03					
Percent error, 100*(Ca+An)/(Ca+An) = -3.52					
Iterations = 10					
Total H = 1.110149e+02					
Total O = 5.556786e+01					
-----Distribution of species-----					
Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	7.837e-07	6.511e-07	-6.106	-6.186	-0.081
H+	5.277e-09	4.571e-09	-8.278	-8.340	-0.062
H2O	5.551e+01	9.995e-01	1.744	-0.000	0.000
Ba	1.605e-06				
BaSO4	8.922e-07	9.004e-07	-6.050	-6.046	0.004
Ba+2	7.059e-07	3.550e-07	-6.151	-6.450	-0.298
BaHCO3+	5.067e-09	4.249e-09	-8.295	-8.372	-0.077
BaCO3	1.922e-09	1.939e-09	-8.716	-8.712	0.004
BaOH+	3.137e-12	2.631e-12	-11.503	-11.580	-0.077
C(-4)	0.000e+00				
CH4	0.000e+00	0.000e+00	-76.842	-76.838	0.004
C(4)	2.548e-03				
HCO3-	2.354e-03	1.989e-03	-2.628	-2.701	-0.073
CaHCO3+	4.171e-05	3.524e-05	-4.380	-4.453	-0.073
MgHCO3+	4.070e-05	3.412e-05	-4.390	-4.467	-0.077
CaCO3	3.659e-05	3.693e-05	-4.437	-4.433	0.004
CO3-2	2.793e-05	1.423e-05	-4.554	-4.847	-0.293
CO2	2.608e-05	2.632e-05	-4.584	-4.580	0.004
MgCO3	1.639e-05	1.654e-05	-4.785	-4.781	0.004
NaHCO3	3.311e-06	3.341e-06	-5.480	-5.476	0.004
NaCO3-	4.304e-07	3.609e-07	-6.366	-6.443	-0.077
MnCO3	1.042e-07	1.051e-07	-6.982	-6.978	0.004
MnHCO3+	1.967e-08	1.649e-08	-7.706	-7.783	-0.077
CaHCO3+	9.282e-09	7.783e-09	-8.032	-8.109	-0.077
BaHCO3+	5.067e-09	4.249e-09	-8.295	-8.372	-0.077
BaCO3	1.922e-09	1.939e-09	-8.716	-8.712	0.004
CaCO3	1.386e-09	1.399e-09	-8.858	-8.854	0.004
ZnCO3	1.293e-10	1.305e-10	-9.888	-9.885	0.004
CaHCO3(2-2)	1.274e-10	6.296e-11	-9.895	-10.201	-0.306
ZnHCO3(2-2)	8.835e-11	3.970e-11	-10.095	-10.401	-0.306
ZnHCO3+	1.372e-11	1.150e-11	-10.863	-10.939	-0.077
Ca	5.433e-03				
Ca+2	3.714e-03	1.896e-03	-2.430	-2.722	-0.292
CaSO4	1.640e-03	1.655e-03	-2.785	-2.781	0.004
CaHCO3+	4.171e-05	3.524e-05	-4.380	-4.453	-0.073
CaCO3	3.659e-05	3.693e-05	-4.437	-4.433	0.004
CaF+	4.964e-07	4.162e-07	-6.304	-6.381	-0.077
CaOH+	8.206e-08	6.880e-08	-7.086	-7.162	-0.077
CaHSO4+	4.519e-11	3.789e-11	-10.345	-10.421	-0.077
Cd	4.458e-07				
Cd+2	2.504e-07	1.237e-07	-6.601	-6.908	-0.306
CdSO4	1.627e-07	1.641e-07	-6.789	-6.785	0.004
CdHSO4(2-2)	2.027e-08	1.002e-08	-7.693	-7.999	-0.306
CdHCO3+	9.282e-09	7.783e-09	-8.032	-8.109	-0.077
CaCO3	1.386e-09	1.399e-09	-8.858	-8.854	0.004
CdOH+	8.457e-10	7.091e-10	-9.073	-9.149	-0.077
CdCl+	7.848e-10	6.580e-10	-9.105	-9.182	-0.077
CdHCO3(2-2)	1.274e-10	6.296e-11	-9.895	-10.201	-0.306
CaH2O12	2.619e-11	2.642e-11	-10.582	-10.578	0.004
CaHCO3-	1.506e-13	1.520e-13	-12.822	-12.818	0.004
CaOH(3-)	7.732e-16	6.483e-16	-15.112	-15.188	-0.077
CdCl3-	5.306e-18	4.449e-18	-17.275	-17.352	-0.077
CdOH(4-2)	2.557e-21	1.263e-21	-20.592	-20.898	-0.306
Cl	7.052e-05				
Cl-	7.052e-05	5.866e-05	-4.152	-4.232	-0.080
CdCl+	7.848e-10	6.580e-10	-9.105	-9.182	-0.077
MnCl+	2.651e-11	2.232e-11	-10.577	-10.653	-0.077
CdCl2	1.506e-13	1.520e-13	-12.822	-12.818	0.004
ZnCl+	4.235e-15	3.650e-15	-14.364	-14.438	-0.077
MnCl2	5.640e-16	5.692e-16	-15.249	-15.245	0.004
CdCl3-	5.306e-18	4.449e-18	-17.275	-17.352	-0.077
ZnCl2	2.087e-19	2.106e-19	-18.680	-18.677	0.004
MnCl3-	1.097e-20	9.196e-21	-19.960	-20.036	-0.077
FeCl+2	6.061e-21	2.995e-21	-20.217	-20.524	-0.306
ZnCl3-	1.506e-23	1.263e-23	-22.822	-22.899	-0.077
FeCl2+	1.534e-24	1.286e-24	-23.814	-23.891	-0.077
ZnCl4-2	6.640e-28	3.281e-28	-27.178	-27.484	-0.306
FeCl3	7.475e-30	7.543e-30	-29.126	-29.122	0.004
Cu(1)	2.290e-13				
Cu+	2.290e-13	1.883e-13	-12.640	-12.725	-0.085
Cu(2)	4.131e-09				
CuOH(2)	4.108e-09	4.146e-09	-8.386	-8.382	0.004
CuOH+	1.087e-11	9.075e-12	-10.964	-11.042	-0.078
Cu+2	7.992e-12	4.150e-12	-11.097	-11.382	-0.285
CuSO4	3.816e-12	3.850e-12	-11.418	-11.415	0.004
CuOH(3-)	6.515e-16	5.462e-16	-13.186	-13.263	-0.077
CuOH(4-2)	4.822e-18	2.383e-18	-17.317	-17.623	-0.306
F	4.747e-05				
F-	4.362e-05	3.624e-05	-4.360	-4.441	-0.081
MgF+	3.292e-06	2.760e-06	-5.483	-5.559	-0.077
CaF+	4.964e-07	4.162e-07	-6.304	-6.381	-0.077
NaF	6.172e-08	6.228e-08	-7.210	-7.206	0.004
HF	1.902e-10	1.919e-10	-9.721	-9.717	0.004
MgF2	2.781e-11	2.332e-11	-10.559	-10.632	-0.077
HF2-	2.758e-14	2.313e-14	-13.559	-13.636	-0.077
FeF+2	2.537e-16	1.254e-16	-15.596	-15.902	-0.306
FeF2+	1.793e-16	1.503e-16	-15.746	-15.823	-0.077
FeF3	8.114e-18	8.188e-18	-17.091	-17.087	0.004
Fe(3)	1.077e-06				
FeOH(3)	8.878e-07	8.959e-07	-6.052	-6.048	0.004
FeOH(4)	1.140e-07	9.554e-08	-6.943	-7.020	-0.077
FeOH(2+)	7.479e-08	6.270e-08	-7.126	-7.203	-0.077
FeF+2	2.537e-16	1.254e-16	-15.596	-15.902	-0.306
FeF2+	1.793e-16	1.503e-16	-15.746	-15.823	-0.077
FeSO4-2	1.298e-16	1.089e-16	-15.867	-15.963	-0.077
FeSO4(2-2)	1.235e-17	1.134e-17	-16.869	-16.947	-0.077
Fe+3	1.010e-17	2.770e-18	-16.996	-17.558	-0.562
FeF3	8.114e-18	8.188e-18	-17.091	-17.087	0.004
FeCl+2	6.061e-21	2.995e-21	-20.217	-20.524	-0.306
FeOH(2+4)	2.099e-21	1.252e-22	-20.678	-21.302	-1.224
FeHSO4+2	2.814e-24	1.398e-24	-23.551	-23.857	-0.306
FeCl2+	1.534e-24	1.286e-24	-23.814	-23.891	-0.077
FeiOH(4+5)	5.651e-25	6.901e-27	-24.248	-26.161	-1.913
FeCl3	7.475e-30	7.543e-30	-29.126	-29.122	0.004
H(0)	3.042e-28				
H2	1.512e-28	1.535e-28	-27.818	-27.814	0.004
K	4.997e-03				
K+	4.866e-03	4.048e-03	-2.313	-2.393	-0.080
KSO4	1.308e-04	1.097e-04	-4.883	-4.960	-0.077
KOH	3.042e-09	3.099e-09	-8.517	-8.513	0.004

Initial solution 10. ESB-2704-B84					
-----Solution composition-----					
Elements	Molality	Moles			
Ba	1.607e-06	1.607e-06			
C	1.040e-02	1.040e-02			
Ca	1.010e-02	1.010e-02			
Cd	3.580e-06	3.580e-06			
Cl	2.767e-03	2.767e-03			
Cu	6.000e-08	6.000e-08			
F	3.169e-05	3.169e-05			
Fe(3)	1.671e-05	1.671e-05			
K	1.563e-03	1.563e-03			
Mg	4.677e-03	4.677e-03			
Mn	2.192e-06	2.192e-06			
N(5)	1.106e-04	1.106e-04			
Na	1.329e-02	1.329e-02			
S(6)	1.986e-02	1.986e-02			
Zn	5.219e-10	5.219e-10			
-----Description of solution-----					
pH = 7.240					
pe = 4.000					
Activity of water = 0.999					
Ionic strength = 6.167e-02					
Mass of water (kg) = 1.000e+00					
Total alkalinity (eq/kg) = 9.286e-03					
Total CO2 (mol/kg) = 1.040e-02					
Temperature (deg C) = 11.500					
Electrical balance (eq) = -7.104e-03					
Percent error, 100*(Ca+An)/(Ca+An) = -9.46					
Iterations = 9					
Total H = 1.110217e+02					
Total O = 5.561533e+01					
-----Distribution of species-----					
Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	7.238e-08	5.796e-08	-7.140	-7.237	-0.096
H+	6.786e-08	5.754e-08	-7.168	-7.240	-0.072
H2O	5.551e+01	9.990e-01	1.744	-0.000	0.000
Ba	1.607e-06				
BaSO4	9.291e-07	9.424e-07	-6.032	-6.026	0.006
Ba+2	6.616e-07	2.938e-07	-6.179	-6.532	-0.352
BaHCO3+	5.067e-09	4.326e-08	-7.788	-7.878	-0.090
BaCO3	4.845e-10	4.914e-10	-9.315	-9.309	0.006
BaOH+	2.126e-13	1.729e-13	-12.672	-12.762	-0.090
C(-4)	0.000e+00				
CH4	0.000e+00	0.000e+00	-66.584	-66.578	0.006
C(4)	1.040e-02				
HCO3-	8.777e-03	7.198e-03	-2.057	-2.143	-0.086
CO2	1.150e-03	1.166e-03	-2.939	-2.933	0.006
CaHCO3+	2.529e-04	2.074e-04	-3.597	-3.683	-0.086
MgHCO3+	1.423e-04	1.157e-04	-3.847	-3.937	-0.090
NaHCO3	4.185e-05	4.245e-05	-4.378	-4.372	0.006
CO3-2	1.721e-05	1.746e-05	-4.764	-4.758	0.006
CO3-2	9.384e-06	4.245e-06	-5.028	-5.372	-0.345
MgCO3	4.640e-06	4.707e-06	-5.333	-5.327	0.006
NaCO3-	4.998e-07	4.063e-07	-6.301	-6.391	-0.090
MnHCO3+	1.474e-07	3.393e-07	-6.379	-6.469	-0.090
CaHCO3+	2.093e-07	1.701e-07	-6.769	-6.769	-0.090
MnCO3	1.758e-08	1.610e-08	-7.711	-7.711	-0.090
BaHCO3+	1.631e-08	1.326e-08	-7.778	-7.787	-0.090
CaCO3	2.485e-09	2.520e-09	-8.605	-8.599	0.006
BaCO3	4.845e-10	4.914e-10	-9.315	-9.309	0.006
ZnHCO3+	9.864e-11	8.019e-11	-10.006	-10.096	-0.090
CaHCO3(2-2)	2.747e-11	6.296e-12	-10.111	-10.471	-0.360
ZnCO3	7.390e-11	7.495e-11	-10.131	-10.125	-0.090
CaHCO3(2-2)	1.558e-11	6.802e-12	-10.807	-11.167	-0.360
Ca	1.010e-02				
Ca+2	6.588e-03	2.977e-03	-2.184	-2.526	-0.432
CaSO4	3.284e-03	3.331e-03	-2.484	-2.477	0.006
CaHCO3+	2.529e-04	2.074e-04	-3.597	-3.683	-0.086
CaCO3	1.721e-05	1.746e-05	-4.764	-4.758	0.006
CaF+	5.316e-07	4.214e-07	-6.274	-6.364	-0.090
CaOH+	1.055e-08	8.579e-09	-7.977	-8.067	-0.090
CaHSO4+	1.195e-09	9.711e-10	-8.923	-9.013	-0.090
Cd	3.580e-06				

Mg	4.200e-03	Mg+2	2.936e-03 1.529e-03 -2.532 -2.816 -0.283	Mg	4.677e-03	Mg+2	3.059e-03 1.430e-03 -2.514 -2.845 -0.330	Mg	8.848e-04	Mg+2	8.299e-04 5.680e-04 -3.081 -3.246 -0.165
MgSO4	1.203e-03 1.214e-03 -2.920 -2.916 0.004	MgSO4	1.469e-03 1.490e-03 -2.833 -2.827 0.006	MgSO4	1.469e-03 1.490e-03 -2.833 -2.827 0.006	MgSO4	1.469e-03 1.490e-03 -2.833 -2.827 0.006	MgSO4	1.469e-03 1.490e-03 -2.833 -2.827 0.006	MgSO4	1.469e-03 1.490e-03 -2.833 -2.827 0.006
MgHCO3+	4.070e-05 3.412e-05 -4.390 -4.467 -0.077	MgHCO3+	4.070e-05 3.412e-05 -4.390 -4.467 -0.077	MgHCO3+	4.070e-05 3.412e-05 -4.390 -4.467 -0.077	MgHCO3+	4.070e-05 3.412e-05 -4.390 -4.467 -0.077	MgHCO3+	4.070e-05 3.412e-05 -4.390 -4.467 -0.077	MgHCO3+	4.070e-05 3.412e-05 -4.390 -4.467 -0.077
MgCO3	1.639e-05 1.654e-05 -4.785 -4.781 0.004	MgCO3	1.639e-05 1.654e-05 -4.785 -4.781 0.004	MgCO3	1.639e-05 1.654e-05 -4.785 -4.781 0.004	MgCO3	1.639e-05 1.654e-05 -4.785 -4.781 0.004	MgCO3	1.639e-05 1.654e-05 -4.785 -4.781 0.004	MgCO3	1.639e-05 1.654e-05 -4.785 -4.781 0.004
MgF+	3.292e-06 2.760e-06 -5.483 -5.559 -0.077	MgF+	3.292e-06 2.760e-06 -5.483 -5.559 -0.077	MgF+	3.292e-06 2.760e-06 -5.483 -5.559 -0.077	MgF+	3.292e-06 2.760e-06 -5.483 -5.559 -0.077	MgF+	3.292e-06 2.760e-06 -5.483 -5.559 -0.077	MgF+	3.292e-06 2.760e-06 -5.483 -5.559 -0.077
MgOH+	3.547e-07 2.974e-07 -6.450 -6.527 -0.077	MgOH+	3.547e-07 2.974e-07 -6.450 -6.527 -0.077	MgOH+	3.547e-07 2.974e-07 -6.450 -6.527 -0.077	MgOH+	3.547e-07 2.974e-07 -6.450 -6.527 -0.077	MgOH+	3.547e-07 2.974e-07 -6.450 -6.527 -0.077	MgOH+	3.547e-07 2.974e-07 -6.450 -6.527 -0.077
Mn(2)	3.648e-07	Mn(2)	3.648e-07	Mn(2)	3.648e-07	Mn(2)	3.648e-07	Mn(2)	3.648e-07	Mn(2)	3.648e-07
Mn+2	1.791e-07 9.300e-08 -6.747 -7.031 -0.285	Mn+2	1.791e-07 9.300e-08 -6.747 -7.031 -0.285	Mn+2	1.791e-07 9.300e-08 -6.747 -7.031 -0.285	Mn+2	1.791e-07 9.300e-08 -6.747 -7.031 -0.285	Mn+2	1.791e-07 9.300e-08 -6.747 -7.031 -0.285	Mn+2	1.791e-07 9.300e-08 -6.747 -7.031 -0.285
MnCO3	1.042e-07 1.051e-07 -6.982 -6.978 0.004	MnCO3	1.042e-07 1.051e-07 -6.982 -6.978 0.004	MnCO3	1.042e-07 1.051e-07 -6.982 -6.978 0.004	MnCO3	1.042e-07 1.051e-07 -6.982 -6.978 0.004	MnCO3	1.042e-07 1.051e-07 -6.982 -6.978 0.004	MnCO3	1.042e-07 1.051e-07 -6.982 -6.978 0.004
MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004	MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004	MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004	MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004	MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004	MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004
MnHCO3+	1.952e-08 1.649e-08 -7.706 -7.783 -0.077	MnHCO3+	1.952e-08 1.649e-08 -7.706 -7.783 -0.077	MnHCO3+	1.952e-08 1.649e-08 -7.706 -7.783 -0.077	MnHCO3+	1.952e-08 1.649e-08 -7.706 -7.783 -0.077	MnHCO3+	1.952e-08 1.649e-08 -7.706 -7.783 -0.077	MnHCO3+	1.952e-08 1.649e-08 -7.706 -7.783 -0.077
MnOH+	1.752e-10 1.469e-10 -9.757 -9.783 -0.077	MnOH+	1.752e-10 1.469e-10 -9.757 -9.783 -0.077	MnOH+	1.752e-10 1.469e-10 -9.757 -9.783 -0.077	MnOH+	1.752e-10 1.469e-10 -9.757 -9.783 -0.077	MnOH+	1.752e-10 1.469e-10 -9.757 -9.783 -0.077	MnOH+	1.752e-10 1.469e-10 -9.757 -9.783 -0.077
MnF+	2.781e-11 2.332e-11 -10.556 -10.632 -0.077	MnF+	2.781e-11 2.332e-11 -10.556 -10.632 -0.077	MnF+	2.781e-11 2.332e-11 -10.556 -10.632 -0.077	MnF+	2.781e-11 2.332e-11 -10.556 -10.632 -0.077	MnF+	2.781e-11 2.332e-11 -10.556 -10.632 -0.077	MnF+	2.781e-11 2.332e-11 -10.556 -10.632 -0.077
MnCl+	2.651e-11 2.232e-11 -10.577 -10.653 -0.077	MnCl+	2.651e-11 2.232e-11 -10.577 -10.653 -0.077	MnCl+	2.651e-11 2.232e-11 -10.577 -10.653 -0.077	MnCl+	2.651e-11 2.232e-11 -10.577 -10.653 -0.077	MnCl+	2.651e-11 2.232e-11 -10.577 -10.653 -0.077	MnCl+	2.651e-11 2.232e-11 -10.577 -10.653 -0.077
Mn(NO3)2	5.708e-16 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004	Mn(NO3)2	5.708e-16 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004	Mn(NO3)2	5.708e-16 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004	Mn(NO3)2	5.708e-16 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004	Mn(NO3)2	5.708e-16 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004	Mn(NO3)2	5.708e-16 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004
MnCl2	5.604e-16 5.692e-16 -15.249 -15.245 0.004	MnCl2	5.604e-16 5.692e-16 -15.249 -15.245 0.004	MnCl2	5.604e-16 5.692e-16 -15.249 -15.245 0.004	MnCl2	5.604e-16 5.692e-16 -15.249 -15.245 0.004	MnCl2	5.604e-16 5.692e-16 -15.249 -15.245 0.004	MnCl2	5.604e-16 5.692e-16 -15.249 -15.245 0.004
MnCl3	1.097e-20 9.196e-21 -19.960 -20.306 -0.077	MnCl3	1.097e-20 9.196e-21 -19.960 -20.306 -0.077	MnCl3	1.097e-20 9.196e-21 -19.960 -20.306 -0.077	MnCl3	1.097e-20 9.196e-21 -19.960 -20.306 -0.077	MnCl3	1.097e-20 9.196e-21 -19.960 -20.306 -0.077	MnCl3	1.097e-20 9.196e-21 -19.960 -20.306 -0.077
Mn(3)	1.444e-29	Mn(3)	1.444e-29	Mn(3)	1.444e-29	Mn(3)	1.444e-29	Mn(3)	1.444e-29	Mn(3)	1.444e-29
Mn+3	1.444e-29 2.956e-30 -28.841 -29.529 -0.689	Mn+3	1.444e-29 2.956e-30 -28.841 -29.529 -0.689	Mn+3	1.444e-29 2.956e-30 -28.841 -29.529 -0.689	Mn+3	1.444e-29 2.956e-30 -28.841 -29.529 -0.689	Mn+3	1.444e-29 2.956e-30 -28.841 -29.529 -0.689	Mn+3	1.444e-29 2.956e-30 -28.841 -29.529 -0.689
N(5)	4.689e-04	N(5)	4.689e-04	N(5)	4.689e-04	N(5)	4.689e-04	N(5)	4.689e-04	N(5)	4.689e-04
NO3-	4.689e-04 3.876e-04 -3.329 -3.412 -0.083	NO3-	4.689e-04 3.876e-04 -3.329 -3.412 -0.083	NO3-	4.689e-04 3.876e-04 -3.329 -3.412 -0.083	NO3-	4.689e-04 3.876e-04 -3.329 -3.412 -0.083	NO3-	4.689e-04 3.876e-04 -3.329 -3.412 -0.083	NO3-	4.689e-04 3.876e-04 -3.329 -3.412 -0.083
Mn(NO3)2	5.680e-14 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004	Mn(NO3)2	5.680e-14 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004	Mn(NO3)2	5.680e-14 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004	Mn(NO3)2	5.680e-14 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004	Mn(NO3)2	5.680e-14 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004	Mn(NO3)2	5.680e-14 5.760e-14 -13.244 -13.240 0.004
Na	3.639e-03	Na	3.639e-03	Na	3.639e-03	Na	3.639e-03	Na	3.639e-03	Na	3.639e-03
Na+	3.554e-03 2.987e-03 -2.449 -2.525 -0.076	Na+	3.554e-03 2.987e-03 -2.449 -2.525 -0.076	Na+	3.554e-03 2.987e-03 -2.449 -2.525 -0.076	Na+	3.554e-03 2.987e-03 -2.449 -2.525 -0.076	Na+	3.554e-03 2.987e-03 -2.449 -2.525 -0.076	Na+	3.554e-03 2.987e-03 -2.449 -2.525 -0.076
NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077	NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077	NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077	NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077	NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077	NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077
NaHCO3	3.311e-06 3.341e-06 -5.480 -5.476 0.004	NaHCO3	3.311e-06 3.341e-06 -5.480 -5.476 0.004	NaHCO3	3.311e-06 3.341e-06 -5.480 -5.476 0.004	NaHCO3	3.311e-06 3.341e-06 -5.480 -5.476 0.004	NaHCO3	3.311e-06 3.341e-06 -5.480 -5.476 0.004	NaHCO3	3.311e-06 3.341e-06 -5.480 -5.476 0.004
NaCO3	4.304e-07 3.690e-07 -6.366 -6.443 -0.077	NaCO3	4.304e-07 3.690e-07 -6.366 -6.443 -0.077	NaCO3	4.304e-07 3.690e-07 -6.366 -6.443 -0.077	NaCO3	4.304e-07 3.690e-07 -6.366 -6.443 -0.077	NaCO3	4.304e-07 3.690e-07 -6.366 -6.443 -0.077	NaCO3	4.304e-07 3.690e-07 -6.366 -6.443 -0.077
NaF	6.172e-08 6.228e-08 -7.210 -7.206 0.004	NaF	6.172e-08 6.228e-08 -7.210 -7.206 0.004	NaF	6.172e-08 6.228e-08 -7.210 -7.206 0.004	NaF	6.172e-08 6.228e-08 -7.210 -7.206 0.004	NaF	6.172e-08 6.228e-08 -7.210 -7.206 0.004	NaF	6.172e-08 6.228e-08 -7.210 -7.206 0.004
NaOH	4.276e-09 4.315e-09 -8.369 -8.365 0.004	NaOH	4.276e-09 4.315e-09 -8.369 -8.365 0.004	NaOH	4.276e-09 4.315e-09 -8.369 -8.365 0.004	NaOH	4.276e-09 4.315e-09 -8.369 -8.365 0.004	NaOH	4.276e-09 4.315e-09 -8.369 -8.365 0.004	NaOH	4.276e-09 4.315e-09 -8.369 -8.365 0.004
O(0)	0.000e+00	O(0)	0.000e+00	O(0)	0.000e+00	O(0)	0.000e+00	O(0)	0.000e+00	O(0)	0.000e+00
O2	0.000e+00 0.000e+00 -41.885 -41.881 0.004	O2	0.000e+00 0.000e+00 -41.885 -41.881 0.004	O2	0.000e+00 0.000e+00 -41.885 -41.881 0.004	O2	0.000e+00 0.000e+00 -41.885 -41.881 0.004	O2	0.000e+00 0.000e+00 -41.885 -41.881 0.004	O2	0.000e+00 0.000e+00 -41.885 -41.881 0.004
S(6)	1.315e-02	S(6)	1.315e-02	S(6)	1.315e-02	S(6)	1.315e-02	S(6)	1.315e-02	S(6)	1.315e-02
SO4-2	1.040e-02 5.006e-03 -1.996 -2.296 -0.300	SO4-2	1.040e-02 5.006e-03 -1.996 -2.296 -0.300	SO4-2	1.040e-02 5.006e-03 -1.996 -2.296 -0.300	SO4-2	1.040e-02 5.006e-03 -1.996 -2.296 -0.300	SO4-2	1.040e-02 5.006e-03 -1.996 -2.296 -0.300	SO4-2	1.040e-02 5.006e-03 -1.996 -2.296 -0.300
CaSO4	1.010e-03 1.655e-03 -2.785 -2.781 0.004	CaSO4	1.010e-03 1.655e-03 -2.785 -2.781 0.004	CaSO4	1.010e-03 1.655e-03 -2.785 -2.781 0.004	CaSO4	1.010e-03 1.655e-03 -2.785 -2.781 0.004	CaSO4	1.010e-03 1.655e-03 -2.785 -2.781 0.004	CaSO4	1.010e-03 1.655e-03 -2.785 -2.781 0.004
MgSO4	1.203e-03 1.214e-03 -2.920 -2.916 0.004	MgSO4	1.203e-03 1.214e-03 -2.920 -2.916 0.004	MgSO4	1.203e-03 1.214e-03 -2.920 -2.916 0.004	MgSO4	1.203e-03 1.214e-03 -2.920 -2.916 0.004	MgSO4	1.203e-03 1.214e-03 -2.920 -2.916 0.004	MgSO4	1.203e-03 1.214e-03 -2.920 -2.916 0.004
KSO4	1.308e-04 1.097e-04 -3.883 -3.960 -0.077	KSO4	1.308e-04 1.097e-04 -3.883 -3.960 -0.077	KSO4	1.308e-04 1.097e-04 -3.883 -3.960 -0.077	KSO4	1.308e-04 1.097e-04 -3.883 -3.960 -0.077	KSO4	1.308e-04 1.097e-04 -3.883 -3.960 -0.077	KSO4	1.308e-04 1.097e-04 -3.883 -3.960 -0.077
NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077	NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077	NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077	NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077	NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077	NaSO4	8.184e-05 6.862e-05 -4.087 -4.164 -0.077
BaSO4	8.922e-07 9.004e-07 -6.050 -6.046 0.004	BaSO4	8.922e-07 9.004e-07 -6.050 -6.046 0.004	BaSO4	8.922e-07 9.004e-07 -6.050 -6.046 0.004	BaSO4	8.922e-07 9.004e-07 -6.050 -6.046 0.004	BaSO4	8.922e-07 9.004e-07 -6.050 -6.046 0.004	BaSO4	8.922e-07 9.004e-07 -6.050 -6.046 0.004
CaSO4	1.627e-07 1.641e-07 -6.789 -6.785 0.004	CaSO4	1.627e-07 1.641e-07 -6.789 -6.785 0.004	CaSO4	1.627e-07 1.641e-07 -6.789 -6.785 0.004	CaSO4	1.627e-07 1.641e-07 -6.789 -6.785 0.004	CaSO4	1.627e-07 1.641e-07 -6.789 -6.785 0.004	CaSO4	1.627e-07 1.641e-07 -6.789 -6.785 0.004
MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004	MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004	MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004	MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004	MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004	MnSO4	6.161e-08 6.217e-08 -7.210 -7.206 0.004
Ca(SO4)2-2	2.027e-08 1.002e-08 -7.693 -7.999 -0.306	Ca(SO4)2-2	2.027e-08 1.002e-08 -7.693 -7.999 -0.306	Ca(SO4)2-2	2.027e-08 1.002e-08 -7.693 -7.999 -0.306	Ca(SO4)2-2	2.027e-08 1.002e-08 -7.693 -7.999 -0.306	Ca(SO4)2-2	2.027e-08 1.002e-08 -7.693 -7.999 -0.306	Ca(SO4)2-2	2.027e-08 1.002e-08 -7.693 -7.999 -0.306
HSO4-	1.983e-09 1.662e-09 -8.703 -8.779 -0.077	HSO4-	1.983e-09 1.662e-09 -8.703 -8.779 -0.077	HSO4-	1.983e-09 1.662e-09 -8.703 -8.779 -0.077	HSO4-	1.983e-09 1.662e-09 -8.703 -8.779 -0.077	HSO4-	1.983e-09 1.662e-09 -8.703 -8.779 -0.077	HSO4-	1.983e-09 1.662e-09 -8.703 -8.779 -0.077
ZnSO4	4.789e-11 4.833e-11 -10.320 -10.316 0.004	ZnSO4	4.789e-11 4.833e-11 -10.320 -10.316 0.004	ZnSO4	4.789e-11 4.833e-11 -10.320 -10.316 0.004	ZnSO4	4.789e-11 4.833e-11 -10.320 -10.316 0.004	ZnSO4	4.789e-11 4.833e-11 -10.320 -10.316 0.004	ZnSO4	4.789e-11 4.833e-11 -10.320 -10.316 0.004
CaHSO4+	4.519e-11 3.789e-11 -10.345 -10.421 -0.077	CaHSO4+	4.519e-11 3.789e-11 -10.345 -10.421 -0.077	CaHSO4+	4.519e-11 3.789e-11 -10.345 -10.421 -0.077	CaHSO4+	4.519e-11 3.789e-11 -10.345 -10.421 -0.077	CaHSO4+	4.519e-11 3.789e-11 -10.345 -10.421 -0.077	CaHSO4+	4.519e-11 3.789e-11 -10.345 -10.421 -0.077
ZnSO4-											

Anhang 3: Karte mit erfassten Stollenmundlöchern (süd)östlich von Miesbach

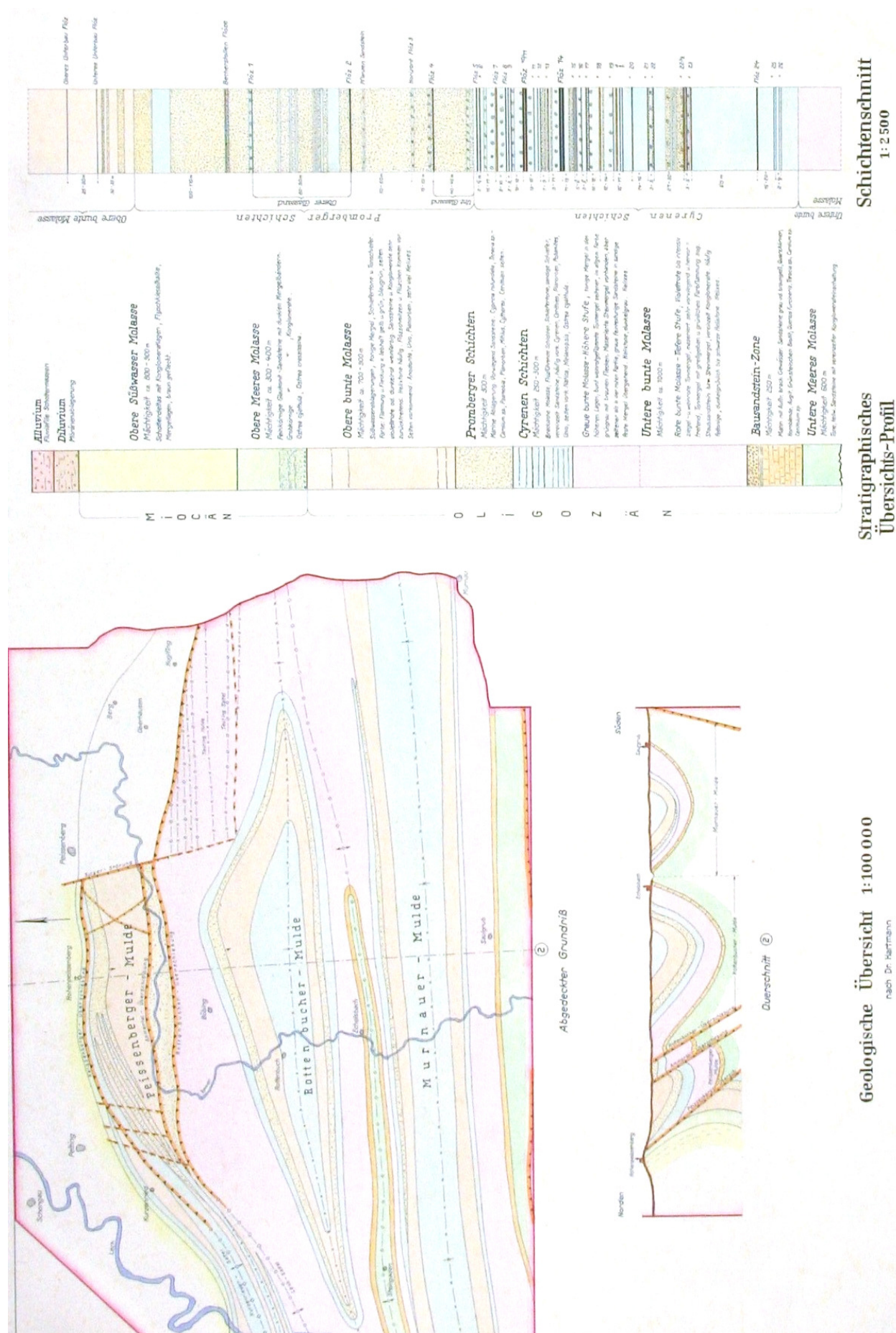


Anhang 4: Tabellarisches Kataster der bayerischen Bergwerke

(inoffizieller Auszug ohne Anspruch auf Vollständigkeit)

Name	Hochwert	Rechtswert	UTM_R	UTM_H	UTM_Zone	TK25	Ort	Landkreis
Kesselbachalm bei Fischbachau	5286300	4498500	723400	5288925	32	8237	Fischbachau	Miesbach
Obere Dickelalpe	5284000	4500500	275297	5286673	33	8338	Bayrischzell	Miesbach
Arzmoosalpe	5284000	4505000	279794	5286499	33	8338	Bayrischzell	Miesbach
Kampenwand	5292000	4528000	303090	5293603	33	8240	Marquartstein	Traunstein
Hirschgrube	5423500	4441500	661076	5423797	32	7033	Pollenfeld	Eichstätt
Krausgrube	5426000	4444000	663475	5426393	32	7033	Wachenzell	Eichstätt
Ludwigszeche	5424300	4445700	665240	5424762	32	7033	Wachenzell	Eichstätt
Müllerzeche	5426000	4449000	668470	5426591	32	7033	Hirnstetten	Eichstätt
Marienzeche	5429000	4451000	670350	5429667	32	7033	Niefang	Eichstätt
Hüttingerwaldgrube	5407500	4433600	653814	5407500	32	7123	Wellheim	Eichstätt
Schafshill	5422000	4473000	692609	5423542	32	7035	Schafshill	Eichstätt
Neubeuern	5293000	4510500	285640	5295281	33	8238	Neubeuern	Rosenheim
Kressenberg	5298580	4554570	329895	5299147	33	8142	Teisendorf	Berchtesgadener Land
Kunigundezeche I	5272160	4577200	351482	5271874	33	8444	Berchtesgaden	Berchtesgadener Land
am Gernerbach bei Klaff	5279700	4575400	349975	5279476	33	8344	Berchtesgaden	Berchtesgadener Land
Höllental bei der Alpspitze	5256390	4427800	653907	5256305	32	8532	Garmisch-Partenkirchen	Garmisch-Partenkirchen
Gute-Hoffnung-Zeche	5255350	4441500	667635	5255794	32	8533	Mittenwald	Garmisch-Partenkirchen
Franz-Adolf-Zeche	5251520	4443520	669801	5252045	32	8533	Mittenwald	Garmisch-Partenkirchen
an der Rupfenvogellähne	5255000	4445450	671596	5255596	32	8533	Mittenwald	Garmisch-Partenkirchen
Rauschberg	5289300	4554300	329266	5289885	33	8242	Inzell	Traunstein
am Frillensee	5292000	4562000	337064	5292284	33	8242	Inzell	Traunstein
Hochstaußen	5291300	4563300	338335	5291534	33	8243	Bad Reichenhall	Berchtesgadener Land
Barbarastollen	5271000	4578000	352236	5270684	33	8444	Berchtesgaden	Berchtesgadener Land
Bohrung Reichenhall I	5288510	4568260	343183	5288555	33	8243	Bad Reichenhall	Berchtesgadener Land
Salzbergwerk Berchtesgaden	5278240	4576620	351138	5277971	33	8343	Berchtesgaden	Berchtesgadener Land
Dürrnberg	5274800	4581000	355380	5274365	33	8344	Berchtesgaden	Berchtesgadener Land
Peißenberg Zieglmeierschacht	5295170	4429300	653907	5295107	32	8232	Peißenberg	Weilheim-Schongau
Peißenberg Tiefstollen	5295850	4429520	654100	5295795	32	8232	Peißenberg	Weilheim-Schongau
Paulinenstollen	5292720	4490440	715096	5295029	32	8	Wolfsgrub/Litzelau	Miesbach
Carolinestollen	5292610	4490200	714860	5294910	32	8	Wolfsgrub/Litzelau	Miesbach
Bärenschützstollen	5291800	4489930	714622	5294090	32	8	Bärenschütz	Miesbach
Leitzach Querschlag	5293190	4491170	715807	5295527	32	8	Leitzach/Sulzgraben	Miesbach
Leitzacher Erbstollen	5293190	4491170	715807	5295527	32	8	Leitzach/Sulzgraben	Miesbach
Alexanderstollen	5295880	4494650	719181	5298351	32	8	Bichl-Kaltern	Miesbach
Sachsstollen	5293460	4493560	718185	5295890	32	8	Nicklasreuth/Sonnenreuth	Miesbach
Drachenthalstollen	5291480	4493250	717952	5293899	32	8	S. Wörnsmühl	Miesbach
Eckersbergerstollen	5296290	4495890	720404	5298808	32	8	Eckersberg	Rosenheim
Kemathstollen	5296460	4496070	720578	5298985	32	8	Kemath	Rosenheim
Auer Hauptstollen	5295930	4497990	722517	5298530	32	8	Thalham	Rosenheim
Alter Auer Erbstollen	5296040	4498200	722723	5298648	32	8	Thalham	Rosenheim
Promrain Stollen	5296090	4496360	720882	5298627	32	8	Promrain	Rosenheim
Steinreber Stollen	5296020	4496850	721374	5298576	32	8	Steinreb	Rosenheim
Gschwendt	5292650	4488380	713040	5294879	32	8	Gschwendt	Miesbach
Deisenrieder Stollen	5291780	4497520	722208	5294364	32	8237	Deisenried	Miesbach
Wasserstollen	5290431	4489606	714351	5292709	32	8	Attenberg	Miesbach
Förderstollen Großtiefental (I)	5292368	4487999	712670	5294583	32	8	Gschwendt	Miesbach
Martinstollen (II)	5292791	4490119	714772	5295088	32	8	Sulzgraben	Miesbach
Wilhelmstollen (II)	5292812	4490186	714838	5295111	32	8	Sulzgraben	Miesbach
Moritzstollen (IV)	5290293	4488326	713077	5292522	32	8	Hausham	Miesbach
Holzstollen	5290442	4491190	715934	5292781	32	8	Attenberg	Miesbach
Friedrichstollen	5293000	4491420	716064	5295347	32	8	Unterwartbichl	Miesbach

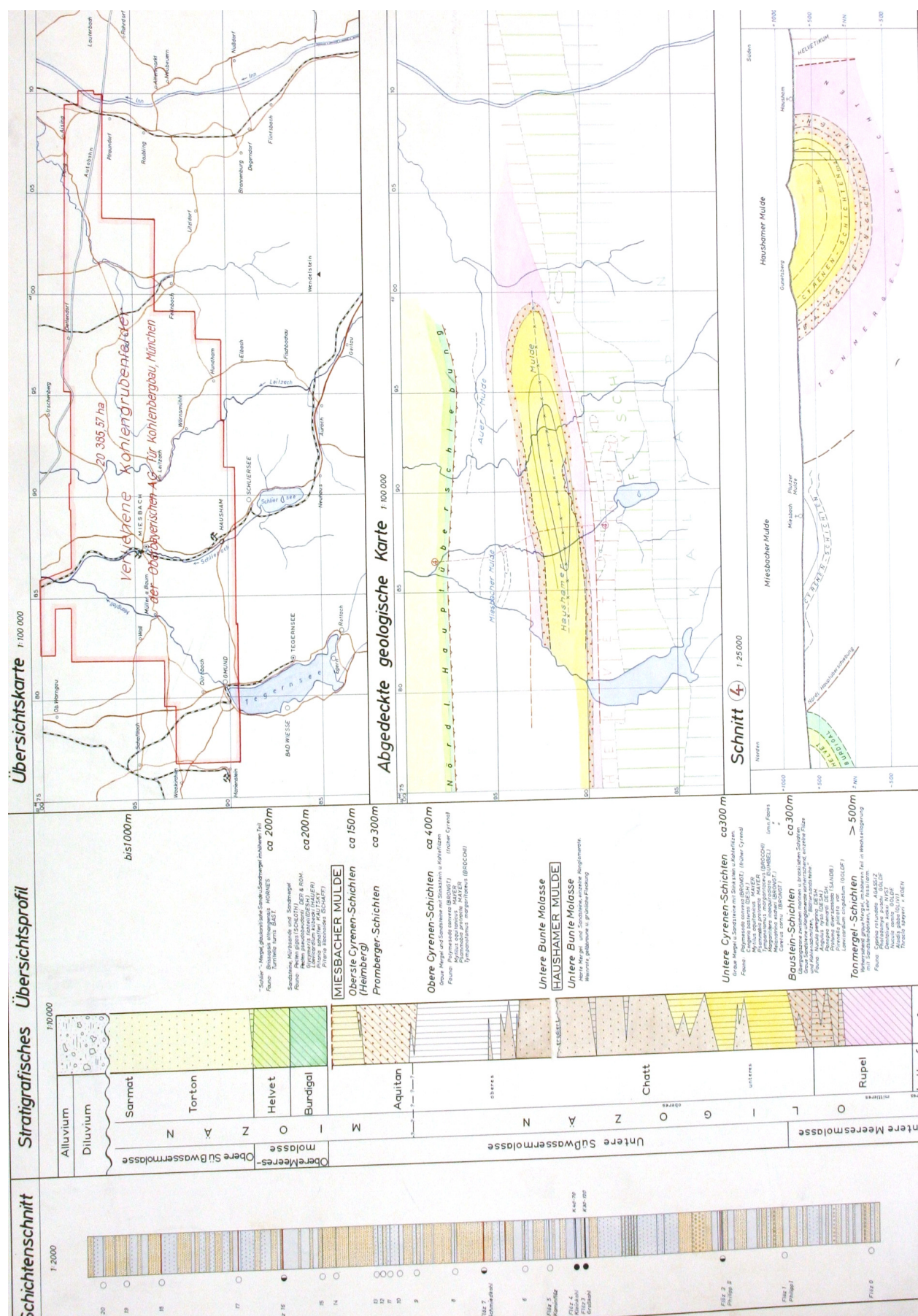
Anhang 5: Geologische Übersicht, Profil u. Schichtenschnitt d. Kohlereviers Peißenberg



Quelle: Archiv des Bayerischen Staatsministeriums für Wirtschaft, Infrastruktur, Verkehr und Technologie (mit freundlicher Genehmigung)



Anhang 7: Geologische Übersicht, Profil u. Schichtenschnitt d. Kohlereviers Hausham



Quelle: Archiv des Bayerischen Staatsministeriums für Wirtschaft, Infrastruktur, Verkehr und Technologie (mit freundlicher Genehmigung)