

Reaktiver Stofftransport

Hydrochemische Modellierung

Prof. Dr. C. Külls

Labor für Hydrologie und Internationale Wasserwirtschaft



FACH
HOCHSCHULE
LÜBECK

University of Applied Sciences

Inhalt

Reaktiver Stofftransport

Wasserinhaltsstoffe

Einführung

Die Vorlesung Reaktiver Stofftransport umfasst vier theoretische und einen praktischen Block (von jeweils einem Tag):

1. Einführung Wasserchemie, Kontrolle, graphische Auswertung
2. Praktischer Teil: Gelände, pH, pe, Probenahme
3. Lösung von Gasen, Mineralen, Adsorption, Komplexierung, Fällung
4. Reaktiver Transport: **Modellierung** von Advektion mit Reaktionen
5. Anwendungsbeispiele und Lernkontrolle

Geländearbeit Lübeck



Figure 1: Messungen

Lernziele

Lernziele sind:

Elementare Fertigkeiten:

- Wasseranalysen bewerten und graphisch auswerten zu können
- Ionenbilanz erstellen, Aktivitäten berechnen, Sättigungsindizes bestimmen, Korrosion erkennen
- Gaslösung berechnen, Neubildungstemperatur bestimmen, Fällungsmengen und Potential bestimmen
- Adsorption rechnen und Adsorptionsversuche auswerten können
- Redoxpotentiale berechnen und bewerten können

Kompetenzen (mehrere Fertigkeiten kombiniert):

- Auswertung einer Wasseranalyse mit Phreeqc: Eingabe, Auswertung, Analyse
- Vorhersage von Reaktionen bei Temperaturänderung, pH, pe-Änderung, Mischung, Verdunstung
- Erstellung von reaktiven Stofftransportmodellen für Böden und Grundwasserleiter

Wasseranalyse

| Einteilung | Ungelöste Stoffe (partikuläre Stoffe; $\geq 0,45 \mu\text{m}$) | | | | Gelöste Stoffe ($< 0,45 \mu\text{m}$) | | | |
|------------------|---|--|---|------------------------------|---|-------------------------------|--|--|
| | Suspendierte und emulgierte Stoffe | | Kolloide | | Elektrolyte (ionare Stoffe) | | Nichtelektrolyte und Gase | |
| | Anorg. | Org. | Anorg. | Org. | Anorg. | Org. | Nichtelektrolyte | Gase |
| Beispiele | - Ton - Schluff - Metallhydroxide | - Bakterien - Protozoen - Viren - Lösungsmittel, Öl | - Kieselsäure - Metallhydroxide - Tonminerale | - Bakterien - Huminstoffe | Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , Na ⁺ , K ⁺ , Fe ^{2+/3+} , Mn ²⁺ , HCO ₃ ⁻ , SO ₄ ²⁻ , NO ₃ ⁻ , Cl ⁻ | dissoz. Huminsäure | - Kieselsäure - ungeladene Komplexe - BTEX, CKW | O ₂ , N ₂ , CO ₂ , Ar, CH ₄ |
| Herkunft | Gestein, Böden | Belebte Welt, natürlicher und anthropogener Eintrag | Gesteine, Böden | Belebte Welt | Gesteine, Böden, Eintrag | Gesteine, Böden, belebte Welt | Gesteine, Böden, natürlicher und anthropogener Eintrag | Atmosphäre, Umsetzungsprozesse |

Figure 2: Wasserinhaltsstoffe