

## Kommentar zur Technischen Mitteilung „Prozessmodellierung hochsalinärer Wässer mit einem erweiterten PHREEQC-Datensatz“ in Grundwasser 18 (2), 93–98 (2013)

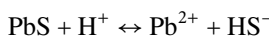
Elke Bozau<sup>1</sup>

Eingegangen: 15. Februar 2016 / Online publiziert: 17. Mai 2016  
© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2016

Aufgrund aktueller Anfragen zu dem in Grundwasser 2013 veröffentlichten „gebo“-Datensatz möchte ich an dieser Stelle darauf hinweisen, dass der „gebo“-Datensatz nur in Kombination mit dem Pitzer-Datensatz älterer PHREEQC-Versionen nutzbar ist, und einige Hinweise zur Nutzung thermodynamischer Daten geben.

Die mit der Software PHREEQC zur Verfügung gestellten thermodynamischen Datensätze basieren auf der langjährigen Arbeit vieler WissenschaftlerInnen und unterliegen einer kontinuierlichen Bearbeitung. Entsprechend aktueller wissenschaftlicher Aufgabenstellungen werden diese Datensätze erweitert. Vor allem bei der Anpassung der thermodynamischen Konstanten an hohe Temperatur- und Druckbedingungen wurden in den letzten Jahren große Fortschritte erzielt.

Aufgrund der Datenmenge und -vielfalt ist in den einzelnen Datensätzen nicht für jeden Parameter eine Quelle hinterlegt. Auch ist bekannt, dass für einzelne chemische Reaktionen unterschiedliche logK-Werte vorhanden sind und genutzt werden. Beispielsweise werden für die Löslichkeit von Galenit nach der Reaktionsgleichung



in den PHREEQC-Datensätzen verschiedene Gleichgewichtskonstanten angegeben:

Der kommentierte Beitrag ist unter <http://dx.doi.org/10.1007/s00767-013-0222-8> zu finden.

✉ Elke Bozau  
elke.bozau@tu-clausthal.de

<sup>1</sup> Hydrogeologie, TU Clausthal,  
Leibnizstraße 10, 38678 Clausthal-Zellerfeld,  
Deutschland

- Datensatz „minteq.dat“: log<sub>k</sub> = –15,33,
- Datensatz „lnl.dat“: log<sub>k</sub> = –14,8544,
- Datensatz „wateq4f.dat“: log<sub>k</sub> = –12,780.

Im Datensatz „phreeqc.dat“ wird diese Reaktion nicht berücksichtigt.

Aquatische Spezies können chemisch unterschiedlich beschrieben werden. So bedingt der im Datensatz „lnl.dat“ vorhandene neutrale aquatische Komplex NaCl ungewöhnlich hohe Halitlöslichkeiten. Leider wurde keine Literaturquelle angefügt, sodass weitere Informationen zur Herkunft dieses Komplexes nur mit relativ großem Aufwand zu erhalten sind.

Für gelöste Kieselsäure wird in den Datensätzen entweder der aquatische Komplex SiO<sub>2</sub> oder H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub> mit den jeweils entsprechenden Folgereaktionen verwendet. Der „gebo“-Datensatz enthält die Spezies SiO<sub>2</sub>. Dieser für das Projekt „Geothermie und Hochleistungsbohrtechnik“ erstellte Datensatz ist zusammen mit dem „pitzer.dat“ zur PHREEQC-Nutzung am Beispiel tiefer Grundwässer Norddeutschlands (Bozau und van Berk 2013) getestet worden. Der mit der aktuellen Software PHREEQC Interactive 3.3.5 (Februar 2016) gelieferte Datensatz „pitzer.dat“ wurde um die H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub>-Spezies erweitert (Appelo 2015) und ist somit nicht in Kombination mit dem „gebo“-Datensatz nutzbar. Zur Anwendung des „gebo“-Datensatzes wird empfohlen, auf den mit der PHREEQC-Version 2 bereitgestellten Pitzer-Datensatz, in dem das Element Si nicht berücksichtigt ist, zurückzugreifen.

### Literatur

- Appelo, C.A.J.: Principles, caveats and improvements in databases for calculating hydrogeochemical reactions in saline waters from 0 to 200 °C and 1 to 100 atm. *Appl. Geochem.* **55**, 62–71 (2015)
- Bozau, E., van Berk, W.: Hydrogeochemical modeling of deep formation water applied to geothermal energy production. *Procedia Earth Planet. Sci.* **7**, 97–100 (2013)