

Kurzfassung .....	III
Extended Abstract .....	IV
Inhaltsverzeichnis .....	VIII
Tabellenverzeichnis .....	XI
Abbildungsverzeichnis .....	XII
Danksagung .....	XV
1 Zielsetzung und Arbeitsmethoden .....	1
1.1 Einleitung .....	1
1.2 Zielsetzung .....	2
1.3 Arbeitsmethoden .....	2
2 Das Untersuchungsgebiet .....	4
2.1 Geographischer und morphologischer Überblick .....	4
2.2 Geologischer Überblick .....	5
2.2.1 Grundgebirge .....	5
2.2.2 Deckgebirge .....	7
2.2.3 Regionalgeologie .....	7
2.3 Strukturgeologischer Überblick .....	10
2.3.1 Allgemein .....	10
2.3.2 Regionale tektonische Verhältnisse .....	10
2.4 Hydrogeologischer Überblick .....	11
2.4.1 Allgemein .....	11
2.4.2 Hydrogeologische Verhältnisse im Raum Rötze .....	14
2.4.3 Oberflächengewässer .....	15
2.5 Verwitterung und Bodenbildung .....	15
2.5.1 Granit- und Gneisverwitterung .....	15
2.5.2 Bodenbildung .....	16
2.5.3 Landnutzung und Bodenarten .....	18
3 Klima und Wasserhaushalt .....	19
3.1 Klimatische Verhältnisse .....	19
3.2 Wasserhaushalt .....	20
3.2.1 Wasserhaushaltsgleichung .....	20
3.2.2 Niederschlag .....	21
3.2.3 Verdunstung .....	23
3.2.4 Abfluß .....	27
3.2.5 Grundwasserneubildung .....	27
4 Grundlagen der Statistik und Thermodynamik .....	30
4.1 Deskriptive Statistik .....	30
4.2 Geostatistische Verfahren .....	31
4.2.1 Voraussetzungen der geostatistischen Berechnungen .....	31
4.2.2 Variogrammanalyse .....	32
4.2.3 Kriging-Interpolationsmethode .....	35
4.3 Thermodynamische Gleichgewichtsmodelle .....	36
4.3.1 Allgemein .....	36
4.3.2 Konzentration und Aktivität .....	37
4.3.3 Sättigungszustände .....	38
4.3.4 Gleichgewichtskonstante und Thermodynamik .....	39

5	Bodenuntersuchungen.....	40
	5.1 Sequentielle Bodenextraktion .....	40
	5.1.1 Durchführung.....	40
	5.1.2 Ergebnisse.....	42
	5.1.3 Gesamtüberblick der Verteilung.....	44
	5.2 Säulenversuche .....	45
	5.2.1 Durchführung.....	45
	5.2.2 Ergebnisse.....	45
	5.2.3 Umlaufbetrieb.....	47
	5.2.4 Interpretation der Auslaugungsverläufe.....	48
	5.3 Bodenaufschlüsse.....	48
	5.4 Röntgenpulver-Diffraktometrie (XRD) .....	50
	5.5 Batchversuche nach DIN 38414/ 4 .....	50
	5.6 Interpretation der Bodenuntersuchungen .....	51
6	Hydrochemie.....	54
	6.1 Beschaffenheit von Niederschlägen.....	54
	6.2 Beschaffenheit des Grundwassers.....	56
	6.2.1 Physikochemische Parameter .....	56
	6.2.2 Das Alte Quellsystem von Rötz .....	60
	6.2.3. Das Neue Quellsystem von Rötz .....	67
	6.2.4 Trinkwasserversorgung von Schönthal.....	73
	6.2.5 Sonstige Untersuchungen .....	79
	6.3 Interpretation der Ergebnisse .....	80
	6.3.1 Physikochemische Parameter .....	80
	6.3.2 Typisierung der Quellwässer .....	83
7	Regionalisierung der physikochemischen Parameter .....	88
	7.1 Probenpunkteverteilung .....	88
	7.2 Physikalische Parameter und Kieselsäure.....	88
	7.2.1 Häufigkeitsverteilung .....	88
	7.2.2 Richtungsabhängige Variogramme.....	89
	7.3 Anionische Wasserinhaltsstoffe.....	96
	7.3.1 Häufigkeitsverteilung .....	96
	7.3.2 Richtungsabhängige Variogramme.....	97
	7.4 Kationische Wasserinhaltsstoffe .....	105
	7.4.1 Häufigkeitsverteilung .....	105
	7.4.2 Richtungsabhängige Variogramme.....	105
	7.5 Interpretation der regionalisierten Daten .....	110
8	Diskussion .....	113
	8.1 Thermodynamische Modelle .....	113
	8.1.2 Wechselwirkungen zwischen Wasser und Gas- bzw. Festphasen .....	114
	8.1.3 Speziesverteilung und Sättigungszustände .....	116
	8.1.4 Bestimmung von Phasengrenzen .....	120
	8.1.5 Wasser von Rötz und Schönthal innerhalb der Phasengrenzenmodells .....	122
	8.1.6 Wertung des Phasengrenzenmodells .....	123
	8.2 Inverse Modelle (NETPATH) .....	124
	8.2.1 Modelltyp I .....	125
	8.2.2 Modelltyp II.....	129
	8.2.3 Modelltyp III.....	130
	8.2.4 Plausibilität der Fließwege .....	134
	8.3 Hydraulische Verhältnisse .....	134
	8.4 Hydrogeologische Situation.....	137
9	Literaturverzeichnis .....	139

10	Anhang	.....	154
	Anhang 1:	Geographische Lage der Probennahmepunkte.....	154
	Anhang 2:	Niederschlagsverteilung der Klimastation Rötz-Steegen .....	155
	Anhang 3:	Monatliche $ET_{pot}$ - und $ET_{reell}$ -Werte und Jahressummen (1985-1995) .....	156
	Anhang 4:	Variogrammanalyse .....	163
	Anhang 5:	Stichtagsmessung (22.09-23.09.98) .....	165
	Anhang 6:	Isolinienpläne mit Schätzfehlerkarten.....	166
	Anhang 7:	Prozentuale Verteilung der Anionen- und Kationengehalte der sequentiellen Bodenextraktion .....	171
	Anhang 8:	Ergebnisse der Bodenaufschlüsse .....	172
	Anhang 9:	Diffraktogramme .....	177
	Anhang 10:	Hydrochemische Analysen der nassen Deposition an den Stationen Brotjackl- riegel und Hemau .....	180
	Anhang 11:	Analysierte Wasserinhaltsstoffe und ihre Bestimmungsmethoden.....	183
	Anhang 12:	Physikochemische Parameter (Feldmessungen) der Quellen südlich von Rötz und Schönthal .....	184
	Anhang 13:	Hydrochemische Analysen der Quellen südlich von Rötz und Schönthal.....	188
	Anhang 14:	Datenloggerdaten in 6h-Intervallen .....	192
	Anhang 15:	Physikochemische Daten der Start- und Zielpunkte für die inversen Model- lierungen .....	196
	Anhang 16:	Liste der berechneten Speziesanteile .....	197
	Anhang 17:	Berechnete Sättigungszustände (PHREEQC 1.6).....	199
	Anhang 18:	PHREEQC-Outputfiles für die Berechnung der Phasengrenzen .....	200
	Anhang 19:	Massentransfers der NETPATH-Modellierungen .....	207
	Anhang 20:	Verwendete Geräte und Software .....	219