

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Bestimmung von Pitzer Parametern aus Dampfdrucken	3
2.2	Dampfdruck-Messungen von reinem Wasser	7
2.3	Dielectric constant of pure water	9
2.4	Druck-Abhängigkeit thermodynamischer Gleichgewichte	12
2.5	Druck- und Temperaturabhängigkeit Gibbs'scher Bildungsenthalpien	14
2.6	Berechnung von temperaturabhängigen Löslichkeitskonstanten aus HKFT-Daten	16
2.7	Berechnung von Gleichgewichtskonstanten aus Standardbildungsdaten	18
3	Zwischenstand: Berechenbarkeit polytherm-polybarer Lösungsgleichgewichte mit dem HKF-Ansatz	21
4	Korrektur partieller molaler Volumen von aquatischen Spezies in hochsalinaren Lösungen	23
5	Experimente	25
5.1	Experimenteller Aufbau	25
5.2	Ergebnisse	26
6	HKFmoRR-Koeffizienten für Basis-Spezies	29
7	Erweiterungen von GeoDat	33
7.1	SrCl ₂ und BaCl ₂	33
7.2	Erdalkalisulfate	36
7.3	Anglesit (PbSO ₄)	47
7.4	Basisdaten für Gesteins-bildende Minerale	57

8	Modellierung des reaktiven Stofftransports im geothermalen Reservoir Groß-Schönebeck.....	67
8.1	Eigenschaften des Reservoirs in Groß-Schönebeck	68
8.1.1	Allgemeines	68
8.1.2	Stratigraphischer Aufbau und Eigenschaften des Reservoir-Gesteins	71
8.1.3	Thermische Eigenschaften des Reservoirs	73
8.1.4	Zusammensetzung des Fluids	74
8.1.5	Ausfällungen.....	76
8.1.6	Zusammensetzung des Gesteins.....	77
8.2	Reservoirmodell.....	78
8.2.1	Modelleigenschaften.....	78
8.2.2	Zusammensetzungen von Gestein und Lösung im Reservoir	80
8.3	Ergebnisse der Modellrechnungen zum reaktiven Stofftransport	89
8.3.1	Beschreibung der Rechnungen.....	89
8.3.2	Transport eines Tracers.....	89
8.3.3	Ergebnisse der Modellrechnungen	91
8.4	Schlussfolgerungen	99
9	Zusammenfassung	101
	Literaturverzeichnis.....	105
	Abbildungsverzeichnis.....	113
	Tabellenverzeichnis.....	117
A	Anhang: Parameterdatei für PHREEQC (GeoDat)	121