

Modellierung des Auslaugverhaltens

T 2878

T 2878

Dieser Forschungsbericht wurde mit modernsten Hochleistungskopierern auf Einzelanfrage hergestellt.

Die Originalmanuskripte wurden reprotechnisch, jedoch nicht inhaltlich überarbeitet. Die Druckqualität hängt von der reprotechnischen Eignung des Originalmanuskriptes ab, das uns vom Autor bzw. von der Forschungsstelle zur Verfügung gestellt wurde.

Im Originalmanuskript enthaltene Farbvorlagen, wie z.B. Farbfotos, können nur in Grautönen wiedergegeben werden. Liegen dem Fraunhofer IRB Verlag die Originalabbildungen vor, können gegen Berechnung Farbkopien angefertigt werden. Richten Sie Ihre Anfrage bitte an die untenstehende Adresse.

© by Fraunhofer IRB Verlag

1999, ISBN 3-8167-5448-1

Vervielfältigung, auch auszugsweise,
nur mit ausdrücklicher Zustimmung des Verlages.

Fraunhofer IRB Verlag

Fraunhofer-Informationszentrum Raum und Bau

Postfach 80 04 69

70504 Stuttgart

Nobelstraße 12

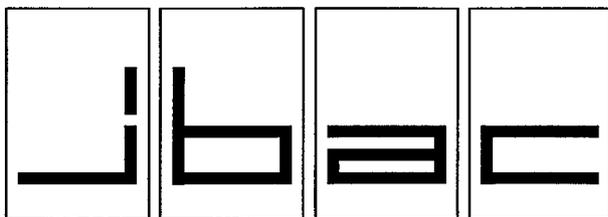
70569 Stuttgart

Telefon (07 11) 9 70 - 25 00

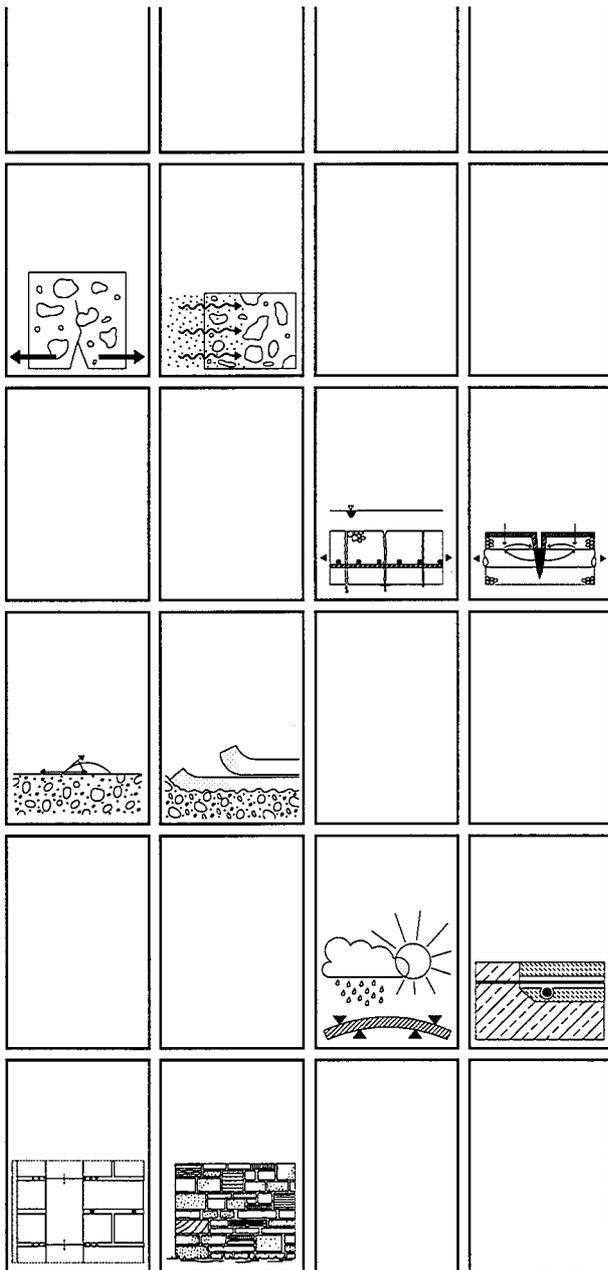
Telefax (07 11) 9 70 - 25 08

e-mail irb@irb.fhg.de

URL <http://www.irb.fhg.de>



Institut für Bauforschung Aachen
 Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule

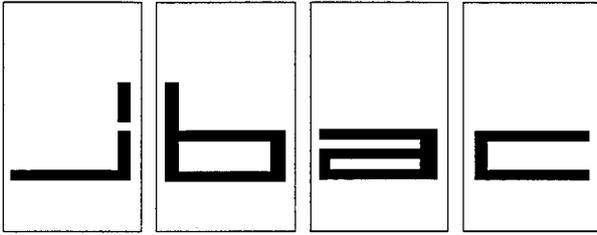


Baustoff · Bauteil · Bauwerk

Forschung · Entwicklung
Überwachung
Prüfung · Beratung

Forschungsbericht
F 625

Modellierung des Auslaugverhaltens



INSTITUT FÜR BAUFORSCHUNG

Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen

Leitung: Professor Dr.-Ing. W. Brameshuber

Postfach, D-52056 Aachen
Schinkelstraße 3, D-52062 Aachen

Telefon (02 41) 80-51 00 · Telex 8 32 704 thac d · Telefax (02 41) 88 88-139

Hb/Fk

3. Ausfertigung

THEMA

Modellierung des Auslaugverhaltens

ABSCHLUSSBERICHT

Forschungsbericht Nr.

F 625

vom 05.05.99

Projektleiter

Prof. Dr.-Ing. P. Schießl,
Dipl.-Ing. U. Wiens

Sachbearbeiterin

Dipl.-Chem. Inga Hohberg

Auftraggeber/
Förderer

Deutsches Institut für Bautechnik (DIBt)
Kolonnenstr. 30

10829 Berlin

Auftragsdatum
Aktenzeichen

18.06.1997

IV 1-5-848/97

Dieser Bericht umfaßt 60 Seiten, davon 52 Textseiten.

Soweit Versuchsmaterial nicht verbraucht ist, wird es nach 4 Wochen vernichtet.

Eine längere Aufbewahrung bedarf einer schriftlichen Vereinbarung.

Die auszugsweise Veröffentlichung dieses Berichtes, seine Verwendung für Werbezwecke sowie die inhaltliche Übernahme in Literaturdatenbanken bedürfen der Genehmigung des ibac.

INHALTSVERZEICHNIS**Seite**

1	EINLEITUNG	1
2	BEWERTUNGSKRITERIEN.....	1
2.1	Rechtliche Ausgangsposition	1
2.2	Bewertung der Auslaugung aus Beton	5
3	MODELLIERUNG DER AUSLAUGUNG AUS DEM BAUSTOFF	7
3.1	Einführung.....	7
3.2	Diffusionsvorgänge	8
3.3	Einfache Diffusionsmodelle	9
3.4	Rechenmodelle aufgrund von Diffusion und chemischer Reaktion.....	10
4	MODELLIERUNG DER AUSBREITUNG DER STOFFE IM BODEN ... BZW. GRUNDWASSER.....	11
4.1	Allgemeines	11
4.2	Physikalische Grundlagen, Bezeichnungen.....	12
4.2.1	Berechnung der Grundwasserströmung	12
4.2.2	Stofftransport.....	19
5	DURCHGEFÜHRTE MODELLRECHNUNGEN	21
5.1	Allgemeines	21
5.2	Auswahl der Betone.....	22
5.3	Beschreibung der Diffusionsberechnungen.....	24
5.4	Beschreibung der durchgeführten Transportberechnungen	27
5.4.1	Allgemeines	27
5.4.2	Beschreibung des gewählten Strömungs- und Transportmodells	28
5.5	Grenzen und Fehler der Modellrechnungen.....	40

INHALTSVERZEICHNIS
Seite

6	ZUSAMMENFASSUNG DER ERGEBNISSE UND SCHLUSSFOLGE .. RUNGEN.....	42
6.1	Allgemeines.....	42
6.2	Vorschläge zur Festlegung der Konventionen	44
7	AUSBLICK	46
8	LITERATUR.....	47
	TABELLEN.....	A1-A8

1 EINLEITUNG

Aufgrund des wachsenden Umweltbewußtseins in der Öffentlichkeit und der zunehmenden Verwertung von Abfällen in Baustoffen wird der Freisetzung umweltrelevanter Stoffe aus Baustoffen eine immer größere Bedeutung zugemessen. Für eine umfassende Bewertung der Umweltverträglichkeit von Baustoffen fehlen jedoch immer noch geeignete und allgemein akzeptierte Konzepte /15/.

Grundsätzlich ist die Umweltverträglichkeit eines Baustoffes/einer Baumaßnahme danach zu beurteilen, ob eine nachteilige Veränderung der Schutzgüter Wasser, Boden und Luft während der Errichtung, der Nutzung und des Abbruchs auftreten kann. Um vor der Verwendung eines neuen Baustoffes eine objektive Bewertung seiner Umweltverträglichkeit vornehmen zu können, müssen zunächst die maßgebenden Mechanismen der Freisetzung (Emission) bzw. der Einbindung umweltrelevanter Stoffe aufgeklärt werden, um Modelle zu erhalten, die eine Abschätzung von Freisetzungsraten der betrachteten Stoffe unter realen Bedingungen aus realen Bauteilen ermöglichen. Hierzu sind geeignete Prüfverfahren notwendig, deren Ergebnisse reproduzierbar und die vor allem praxisrelevant sind. Da Veruche unter Laborbedingungen stets Konventionen darstellen, müssen die Ergebnisse aus den Laboruntersuchungen auf reale Bedingungen übertragen werden können. Hierzu sind Modellbetrachtungen (Szenarien) notwendig (siehe Abschnitt 2.2). Schließlich müssen Bewertungskriterien und Grenzwerte festgesetzt werden, die sich nicht an dem analytisch Meßbaren orientieren, sondern dem jeweiligen Gefährdungspotential in adäquater Weise Rechnung tragen /35/.

Die Freisetzung umweltrelevanter Bestandteile aus zementgebundenen Baustoffen erfolgt hauptsächlich aufgrund der Auswaschung bzw. Auslaugung von im wesentlichen anorganischen Stoffen. In diesem Forschungsbericht soll am Beispiel der Auslaugung gezeigt werden, wie die Umweltverträglichkeit von Beton unter Anwendung von Modellrechnungen standortunabhängig bewertet werden kann.

2 BEWERTUNGSKRITERIEN

2.1 Rechtliche Ausgangsposition

Bei den folgenden Ausführungen wird im wesentlichen die Auswirkung eines Baustoffes auf die Schutzgüter (Grund)wasser und Boden betrachtet. Die vorgestellten Bewertungskriterien finden Eingang in ein Merkblatt des DIBt, in dem Regelfälle des Einsatzes von Baustoffen definiert werden sollen, die von vornherein keine schädlichen Grundwasser-Veränderungen verursachen /28/.

Nach den Festlegungen des Wasserhaushaltsgesetzes (WHG) und des Bundesbodenschutzgesetzes (BbodSchG) müssen schädliche Veränderungen des Grundwassers und/oder schädliche Bodenveränderungen verhindert bzw. so verringert werden, daß keine nachteiligen Veränderungen der natürlichen Lebensgrundlagen zu besorgen sind. Ein gangbarer Weg, dies zu erreichen, ist die Definition von sogenannten *Schadensfällen* (Grundwasserschäden, Bodenschäden) sowie die Bewertung anhand von *Geringfügigkeitsschwellen*. Im folgenden wird die Bewertung anhand der Geringfügigkeitsschwellen näher beschrieben. Dazu werden zunächst einige Begriffe erläutert.

- **Grundwasserschäden**

Um zu bewerten, ob Grundwasser durch Baustoffe/Baumaßnahmen *dauernd schädlich verunreinigt* werden kann (Auftreten eines Grundwasserschadens), müssen einige unbestimmte Rechtsbegriffe aus dem WHG näher bestimmt werden. Es muß konkretisiert werden, unter welchen Bedingungen Grundwasser als „*dauernd*“ oder in „*einem nicht nur unerheblichen Ausmaß*“ als „*schädlich verunreinigt*“ einzustufen ist. Dazu wird der *Ort der Beurteilung* und die *Geringfügigkeitsschwelle* definiert /38/.

- **Ort der Beurteilung**

Für das Entstehen einer schädlichen Grundwasserverunreinigung ist es grundsätzlich unerheblich, ob eine Verunreinigung eines Grundwasservolumenelements im weiteren Verlauf der Fließstrecke abgebaut oder durch die Vermischung mit nicht verunreinigtem Grundwasser verdünnt wird. Der Ort der Beurteilung ergibt sich aus der Lage des Einbauortes zum Grundwasser:

- Das Bauprodukt wird über dem Grundwasser eingebaut. Der Stoffeintrag in das Grundwasser erfolgt also aus der ungesättigten Zone. Ort der Beurteilung ist die betroffene Grundwasseroberfläche, an der belastetes Sickerwasser Teil der gesättigten Zone, also Grundwasser wird.
- Das Bauprodukt wird im Grundwasser eingebaut, wird also von Grundwasser umströmt oder durchströmt. Ort der Beurteilung ist der Kontaktbereich zwischen dem Material und dem Grundwasser (dieser Bereich wird als *Kontaktgrundwasser* bezeichnet).

Bei der Bewertung wird zusätzlich eine Fallunterscheidung zwischen *wasserdurchlässiger* und *wasserundurchlässiger Bauweise* vorgenommen. Für die wasserdurchlässigen Bauweisen können die Immissionen mit Hilfe von Säulenversuchen bestimmt werden. Die Immissionen werden dann mit den entsprechenden Geringfügigkeitsschwellenwerten verglichen. Bei den wasserundurchlässigen Bauweisen (zu denen die Baumaßnahmen aus Beton gehören) findet ein Stoffeintrag in das Grundwasser nur an der Oberfläche des Materials statt. Neben kurzfristigen „wash-off“-Effekten wird die Auslaugung im wesentlichen durch Diffusionsprozesse dominiert /15/. Daher nehmen die Stoffkonzentrationen mit zunehmender Expositionszeit und Entfernung vom Baustoff/Bauteil ab. Zum Zeitpunkt Null, d. h. unmittelbar nach Einbringen des Baustoffs/Bauteils in das Grundwasser kann die Geringfügigkeitsschwelle an der Grenzschicht erheblich überschritten werden. Erhöhte Konzentrationen in sehr dünnen Grenzschichten und für kurze Zeiträume sind aber wasserrechtlich nicht relevant. Daher ist es grundsätzlich zulässig, bei der Bewertung von Stoffeinträgen sowohl *kleinräumig* (über eine bestimmte Grenzschichtdicke) als auch *zeitlich* (über einen definierten Zeitraum (z. B. 90 Tage)) zu mitteln. Es ist also notwendig, festzulegen, wie groß die Grenzschichtdicke sein und über welchen Zeitraum gemittelt werden darf. Zur Festlegung dieser Konventionen müssen zunächst die Einflüsse verschiedener Parameter betrachtet werden. Die in diesem Forschungsbericht vorgestellten Modellrechnungen sollen dazu dienen, die verschiedenen Randbedingungen für die Bewertung festzulegen.

- *Geringfügigkeitsschwelle*

Eine Stoffbelastung des Sickerwassers bzw. Kontaktgrundwassers am Ort der rechtlichen Bewertung kann als *geringfügig* und damit als unschädlich im Sinne des WHG bewertet werden, wenn folgende Kriterien erfüllt werden /23/:

- es können keine humantoxischen Wirkungen hervorgerufen werden,
- die Grenzwerte der Trinkwasserverordnung werden eingehalten **und**
- es können keine relevanten ökotoxikologischen Wirkungen (z. B. bei einer angenommenen Nutzung oder beim Austritt in ein oberirdisches Gewässer) auftreten.

Diese Bedingungen sind i. d. R. erfüllt, wenn die Geringfügigkeitsschwellenwerte eingehalten werden. Die entsprechenden Konzentrationen, die als Geringfügigkeitsschwellen für die Grundwasserbelastung betrachtet werden und von der LAWA aufgestellt wurden sind in Tabelle A1 zusammengestellt. Diese Geringfügigkeitsschwellen sind für das Sickerwasser bzw. Kontaktgrundwasser am *Ort der Beurteilung* einzuhalten. Liegen die regionalen Hintergrundwerte im Grundwasser (vgl. Tabelle A2) bereits in der Größenordnung dieser Geringfügigkeitsschwellen, können von den Wasserbehörden für solche Regionen höhere Werte festgelegt werden. Die Geringfügigkeitsschwellen entsprechen den sogenannten Prüfwerten nach den gemeinsamen Grundsätzen zur „Gefahrenbeurteilung von Bodenverunreinigungen/Altlasten als Gefahrenquelle für das Grundwasser“ der Länderarbeitsgemeinschaften Abfall, Wasser und Boden. Dabei wurden die Geringfügigkeitsschwellen wirkungsorientiert, d. h. vorwiegend human- und ökotoxikologisch begründet abgeleitet. Übersteigen aufgrund anthropogenen Stoffeintrags die Stoffgehalte die Geringfügigkeitsschwelle, so ist ein Grundwasserschaden zu besorgen, und ein wasserrechtliches Genehmigungsverfahren muß eingeleitet werden /23/.

In Bild 1 ist zum besseren Verständnis eine Graphik wiedergegeben, die verdeutlichen soll, wo die Geringfügigkeitsschwelle angesetzt wird, nämlich unterhalb des stark anthropogen beeinflussten Bereichs.

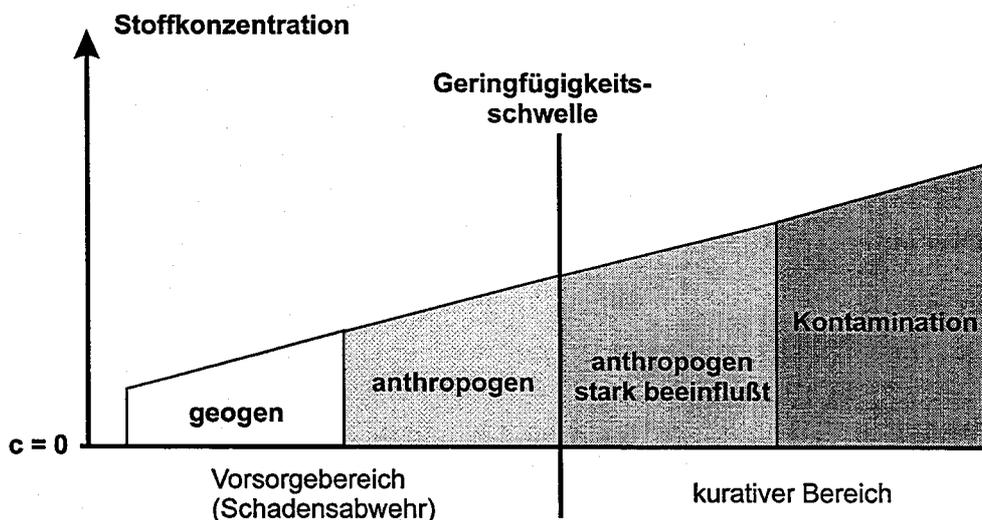


Bild 1: Verdeutlichung der Geringfügigkeitsschwelle /17/

Bei der Bewertung der Bodenbelastung wird zur Zeit davon ausgegangen, daß es im Boden nicht zu relevanten Belastungen kommt, wenn die für den Grundwasserschutz definierten Geringfügigkeitsschwellen eingehalten werden.

2.2 Bewertung der Auslaugung aus Beton

Sollen Aussagen über das mögliche Gefährdungspotential durch die Auslaugung von umweltrelevanten Stoffen aus zementgebundenen Baustoffen getroffen werden, ist die Kenntnis des zeitabhängigen Auslaugverhaltens unter den gegebenen bzw. zu erwartenden Bedingungen am Bauwerk oder Bauteil erforderlich. Diese Informationen können im Labor durch Auslaugtests erhalten werden. In Auslaugtests wird versucht, definierte Randbedingungen zu schaffen und spezifische Einflußgrößen nachzustellen. Durch die Wahl geeigneter und praxisorientierter Auslaugverfahren können die Freisetzungsraten sowie die dominierenden Auslaugmechanismen der umweltrelevanten Stoffe bestimmt werden. Eine umfangreiche Beschreibung der Auslaugprozesse und -verfahren findet sich in /15, 32/.

Zur Bewertung der Boden- und Grundwasserbelastung durch die Auslaugung umweltrelevanter Stoffe müssen die Ergebnisse der Laboruntersuchungen in die Praxis übertragbar sein. Hierzu sind Modellbetrachtungen erforderlich, da die Versuche unter Laborbedingungen immer Konventionen darstellen.

Bei der Betrachtung der Freisetzung umweltrelevanter Stoffe aus einem Bauteil kann es große Unterschiede in Abhängigkeit davon geben, zu welchem Zeitpunkt man die Freisetzung betrachtet und in welchem Abstand zum Bauteil die Konzentrationen mit Grenz- bzw. Richtwerten verglichen werden. Aufgrund der allgemeinen Diffusionsgesetze nehmen die Freisetzungsraten mit der Zeit/Auslaugdauer ab und gleichzeitig ändern sich die Konzentrationen eines freigesetzten Stoffes mit zunehmender Entfernung vom Bauteil. Das heißt, es müssen auch hier Konventionen festgelegt werden, zu welchem Zeitpunkt die Freisetzungsraten ermittelt werden, und in welchem Abstand zum Bauteil die Konzentrationen mit den entsprechenden Vorsorgewerten verglichen werden.

Grundsätzlich sind zwei Arten von Rechenmodellen zu unterscheiden:

1. Modelle, mit denen die zeitabhängige Freisetzung der umweltrelevanten Stoffe aus dem Baustoff/Bauteil in den Boden/das Grundwasser berechnet wird. Dies sind im allgemeinen *Diffusionsmodelle* unter Berücksichtigung baustoffspezifischer und praxisrelevanter Randbedingungen.
2. Modelle, mit denen die Ausbreitung der freigesetzten Stoffe im Boden/Grundwasser simuliert wird. Mit diesen *Transportmodellen* können die zeitlich variierenden Konzentrationen umweltrelevanter Stoffe im Boden/Grundwasser unter Berücksichtigung der Bodenverhältnisse in Abhängigkeit vom Abstand zum Bauteil/Bauwerk ermittelt werden.

Durch die Kombination von Diffusions- und Transportmodell wird eine Bewertung des Auslaugverhaltens von Baustoffen möglich, indem die Schadstoffkonzentrationen im Boden/ Grundwasser unter definierten Randbedingungen (Bodenverhältnisse, z. B. stark durchlässiger Untergrund, geringes Grundwassergefälle; Einbauort (im Grundwasser oberhalb des Grundwassers)) in Abhängigkeit von der Zeit prognostiziert werden. Das Vorgehen ist in Bild 2 schematisch dargestellt.

Zunächst muß ein Referenzabstand vom Bauteil (x_R) und eine Referenzzeit (t_R), nach dem ersten Kontakt des Bauteils mit Grundwasser, definiert werden. Mit Hilfe der Rechenmodelle werden die zeit- und ortsabhängigen Schadstoffgehalte im Grundwasser berechnet. Diese werden mit den entsprechenden Geringfügigkeitsschwellen bzw. Hintergrundwerten am Referenzort (x_R) zum Referenzzeitpunkt (t_R) verglichen. Die zulässigen Schadstoffgehalte (S_R) dürfen dabei nicht überschritten werden.

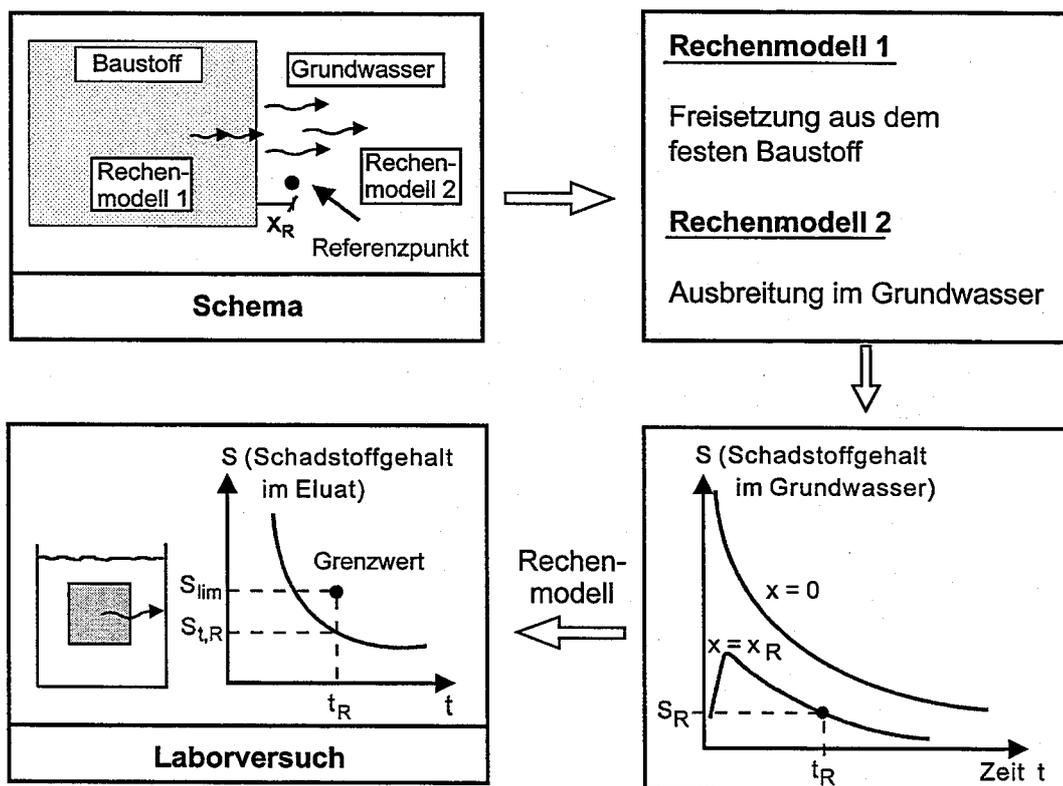


Bild 2: Schema zur Bewertung der Auslaugung aus Baustoffen anhand von Rechenmodellen /16/

Zur Bewertung der Ergebnisse aus Auslaugverfahren unter Laborbedingungen, werden dieselben Modelle benutzt. Zunächst wird die für das Grundwasser festgesetzte zulässige Konzentration in eine zulässige Konzentration im Eluat umgerechnet (S_{lim}). Mit der im Auslaugversuch ermittelten Freisetzungsrate (eluierte Stoffmenge pro Oberfläche und Zeit) wird über das Rechenmodell 1 die Konzentration im Eluat zur Referenzzeit t_R ($S_{t,R}$) errechnet. Diese kann dann mit der zulässigen Freisetzung S_{lim} verglichen werden (vgl. Bild 2).

Im folgenden werden die allgemeinen Grundlagen zu den im Rahmen dieses Forschungsprojektes durchgeführten Berechnungen beschrieben. Zunächst werden die Grundlagen für die Diffusionsberechnungen (Modell 1) sowie die Strömungs- und Transportberechnungen (Modell 2) erläutert. Anschließend wird anhand der durchgeführten Modellrechnungen der Einfluß folgender Parameter auf die Konzentrationen umweltrelevanter Stoffe im Grundwasser beschrieben:

- Einfluß des Betons (Einfluß des Bindemittels und des Zusatzstoffes),
- Einfluß der Bauteilgröße,
- Einfluß der kleinräumigen Mittelwertbildung im Kontaktgrundwasser (siehe Abschnitt 2.1),
- Einfluß des Beobachtungszeitpunkts/Beobachtungsorts,
- Einfluß der Durchlässigkeit des Untergrundes und des Grundwassergefälles.

3 MODELLIERUNG DER AUSLAUGUNG AUS DEM BAUSTOFF

3.1 Einführung

Um geeignete Rechenmodelle zur Beschreibung der Auslaugung zu finden, müssen zunächst die Auslaugmechanismen bestimmt und beschrieben werden. Je nach Eigenschaft der Materialien (porös, nicht porös, monolithisch, stückig...) können unterschiedliche Auslaugmechanismen und Randbedingungen vorherrschen /34/.

Für zementgebundene Baustoffe wurde in Grundlagenuntersuchungen nachgewiesen, daß der dominierende Auslaugprozess für die meisten anorganischen Stoffe die Diffusion ist /15, 32/. Daher können zur rechnerischen Beschreibung der Auslaugprozesse Diffusionsmodelle angewendet werden. Im folgenden werden aufgrund von Literaturdaten die zur Beschreibung von Auslaugvorgängen aus zementgebundenen Materialien am häufigsten angewendeten Diffusionsmodelle zusammenfassend beschrieben.

3.2 Diffusionsvorgänge

Die Diffusion ist ein Stofftransport, der auf der Eigenbewegung der Partikel (Brown'sche Molekularbewegung) basiert. Die Diffusion wird dabei durch Unterschiede in den Teilchenkonzentrationen (Konzentrationsgradient) ausgelöst.

Stationäre und instationäre Diffusionsvorgänge lassen sich durch das 1. und 2. Fick'sche Gesetz beschreiben.

Für die Beschreibung von stationären Diffusionsvorgängen (der Konzentrationsgradient bleibt über die Zeit konstant) gilt das 1. Fick'sche Gesetz in der Form:

$$\frac{dN}{dt} = -D_i \cdot A \cdot \frac{dc}{dx} \quad (\text{allgemein: } \dot{m} = -D_i \cdot \text{grad } c) \quad (1)$$

mit:

- dN/dt = Teilchenstrom (Zahl der Teilchen, die pro Zeiteinheit eine bestimmte Fläche passieren)
- dc/dx = Konzentrationsgradient
- A = Flächeneinheit
- D_i = spezifischer Diffusionskoeffizient der Stoffart i

Der allgemeine Fall der instationären Diffusion (Konzentration als Funktion des Ortes und der Zeit) wird durch das 2. Fick'sche Gesetz (auch Diffusionsgleichung) ausgedrückt:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_i \cdot \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (2)$$

mit :

- D_i = spezifischer Diffusionskoeffizient der Stoffart i
- C = Konzentration der Stoffart i
- t = Zeit
- x, y, z = Ausbreitung in x, y , und z Richtung

In den Kapillarporen der Zementsteinmatrix wird die freie Diffusion der Ionen behindert. Zum einen wird die Diffusion durch den längeren Weg in den Poren verlangsamt (physikalische Effekte). In der Diffusionsgleichung wird der freie Diffusionskoeffizient durch den wirksamen (apparent) Diffusionskoeffizienten $D_{a,i}$ ersetzt. Dabei wird die Größe des wirksamen Diffusionskoeffizienten durch die Gesamtporosität und die Gewundenheit der Poren (Tortuosität) bestimmt. Desweiteren kann die Diffusion in der Zementsteinmatrix auch durch chemische Reaktionen der gelösten Stoffe im Porenwasser (pH-Wert abhängige Auflösung, Ausfällung) bzw. mit der Matrix (z. B. Fixierung der Schwermetalle in den Zementsteinmineralien) beeinflußt werden.

Die in Auslaugtests ermittelten Diffusionskoeffizienten für zementgebundene Baustoffe sind daher kleiner als der Diffusionskoeffizient der freien Ionen in Wasser und auch kleiner als der wirksame Diffusionskoeffizient. Man spricht vom *effektiven Diffusionskoeffizienten* $D_{e,i}$.

Zwischen $D_{e,i}$ und D_i besteht ganz allgemein folgender Zusammenhang /32/:

$$D_{e,i} = b \cdot D_{a,i} = a \cdot b \cdot D_i \quad (3)$$

mit:

- $D_{e,i}$ = effektiver Diffusionskoeffizient der Stoffart i
- D_i = freier Diffusionskoeffizient in Wasser
- a = dimensionsloser Faktor, der die physikalischen Einflüsse berücksichtigt
- b = dimensionsloser Faktor, der die chemischen Einflüsse berücksichtigt

3.3 Einfache Diffusionsmodelle

Zur Berechnung der Diffusionskoeffizienten aus praxisorientierten Auslaugversuchen (Standtests) bedient man sich einfacher Lösungen der allgemeinen Diffusionsgleichung.

Diese Lösungen zur Beschreibung der Freisetzung von Inhaltsstoffen aus einer Zementsteinmatrix beruhen auf der Annahme, daß die betrachteten Stoffe in der Auslaugflüssigkeit (Eluent) gut löslich sind und aus der Matrix komplett mobilisiert werden können (verfügbar sind) und durch Diffusion ausgetragen werden. Für einen Feststoff unendlicher Ausdehnung, der über eine Ebene in Kontakt mit einer Flüssigkeit (Eluent) steht, ergibt sich folgende Lösung für die allgemeine Diffusionsgleichung /3, 4, 8, 9/:

$$J(t) = -D_e \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0} = S_0 \sqrt{\frac{D_e}{\pi \cdot t}} \Rightarrow D_e = \pi \cdot t \left(\frac{J}{S_0} \right)^2 \quad (4)$$

mit:

- J = $dN/dt \cdot A$ = Diffusionsstromdichte der Ionen [mmol/(s·m²)] (Zahl der Teilchen, die pro Fläche und Zeit transportiert werden)
- D_e = effektiver Diffusionskoeffizient der Ionen [m²/s]
- t = Elutionszeit [s]
- S₀ = Konzentration der Ionen im Feststoff zum Zeitpunkt t = 0 [mmol/m³]

Die Lösung für unendliche Systeme darf auf endliche Systeme angewandt werden, solange Konzentrationsänderungen in der Nähe der Enden vernachlässigbar sind. Bei dieser Lösung der Diffusionsgleichung wird vorausgesetzt, daß die betrachteten Stoffe während der Auslaugung homogen im Feststoff verteilt bleiben, der effektive Diffusionskoeffizient (D_e) konstant bleibt und keine chemischen Reaktionen den Stofftransport stören. Außerdem muß die Konzentration an der Kontaktzone zwischen Feststoff und Flüssigkeit möglichst null sein, was durch den Austausch des Eluentens während der Auslaugversuche gewährleistet wird.

Bei der Betrachtung der Auslaugung von Schwermetallen aus zementgebundenen Baustoffen kann diese vereinfachte Lösung nur begrenzt eingesetzt werden, da die Löslichkeiten der meisten Schwermetallionen sehr stark vom pH-Wert abhängig sind und die Auflösung langsam vonstatten geht. Ohne weiteres sind diese vereinfachten Modelle für die Auslaugung von Natrium und Kalium anzuwenden und für das schnell lösliche Chromat unter der Annahme, daß sich der pH-Wert in der Porenlösung nicht zu stark verändert (für Beton ab einem Alter von rd. 7 d kann dies ohne weiteres angenommen werden /13/). Dabei sollte im Falle des Chromats für S₀ der lösliche Anteil bei einem pH-Wert von 12 in Ansatz gebracht werden, da dies der pH-Wert ist, der sich in Wasser in Kontakt mit der Betonoberfläche einstellt.

3.4 Rechenmodelle aufgrund von Diffusion und chemischer Reaktion

Viele der umweltrelevanten Stoffe sind in der Zementsteinmatrix fest eingebunden (fixiert) und/oder sind im hochalkalischen Porenwasser nur schwer löslich. Daher muß bei der rechnerischen Beschreibung der Auslaugprozesse für diese Stoffe eine Beschreibung der Auflösung/Ausfällung aufgrund von chemischen Reaktionen berücksichtigt werden.

Es werden prinzipiell zwei Fälle unterschieden:

1. Die Reaktion ist schnell im Vergleich zur Diffusion; es liegt ein konstantes chemisches Gleichgewicht zwischen dem ungelösten und dem gelösten Stoff vor.
2. Die Reaktion ist so langsam, daß die Geschwindigkeit der Bildung der löslichen Form mit in Betracht gezogen werden muß /8/.

Die allgemeine Diffusionsgleichung wird dann für diese Bedingungen erweitert /8/. Für definierte Randbedingungen können Lösungen der erweiterten Diffusionsgleichung gefunden werden /4, 8, 26/. Auf die mathematischen Lösungen wird hier nicht im Detail eingegangen. Angemerkt sei an dieser Stelle, daß allen Lösungsansätzen gemeinsam ist, daß zur Bestimmung des effektiven Diffusionskoeffizienten aus den mathematischen Gleichungen der verfügbare (mobilisierbare) Anteil der betrachteten Stoffe bestimmt werden muß. Bei den in der Literatur beschriebenen Untersuchungen wird hierfür meistens ein Auslaugversuch unter extremen Bedingungen (niedriger pH-Wert, fein aufgemahlene Proben) vorgeschlagen und angewendet. Dies ist für zementgebundene Baustoffe nicht praxisrelevant. Hier ist es notwendig, eine geeignete Verfahrensweise zu finden, mit der die Verfügbarkeit praxisrelevant zu bestimmen ist. Hierzu sind noch Forschungsarbeiten notwendig, um die Kinetik (Reaktionsgeschwindigkeit) der pH-wertabhängigen Auflösung/Nachlösung der umweltrelevanten Stoffe beschreiben zu können /17/. Im Rahmen des Forschungsprojektes wurde daher mit dem einfachen Diffusionsmodell gerechnet.

4 MODELLIERUNG DER AUSBREITUNG DER STOFFE IM BODEN BZW. GRUNDWASSER

4.1 Allgemeines

Um die Ausbreitung der Stoffe im Grundwasser zu ermitteln, können geologische Strömungs- und Transportmodelle angewendet werden. Im Rahmen dieser Forschungsarbeit konnte kein eigenes Strömungs- und Transportprogramm geschrieben werden, sondern es wurde auf frei erhältliche Programme zurückgegriffen. Dabei mußte darauf geachtet werden, daß bei der Transportmodellierung eine Möglichkeit vorhanden ist, die Stoffkonzentrationen im Quellterm (Eintrag der Stoffe ins Grundwasser) mit einer zeitlichen Abhängigkeit einzugeben, da sich ja aufgrund der Diffusionsprozesse die Freisetzungsrates zeitabhängig ändert.

Im Rahmen dieses Forschungsprojektes wurde zur Berechnung der Ausbreitung der Schadstoffe im Grundwasser das Grundwasserströmungs- und Stofftransportmodell des Programms **Processing Modflow** verwendet. Das Programm ermöglichte eine zeitabhängige Eingabe des Quellterms. Im folgenden werden die notwendigen physikalischen Grundlagen und Randbedingungen zur Modellierung des Stofftransports im Grundwasser erläutert.

4.2 Physikalische Grundlagen, Bezeichnungen

4.2.1 Berechnung der Grundwasserströmung

- *Grundwasserleiter*

Den Bereich des Bodens, in dem Grundwasser fließen kann, bezeichnet man als Grundwasserleiter bzw. Aquifer. Im Gegensatz dazu bilden z. B. Tonschichten oder Festgestein Grundwasserhemmer oder Grundwasserstauer.

Die Grundwasserleiter durch Sande oder Kiese werden dabei als Lockergesteinsaquifer bezeichnet. Die Abgrenzung des Aquifers nach unten wird als **Basis**, die Abgrenzung nach oben als **Top** bezeichnet (siehe Bild 3). Der Abstand von der Basis zum Top ist die **Mächtigkeit M** des Aquifers. Befindet sich der Grundwasserspiegel im Grundwasserleiter selber, so spricht man von einem **ungespannten** Aquifer (freie Oberfläche). Erreicht der Grundwasserspiegel die Oberkante des Aquifers oder steht das Wasser im Aquifer sogar unter Druck, so spricht man von **gespannten** Grundwasserverhältnissen. Der Bereich unterhalb des Grundwasserspiegels wird als gesättigter Bereich bezeichnet. Über dem Grundwasserspiegel schließt sich der Kapillarsaum an, in dem Wasser aufgrund von Kapillarkräften aufsteigen kann. Dieser Bereich und auch der darüberliegende Bereich wird als ungesättigte Bodenzone bezeichnet.

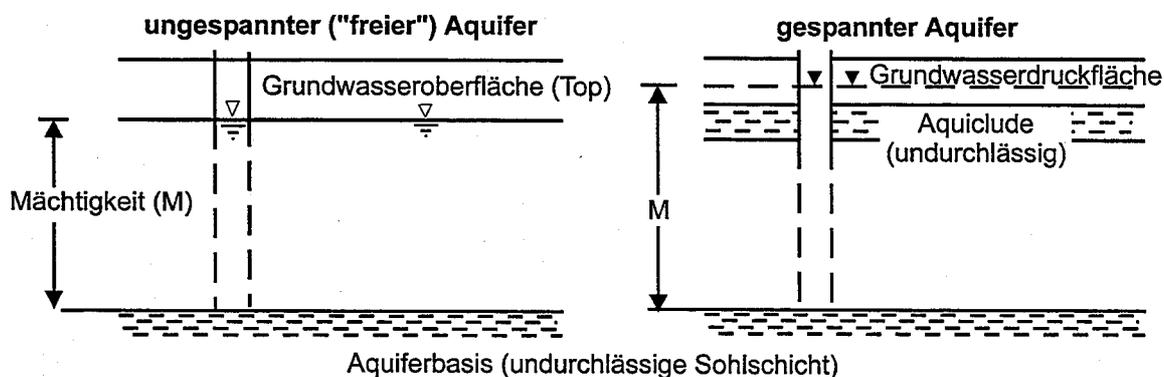


Bild 3: Schematische Darstellung des freien und gespannten Grundwasserleiters (Aquifer) /21/

• **Porosität**

Die Grundwasserströmung ist die Strömung durch das poröse Medium des Bodens, wobei die Bodenteilchen ein Korngerüst aufspannen und das Wasser durch die Porenräume des Korngerüstes fließt. Es ist jedoch nicht der gesamte Porenraum strömungswirksam (abflußwirksam). Eine Strömung findet hauptsächlich dort statt, wo die Bodenart genügend Porenraum zur Strömung bereitstellt, also z. B. im Sand oder Kies. Ton hingegen hat zwar auch einen hohen Porenraum, aufgrund der feinen Struktur der Bodenteilchen liegt hier jedoch fast ausschließlich an Bodenteilchen gebundenes Wasser vor. Den Anteil aller Poren am Bodenvolumen bezeichnet man als **Porosität n** [-], der Anteil des abflußwirksamen Porenraums wird als effektive oder **nutzbare Porosität n_e** bezeichnet. In Tabelle 1 und 2 sind einige Werte für die Gesamtporosität und die effektive Porosität von Lockergesteinen zusammengestellt.

Tabelle 1: Anhaltswerte für die Porosität, die effektive Porosität und den Durchlässigkeitsbeiwert verschiedener Lockergesteine /24/

Gestein	Gesamtporosität n	effektive Porosität n_e	Durchlässig- keitsbeiwert k_f
-	-	-	m/s
1	2	3	4
Sandiger Kies	0,25 - 0,35	0,20 - 0,25	$3 \cdot 10^{-3} - 5 \cdot 10^{-4}$
Kiesiger Sand	0,28 - 0,35	0,15 - 0,20	$1 \cdot 10^{-3} - 2 \cdot 10^{-4}$
Mittlerer Sand	0,30 - 0,38	0,10 - 0,15	$4 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^{-4}$
Schluffiger Sand	0,33 - 0,40	0,08 - 0,12	$2 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^{-5}$
Sandiger Schluff	0,35 - 0,45	0,05 - 0,10	$5 \cdot 10^{-5} - 1 \cdot 10^{-6}$
Toniger Schluff	0,40 - 0,55	0,03 - 0,08	$5 \cdot 10^{-6} - 1 \cdot 10^{-8}$
Schluffiger Ton	0,45 - 0,65	0,02 - 0,05	ca. 10^{-8}

Tabelle 2: Porosität und effektive Porosität (n bzw. n_e) von natürlich vorkommenden Lockergesteinen

Lockergestein	Gesamtporosität n	effektive Porosität n_e
1	2	3
Feinsand	0,42	0,14
Mittelsand	0,40	0,20
Grobsand	0,36	0,25
Feinkies	0,37	0,30
Mittelkies	0,37	0,30
Grobkies	0,37	0,30

- **Grundwasserfließgeschwindigkeit**

Das Grundwasser fließt auf sehr krümmungsreichen Bahnen in den Poren der Lockergesteine. Für verschiedene Aufgabenstellungen gibt es unterschiedliche Definitionen und Herleitungen der **Grundwasserfließgeschwindigkeit**. Im folgenden werden daher die verschiedenen Begriffe erläutert.

1. Grundwasserabstandsgeschwindigkeit v_a

Die **Grundwasserabstandsgeschwindigkeit** v_a errechnet sich aus dem Abstand L von zwei Punkten einer Grundwasserstromlinie und der Fließzeit $t/24/$:

$$v_a = \frac{L}{t} \left[\frac{m}{s} \right] \quad (5)$$

Die Abstandsgeschwindigkeit entspricht nicht der realen Geschwindigkeit des Grundwassers, da die Wasserteilchen auf Umwegen um die Körner des Bodens herumfließen müssen, wodurch sich die zurückgelegte Weglänge wesentlich vergrößert. Da die Fließrichtung nicht genau horizontal verläuft, hat sie also eine horizontale und eine vertikale Komponente. Letztere ist in Porengrundwasserleitern sehr klein und wird daher immer vernachlässigt.

Im Feldversuch kann die Abstandsgeschwindigkeit v_a mittels Markierungsstoffen (Tracer) gemessen werden. Die Tracer werden dabei z. B. in ein Bohrloch gegeben und die Laufzeit zu einem zweiten Bohrloch wird ermittelt /27/.

Anhaltswerte für die Grundwasserabstandsgeschwindigkeit v_a in natürlichen Grundwasserleitern gibt Tabelle 3.

Tabelle 3: Beobachtete Abstandsgeschwindigkeiten v_a und Grundwassergefälle i /27/

Aquifer/Ort	v_a	i
-	m/d	‰
1	2	3
Keupersand bei Nürnberg	1,5	3
Neckartal bei Mannheim	1,2 - 1,6	1,7
Diluvium bei Leipzig	2,5	4,5
Alluvium am Oberrhein	3 - 7,8	0,6
Illerquartär bei Neu-Ulm	11	2,5
Münchener Schotterebene	10	3,3

Der Tabelle 3 sind auch die zugehörigen Grundwassergefälle i zu entnehmen. Zu beachten ist, daß i und v_a örtlich und zeitlich schwanken. Im allgemeinen liegt v_a bei 1-10 m/d, selten bei 10-20 m/d, nur im Karst ist v_a sehr hoch, z. T. über 1 km/d /27/.

2. Grundwasserfiltergeschwindigkeit v_f

Die **Grundwasserfiltergeschwindigkeit** v_f errechnet sich aus dem Grundwasserabfluß Q und dem Querschnitt des Grundwasserleiters A

$$v_f = \frac{Q}{A} \left[\frac{m}{s} \right] \quad (6)$$

Zwischen Abstandsgeschwindigkeit und Filtergeschwindigkeit besteht folgender Zusammenhang:

$$Q = v_a \cdot A_p = v_f \cdot A \quad (7)$$

Häufig wird in der Literatur auch der Begriff der Porengeschwindigkeit v_p verwendet. Dieser Begriff ist die physikalisch korrekte Bezeichnung für die Strömung zwischen den Poren. Der Betrag der Porengeschwindigkeit ist aufgrund der Variabilität der Strömung zwischen den Bodenkörnern mathematisch nicht zu erfassen und kann somit nicht in eine mathematische Beziehung zur Abstands- oder Filtergeschwindigkeit gesetzt werden. Da bei der Berechnung der Grundwasserströmung nur die Filtergeschwindigkeit und beim Stofftransport nur die Abstandsgeschwindigkeit von Interesse sind, wird der Begriff der Porengeschwindigkeit im weiteren nicht mehr verwendet.

- **Transmissivität**

Die **Transmissivität** T ist ein Maß für die Wassermenge, die durch eine Einheitsbreite und über die gesamte Mächtigkeit eines Aquifers bei einem hydraulischen Gradienten von $i = 1$ übertragen wird. Die Transmissivität wird in $[m^2/s]$ angegeben und ist das Produkt des Durchlässigkeitsbeiwerts k_f und der Mächtigkeit M des Aquifers:

$$T_M = M \cdot k_f \quad (8)$$

mit:

T_M : Transmissivität $[m^2/s]$

M : Mächtigkeit des Aquifers (Abstand zwischen Aquiferbasis und Aquifertop, siehe oben) $[m]$

k_f : Durchlässigkeitsbeiwert $[m/s]$

- **Durchlässigkeit (Gesetz von Darcy)**

Das Gesetz von Darcy besagt, das in einem isotropen (lokale Durchlässigkeit ist richtungsunabhängig), porösen Medium die Filtergeschwindigkeit proportional zum Gradienten der Standrohrspiegelhöhen (Gefälle des Grundwasser- bzw. Grundwasserdruckspiegels) ist. In seiner einfachsten Form lautet das Darcy'sche Gesetz (auch Filtergesetz genannt):

$$v_f = k_f \cdot i \quad (9)$$

mit:

k_f : Durchlässigkeitsbeiwert $[m/s]$

$i = \Delta h / \Delta l$: Gefälle des Grundwasser- bzw. Grundwasserdruckspiegels $[-]$

h : Standrohrspiegelhöhe; Wasserhöhe, die sich in einem Meßpegel eines Aquifers einstellt $[m]$

l : Abstand zweier Meßpegelstellen $[m]$

Der Proportionalitätsfaktor k_f wird als Durchlässigkeitsbeiwert bezeichnet. Gleichung (9) gilt nur eindimensional und berücksichtigt nicht eine mögliche Anisotropie des Bodens. Für eine allgemeine Beschreibung der Filtergeschwindigkeiten wird daher richtiger folgende Gleichung verwendet:

$$v_{fi} = -k_{fij} \cdot \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (10)$$

Der symmetrische Tensor k_{fij} heißt Durchlässigkeitstensor. Der Durchlässigkeitstensor ist umgekehrt proportional zur Viskosität, die temperaturabhängig ist. In großen Teilen Deutschlands kann diese Abhängigkeit vernachlässigt werden, da das Grundwasser das ganze Jahr hindurch eine Temperatur um 10 °C aufweist.

In Tabelle 4 sind die Durchlässigkeitsbeiwerte gemäß DIN 18 130 Teil 1 angegeben. In Tabelle 5 sind durch Pumpversuche ermittelte Durchlässigkeitsbeiwerte für verschiedene natürliche Grundwasserleiter zusammengestellt.

Tabelle 4: Durchlässigkeitsbereiche gemäß DIN 18 130 Teil 1

Durchlässigkeitsbereich	Durchlässigkeitsbeiwert (k_f)
-	m/s
1	2
sehr schwach durchlässig	$< 10^{-8}$
schwach durchlässig	$10^{-8} - 10^{-6}$
durchlässig	$> 10^{-6} - 10^{-4}$
stark durchlässig	$> 10^{-4} - 10^{-2}$
sehr stark durchlässig	$> 10^{-2}$

Tabelle 5: Aus Pumpversuchen errechnete Durchlässigkeitsbeiwerte (k_f -Werte) verschiedener Grundwasserleiter /27/

Ort	$k_f \cdot 10^{-3}$
-	m/s
1	2
Sand 4 - 8 mm ohne andere Teile	$3,5 \cdot 10^{-2}$
Sand 2 - 4 mm ohne andere Teile	$2,5 \cdot 10^{-2}$
Grobkies mit Sand, Illertal bei Kempten	$2,0 \cdot 10^{-2}$
Diluvialkies bei Leipzig	$5,0 \cdot 10^{-3}$
Flußsand bei Münster	$2,5 \cdot 10^{-3}$
Dünensand (Nordsee)	$2,0 \cdot 10^{-4}$

• **Strömungsfeldgleichung**

Das Darcy'sche Gesetz reicht allein nicht für die Beschreibung des Strömungsfeldes aus, da es nur die Abhängigkeit der Geschwindigkeitskomponenten von dem jeweiligen Gradienten der Standrohrspiegelhöhe festlegt. Um eine vollständige Beschreibung des Strömungsfeldes zu erhalten wird unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung /11/ die allgemeine Strömungsfeldgleichung hergeleitet:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} k_{f ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} = 0 \quad (11)$$

mit:

- S_s : Speicherterm (im Fall des Aquifers m. freier Oberfläche meist identisch mit der effektiven Porosität)
 h : Standrohrspiegelhöhe
 $k_{f ij}$: Durchlässigkeitstensor
 x_j : Ausdehnung des Aquifers

In dieser Gleichung ist als einzige Unbekannte die Standrohrspiegelhöhe h enthalten.

Üblicherweise sind die meisten Problemstellungen im Grundwasser mit der gewünschten Aussagegenauigkeit zweidimensional lösbar. Nur selten sind tatsächlich dreidimensionale Ansätze notwendig. So wurde auch bei den Berechnungen im Rahmen dieser Forschungsarbeit ein zweidimensionales Strömungs- und Transportmodell verwendet.

Zur geschlossenen Lösung der Strömungsfeldgleichungen müssen sowohl Anfangs- als auch Randbedingungen vorgegeben werden. Bei den durchgeführten Berechnungen wurden als Anfangsbedingung im gesamten Gebiet die Standrohrspiegelhöhen vorgegeben. Als Randbedingung wurden sogenannte Dirichlet Randbedingungen vorgegeben, d. h. die Standrohrspiegelhöhen auf einem Gebietsrandabschnitt wurde vorgegeben.

4.2.2 Stofftransport

In diesem Abschnitt werden die Grundlagen zur Berechnung des Stofftransports im Grundwasser erläutert. Dabei wird nur der Transport eines Stoffes in der gesättigten Wasserzone behandelt. Außerdem werden lediglich im Wasser lösliche Stoffe betrachtet, die nur einfachen Sorptions- bzw. Reaktionsprozessen unterliegen. Chemischer und biologischer Abbau wird nicht betrachtet.

Bei der Ausbreitung eines Stoffes im Grundwasser wird grundsätzlich unterschieden zwischen /11, 22, 24/:

- dem Transport eines idealen Tracers durch Advektion, Diffusion und Dispersion
- sowie den eventuellen zusätzlichen Sorptions- und Reaktionsvorgängen bei Stoffen, die nicht als idealer Tracer angesehen werden können.

Als idealer Tracer wird also ein Stoff bezeichnet, der weder Sorptions- noch Reaktionsprozessen unterliegt /11/.

Die *Advektion* beschreibt den Transport eines gelösten Stoffes mit der Strömungsgeschwindigkeit des Grundwassers (Abstandsgeschwindigkeit). Hierzu muß also eine genaue Kenntnis des Strömungsfeldes vorhanden sein /24/.

Die *Diffusion* bezeichnet die Ausbreitung eines Stoffes über die Brown'sche Molekularbewegung (siehe Abschnitt 3.1). Diese Ausbreitungsform ist relativ langsam und benötigt daher einen langen Zeitraum für eine meß-/feststellbare Ausbreitung. Die molekulare Diffusion im Grundwasser ist die gleiche wie im freien Wasser ohne Bodenmatrix, wobei der Diffusionskoeffizient im Grundwasser sich ergibt aus dem Produkt der effektiven Bodenporosität und dem freien Diffusionskoeffizienten der Stoffart /11, 24/:

$$D_{GW,i} = n_e \cdot D_{0,i} \quad (12)$$

mit:

$D_{GW,i}$: Diffusionskoeffizient der Stoffart i im Grundwasser [m/s]

n_e : effektive Porosität des Bodens [-]

$D_{0,i}$: freier Diffusionskoeffizient der Stoffart i in Wasser [m/s]

Wenn eine Schadstoffwolke (hier Kontaktgrundwasser) sich mit unbelastetem Grundwasser vermischt, kommt es zur Aufweitung der Schadstoffwolke. Dieser Prozeß wird **Dispersion** genannt /24/. Die Dispersion wird durch zwei Effekte hervorgerufen. Zum einen müssen die Schadstoffteilchen im porösen Medium unterschiedlich lange Wegstrecken zurücklegen (mechanische Dispersion) und zum anderen erfolgt die Diffusion immer in Richtung des Konzentrationsgefälles. Die Kombination beider Effekte wird hydrodynamische Dispersion genannt. Diese Phänomene müssen in der mathematischen Formulierung des Stofftransportes durch entsprechende Dispersionsterme berücksichtigt werden /11, 24/. Dabei wird zwischen longitudinaler (Streckung in Strömungsrichtung) und transversaler (Verbreiterung quer zur Strömungsrichtung) unterschieden, wobei die longitudinale Dispersion um einen Faktor 10 größer ist als die transversale Dispersion. Infolge der Dispersion breitet sich eine Stoffwolke im Grundwasser mit zunehmender Entfernung von ihrer Quelle immer weiter aus, d. h., die Dispersion ist ein skalenabhängiges Phänomen. Anhaltswerte für die Größe des longitudinalen Dispersionskoeffizienten sind der Literaturstelle /22/ zu entnehmen. Die Stoffausbreitung durch Dispersion ist bei praktischen Problemstellungen grundsätzlich wesentlich größer als die Stoffausbreitung über Diffusion, so daß diese meistens vernachlässigt werden kann.

Betrachtet man nicht nur den Stofftransport eines idealen Tracers, so müssen auch Sorptions- und Reaktionsprozesse betrachtet werden. Als Sorption bezeichnet man den Austausch von Wasserinhaltsstoffen zwischen dem Wasser und der Kornmatrix. Die Anlage von Stoffen an der Oberfläche der Kornmatrix bezeichnet man als Adsorption, deren Umkehrung die Desorption ist. Der Grad der Adsorption im Grundwasser ist vor allem von der Bodenart abhängig. So erfolgt in Kies- und Sandböden nur in geringerem Maße Adsorption, in organischen Böden oder Tonböden findet dagegen eine sehr hohe Adsorption statt. Die Adsorption wird durch sogenannte Isothermen (Gleichgewicht bei konstanter Temperatur) beschrieben, z. B. durch die Freundlich- oder Langmuir-Isotherme. Dabei läßt sich eine Gleichgewichtsadsorption auch als gleichmäßige Verzögerung der Stoffausbreitung verstehen. Das Maß der Verzögerung wird vom **Retardierungsfaktor R** bestimmt:

$$R = 1 + \frac{K_d}{n} \quad (13)$$

mit:

R: Retardierungsfaktor [-]

K_d : Gleichgewichtsfaktor der Adsorption (Adsorptionskoeffizient) [-]

n: Porosität des Bodens [-]

Neben der Gleichgewichtsadsorption gibt es auch die Adsorption, die keinem Gleichgewicht unterliegt. Einzelheiten hierzu sind /22, 24/ zu entnehmen, ebenso die Beschreibung von chemischen Abbaureaktionen.

Berücksichtigt man die aufgeführten Phänomene, so erhält man für einen Stofftransport ohne Adsorption und chemischem Abbau folgende Stofftransportgleichung:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_{a_i} \frac{\partial C}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{t_{ij}} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) = Q_c \quad (14)$$

Auch zur Lösung der Stofftransportgleichung müssen Anfangs- und Randbedingungen gewählt werden. Als Anfangsbedingung muß die Stoffkonzentration im Grundwasser angegeben werden. Für die durchgeführten Berechnungen wurden für Chrom(VI) $C_{0,Cr} = 0$ angenommen, da die Konzentration von Chrom(VI) im Grundwasser nur sehr gering ist (0 bis 0,4 µg/l /30/). Als Randbedingungen werden wie bei der Strömungsfeldberechnung Drichelet Randbedingungen gewählt (Vorgabe der Konzentrationen auf einem Gebietsrandabschnitt).

5 DURCHGEFÜHRTE MODELLRECHNUNGEN

5.1 Allgemeines

Im Rahmen des Forschungsvorhabens wurden Modellberechnungen durchgeführt, um die Ergebnisse von Laborversuchen auf Praxisbedingungen zu übertragen. Dazu wurden mit Hilfe der Rechenmodelle die sich im Grundwasser orts- und zeitabhängig einstellenden Stoffkonzentrationen prognostiziert. Dabei sollte überprüft werden, welchen Einfluß verschiedene Randbedingungen/Parameter auf die prognostizierten Konzentrationen haben. Die Ergebnisse der Berechnungen sollen als Grundlage zur Festlegung von Konventionen bei der Bewertung der Emissionen aus zementgebundenen Baustoffen dienen (siehe Abschnitt 2.2).

Um zu einer einheitlichen Bewertung der Auslaugung aus monolithischen Baustoffen zu gelangen, müssen folgende Randbedingungen festgelegt werden:

- die Größe des betrachteten Bauteils,
- der Bereich des Kontakgrundwassers, über den bei der Bewertung kleinräumig gemittelt werden kann,
- der Abstand vom Bauteil, in dem die ermittelten Konzentrationen mit den entsprechenden Vorsorgewerten (Geringfügigkeitsschwellen) verglichen werden,
- der Zeitpunkt nach dem ersten Kontakt mit dem Grundwasser an dem die ermittelten Konzentrationen mit den Vorsorgewerten verglichen werden.

Um die orts- und zeitabhängigen Konzentrationen im Grundwasser zu prognostizieren, sind zwei Schritte notwendig (vgl. Abschnitt 2.2):

1. Ermittlung der Freisetzung der umweltrelevanten Stoffe (hier Chrom) aus dem Baustoff (Beton) mit Hilfe des Diffusionsmodells. Diese Emission entspricht dem Eintrag, der Immission in das Grundwasser.
2. Simulation der Ausbreitung der umweltrelevanten Stoffe im Grundwasser mit dem Strömungs- und Transportmodell.

Im folgenden werden diese beiden Schritte näher beschrieben.

5.2 Auswahl der Betone

Bei den im Rahmen dieses Forschungsprojektes durchgeführten Modellrechnungen wurden vorhandene Untersuchungsergebnisse aus /32, 33, 37/ ausgewertet. Dabei handelt es sich um Ergebnisse von praxisorientierten Auslaugversuchen im Labor (Standtests). Die Standtests wurden unter folgenden Bedingungen durchgeführt:

- Prüfkörper: Betonwürfel (10 x 10 x 10 cm³),
- Verhältnis Volumen des Eluenten
zur Oberfläche des Probekörpers: 8 : 1,
- Eluent: entionisiertes Wasser,
- Versuchstemperatur: Raumtemperatur,
- Zahl der Eluentenwechsel: 8 (6)
- Bewegungsart: nicht rühren.

Es wurde der Einfluß des Bindemittels (Portlandzement bzw. Hochofenzement) und der Zusatz von Steinkohlenflugasche berücksichtigt. Die Zusammensetzung der für die Berechnungen ausgewählten Betone ist der Tabelle A3 zu entnehmen. Die chemische Zusammensetzung der Ausgangsstoffe ist für die Hauptbestandteile in der Tabelle A4 und für die Schwermetalle bzw. Spurenelemente in der Tabelle A5 zusammengefaßt. Der Tabelle A5 sind auch Angaben zum Auslaugverhalten der Ausgangsstoffe zu entnehmen. In Tabelle A7 sind zur Einordnung der verwendeten Ausgangsstoffe die Spannweiten der Schwermetallgehalte von Betonausgangsstoffen zusammengestellt. Der Vergleich der Tabellen A5 und A7 zeigt, daß die eingesetzten Zemente bezüglich der Schwermetallgehalte im mittleren Bereich der Spannweiten liegen und die SFA1 einen relativ hohen Schwermetallgehalt aufweist, während die SFA2 ebenfalls einen mittleren Schwermetallgehalt aufweist /32/.

In Tabelle A8 sind die Ergebnisse der in /32, 33, 37/ durchgeführten Standtests zusammengefaßt wiedergegeben. Den Ergebnissen ist zu entnehmen, daß aus Beton, der aus genormten Ausgangsstoffen hergestellt wird, als umweltrelevanter Stoff im jungen Alter des Betons vor allem das Chrom freigesetzt wird. Auch die Untersuchung von Betonen mit Einsatz nicht genormter oder bauaufsichtlich zugelassener Ausgangsstoffe hat ergeben, daß die meisten Schwermetalle fest in die Zementsteinmatrix eingebunden werden, lediglich das Chrom (sofern in den Ausgangsstoffen vorhanden) wird im jungen Alter des Betons in nachweisbaren Mengen freigesetzt (siehe Tabelle A9). Die Modellrechnungen im Rahmen dieses Projektes wurden daher am Beispiel des Chroms durchgeführt. Die Ergebnisse lassen sich hinsichtlich der Festlegung von Konventionen auch auf andere Schwermetalle übertragen, wobei jedoch das Rechenmodell für die Freisetzung aus dem Baustoff komplexer gestaltet sein muß (siehe Abschnitt 3.4).

Bei den Untersuchungen in /32, 33, 37/ wurde in den Eluatn jeweils der Gesamtchromgehalt bestimmt, d. h. es wurde nicht differenziert zwischen Chrom(III) und Chrom(VI). Zusätzliche Untersuchungen die im Rahmen eines laufenden Forschungsprojektes durchgeführt wurden haben belegt, daß es sich bei dem freigesetzten Chrom um Chrom(VI) handelt.

5.3 Beschreibung der Diffusionsberechnungen

- *Ermittlung der effektiven Diffusionskoeffizienten für die Berechnungen*

Für die Modellrechnungen wurde zunächst nach Gleichung (4) der effektive Diffusionskoeffizient bestimmt. Für Chrom(VI) kann diese Gleichung unter der Annahme verwendet werden, daß sich der pH-Wert im Porenwasser während des Auslaugversuchs nicht wesentlich verändert. Da nicht das gesamte im Beton vorhandene Chrom eluierbar ist, wurde anstelle der Gesamtkonzentration für S_0 die bei pH = 12 eluierbare (mobilisierbare) Menge eingesetzt. Für die Berechnung des Diffusionsstromes wurde folgende Gleichung verwendet /15, 32/:

$$J_i = \sum_{i=1}^n (C_i - C_0) \frac{V}{A \cdot t_i} \quad (15)$$

mit:

J_i = Diffusionsstromdichte; Menge der Teilchen, die pro Fläche und Zeit transportiert werden [mmol/(s·m²)]

C_i = Konzentration der betrachteten Ionenart im Eluat [mmol/l] im i-ten Intervall

C_0 = ursprüngliche Konzentration der betrachteten Ionen [mmol/l] im Eluenten (Blindwert)

V = Volumen des Eluenten [l]

A = Oberfläche des Prüfkörpers [m²]

t_i = gesamte Kontaktzeit nach der i-ten Eluentenerneuerung [s]

n = Anzahl der Zyklen

Die so Gleichung (4) berechneten effektiven Diffusionskoeffizienten sind in Tabelle A10 wiedergegeben. Diese wurden dann in den durchgeführten numerischen Berechnungen verwendet.

Für die Modellierung der Freisetzung aus dem Baustoff (Beton) und der anschließenden Ausbreitung in angrenzendes (ruhend) Wasser wurde ein einfaches numerisches Rechenmodell gewählt. Dazu wurde die allgemeine Diffusionsgleichung in eindimensionaler Form verwendet (wie auch bei der Auswertung der Versuchsergebnisse). Die instationäre eindimensionale Diffusionsgleichung wurde dann im Vorwärtsdifferenzenverfahren numerisch gelöst /20/. Mit diesem Diffusionsmodell wurden die orts- und zeitabhängigen Chromkonzentrationen in Wasser, das in Kontakt mit einer Betonoberfläche steht, berechnet.

In Bild 4 sind die Ergebnisse dieser Berechnungen am Beispiel der Betone B2 und B3 wiedergegeben. Wie aufgrund der allgemeinen Diffusionsgesetze zu erwarten ist, nehmen die Chromkonzentrationen sowohl mit zunehmender Kontaktzeit als auch mit zunehmenden Abstand zum Beton ab.

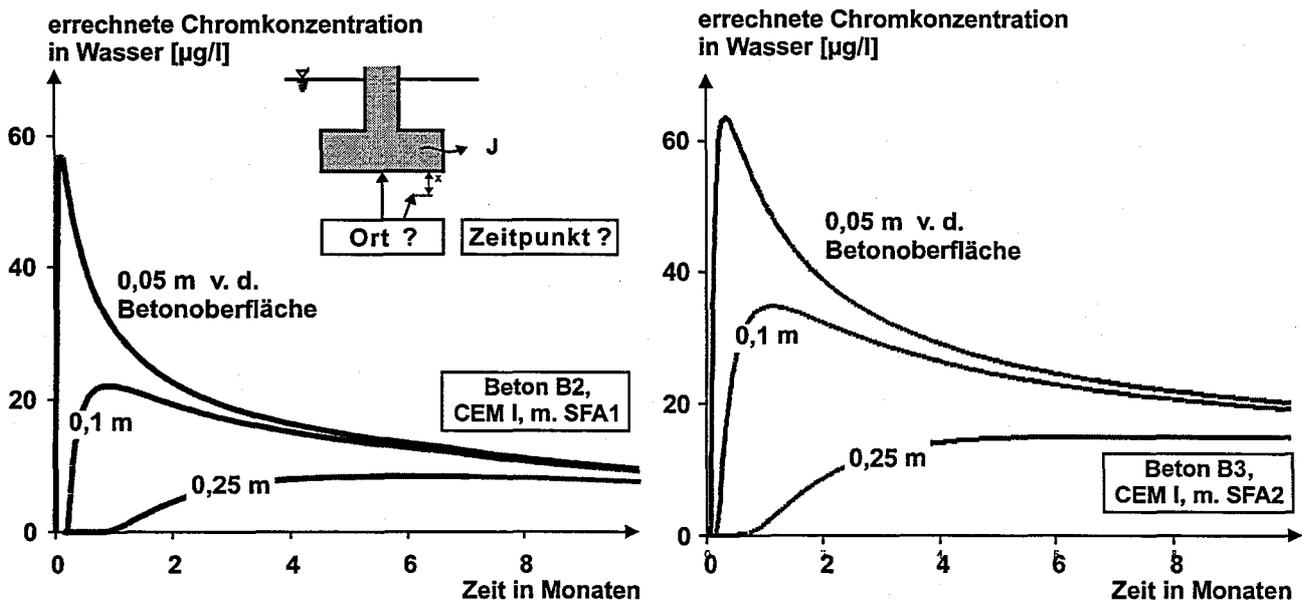


Bild 4: Ermittlung der Freisetzung von Chrom aus Beton und Ausbreitung in Wasser anhand eines numerischen Diffusionsrechenansatz (B2: $D_e = 2,1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$; B3: $D_e = 3,1 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$)

Es gilt also, Konventionen zu treffen, für welchen Abstand vom Baustoff/Bauteil die sich zeitlich ändernden Konzentrationen mit den entsprechenden Richt-/Grenzwerten verglichen werden sollen. Nach den Vorgaben aus dem Gewässerschutz ist hier das Kontaktgrundwasser, das ist die an den Beton angrenzende, sehr dünne Wasserschicht, zu betrachten, wobei eine kleinräumige Mittelwertbildung zulässig ist /38/. Das heißt, es muß für die Bewertung festgelegt werden, über welchen Bereich die Konzentrationen gemittelt werden sollen.

In den Bildern 5 und 6 wurde eine Überprüfung der mit den Rechenmodell erzielten Ergebnissen vorgenommen. Es werden jeweils die Versuchsergebnisse mit den mit dem Rechenmodell erzielten Ergebnissen verglichen.

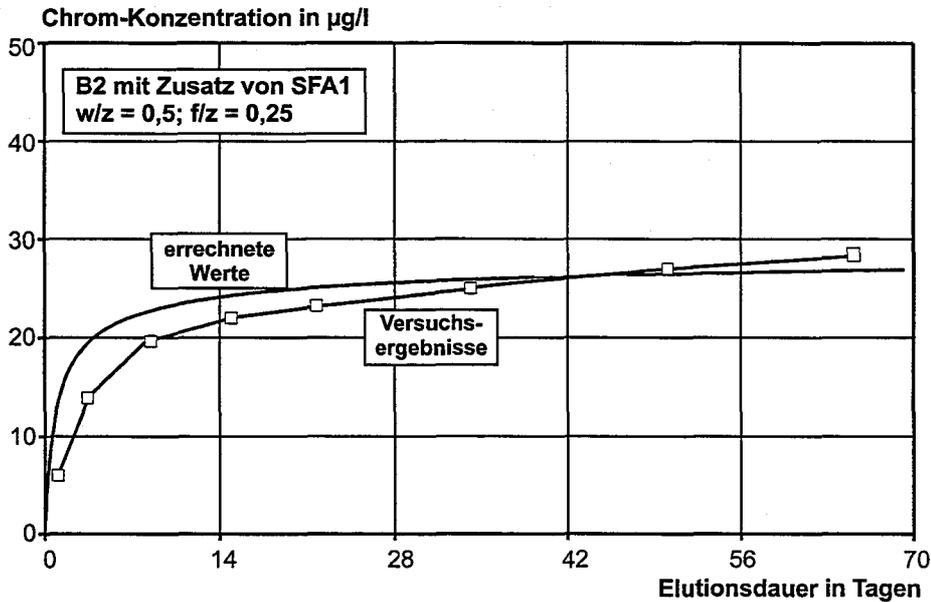


Bild 5: Ergebnisse der Diffusionsberechnungen; Vergleich von errechneten Konzentrationen mit im Standtest gemessenen Konzentrationen

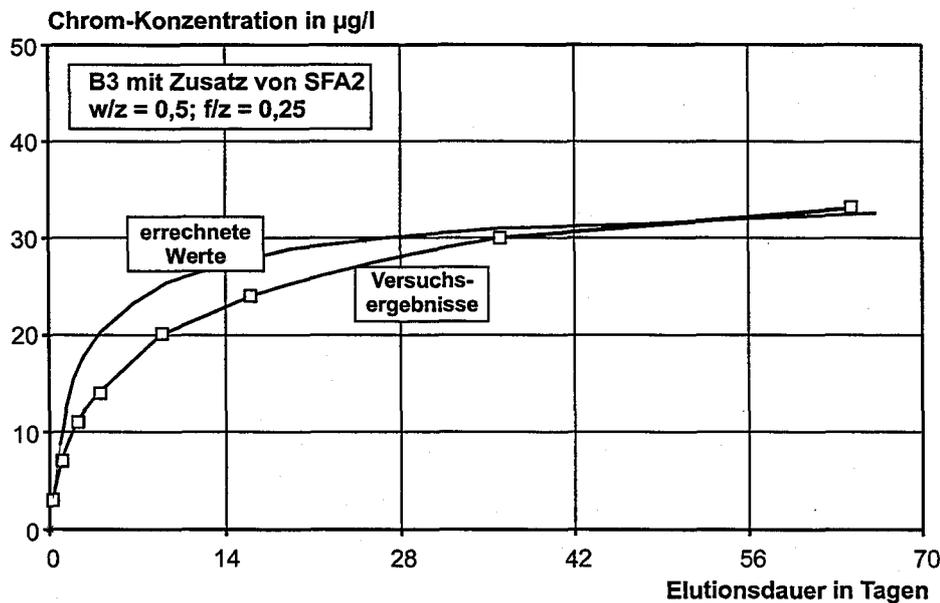


Bild 6: Ergebnisse der Diffusionsberechnungen; Vergleich von errechneten Konzentrationen mit im Standtest gemessenen Konzentrationen

Wie man den Bildern entnehmen kann, gibt es eine gute Übereinstimmung zwischen Versuchsergebnissen und gerechneten Konzentrationen. Lediglich der am Anfang ergeben sich mit dem Diffusionsmodell etwas höhere Konzentrationen.

Die Abweichungen der errechneten mit den gemessenen Kurven haben folgende Gründe:

- Für die numerische Lösung der Diffusionsgleichung müssen gewisse Randbedingungen vorgegeben werden. Die Berechnung setzt voraus, daß die Konzentration im Eluat immer null ist. Gleichzeitig wird angenommen, daß die Freisetzung nur in einer Ebene stattfindet (dies war bei dem gewählten Standversuch nicht gegeben).
- Im Versuch muß sich erst ein Diffusionsgleichgewicht einstellen. Nicht über die ganze Versuchsdauer liegt tatsächlich Diffusionskontrolle vor.

Die mit Hilfe des Diffusionsansatzes errechneten zeitabhängigen Freisetzungen (mg/m^2 als $f(t)$) wurden im Transportprogramm in den entsprechenden Quellterm eingegeben. Anschließend wurden mit dem Strömungs- und Transportmodell (siehe Abschnitt 5.4) die orts- und zeitabhängigen Konzentrationen der umweltrelevanten Stoffe (hier Chrom) im Grundwasser berechnet. Dabei mußte die Freisetzungsrates, die im Versuch für Wasser bestimmt worden war, noch auf den Boden (Untergrund) bezogen werden.

Hierzu wurden die errechneten Freisetzungsrates jeweils mit der effektiven Porosität multipliziert. Darüber hinaus wurden die Rechenergebnisse aus dem Diffusionsprogramm noch über die ersten 10 cm gemittelt, da das Transportprogramm die Daten aus den Diffusionsberechnungen nicht direkt einlesen konnte.

5.4 Beschreibung der durchgeführten Transportberechnungen

5.4.1 Allgemeines

In Abschnitt 5.1 wurden die für die Bewertung festzulegenden Randbedingungen aufgelistet. Zusätzlich müssen für die Prognose der Stoffkonzentrationen im Grundwasser mit einem Strömungs- und Transportmodell noch folgende Randbedingungen festgelegt werden:

- die Durchlässigkeit des Untergrundes k_f und das Grundwassergefälle i .
- die Beschaffenheit des Grundwasserleiters (freie Oberfläche, gespannte Oberfläche, Mächtigkeit),
- die Abmessungen des Modellgeländes.

In den durchgeführten Berechnungen wurden einige der angegebenen Parameter variiert, um zu einer realistischen und praxismgerechten Festlegung der Randbedingungen zu gelangen. Die gewählten Bedingungen spiegeln dabei nicht die in der Natur tatsächlich gegebenen Bedingungen in einem Grundwasserleiter wieder, die wesentlich komplexer sind, als sie mit einem Rechenmodell abgebildet werden können. Mit dem Modell sollen Betone standortunabhängig unter definierten und gleichen Randbedingungen bewertet werden. Dabei gilt es die Randbedingungen möglichst realistisch festzulegen, um obere und untere Schranken des tatsächlichen Geschehens abstecken zu können (Szenarien-Technik).

5.4.2 Beschreibung des gewählten Strömungs- und Transportmodells

In Bild 7 ist das für die Berechnungen verwendete Grundwassermodell einmal im horizontalen Schnitt durch den Grundwasserleiter (Aquifer) und einmal im vertikalen Schnitt durch den Aquifer dargestellt. Für die im Rahmen des Forschungsprojektes durchgeführten Berechnungen wurde ein Modellgelände mit den Abmessungen 150 x 300 m² gewählt. Die Strömungs- und Transportmodellierung wurde zweidimensional durchgeführt.

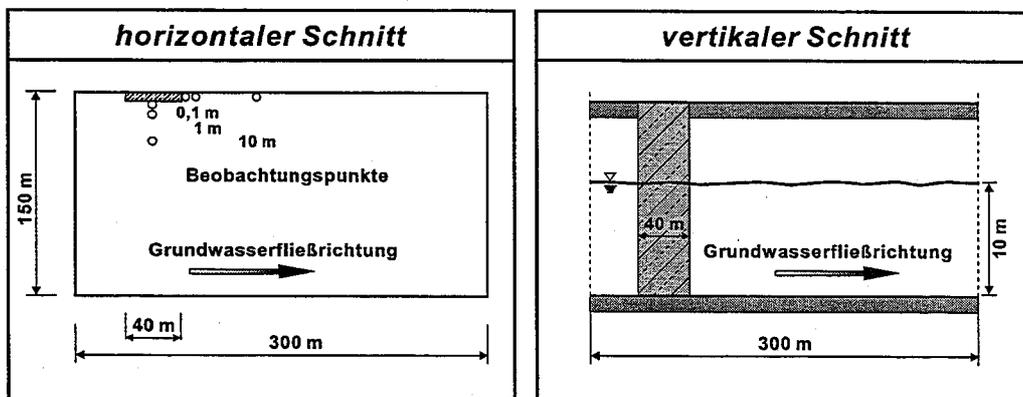


Bild 7: Betonfundament im Kontakt mit Grundwasser; schematische Skizzierung des Grundwassermodells zur Bewertung der Auslaugung

In dem Modell wird ein Betonfundament betrachtet, das jeweils über seine gesamte Breite, die variiert wurde (im Bild 40 m) in den Aquifer hineinragt. Da das Transportmodell die eingebrachten Stoffe stets gleichmäßig über die gesamte Aquiferhöhe verteilt, wurde in dem Modell die Freisetzung aus dem Fundament über die gesamte Aquiferhöhe (10 m) ermittelt. Damit werden die Berechnungen unabhängig von der Mächtigkeit der grundwasserführenden Schicht.

Das verwendete Transportmodell ermöglicht es, in beliebigen Abständen auf dem Modellgelände Beobachtungspunkte anzugeben. An diesen Beobachtungspunkten können die sich zeitlich ändernden Konzentrationsverläufe (Durchgangskurven) aufgezeichnet werden. Bei den durchgeführten Berechnungen wurden in der Regel Beobachtungspunkte im Abstand von 0,1 m, 1 m und 10 m vom Betonfundament jeweils in Richtung des fließenden Grundwassers und vertikal zur Fließrichtung eingefügt.

Es wurde ein Grundwasserleiter mit freier Oberfläche betrachtet. Dabei wurde die Durchlässigkeit des Bodens in den Bereichen $k_f = 10^{-5}$ - 10^{-3} m/s variiert (durchlässig bis stark durchlässiger Untergrund, siehe Tabelle 4). Bei dieser Variation verändert sich naturgemäß auch die Fließgeschwindigkeit des Grundwassers ($v_f \approx k_f \cdot i$). Die zugehörige effektive Porosität wurde der Literatur entnommen /22, 24/.

Das Grundwassergefälle, und damit auch die Fließgeschwindigkeit des Wassers wurde im Bereich 10^{-4} - 10^{-5} variiert.

Es sei an dieser Stelle angemerkt, daß bei den Berechnungen sehr geringe Fließgeschwindigkeiten betrachtet wurden. Das heißt, die in das Grundwasser eingetragenen Stoffe werden nur in sehr geringen Maße durch neu hinzutretendes Grundwasser verdünnt, so daß eine Betrachtung ungünstiger Verhältnisse erfolgt.

Der Aquifer wurde als isotrop (Anisotropiefaktor = 1) betrachtet, was in der Natur natürlich nicht vorkommt. Die longitudinale und transversale Dispersionslänge, die für die Berechnungen notwendig sind, wurden ebenfalls der Literatur entnommen.

Bei den Berechnungen wurde eine Retardierung der Ausbreitung des Chroms im Boden, d. h. die verzögerte Ausbreitung aufgrund von Adsorptionsreaktion im Boden, zunächst nicht berücksichtigt. Diese findet aber unter natürlichen Bedingungen statt. Das heißt, auch hier wurden ungünstige Bedingungen gewählt.

Die für die Berechnungen gewählten Randbedingungen werden in Tabelle 6 noch einmal zusammengefaßt.

Wie oben beschrieben, sollten bei den Berechnungen einige Parameter variiert werden, um zu überprüfen, wie sich diese Variationen auf die prognostizierten Stoffkonzentrationen im Grundwasser auswirken.

Tabelle 6: Modellparameter für die Transportberechnungen

Parameter	Symbol	Einheit	gewählte Größe	Literatur
1	2	3	4	5
Modellgröße	-	m · m	300 · 150	-
Durchlässigkeitsbeiwert	k_f	m/s	variiert	s. Tabelle 7
effektive Porosität	n_e	-	variiert	s. Tabelle 7
Grundwassergefälle	i	-	variiert	-
Anisotropiefaktor	-	-	1	-
longitudinale Dispersionslänge ¹⁾	α_L	m	50	/24, 21/
transversale Dispersionslänge	α_T	m	$\alpha_L/10 = 5$	/11, 24/
effektiver Diffusionskoeffizient für Cr im Untergrund	$D_{e,U}$	m/s	$D_0 \cdot n_e = 2,26 \cdot 10^{-10}$	/24, 25/
Retardierungsfaktor	R	-	1 bzw. 2	/6/
Immission, gemittelt über 10 cm	J(t)	mg/(m ² ·s)	errechnet aus Diffusionsmodell (s. Abschnitt 5.3)	-

1) die longitudinale Dispersion ist abhängig von der betrachteten Ausdehnung des Aquifers (Größe des Modellgebiets)

In Tabelle 7 sind die gewählten Variationen zusammengestellt. Dabei wurden in Diskussionen innerhalb der DIBt Projektgruppe "Boden- und Grundwassergefährdung durch Baustoffe" und auch der Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA) einige Randbedingungen vorgeschlagen (im weiteren Text als „Standardbedingungen“ bezeichnet). Diese Randbedingungen sind in der Tabelle grau unterlegt. Dabei handelt es sich um ungünstige Randbedingungen. So ist z. B. die Abstandsgeschwindigkeit des Grundwassers, die sich nach Gleichung (9) ergibt, unter Standardbedingungen nur etwa 0,01 m/d (die mittlere „Fließgeschwindigkeit“ im Standtest“ (ermittelt aus dem Gesamtvolumen des Eluentens, dividiert durch die Oberfläche des Prüfkörpers und die Gesamtelutionszeit) beträgt bei 8 Eluentenwechseln ungefähr 0,08 m/d). Vergleicht man diesen Wert mit den in Tabelle 3 angegebenen Grundwasserfließgeschwindigkeiten, so handelt es sich in der Tat um fast stehendes Grundwasser.

Tabelle 7: Modellvariationen zur Berechnung der orts- und zeitabhängigen Chromkonzentrationen in Grundwasser

Parameter	Symbol	Einheit	gewählte Größe
1	2	3	4
Fläche des Bauteils	-	m ²	200
			400
			800
kleinräumige Mittelwertbildung im Kontaktgrundwasser	-	cm	0 - 10
			0 - 20
			0 - 30
Abstand zum Bauteil	-	m	0,1
			1
			10
Durchlässigkeitsbeiwert; effektive Porosität	k _f ; n _e	m/s; -	10 ⁻³ ; 0,2
			10 ⁻⁴ ; 0,1
			10 ⁻⁵ ; 0,1
Grundwassergefälle	i	-	1·10 ⁻³
			5·10 ⁻³
			1·10 ⁻⁴

 : Standardbedingungen

• *Einfluß des Betons*

Für die Transportberechnungen wurden die fünf Betone betrachtet, deren Freisetzung aus dem Baustoff wie in Abschnitt 5.3 beschrieben berechnet wurde.

Zunächst wurden für die fünf Betone im Modell jeweils die sich unter Standardbedingungen (siehe Tabelle 7) einstellenden Grundwasserkonzentrationen berechnet.

Die Ergebnisse der Berechnungen für die fünf Betone sind in Bild 8 wiedergegeben. Wie erwartet, nehmen die Chromkonzentrationen im Grundwasser mit zunehmender Zeit nach dem ersten Kontakt mit dem Grundwasser ab. Für Beton B3 werden die höchsten Konzentrationen prognostiziert. Für die Betone mit Hochofenzement als Bindemittel werden die geringsten Konzentrationen prognostiziert. Dabei war nur ein geringer Unterschied in der Auslaugrate durch den Zusatz von Steinkohlenflugasche bei den Betonen mit Hochofenzement als Bindemittel zu verzeichnen.

Lediglich die Konzentrationen für den Beton B3 überschreiten im Abstand 0,1 m vom Bauteil für einen Zeitraum von etwa vier Monaten die Vorsorgewerte für Chrom(VI) ($10 \mu\text{g/l}$).

Der Beton B3 wurde für die weiteren Berechnungen gewählt, da er die höchste Chromauslaugung der betrachteten Betone aufwies.

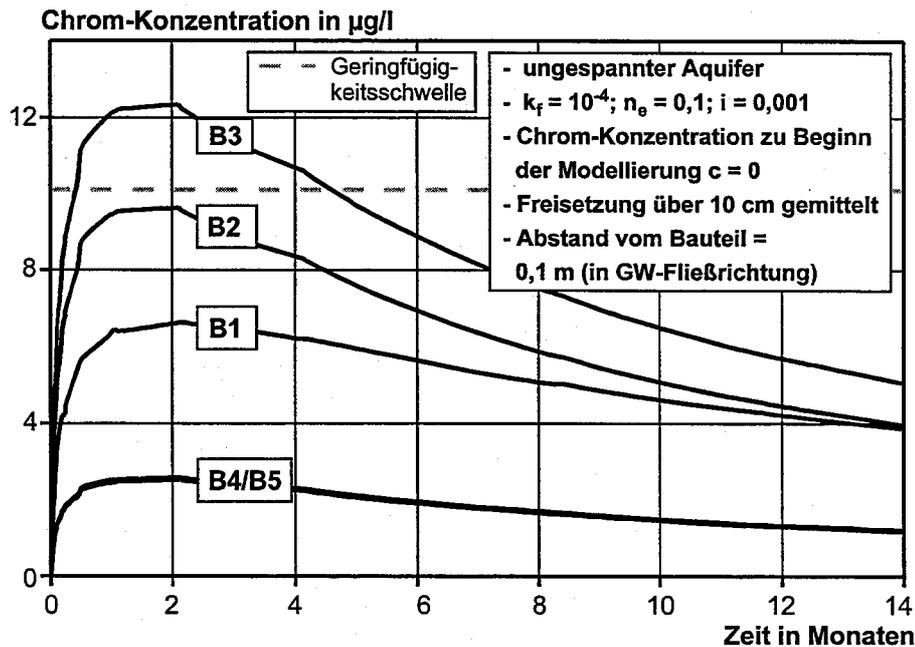


Bild 8: Zeitabhängige Chromkonzentrationen im Grundwasser (GW); Abhängigkeit vom Beton

• *Einfluß der Bauteilgröße*

In Bild 9 sind die zeitabhängigen Chromkonzentrationen im Grundwasser für den Beton B3 in Abhängigkeit von der Bauteilgröße dargestellt. Dem Bild ist zu entnehmen, daß bei einer Bauteilfläche von 200 m^2 die Chromkonzentrationen lediglich in einem Zeitraum von etwa einem Monat den Vorsorgewert für Chrom(VI) leicht überschreiten. Mit steigender Größe des Bauteils wird das Maximum der Durchgangskurve nicht wesentlich höher, aber die Konzentrationen im Grundwasser nehmen mit steigender Bauteilgröße langsamer ab, d. h. das Maximum wird immer breiter.

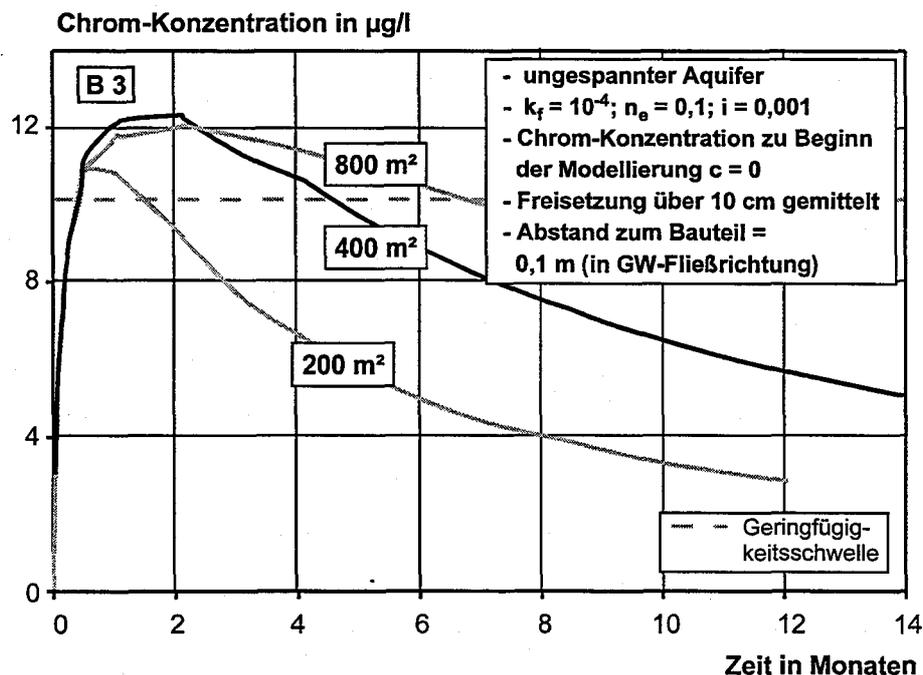


Bild 9: Zeitabhängige Chromkonzentrationen im Grundwasser (GW); Abhängigkeit von der Größe des Bauteils

• **Einfluß der kleinräumigen Mittelwertbildung**

In Bild 10 ist der Einfluß der Mittelwertbildung über verschiedene Abstände zum Bauteil dargestellt, nämlich 0 - 10 cm, 0 - 20 cm und 0 - 30 cm. Wie in Abschnitt 2.1 beschrieben wurde, ist nach Wasserrecht eine kleinräumige Mittelwertbildung erlaubt. Dem Bild 10 ist zu entnehmen, daß sich in diesen kleinen Abständen zum Bauwerk die Konzentrationen nicht wesentlich verändern. Dies ist vor allem auf die langsame Fließgeschwindigkeit des Wassers zurückzuführen. Für die Bewertung könnten die Konzentrationen also ohne weiteres in einem Kontaktwasserbereich von 0 - 30 cm gemittelt werden. Wie sich die prognostizierten Konzentrationen in größeren Abständen zum Bauteil verändern, wird im nächsten Abschnitt erläutert.

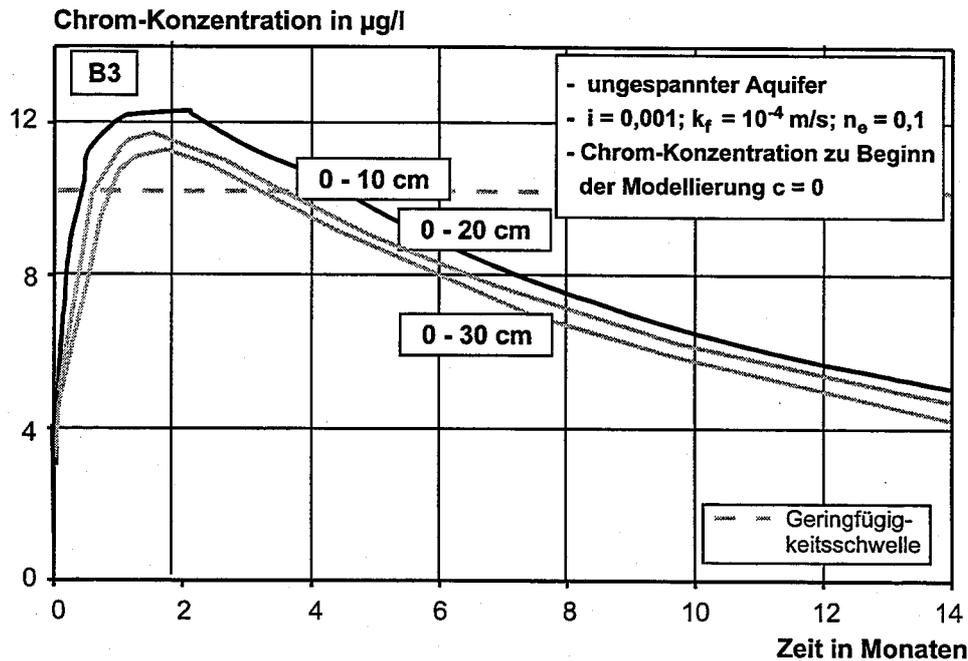


Bild 10: Zeitabhängige Chromkonzentrationen im Grundwasser; Abhängigkeit von der kleinräumigen Mittelwertbildung

• *Einfluß des Abstands vom Bauteil*

Um zu verdeutlichen, wie die prognostizierten Konzentrationen vom Abstand zum Bauteil abhängen, ist in Bild 11 zunächst ein horizontaler Schnitt durch den Aquifer dargestellt. In dem Bild sind die sich nach einem Jahr einstellenden Konzentrationen wiedergegeben. Wie dem Bild zu entnehmen ist, werden die Geringfügigkeitsschwellen für Chrom(VI) nach einem Jahr Kontaktzeit an keiner Stelle des Modellgeländes überschritten.

In Bild 12 sind die zeitabhängigen Chromkonzentrationen (Durchgangskurven) für den Beton B3 in verschiedenen Abständen (in Fließrichtung (f) und senkrecht (s) zur Grundwasserfließrichtung) zum Bauteil dargestellt. Dem Bild ist zu entnehmen, daß senkrecht zur Grundwasserfließrichtung die Chromkonzentrationen ein kleineres Maximum haben und schneller abnehmen, als in Fließrichtung. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die in das Grundwasser eingetragenen Stoffe in Fließrichtung „mitgeschleppt“ werden und senkrecht zur Fließrichtung Wasser hinzukommt, das keinen Kontakt mit dem Bauteil hatte und somit die Konzentrationen etwas verdünnt. Dem Bild ist weiter zu entnehmen, daß in einem Abstand von 5 m zum Bauteil zu keinem Zeitpunkt die Geringfügigkeitsschwellen überschritten werden (senkrecht zur Fließrichtung schon in einem Abstand von 1 m), wobei weder eine Retardierung noch ein chemischer Abbau während der Fließstrecke angenommen wurde.

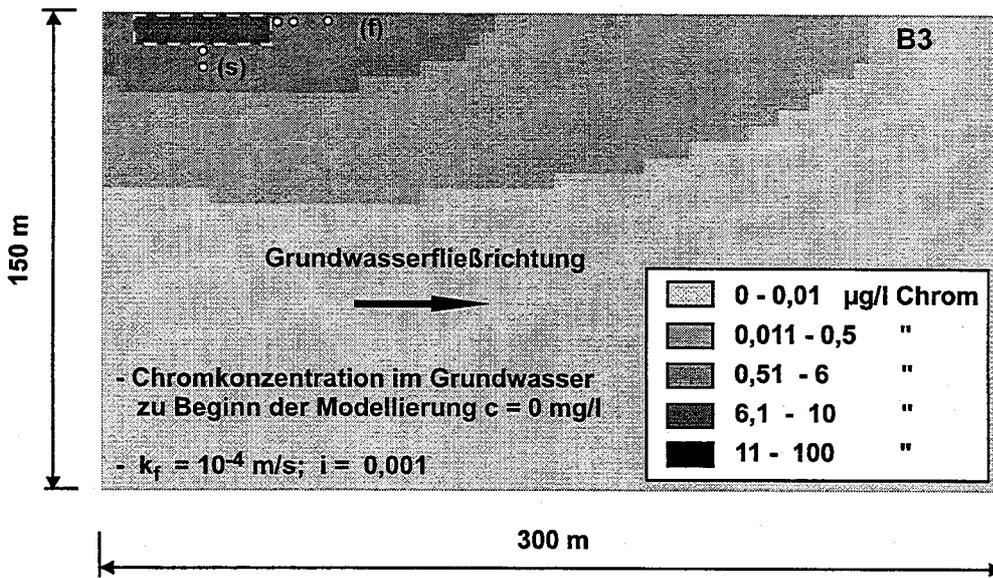


Bild 11: Belastung des Grundwassers durch die Auslaugung von Chrom aus einem Betonfundament; Konzentrationsverteilung nach einem Jahr (f: Beobachtungspunkte in Grundwasserflussrichtung; s: Beobachtungspunkte senkrecht zur Grundwasserflussrichtung)

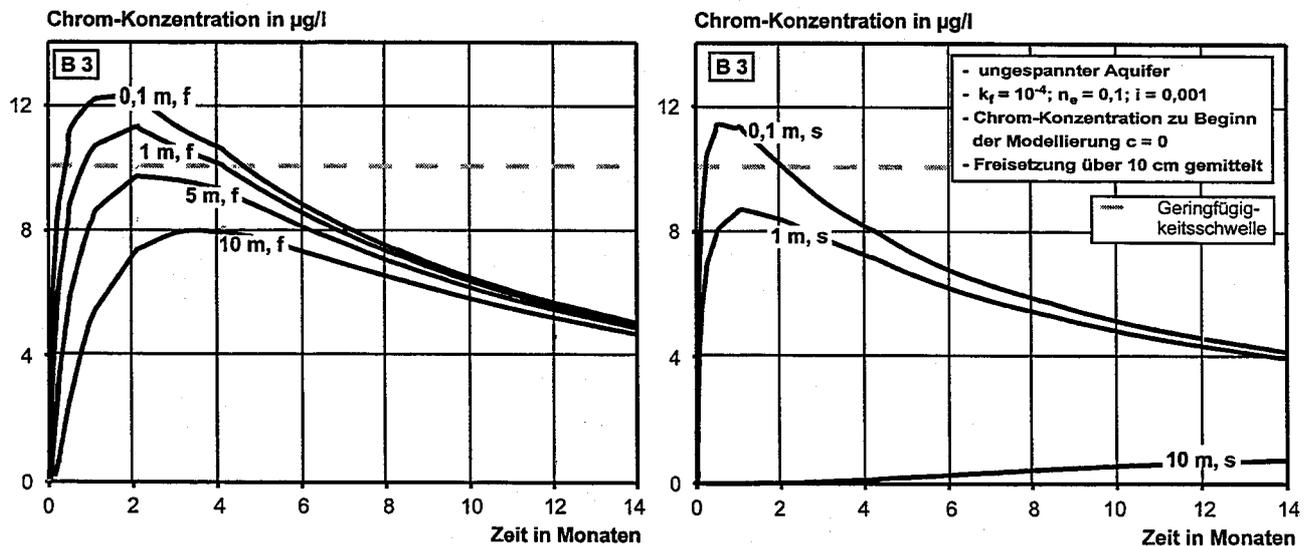


Bild 12: Orts- und zeitabhängige Chromkonzentrationen; Abhängigkeit vom Abstand zum Bauteil (f: Beobachtungspunkte in Grundwasserflussrichtung; s: Beobachtungspunkte senkrecht zur Grundwasserflussrichtung, vgl. Bild 7)

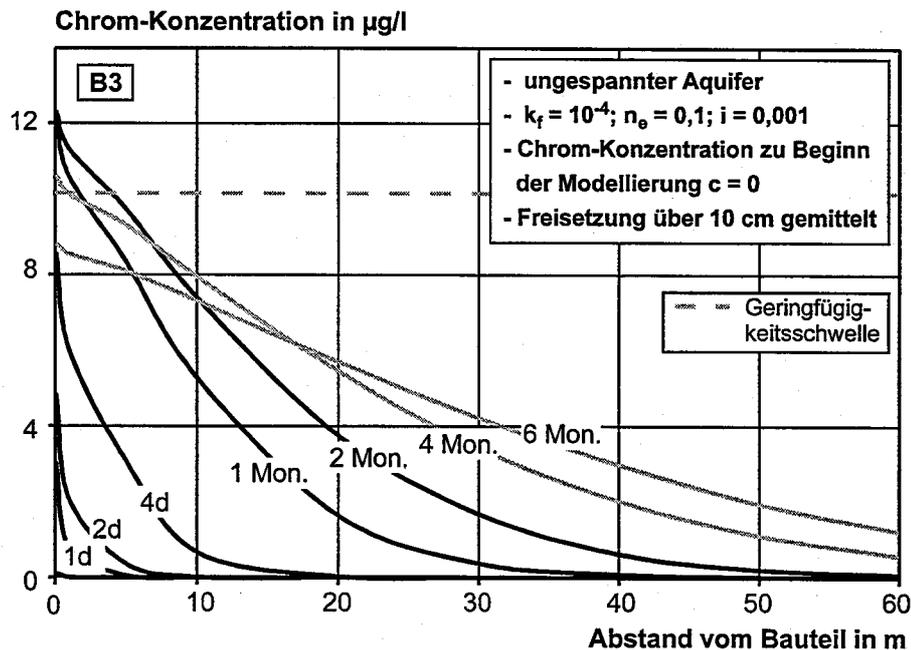


Bild 13: Zeitabhängige Chromkonzentrationen in Abhängigkeit vom Abstand zum Bauteil (in Grundwasserfließrichtung)

In Bild 13 ist noch eine andere Darstellung zum Einfluß des Abstands zum Bauteil wiedergegeben. In diesem Bild sind die prognostizierten Konzentrationen als Funktion zum Abstand (in Grundwasserfließrichtung) aufgetragen. Dabei ergeben sich zu jedem Zeitpunkt andere Kurven. Dabei sind die Abstandskurven bis zum Erreichen der maximalen Konzentration schwarz wiedergegeben und die Abstandskurven nach Überschreiten der maximalen Konzentration grau. Dieses ist nur eine andere Darstellung der Ergebnisse aus Bild 13 und soll verdeutlichen, daß nach 4 Monaten die Geringfügigkeitsschwelle in jedem Abstand zum Bauteil unterschritten ist.

- **Einfluß der Durchlässigkeit des Untergrundes**

In Bild 14 sind die zeitabhängigen Chromkonzentrationen in Abhängigkeit von der Durchlässigkeit des Untergrundes für den Beton B3 dargestellt. Wie am Beginn dieses Abschnitts beschrieben wurde, wird durch die Variation der Durchlässigkeit direkt die Fließgeschwindigkeit des Wassers beeinflusst und somit auch die Ausbreitungsgeschwindigkeit der transportierten Stoffe. Erwartungsgemäß nehmen die Chromkonzentrationen bei einer größeren Durchlässigkeit des Untergrundes schneller ab. Eine Verringerung der Durchlässigkeit des Untergrundes führt nicht zu einem höheren Maximum, sondern zu einer langsameren Abnahme der Stoffkonzentrationen im Grundwasser (breiteres Maximum).

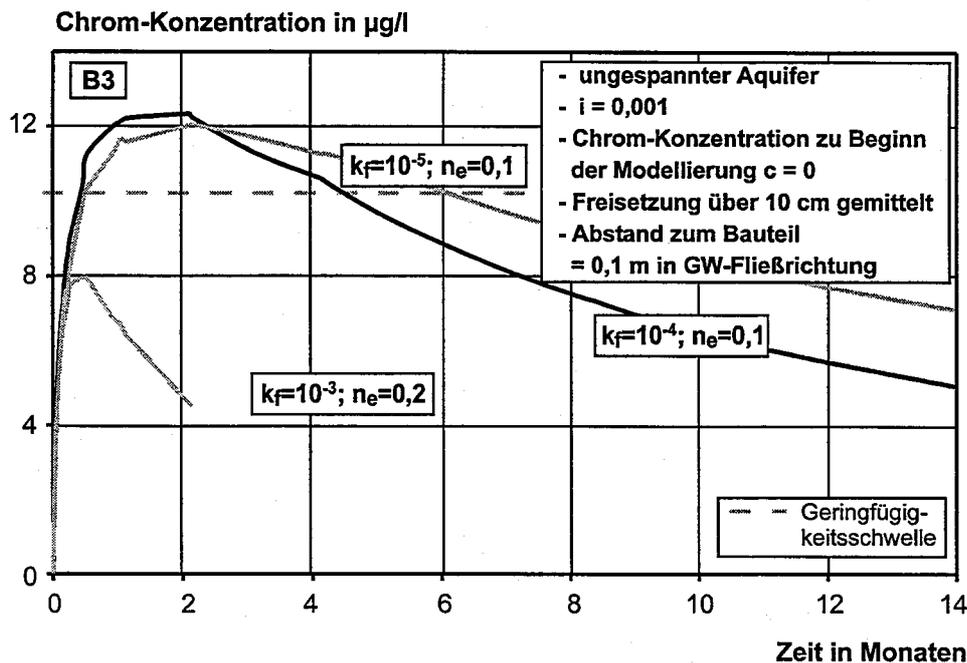


Bild 14: Zeitabhängige Chromkonzentrationen; Einfluß der Durchlässigkeit und der effektiven Porosität ($k_f; n_e$)

• **Einfluß des Grundwassergefälles**

Ebenso wie eine variierte Durchlässigkeit wirkt sich auch ein variiertes Grundwassergefälle direkt auf die Fließgeschwindigkeit aus. So ist zu erwarten, daß mit zunehmendem Grundwassergefälle die für das Grundwasser prognostizierten Stoffkonzentrationen schnell abnehmen. In Bild 15 sind die zeitabhängigen Chromkonzentrationen für unterschiedliche Grundwassergefälle (Fließgeschwindigkeiten) dargestellt. Es wird deutlich, daß bei Grundwassergefällen, die kleiner sind als 10^{-3} , die prognostizierten Konzentrationen sich nur unwesentlich unterscheiden. Das heißt mit einem Grundwassergefälle von 10^{-3} wurde bereits eine ungünstige Bedingung gewählt. Bei einer Vergrößerung des Gefälles nehmen die prognostizierten Konzentrationen sehr schnell ab.

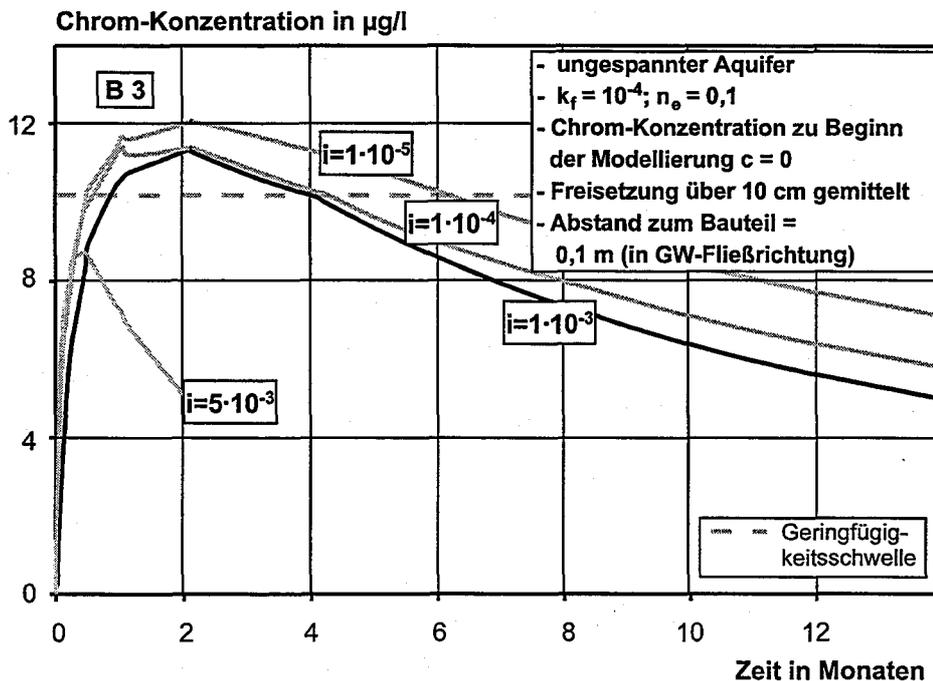


Bild 15: Zeitabhängige Chromkonzentrationen; Abhängigkeit vom Grundwassergefälle i

• **Einfluß der Temperatur des Grundwassers**

Die Laborversuche, die den Berechnungen im Rahmen dieses Forschungsberichtes zugrunde liegen, wurden wie allgemein üblich bei Raumtemperatur (20 °C) durchgeführt. Demgegenüber hat das Grundwasser eine Temperatur von ungefähr 10 °C . Sowohl die Diffusions- als auch die Lösungsprozesse verlaufen bei niedrigeren Temperaturen langsamer, so daß die für das Grundwasser prognostizierten Konzentrationen mit abnehmender Temperatur abnehmen sollten. Zum Einfluß der Temperatur auf die Auslaugrate gibt es bisher nur vereinzelt Versuchsergebnisse /10/. In /10/ wurde gefunden, daß sich bei Erhöhung der Temperatur um 10 °C der effektive Diffusionskoeffizient ungefähr verdoppelt (allerdings für eine andere Betonzusammensetzung). Verhält sich der Beton B3 ähnlich, so ergibt sich der in Bild 16 dargestellten Konzentrationsverlauf. Werden also den Modellrechnungen direkt die Ergebnisse der Laborversuche zugrunde gelegt, so erhält man Konzentrationen, die um den Faktor 0,7 - 0,8 zu hoch abgeschätzt werden. Das heißt, auch hier wurden „worst-case“-Bedingungen gewählt.

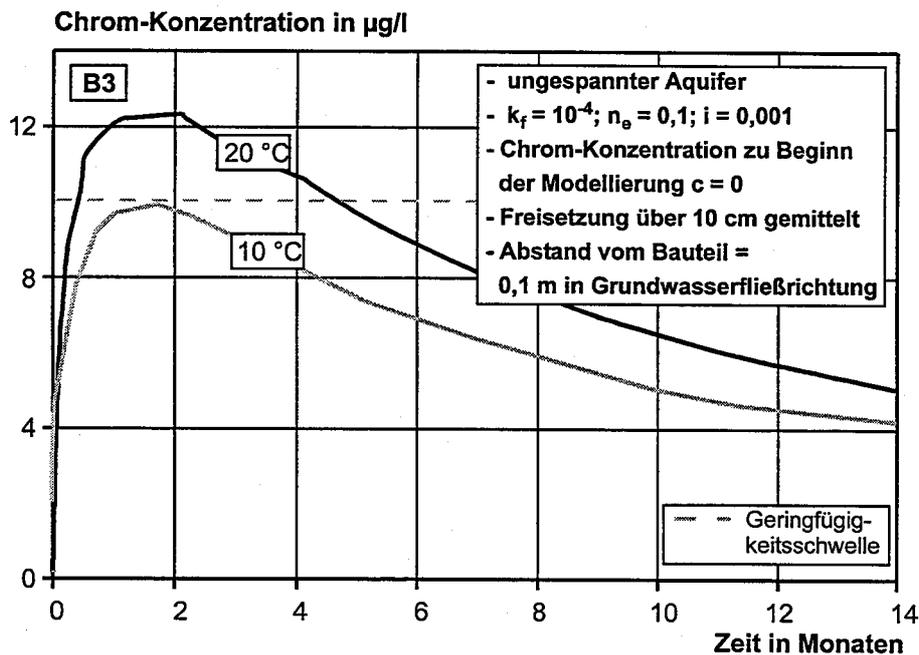


Bild 16: Zeitabhängige Chromkonzentrationen; Abhängigkeit von der Temperatur des Grundwassers

• *Einfluß der Retardierung*

Wie unter Abschnitt 4.2.2 beschrieben, kommt es im Grundwasserleiter allein aufgrund physikalischer Prozesse (Adsorption und Desorption im Porengefüge des Grundwasserleiters) zu einer Verlangsamung des Stofftransports (Retardierung). Diese Retardierung findet in der Natur in jedem Fall statt. In Bild 17 ist der Einfluß der Retardierung dargestellt. Dem Bild ist zu entnehmen, daß die Stoffkonzentrationen im Grundwasser durch die Retardierung erheblich geringer werden. Dabei wurde mit einem Retardierungsfaktor von $R = 2$ gerechnet. In der Literatur sind für Chrom auch noch höhere Retardierungsfaktoren gefunden worden /6/, die sich in einer entsprechend längeren Verzögerung der Ausbreitung auswirken und damit zu niedrigeren Konzentrationen führen.

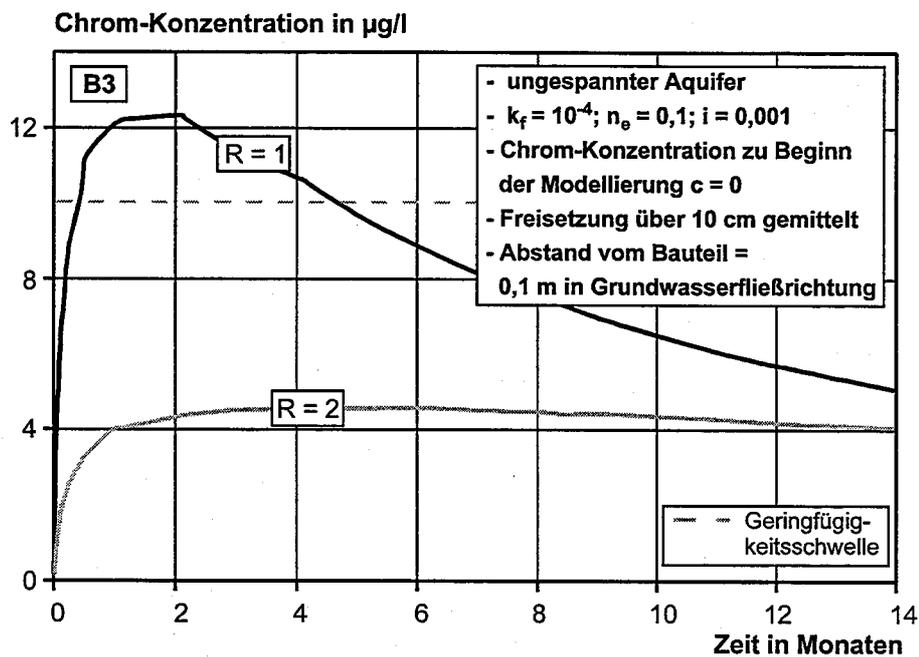


Bild 17: Zeitabhängige Chromkonzentrationen; Einfluß der Retardierung

5.5 Grenzen und Fehler der Modellrechnungen

In den vorgestellten Modellrechnungen wurde gezeigt, wie die Ergebnisse aus Laborversuchen in die Praxis übertragen werden können. Durch diese Übertragung auf reale Verhältnisse ist eine Bewertung der Baustoffe durch den Vergleich mit entsprechenden Geringfügigkeitsschwellen möglich. Mit den Modellen kann dabei naturgemäß nur eine Annäherung an die tatsächlichen Verhältnisse gefunden werden. Bei den Berechnungen wurde eine Vielzahl von Vereinfachungen getroffen, da das Ziel nicht war, die natürlichen Verhältnisse wirklichkeitsgetreu wiederzugeben, sondern Baustoffe standortunabhängig bewerten zu können. Im folgenden werden kurz einige Parameter aufgelistet, die in den Modellen nicht betrachtet wurden.

• *Einfluß des Hydratationsalters*

Bei den Betrachtungen wurden Versuchsergebnisse von Betonen zugrunde gelegt, die bei Beginn der Auslaugversuche ein Alter von 28 d aufwiesen. Während bei Betonen mit Portlandzement in höherem Alter als 28 d kaum noch eine Verdichtung des Porengefüges zu beobachten ist, kommt es insbesondere bei Betonen mit Hochofenzement und SFA als Betonzusatzstoff über ein Alter von 28 d hinaus zu einer deutlichen Verdichtung des Porengefüges, wodurch die effektiven Diffusionskoeffizienten für umweltrelevante Stoffe signifikant verkleinert werden. Hinsichtlich der Freisetzung umweltrelevanter Stoffe wurden die Betone mit SFA und Hochofenzement bei der Prüfung im Alter von 28 d demnach ungünstiger bewertet als Betone, die nur mit Portlandzement hergestellt werden. Den Untersuchungsergebnissen in /32/ ist zu entnehmen, daß die Chromauslaugung für Mörtel schon in einem Prüfkörperalter von 90 d erheblich geringer wird (siehe Bild 18).

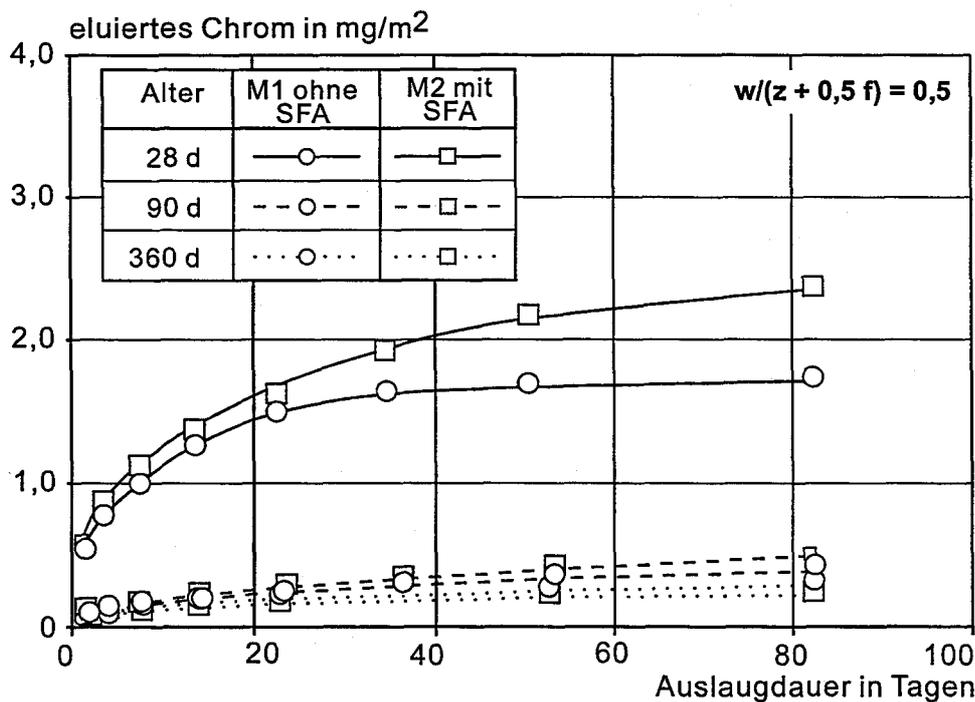


Bild 18: Chromauslaugung aus Mörteln ohne und mit Zusatz von Steinkohlenflugasche in Abhängigkeit vom Probenalter

- *Einfluß des pH-Wertes des Grundwassers*

Bei den Berechnungen wurde der pH-Wert des Grundwassers nicht berücksichtigt. Bei der Betrachtung des Kontaktgrundwassers bei langsam fließenden Grundwasser ist dies auch nicht von großer Bedeutung, da dort der pH-Wert sehr hoch sein wird (ähnlich wie im Auslaugversuch). Zudem wird die Löslichkeit von Chromat mit sinkendem pH-Wert bis zum neutralen Bereich kleiner und steigt im sauren Bereich wieder an.

- *Fällungsreaktionen*

Bei den Berechnungen wurde nicht berücksichtigt, daß es durch im Grundwasser vorhandene Bestandteile schnell zur Ausfällung des Chroms kommen kann. Die Laborversuche wurden mit entionisiertem Wasser durchgeführt. Allerdings haben Versuche mit Leitungswasser gezeigt, daß sich der Einfluß nicht allzu sehr auswirkt (zumindest für das Chrom) /10/.

Die aufgezählten Parameter sollten in künftigen Modellbetrachtungen Eingang finden. Dazu muß der jeweilige Einfluß aber unter Labor- bzw. Feldbedingungen abgeklärt werden.

6 ZUSAMMENFASSUNG DER ERGEBNISSE UND SCHLUSSFOLGERUNGEN

6.1 Allgemeines

Im Rahmen dieses Forschungsprojektes wurden Berechnungen durchgeführt, um die Ergebnisse von Auslaugversuchen im Labor (die immer Konventionen darstellen) auf reale Verhältnisse zu übertragen. Dabei wurden zwei Arten von Rechnungen durchgeführt:

1. Rechnungen mit einem Diffusionsmodell, mit dem die zeitabhängige Freisetzung der umweltrelevanten Stoffe aus dem Beton in den Boden/das Grundwasser berechnet wurde.
2. Rechnungen mit einem Grundwasserstömungs- und Transportmodell, mit dem die Ausbreitung der freigesetzten Stoffe im Boden/Grundwasser simuliert wurde.

Die durchgeführten Modellrechnungen sollten die Einflüsse verschiedener Randbedingungen auf die prognostizierten Konzentrationen umweltrelevanter Stoffe, die aus Beton in langsam fließendes Grundwasser freigesetzt werden, aufzeigen. Die Ergebnisse der Berechnungen sollen als Grundlage zur Festlegung von Konventionen bei der Bewertung des Auslaugverhaltens zementgebundener Baustoffe dienen.

Die meisten für die Berechnungen gewählten Randbedingungen sind ungünstige Bedingungen (worst-case Betrachtung). Die Ergebnisse spiegeln also nicht die tatsächlich unter realen Bedingungen zu erwartenden Verhältnisse wider, sondern wurden gewählt, um zu zeigen, wie Betone standortunabhängig bewertet werden können. In den durchgeführten Berechnungen wurden folgende Einflußgrößen betrachtet:

- Einfluß des Betons,
- die Größe des betrachteten Bauteils,
- der Bereich des Kontakgrundwassers, über den bei der Bewertung kleinräumig gemittelt werden kann,
- Einfluß der Fließgeschwindigkeit des Grundwassers (Durchlässigkeit des Untergrundes, Grundwassergefälle),
- Abhängigkeit der prognostizierten Konzentrationen vom Abstand zum Bauteil,
- Abhängigkeit der prognostizierten Konzentrationen von der Kontaktzeit mit dem Bauteil,
- Einfluß der Temperatur und der Retardierung.

Die dargestellten Ergebnisse haben gezeigt, daß vor allem die Fließgeschwindigkeit des Grundwassers sowie die Temperatur und die Retardierung einen entscheidenden Einfluß auf die prognostizierten Grundwasserkonzentrationen haben. Die Fließgeschwindigkeit des Grundwassers ist dabei direkt von Durchlässigkeit des Untergrundes und dem Grundwassergefälle abhängig. Dabei wirkten sich kleinere Grundwasserfließgeschwindigkeiten als 0,01 m/d kaum auf die prognostizierten Konzentrationen aus, während bei höheren Fließgeschwindigkeiten die Konzentrationen schnell abnehmen.

Mit zunehmender Bauteilgröße wird das Konzentrationsmaximum zwar nicht erhöht, dafür nehmen aber die Konzentrationen mit der Zeit langsamer ab.

Kleine Abstände vom Bauwerk wirken sich bei den gewählten niedrigen Fließgeschwindigkeiten des Grundwassers nur in sehr geringem Umfang aus. Zur Bewertung kann daher ohne weiteres im Kontaktgrundwasser über einen Bereich von 0 - 30 cm bzw. sogar von 0 - 50 cm gemittelt werden. Für die Bewertung sollte außerdem nicht nur kleinräumig sondern auch zeitlich gemittelt werden. Aufgrund der Ergebnisse wird vorgeschlagen, die prognostizierten Konzentrationen über eine Zeit von drei Monaten zu mitteln und den Wert, der sich aus dieser Mittelung ergibt, mit dem entsprechenden Vorsorgewert zu vergleichen.

Berücksichtigt man bei den Transportberechnungen die Retardierung durch rein physikalische Vorgänge (Adsorption in den Poren des Grundwasserleiters), so sind die prognostizierten Konzentrationen um ca. den Faktor 0,3 kleiner als ohne Retardierung. Im Falle der Rechnung mit den bei Raumtemperatur im Versuch bestimmten Freisetzungsraten erhält man Ergebnisse, die um den Faktor 1,25 bzw. 1,43 zu hoch sind. Berücksichtigt man die Retardierung und den Temperatureinfluß nicht, so liegen die Ergebnisse auf jeden Fall deutlich auf der sicheren Seite.

6.2 Vorschläge zur Festlegung der Konventionen

Folgende Konventionen müssen für die Bewertung der Boden- und Grundwassergefährdung infolge der Auslaugung aus Beton festgelegt werden:

- die Größe des betrachteten Bauteils,
- der Bereich, über den im Kontaktgrundwasser kleinräumig gemittelt werden kann,
- der Abstand vom Bauteil, in dem die ermittelten Konzentrationen mit den Vorsorgewerten verglichen werden,
- der Zeitpunkt nach dem ersten Kontakt mit dem Grundwasser an dem die ermittelten Konzentrationen mit den Vorsorgewerten verglichen werden,
- die Durchlässigkeit des Untergrundes und das Grundwassergefälle.

Aufgrund der durchgeführten Modellrechnungen werden die in Tabelle 8 aufgeführten Randbedingungen vorgeschlagen.

In Tabelle 9 sind die über drei Monate gemittelten Konzentrationen im Grundwasser für die im Rahmen dieses Forschungsprojektes gewählten Betone zusammengestellt. Dabei sind die Mittelwerte jeweils für verschiedene Bereiche des Kontaktgrundwassers angegeben.

Betrachtet man die über 0-30 cm und drei Monate gemittelten Werte, so unterschreiten alle untersuchten Betone aus genormten Ausgangsstoffen die Geringfügigkeitsschwelle für Chrom(VI), obwohl bei den Berechnungen „worst-case“-Bedingungen zugrunde gelegt wurden. Bei Berücksichtigung einer Temperatur von 10 °C im Grundwasser würden sich diese Werte noch einmal um den Faktor 0,7-0,8 verringern.

Überträgt man die erhaltenen Ergebnisse wieder auf den Laborversuch (siehe Bild 2, Abschnitt 2.2), so würde sich als Grenzwert für die aufgrund von Diffusion freigesetzte Menge (im 1. Jahr) mit den in Tabelle 8 zusammengestellten Konventionen ein Wert von 10 mg/m^2 ergeben. Bei Einhaltung dieses Wertes ist ganz grundsätzlich keinerlei Gefährdung für Boden und Grundwasser zu erwarten.

Tabelle 8: Randbedingungen für die Modellrechnungen zur Bewertung der Auslaugung aus Beton (Vorschlag)

Randbedingung	gewählte Größe
1	2
Größe des betrachteten Bauteils	400 m ²
Bereich über den kleinräumig gemittelt werden darf (in Fließrichtung)	0-30 cm
Abstand vom Bauteil, in dem die ermittelten Konzentrationen mit den Vorsorgewerten verglichen werden (in GW-Fließrichtung)	<ul style="list-style-type: none"> • 0,1 m • 10 m
Zeitpunkt nach dem ersten Kontakt mit dem Grundwasser, an dem die ermittelten Konzentrationen mit den Vorsorgewerten verglichen werden	<ol style="list-style-type: none"> 1. die Vorsorgewerte sollen im Abstand 10 m zu keinem Zeitpunkt die Vorsorgewerte überschreiten 2. im Abstand 0,1 m soll der über drei Monate gemittelte Wert den Vorsorgewert um maximal 50 % überschreiten
Durchlässigkeit des Untergrundes	$k_f = 10^{-4} \text{ m/s}$
Grundwassergefälle	$i = 10^{-3}$

Tabelle 9: Konzentrationen im Kontaktgrundwasser im Abstand von 0,1 m zum Bauteil (in Grundwasserfließrichtung) gemittelt über drei Monate nach dem ersten Kontakt des Bauteils/Baustoffs mit dem Grundwasser¹⁾

Bereich der Mittelwertbildung	Mittlere Chromkonzentration im Kontaktgrundwasser				
	Beton				
	B1	B2	B3	B4	B5
-	µg/l				
1	2	3	4	5	6
0 - 10 cm	6,0	8,8	11,3	2,3	2,4
0 - 20 cm	5,8	8,5	10,7	2,2	2,3
0 - 30 cm	5,2	7,3	9,9	2,0	2,1

1) ohne Berücksichtigung der Temperatur des Grundwassers und der Retardierung

7 AUSBLICK

Im Rahmen dieses Forschungsprojektes wurde am Beispiel der Auslaugung von Chrom aus Beton gezeigt, wie das Auslaugverhalten zementgebundener Baustoffe anhand von Rechenmodellen bewertet werden kann und wie sich aus den Ergebnissen Grenzwerte für den Laborversuch ableiten lassen.

Wie in Abschnitt 3.3 ausgeführt wurde, kann das im Rahmen dieses Projektes verwendete Diffusionsmodell nicht ohne weiteres auf die anderen Schwermetalle übertragen werden. Die Betrachtungsweisen und Bewertungskriterien gelten jedoch analog. Für die Betone aus genormten Baustoffen werden andere Schwermetalle außer Chrom nicht in relevanten Mengen eluiert. Bei der Bewertung neu zuzulassender Ausgangsstoffe (z. B. Abfälle zur Verwertung), müssen auch die anderen Schwermetalle betrachtet werden. Dazu muß das einfache Diffusionsmodell um den Einfluß der chemischen Reaktion erweitert werden. Das Transportmodell läßt sich dann völlig analog anschließen.

Die im Rahmen dieser Forschungsarbeit mit den Rechenmodellen prognostizierten Gehalte umweltrelevanter Stoffe im Grundwasser konnten nicht mit Datenmaterial aus Feldversuchen bzw. -messung verglichen werden, da solches Datenmaterial nicht zur Verfügung steht. Hier wäre es wünschenswert, wenn solche Daten bestimmt würden, um zu überprüfen, ob die errechneten Werte mit unter realen Verhältnissen gewonnen Werten übereinstimmen.

8 LITERATUR

- /1/ Baker, P.G. ; Bishop, P.L.: Prediction of Metal Leaching Rates from Solidified/Stabilized Wastes Using the Shrinking Unreacted Core Leaching Procedure. In: Journal of Hazardous Materials 52 (1997), S. 311-333
- /2/ Barna, R. ; Moszkowicz, P. ; Veron, J. ; Timoveanu, M.: Solubility Model for the Pore Solution of Leached Concrete Containing Solidified Waste. In: Journal of Hazardous Materials 37 (1994), S. 33-39
- /3/ Barna, R. ; Sanchez, F. ; Moszkiwicz, P. ; Mehu, J.: Leaching Behavior of Pollutants in Stabilized/Solidified Wastes. In: Journal of Hazardous Materials 52 (1997), S. 287-310
- /4/ Batchelor, B.: Leach Models: Theory and Application. In: Journal of Hazardous Materials 24 (1990), S. 255-266
- /5/ Bliefert, C.: Umweltchemie. Weinheim : VCH, 1994
- /6/ Brauer, H.: Handbuch des Umweltschutzes und der Umweltschutztechnik – Band 1 : Emissionen und ihre Wirkungen. Berlin, Springer Verlag 1997
- /7/ Bundes-Bodenschutzgesetz, BBodSchG vom 17. März 1998, BGBl. I S. 502
- /8/ Coté, P.L. ; Constable, T.W. ; Moreira, A.: An evaluation of cement-based waste forms using the results of approximately two years of dynamic leaching. In: Nuclear and waste management 7 (1987) Nr.2, S.129-139
- /9/ Crank, J.: The mathematics of diffusion. 2. Auflage, Oxford: Clarendon Press, 1975
- /10/ Groot, G.J. de ; Hohberg, I. ; Lamers, F.J.M. ; Veen, A.M.H. van der ; Wassing, W.: Development of a leaching protocol for the determination of the environmental quality of concrete. MAT1 CT93-0026, Final report. March 1997
- /11/ Forkel, Ch.: Numerische Methoden in der Hydrodynamik. Vorlesungsmanuskript. Kapitel 5: Grundwasserströmung. Kapitel 6: Stofftransport im Grundwasser. Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft, Aachen 1998
- /12/ Gemeinsame Verwaltungsvorschrift des Umweltministeriums und des Sozialministeriums über Orientierungswerte für die Bearbeitung von Altlasten und Schadensfällen Az.: 32-8984.00-UM-Az.:57-8490.1.40(SM)- des Landes Baden-Württemberg September 1993 GABl. (30. Nov. 1993) Nr. 33 S 1115 - 1123
- /13/ Gunkel, P.: Die Zusammensetzung der flüssigen Phase erstarrender und erhärtender Zemente. In: Beton-Information 23 (1983), Nr. 1, S. 3-8
- /14/ Hinsenveld, M. ; Bishop, P.L.: Use of the Shrinkage Core/Exposure Model to Describe the Leachability from Cement Stabilized Wastes. Philadelphia : American Society for Testing and Materials, ASTM STP 1240, 1996. - In: Stabilization and Solidification of Hazardous, Radioactive and Mixed Wastes, (Gilliam, T.M. ; Wiles, C.A. (Ed.)), Vol. 3, S. 528-537

- /15/ Hohberg, I. ; Müller, Ch. ; Schießl, P. ; Volland, G.: Umweltverträglichkeit zementgebundener Baustoffe. Sachstandsbericht. Berlin : Beuth. In: Schriftenreihe des Deutschen Ausschusses für Stahlbeton (1996), Nr. 458
- /16/ Hohberg, I. ; Schießl, P.: Auslaugung umweltrelevanter Stoffe - Bewertung über Modellrechnungen DAfStb Forschungskolloquium Aachen, 1998
- /17/ Hohberg, I. ; Spanka, G. ; Volland, G.: Analyse des Forschungsbedarfs zur Bewertung des Auslaugverhaltens von Beton. Aachen, Institut für Bauforschung, 1999. Forschungsbericht Nr. F 597 (unveröffentlicht)
- /18/ Institut für Wassergefährdende Stoffe; IWS: Ausgewählte Projekte 1986-1996. Aufgabenstellung - Vorgehensweise - Ergebnisse. Berlin: Institut für Wassergefährdende Stoffe, IWS, 1996, S. 49-55
- /19/ Jaroni, Hw, Trenk, T.v.d.: Prüfwerte zum Schutz von Menschen auf kontaminierten Böden - fachliche Begründung einer Ableitung. In: Forum Städtehygiene 46 (1995) September/Okttober S 315 - 329
- /20/ Kiessl, K.: Das Berechnen instationärer Diffusionsvorgänge mit Hilfe von Differenzen-Verfahren (Crank-Nicolson). Technische Akademie Esslingen, 1987
- /21/ Kinzelbach, W. ; Rausch, R.: Grundwassermodellierung. Eine Einführung mit Übungen. Stuttgart : Borntraeger, 1995
- /22/ Kinzelbach, W.: Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser. München : Oldenbourg. In: Schriftenreihe Wasser Abwasser (1987), Nr. 21
- /23/ Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA); ad-hoc Arbeitskreis "Prüfwerte": Prüfwerte (Geringfügigkeitsschwellen) zur Beurteilung von Grundwasserschäden und ihre Begründung. Stand 08. April 1998
- /24/ Lege, T. ; Kolditz, O. ; Zielke, W.: Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten. Band 2: Strömungs- und Transportmodellierung. Springer Verlag Berlin Heidelberg, 1996
- /25/ Lide, D.R. ; Frederikse, H.P.R.: CRC Handbook of Chemistry and Physics. 76. Ed. New York : CRC Press, 1995
- /26/ Moszkowicz, P. ; Pousin, J. ; Sanchez, F.: Diffusion and Dissolution in a Reactive Porous Medium: Mathematical Modelling and Numerical Simulations. In: Journal of Computational and Applied Mathematics 66 (1996), S. 377-389
- /27/ Mutschmann, J., Stimmelmayer, F.: Taschenbuch der Wasserversorgung 10. vollständig überarbeitete und aktualisierte Aufl. Franckh-Kosmos, 1994
- /28/ Pawel, A.: Ergebnisse der Projektgruppe „Boden- und Grundwassergefährdung durch Baustoffe Analyse und Bewertung“. Workshop der Deutschen Bauchemie „Boden- und Grundwassergefährdung durch Bauprodukte - Neue bauaufsichtliche Anforderungen“, Frankfurt, 23. Mai 1998

- /29/ Sardin, M. ; Schweich, D. ; Leu, F.J. ; Genuchten van, M.Th.: Modeling the Nonequilibrium Transport of Linearly Interacting Solutes in Porous Media: A Review. In: Water Resources Research 27 (1991), Nr. 9, S. 2287-2307
- /30/ Scheffer, F. ; Schachtschnabel, P. ; Blume, H.-P. ; Brümmer, G. ; Hartge, K.H.: Lehrbuch der Bodenkunde. 14. Aufl. Stuttgart : Enke, 1998
- /31/ Schießl, P. ; Hohberg, I.: Bewertung der Auslaugung umweltrelevanter Stoffe aus zementgebundenen Baustoffen durch Modellierung der Auslaugvorgänge. Workshop der Deutschen Bauchemie „Boden- und Grundwassergefährdung durch Bauprodukte - Neue bauaufsichtliche Anforderungen“, Frankfurt, 23. Mai 1998
- /32/ Schießl, P. ; Hohberg, I.: Umweltverträglichkeit von zementgebundenen Baustoffen - Untersuchungen zum Auslaugverhalten. Institut für Bauforschung, Aachen 1995. Forschungsbericht Nr. F 414
- /33/ Schießl, P. ; Hohberg, I.: Vergleichsuntersuchungen zur Normung von Auslaugverfahren für zementgebundene Baustoffe. Aachen, Institut für Bauforschung, 1997. Forschungsbericht Nr. F 594
- /34/ Schießl, P. ; Hohberg, I.: Construction Materials. Amsterdam : Elsevier, 1997. - In: Harmonization of Leaching/Extraction Tests. Vol. 70: Studies in Environmental Science, (Sloot van der, H.A. ; et al (Ed.)), S. 187-208, 1997
- /35/ Schießl, P. ; Hohberg, I.: Umweltverträglichkeit von zementgebundenen Baustoffen. Wiesbaden : Deutscher Beton-Verein e.V., DBV, 1996. In: Forschung, Vorträge der DBV-Arbeitstagung 7. November 1996 in Wiesbaden, S. 65-71
- /36/ Sloot van der, H.A. ; Groot de, G.J. ; Wijkstra, J. ; Wegen van de, G.: Karakterisering van het uitlooggedrag van anorganische Componenten uit Bouwmaterialen waarin primaire en secundaire Grondstoffen zijn verwerkt. Bilthoven: Workshopverlslag, 1989. - In: Beoordeling van Bouwstoffen in het Licht van het Bouwstoffenbesluit - WBB, 1989, S. 12-27
- /37/ Sloot van der, H.A. ; Rauret, G. ; Mehu, J. ; Hjelmar, O. ; Hohberg, I.: Technical network for the Harmization of Leaching/Extraction tests. EU-contract No
- /38/ Stockerl, R.: Das Wasserrecht : Grundlagen und Auswirkungen auf den Einsatz von Bauprodukten. Workshop der Deutschen Bauchemie „Boden- und Grundwassergefährdung durch Bauprodukte - Neue bauaufsichtliche Anforderungen“, Frankfurt, 23. Mai 1998

Tabelle A1: Geringfügigkeitsschwellenwerte zur Bewertung von Grundwasserverunreinigungen¹⁾ (Stand Dezember 1998) /23/

Anorganische Parameter	Einheit	Vorsorgewert
1	2	3
Antimon, Sb	µg/l	5
Arsen, As		10
Barium, Ba		300
Blei, Pb		10
Cadmium, Cd		5
Chrom, gesamt, Cr		50
Chromat, Cr		10
Cobalt, Co		50
Cyanid, gesamt, CN ⁻		50
Cyanid, leicht freisetzbar CN		5
Fluorid, F		750
Kupfer, Cu		50
Molybdän, Mo		50
Nickel, Ni		20
Quecksilber, Hg		1
Selen, Se		10
Thallium, Tl		1
Vanadium, V		20
Zink, Zn		300
Zinn, Sn		40

- 1) Die Werte entsprechen den aktualisierten Prüfwerten der LAWA-Empfehlungen für die Erkundung, Bewertung und Behandlung von Grundwasserschäden

Tabelle A2: Hintergrundwerte für Wasser und Boden (anorganische Stoffe)

Parameter	Hintergrundwerte		
	Boden /12/ 97,5 % Perzentil	Boden /19/ (H-B Werte)	Grundwasser /19/ (H-W-Werte)
-	mg/kg		µg/l
1	2	3	4
Aluminium	-	-	100
Ammonium	-	-	100
Arsen	7 - 78	6 - 17	3
Blei	19 - 747	25 - 55	4
Cadmium	-	0,2 - 1,0	1
Chrom (gesamt)	16 - 745	20 - 90	2
Chrom(VI)	-	1	0,4
Cyanid	-	n. n.	0,2
Fluorid	100 - 2000	150	250
Kupfer	21 - 284	10 - 60	5
Nickel	7 - 648	15 - 100	3
Quecksilber	-	0,05 - 0,2	0,05
Selen	-	1	4
Thallium	-	0,2 - 0,7	3
Zink	52 - 2606	35 - 150	150
Zinn	3 - 41	4 - 20	2

1) n. n.: nicht nachzuweisen

Tabelle A3: Zusammensetzung der für die Berechnungen ausgewählten Betone

Probe	B1	B2	B3	B4	B5
Bestandteil	kg/m ³				
1	2	3	4	5	6
CEM I 32,5 R	360	320	320	360	320
SFA 1	-	80	-	-	-
SFA 2	-	-	80	-	80
Zuschlag (Sieblinie A/B 16)	1817	1777	1776	1807	1769
Wasser	180	180	180	180	180
(w/z+0,5f)-Wert ¹⁾	0,50	0,50	0,50	0,50	0,50

1) $k = 0,5$; $k =$ Wirksamkeitswert zur Anrechnung der SFA auf den w/z-Wert

Tabelle A4: Chemische Zusammensetzungen der verwendeten Zemente und der Steinkohlenflugasche (SFA); Hauptbestandteile

Prüfgröße	Einheit	Gehalt der Probe			
		CEM I 32,5 R	CEM III/A 32,5	SFA 1	SFA 2
1	2	3	4	5	6
Aluminiumoxid, Al ₂ O ₃	M.-%	5,5	8,2	26	26
Calciumoxid, CaO		63	54	5,8	5,2
Chlorid, Cl ⁻		n. b.	0,02	< 0,01	0,014
Eisenoxid, Fe ₂ O ₃		2,5	1,9	8,8	7,9
Freikalk, CaO _{frei}		n. b.	n. b.	0,45	0,31
Gesamtkohlenstoff, CO ₂		2,4	2,1	5,8	4,1
Gesamtschwefel, SO ₃		2,5	2,1	2,1	1,1
Glühverlust		2,9	2,9	3,3	2,05
Kaliumoxid, K ₂ O		0,71	0,56	3,1	3,8
Magnesiumoxid, MgO		1,3	4,0	2,5	2,7
Manganoxid, MnO		0,07	0,15	0,11	2,7
Natriumoxid, Na ₂ O		0,17	0,17	1,3	0,64
Phosphorpentoxid, P ₂ O ₅		0,11	0,07	0,55	0,14
Siliciumdioxid, SiO ₂		20	25	45	50
Titandioxid, TiO ₂		0,37	0,56	1,0	1,0
Vanadiumpentoxid, V ₂ O ₅	0,02	0,01	0,07	0,04	

Tabelle A5: Charakterisierung der in dem Versuchsprogramm eingesetzten Zemente und Steinkohlenflugaschen und unter extremen Bedingungen eluierbare Mengen /32/

Bestandteil	CEM I 32,5 R		CEM III A 32,5	
	Gesamt- gehalt	Eluierbares n. DEV-S4 ¹⁾	Gesamt- gehalt	Eluierbares n. DEV-S4 ¹⁾
-	mg/kg			
1	2	3	4	5
Antimon, Sb	2	n. b.	5	n. b.
Arsen, As	7	< 0,1	2	< 0,1
Barium, Ba	280	1,7	420	0,3
Blei, Pb	21	0,2	14	< 0,1
Cadmium, Cd	< 0,5	< 0,1	< 0,5	< 0,1
Chrom, Cr	68	0,8	46	< 0,1
Kobalt, Co	6	< 0,1	4	< 0,1
Kupfer, Cu	96	0,03	18	< 0,01
Nickel, Ni	36	< 0,1	23	< 0,1
Quecksilber, Hg	< 0,1	< 0,1	< 0,1	< 0,1
Thallium, Tl	0,2	< 0,1	0,5	< 0,1
Zink, Zn	309	0,07	245	0,05

1) Elutionsverfahren nach DIN 38 414 Teil 4

Tabelle A6: Fortsetzung

Bestandteil	SFA1		SFA2	
	Gesamt- gehalt	Eluierbares n. DEV-S4 ¹⁾	Gesamt- gehalt	Eluierbares n. DEV-S4 ¹⁾
-	mg/kg			
1	2	3	4	5
Antimon, Sb	37	0,43	19	n. b.
Arsen, As	321	3	247	0,4
Barium, Ba	787	3	1316	2
Blei, Pb	482	< 0,1	817	< 0,1
Cadmium, Cd	7	< 0,1	7	0,01
Chrom, Cr	250	5	248	1
Kobalt, Co	74	0,1	65	< 0,1
Kupfer, Cu	307	< 0,01	189	0,03
Nickel, Ni	181	0,08	158	< 0,1
Quecksilber, Hg	< 0,1	< 0,01	< 0,1	< 0,01
Thallium, Tl	3	0,02	2	0,04
Zink, Zn	560	0,03	1177	0,21

1) Elutionsverfahren nach DIN 38 414 Teil 4

Tabelle A7: Gehalte an umweltrelevanten Elementen in Betonausgangsstoffen /15/¹⁾

Element	Zemente		Zusatzstoffe
	CEM I	CEM III	Steinkohlenflugasche (SFA)
-	mg/kg		
1	2	3	4
Antimon, Sb	2 - 18	-	< 0,5 - 37
Arsen, As	4 - 23	0,8 - 2	0,6 - 321
Barium, Ba	185 - 390	-	612 - 2249
Blei, Pb	5,0 - 254	< 1 - 18	23 - 817
Cadmium, Cd	0,03 - 6	< 0,1 - 1	0,2 - 7
Chrom, Cr	25 - 124	20 - 80	29 - 360
Kupfer, Cu	55 - 98	5 - 17	38 - 613
Nickel, Ni	17 - 97	4 - 25	46 - 301
Quecksilber, Hg	< 0,02 - 0,12	< 0,1	< 0,5 - 0,7
Thallium, Tl	< 0,2 - 4,1	< 0,5	0,7 - 4
Zink, Zn	21 - 679	5 - 80	47 - 1483

- 1) die angegebenen Spannweiten sind Minimal- und Maximalwerte vorliegender Untersuchungen; Mittelwerte, charakteristische oder repräsentative Quantilwerte sind hieraus nicht ableitbar

Tabelle A8: Ergebnisse der Auslauguntersuchungen von Beton aus genormten Ausgangsstoffen; Ergebnisse des Standtests /32, 33, 37/

Beton		B1	B2	B3	B4	B5	
Bindemittel		CEM I 32,5 R			CEM III/A 32,5		
w/(z+0,5f)		0,5					
Zusatzstoff/Zuschlag		-	SFA1	SFA2	-	SFA1	
Prüfgröße		mg/m ²					
		1	2	3	4	5	6
Arsen,	As	< 0,2	0,74	0,79	0,21	< 0,2	
Blei,	Pb	< 0,4	< 0,4	< 0,4	< 0,4	< 0,4	
Cadmium,	Cd	< 0,2	< 0,2	< 0,2	< 0,2	< 0,2	
Chrom,	Cr	1,2	3,1	3,6	1,8	1,0	
Kupfer,	Cu	1,2	0,58	0,81	< 0,4	< 0,4	
Zink,	Zn	8,2	2,8	0,5	1,4	0,7	

1) ausgelaugte Menge nach 56 d und 8maligem Eluentenaustausch

Tabelle A9: Ergebnisse der Auslauguntersuchungen von Beton aus nicht genormten Ausgangsstoffen bzw. dotiertem Beton; Ergebnisse des Standtests /10, 32, 33/

Beton		B5 ¹⁾	B6 ²⁾	B7 ³⁾	
Bindemittel		CEM I 32,5 R			
Zusatzstoff/Zuschlag		MHS	MVA	SFA/dotiert	
w/(z+0,5f)		0,5	0,6	0,55	
Prüfgröße		mg/m ²			
		1	2	3	4
Arsen,	As	< 0,2	< 0,2	13	
Blei,	Pb	< 0,4	< 0,4	n. b.	
Cadmium,	Cd	< 0,2	< 0,2	< 0,2	
Chrom,	Cr	16	1,04	339	
Kupfer,	Cu	1,4	0,55	0,81	
Zink,	Zn	9,4	3,06	7,6	

- 1) Beton m. Kupferhüttenschlacke (MHS); ca. 50 Vol.-% des Zuschlags wurden durch MHS ersetzt; z = 350 kg/m³
- 2) Beton m. Müllverbrennungssasche (MVA); f/z = 0,25; z = 250 kg/m³
- 3) dotierter Beton; der Beton wurde über das Anmachwasser m. Schwermetallen aufdotiert dadurch enthielt der Beton ca. 100 mg/kg Arsen, ca. 60 mg/kg Cadmium, ca. 120 mg/kg Chrom ((z+f) = 330 kg/m³, f/z=0,22)

Tabelle A10: Ergebnisse der Untersuchungen von Betonproben¹⁾; Eluierbares bei pH = 12, Ergebnisse aus praxisorientierten Untersuchungen (Standtests) sowie ermittelte effektive Diffusionskoeffizienten /32, 33, 37/

Probe	Zementart	Zusatzstoff	Eluierbares	Emissionen ²⁾	$D_{e,Cr}$ ³⁾
-	-	-	mg/kg	mg/m ² ·a	m ² /s
1	2	3	4	5	6
B1	CEM I 32,5 R	-	1,1	2,2	$1,2 \cdot 10^{-13}$
B2		SFA1	0,95	3,8	$2,1 \cdot 10^{-13}$
B3		SFA2	1,4	6,7	$3,1 \cdot 10^{-13}$
B4	CEM III/A 32,5	-	0,3	3,3	$2,1 \cdot 10^{-12}$
B5		SFA1	0,4	1,9	$1,1 \cdot 10^{-12}$

- 1) Zusammensetzung siehe Tabelle A3; w/(z + 0,5f) = 0,5; Alter 28 d
- 2) Nach dem ersten Jahr durch Diffusion freigesetzte Menge /32/
- 3) effektiver Diffusionskoeffizient für Chrom