

NYMØLLE STENINDUSTRIER A/S

## Vurdering af grundvandsrisiko ved udvidelse af et råstofområde ved Vilstrup Vandværk

ADRESSE COWI A/S  
Visionsvej 53  
9000 Aalborg

TLF +45 56 40 00 00

FAX +45 56 40 99 99

WWW cowi.dk

NOTAT

PROJEKTNR.

A093728

DOKUMENTNR.

1

VERSION

2.0

UDGIVELSESDATO

17. maj 2017

BESKRIVELSE

Endelig udgave

UDARBEJDET

NPA

KONTROLLERET

TOHM

GODKENDT

NPA

## INDHOLD

1	Baggrund	2
2	Beskrivelse af graveområdet	2
2.1	Geologiske forhold	3
2.2	Hydrogeologiske forhold	4
2.3	Grundvandskemiske forhold	4
3	Potentielle risici ved den planlagte råstofindvinding	5
3.1	Grundvandskvalitet	5
3.2	Spild af miljøfremmede stoffer	8
4	Konsekvenser af efterbehandling	11
5	Samlet vurdering og anbefalinger	11
6	Referencer	13

## BILAG

Bilag A Oversigtskort

Bilag B PHREEQC-outputfil

### 1 Baggrund

Nymølle Stenindustrier A/S ønsker at grave råstoffer på matrikel 2n, Vilstrup Gårde, Kristrup. Det planlagte graveområde er beliggende ca. 140-200 m syd for Vilstrup Kildeplads, hvor Verdo Vand A/S indvinder drikkevand fra borerne DGU-nr. 69.213, 69.523, 69.558 og 69.818. Verdo har tidligere påklaget indvindingstilladelsen, idet der er bekymring for, om den planlagte råstofindvinding kan udgøre en risiko for grundvandskvaliteten i borerne på Vilstrup kildeplads, hvor der aktuelt indvindes ca. 365.000 m<sup>3</sup> drikkevand om året, men det er forventningen, at indvindingen indenfor de kommende 10-15 år skal øges til ca. 1.000.000 m<sup>3</sup>/år. Der er tidligere truffet aftale om, at sagen skulle genoptages, når statens grundvandskortlægning i området var afsluttet. Dette er nu tilfældet, og Nymølle Stenindustrier A/S har på den baggrund anmodet COWI om at bistå med udarbejdelsen af nærværende risikovurdering.

### 2 Beskrivelse af graveområdet

Det planlagte råstofområde samt Verdos indvindingsboringer på Vilstrup Kildeplads ses på figur 2.1. Et større oversigtskort er vedlagt som Bilag A.



Figur 2.1: Beliggenhed af det planlagte råstofområde samt Verdos indvindingsboringer på Vilstrup kildeplads. Det blåskraverede areal viser den påtænkte materialeplads.

Indvindingen skal foregå ved, at muld og overjord indledningsvist afrømmes, hvorefter der afgraves råstoffer, indtil undergrænsen af forekomsten, som udgøres af fint hvidt sand. I områdets nordlige og vestlige del kan der graves indtil 20 m u.t., mens der i den sydlige og østlige del kun kan graves til ca. 10 m u.t.

## 2.1 Geologiske forhold

Indenfor det planlagte råstofområde er der i 2004 udført 10 råstofboringer af dybder på 5,5 til 15,5 m u.t. Under muldlaget findes der i den sydlige og østlige del af området et kvartært lerlag af begrænset mægtighed (op til 5 m), mens lerlaget er helt fraværende i den nordlige og vestlige del. Lerlaget er brunt (oxidert) og uden tvivl stærkt opsprækket. Under lerlaget, eller imod nord og vest umiddelbart under muldlaget, findes der kvartært sand og grus.

I den nærliggende dybere boring DGU-nr. 69.547 er der beskrevet sand indtil 22,5 m u.t., herunder 3 meter gråt (reduceret) ler og dybere nede igen sand og grus til mindst 47 m u.t. Det nævnte lerlag er ikke beskrevet i Verdos boring 69.213, hvor der under muldlaget er beskrevet sand, grus og silt til 73 m u.t., herunder moræneler og endelig danielkalk fra 76 m u.t. I Verdos øvrige 3 indvindingsboringer samt pejleboring 69.319 er derimod beskrevet et lag af glacielt smeltvandsler, som starter 31-32 m u.t. og har en samlet mægtighed på 2-11 m. En væsentlig terrænforskel bevirker, at dette lag ligger i ca. samme kote som lerlaget i 69.547. Under dette lerlag findes det primære sand- og grusmagasin, som nedadtil er begrænset af ler.

## 2.2 Hydrogeologiske forhold

Den østligste boring på Vilstrup kildeplads (DGU-nr. 69.213) har indtag i kalken, mens de øvrige boringer på kildepladsen har indtag i det primære sandmagasin, hvilket ligeledes gælder Nymølle Stenindustriens boring DGU-nr. 69.547, som er beliggende ca. 250 m vest for graveområdet. Grundvandets strømningsretning er nordlig, og graveområdet ligger indenfor det grundvandsdannende opland til Vilstrup kildeplads. Pejlede rolandspejl viser, at rolandspejlet i det primære sandmagasin ligger omkring kote +9 m, mens det i kalken ligger i kote +7,2 m. Dette viser, at lerlaget under det primære sandmagasin er vandstandsende, og at trykgradienten fra det primære sandmagasin til kalkmagasinet er nedadrettet, dvs. der er grundvandsdannelse til kalken. Det er småt med vandspejlspejlinger for det sekundære sandmagasin, men i den nu sløjfede, 29 m dybde DGU-nr. 69.631, som lå få meter fra graveområdets sydøstlige udkant, blev rolandspejlet i 2009 pejlet til 20,5 m u.t., svarende til kote +12,2. Dette relativt høje vandtryk indikerer, at laget af smeltevandsler over det primære sandmagasin – i hvert fald lokalt – er vandstandsende, og at der også er en betydelig nedadrettet gradient fra det sekundære sandmagasin og til det primære sandmagasin.

Terrænet i graveområdet skråner fra nordvest, hvor terrænkoten ligger omkring +43 m, og imod sydøst, hvor terrænkoten ligger omkring +32 m. Dette betyder, at grundvandsspejlet i det primære magasin ligger mindst 23 m u.t., mens grundvandsspejlet i det sekundære magasin ligger mindst 19,8 m u.t. Den planlagte råstofgravning kommer således til at foregå i den umættede zone og med en minimumsafstand til grundvandsspejlet på ca. 3 m.

## 2.3 Grundvandskemiske forhold

Eneste analyse af grundvand fra det sekundære sandmagasin stammer fra Nymølle Stenindustriens boring DGU-nr. 69.606, som er beliggende ca. 650 m nordøst for det planlagte råstofområde (se Bilag A). Grundvandet er af den oxiderede redoxvandtype A med 38 mg/l nitrat. Et sulfatindhold på 46 mg/l ligger indenfor normalområdet i det danske grundvand og indikerer, at der stort set ikke findes nitratreduktionskapacitet i dæklag og magasin, der således er genoxiderede. Det vurderes, at grundvandet er af en sådan kvalitet, at det efter normal vandbehandling (iltning og filtrering) vil kunne overholde alle kvalitetskravene til drikkevand, jf. "Drikkevandsbekendtgørelsen" (BEK nr. 802 af d. 01/06/2016).

Det primære sandmagasin indeholder øverst oxideret og nitratholdigt grundvand. Således var der 25 mg/l nitrat (redoxvandtype B) ved seneste analyse af den nu nedlagte indvindingsboring DGU-nr. 69.215. Dybere nede er grundvandet reduceret og med intet eller et meget lavt indhold af nitrat. Den dominerende redoxproces er her jernreduktion. Sulfatindholdet er i alle boringer let forhøjet (55-80 mg/l), hvilket viser, at der foregår nitratreduktion i dæklaget af smeltevandsler og/eller det primære magasin. I forhold til grundvandets anvendelighed til drikkevand er der ingen problemer med den vandkemiske sammensætning. Det skal imidlertid bemærkes, at der i Nymølle Stenindustriens boring 69.547 er fundet 0,32 µg/l BAM i en vandprøve fra d. 4. november 2016. Boringen ligger 350 m vest-sydvest for den nærmeste indvindingsboring på Vilstrup kildeplads (69.558) og har indtag i samme magasin 39-47 m u.t. Der er tidligere fundet små mængder BAM (op til 0,016 µg/l) i 69.558, men indholdet ligger ved

seneste analyse under detektionsgrænsen. Der er med stor sandsynlighed tale om samme forureningskilde, men udviklingen i 69.558 indikerer, at kildestyrken er aftagende.

Det prækvartære kalkmagasin er repræsenteret ved Verdos dybe indvindingsboring 69.213. Grundvandet er her stærkt reduceret (vandtype D) og nitratfrit. Eneste problemparameter i forhold til kvalitetskravene til drikkevand er fluorid, hvor der ved seneste analyse er konstateret et indhold på 2,2 mg/l, mens grænseværdien er 1,5 mg/l. Kilden er naturlig frigivelse fra fluorit indlejret i kalken, og der er således ikke tale om forurening.

### 3 Potentielle risici ved den planlagte råstofindvinding

Der er identificeret følgende mulige risici for grundvandskvaliteten som følge af den planlagte råstofindvinding:

- > Direkte påvirkning af grundvandskvaliteten
- > Barometerånding med mobilisering af tungmetaller som konsekvens
- > Øget forureningssårbarhed
- > Øget udvaskning af organisk stof til grundvandet
- > Øget risiko for mikrobiel forurening af grundvandet
- > Spild af miljøfremmede stoffer (dieselolie, tilsætningsstoffet AdBlue eller hydraulikolie)

Ovennævnte gennemgås i de følgende afsnit.

#### 3.1 Grundvandskvalitet

Under råstofindvindingen vil afgravningen af overjorden mindske nedvaskningen af opløst organisk stof til det terrænnære grundvand (se i øvrigt afsnit 3.1.3), hvilket imidlertid ikke medfører nogen forringelse af grundvandskvaliteten.

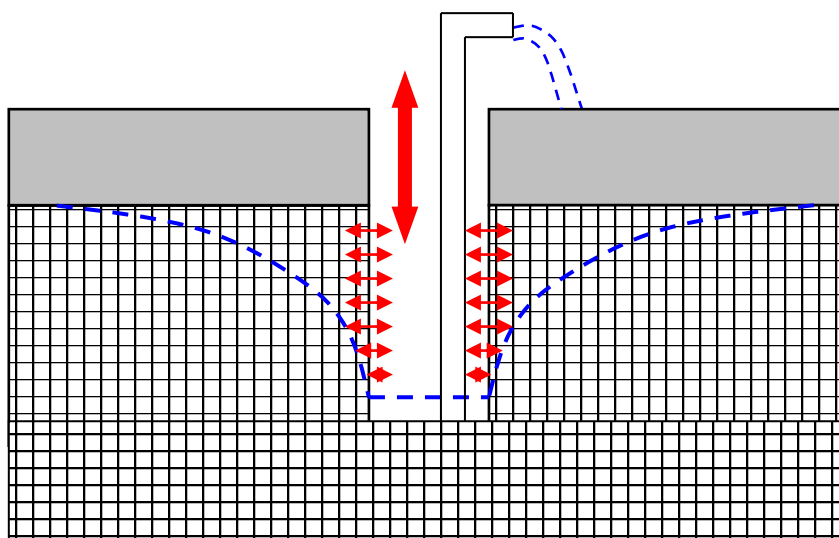
Hovedparten af de mikrobielle nedbrydningsprocesser, som påvirker grundvandskvaliteten, foregår i overjorden. Dette medfører et mindre nedbrydningspotentiale for eksempelvis nitrat (se afsnit 3.1.2) og miljøfremmede stoffer. Imidlertid anvendes der ikke gødning eller pesticider på arealet under råstofgravningen, hvorfor det reducerede nedbrydningspotentiale kun har betydning i forbindelse med spild af eksempelvis olie (se afsnit 3.2). Den lavere mikrobielle omsætning har imidlertid også den konsekvens, at der dannes mindre CO<sub>2</sub>. Før afgravningen vil afsondring fra mikroorganismer og planterødder i rodzonen medføre et ofte 10 til 100 gange højere CO<sub>2</sub>-partialtryk i den jordluft, som er i ligevægt med det øvre grundvand /1/. Når overjorden er afgravet, vil det terrænnære grundvand nærme sig ligevægt med atmosfærens indhold af CO<sub>2</sub>, som er ca. 400 ppm, hvilket vil medføre en pH-stigning. Også iltindholdet i det terrænnære grundvand kan forventes at stige pga. øget ilt diffusion til grundvandspejlet og mindre reduktionspotentiale i overjorden.

Med udgangspunkt i den udførte vandanalyse på DGU-nr. 69.606, som er eneste boring i området med indtag i det sekundære sandmagasin, er der vha. det geokemiske modelleringsprogram PHREEQC udført beregning af de maksimale stigninger i pH og iltindhold (ved fuld ligevægt med atmosfæren). Outputfilen er vedlagt som Bilag B. Resultaterne viser en maksimal pH-stigning fra 7,5 til 8,2 og en maksimal stigning i iltindhold fra 3,5 til 11,7 mg/l. Ingen af disse ændringer påvirker vandets anvendelighed til drikkevandsforsyning.

Den umiddelbare effekt af bortgravning af overjorden samt en betydelig del af den umættede zone vil således være en mindre stigning i pH og iltindhold. Det bemærkes, at grundvandet i det sekundære magasin allerede er iltet (redox-vandtype A), og grundvandets redoxforhold ændrer sig således ikke.

### 3.1.1 Barometerånding

Barometerånding opstår, når atmosfærisk luft får adgang til et frit grundvandsmagasin overlejret af et lavpermeabelt dæklag (se figur 3.1). Når en del af magasinet blotlægges, idet grundvandsspejlet sænkes til under bunden af det lavpermeable dæklag, opstår der lokalt frie magasinforhold og dermed mulighed for barometerånding, hvor atmosfærisk luft pga. variationer i lufttrykket skiftevis presses ind og ud af det førhen iltfri grundvandsmagasin. Barometerånding kan medføre pyritoxidation i stort omfang med frigivelse af urenheder i mineralet, herunder især nikkel og arsen, til grundvandet som følge.



Figur 3.1: Illustration af "barometerånding". På grund af oppumpning og deraf følgende grundvandssænkning opstår der frit vandspejl under et lavpermeabelt dæklag. De røde pile illustrerer luftstrømmen. Ved stigende lufttryk blæses der atmosfærisk luft ned i magasinet, og ved faldende lufttryk blæses der iltforarmet og CO<sub>2</sub>-beriget luft ud af magasinet.

To grundlæggende forudsætninger for at barometerånding kan forekomme er således et lavpermeabelt dæklag underlejret af et spændt magasin, samt en lokal afsænkning af grundvandsspejlet til under bunden af det lavpermeable dæklag, så der opstår frie magasinforhold. Ingen af disse forhold er til stede i det sekundære grundvandsmagasin, hvorfra den planlagte råstofindvinding skal fo-

regå. Som beskrevet i afsnit 2.1 findes der i den sydlige og østlige del af området et overfladenært kvartært lerlag af begrænset mægtighed, men dette lerlag er umættet og uden tvivl opsprækket, og grundvandsspejlet står mange meter lavere. Hertil kommer, at råstofgravningen udelukkende kommer til at berøre den umættede zone. Den planlagte råstofgravning kan således under ingen omstændigheder medføre barometerånding.

### 3.1.2 Ændring af forureningssårbarhed

Afgravning af overjorden under selve indvindingen medfører uomtvisteligt en forøget forureningssårbarhed overfor både nitrat, pesticider og andre miljøfremmede stoffer. Eksempelvis medfører afgravning af de øverste 17 m af en umættet zone på 20 meter, at 94,5 % af lagets sorptionspotentiale for pesticider og lignende miljøfremmede stoffer fjernes (beregnet ud fra formel (6) i /2/). Også nedbrydningspotentialet, som for hovedpartens vedkommende er lokaliseret i overjorden, reduceres betydeligt.

Endvidere øges grundvandets nitratsårbarhed, men kun i ringe omfang, idet reduktionspotentialet i den umættede zone er yderst begrænset. En ofte anvendt tommelfingerregel er, at 15 % af nitratbelastningen fra overfladen fjernes over redoxgrænsen, når overjordlaget er intakt. Denne 15 % reduktion sættes således ud af kraft, indtil overjordlaget efter råstofgravningen er reetableret.

I praksis forekommer der ingen belastning med pesticider, hverken under eller efter råstofgravningen, mens nitratbelastningen er begrænset til regnvandets indhold, som typisk ligger omkring 3 mg/l samt hertil evt. tørafsætning, som imidlertid forekommer uanset arealanvendelsen. Ses der bort fra sidstnævnte, kan nitratbelastningen af det terrænnære grundvand således øges fra  $0,85 \cdot 3 = 2,55$  mg/l til 3,0 mg/l i graveperioden. Til sammenligning ligger nitratudvaskningen fra landbrugsarealer, som udgør den nuværende arealanvendelse, typisk i størrelsesordenen 50-100 mg/l.

Konsekvenser af de mulige belastninger med miljøfremmede stoffer, som kan forekomme i forbindelse med spild/uheld i løbet af graveperioden, er beskrevet i detaljer i afsnit 3.2.

### 3.1.3 Udvasning af organisk stof

Opløst organisk kulstof (DOC) defineres som den fraktion af organisk kulstof, der ikke tilbageholdes ved filtrering igennem et 0,45 µm filter. I grundvands-sammenhæng kvantificeres det opløste organiske stof normalt ved parameteren NVOC (ikke flygtigt organisk kulstof). I uforurenede jordlag er kun en meget lille del af det opløselige organiske kulstof flygtigt, hvorfor  $DOC \approx NVOC$ .

Forudsat at overjorden er uforurenede, synes det organiske stof fra muldlaget kun at udvaskes til en begrænset dybde. Således indikerer både danske og udenlandske forsøgsresultater beskrevet i /3/, at den maksimale udvaskningsdybde er ca. 3 meter, hvilket tilskrives ringe mobilitet af det opløste organiske stof pga. udfældning, sorption og kompleksbinding til mineraloverflader, mikrobiel omsætning samt rent fysiske processer som flokkulering og filtrering.

Eftersom der ikke planlægges afgravet råstoffer til mindre end 3 m over grundvandspejlet (jf. afsnit 2.2), er risikoen for væsentligt forøget indhold af NVOC i det terrænnære grundvand, når råstofgravningen er tilendebragt og muldlaget reetableret, minimal. Det anses på den baggrund for helt udelukket, at afgravningen kan medføre en målbar øgning af NVOC i indvindingsboringerne på Vilstrup kildeplads, som har indtag i enten det primære sandmagasin eller det underliggende kalkmagasin.

### 3.1.4 Mikroorganismer

Potentielt sygdomsfremkaldende mikroorganismer som f.eks. coliforme bakterier, herunder ikke mindst tarmbakterien *E. coli*, vil uden tvivl have på overfladen i både graveperioden og efterbehandlingsperioden, men omfanget kan forventes at være meget begrænset, eftersom der ikke udspreddes organisk gødning. Grundvandets beskyttelse imod mikroorganismer ligger til dels i overjorden, hvor eksempelvis naturlig filtrering tilbageholder en stor del af mikroorganismene i det infiltrerende vand. Under overjorden (den øverste meter) er opholdstiden derimod den afgørende faktor. Generelt anses overlevelsestiden for overfladebakterier i grundvand for at være begrænset. Ifølge /4/ kan man forvente en 90 % reduktion i løbet af 10 dage ved 20 °C, om end enkelte bakterier kan overleve i 200 dage eller mere, dels pga. lavere grundvandstemperatur og dels fordi de er beskyttet imod ultraviolet lys.

Grundvandets sårbarhed overfor bakterier kan klassificeres ud fra flowdiagrammet på side 10 i /4/. Eftersom der efterlades en umættet zone af minimum 3 m tykkelse, vil sårbarheden af det sekundære magasin efter råstofgravningen ligge på grænsen imellem stor og lille, mens det primære sandmagasin samt naturligvis det underliggende kalkmagasin vil have lille sårbarhed, uanset om der udføres råstofgravning eller ej. Betænker man desuden den meget lave overfladebelastning med sygdomsfremkaldende bakterier, som kan forventes i både grave- og efterbehandlingsperioden, anses det for udelukket, at råstofindvindingen kan medføre bakteriologisk forurening af det grundvand, som pumpes op fra indvindingsboringerne på Vilstrup kildeplads.

## 3.2 Spild af miljøfremmede stoffer

Som tidligere beskrevet medfører råstofgravningen en øget sårbarhed af grundvandet overfor miljøfremmede stoffer, primært i selve indvindingsperioden hvor overjorden er afgravet. Der tilføres ingen pesticider eller andre miljøfremmede stoffer til jordoverfladen, hvorfor risikoen udgøres af spild/uheld, hvor der kan være tale om brændstof (dieselolie), brændstoftilsætning (AdBlue) eller hydraulikolie. Det er vurderet, at en sandsynlig worst case spildmængde er 200 liter. Risikoberegningerne er udført ved anvendelse af Excelprogrammet BRIBE (version 3.2), som er udviklet til at beregne resulterende maksimumskoncentrationer i en indvindingsboring som følge af et enkelt, momentant spild.

Beregningerne er udført for det primære sandmagasin, og der er taget højde for, at de øverste 20 m sediment er fjernet. Det geologiske profil er hentet fra den mest sårbare indvindingsboring på kildepladsen, som er DGU-nr. 69.558. Der er regnet med en nettonedbør på 350 mm/år (jf. JAGG) og en grundvanddannelse på 100 % af nettonedbøren. Den registrerede oppumpning på ca. 364.600 m<sup>3</sup> i



2015 fordeles ligeligt på de fire indvindingsboringer, således at der i risikoberegningerne kalkuleres med en årlig oppumpning fra boringen på 91.150 m<sup>3</sup>.

### 3.2.1 Dieselolie

Under de givne beregningsforudsætninger er det fundet, at det mest grundvandskritiske stof i dieselolie er toluen, som her findes i en typisk koncentration på 1790 mg/l /5/. Et momentant spild af 200 liter dieselolie giver en maksimumskoncentration af toluen i det oppumpede grundvand på 0,43 µg/l, som indtræder 18,6 år efter spildet. Grundvandskvalitetskriteriet er 5 µg/l, hvilket er en faktor 11,6 over den beregnede maksimumskoncentration. Der er regnet med en urealistisk lang halveringstid for toluen på 10.000 dage i hele lagfølgen, og desuden er den horisontale transport frem til kildepladsen efter stofgennembrud til det primære sandmagasin ikke medregnet. Disse forhold gør samlet beregningerne særdeles konservative. Dermed er konklusionen på beregningerne meget sikker. Et screendump fra BRIBE ses på figur 3.2.

BRIBE version 3.2			Vis/Skjul databaser	Egenskaber	Beregn				
Parameter	Værdi	Enhed							
Stof	Toluen - 108-88-3	Olieprodukter							
Koncentration/opløselighed	1790	mg/l	Forklaring:						
Spilmængde	200	l	xxx Værdien udregnes/indsættes automatisk						
Nettonedbør	350	mm/år	xxx Værdien indsættes manuelt af bruger						
Oppumpning fra boring	91150	m <sup>3</sup> /år	Antal år = -1 Ved Antal år = -1 stopper beregningerne når alle lag er under grundvandskvalitetskriteriet						
Tidsskridt	8,009142857	timer	Beregningstid Er afhængig af dispersivitet, cellehøjde og nettonedbør						
Antal år	44,9	år	Opløselighed 530 mg/l						
Cellehøjde	0,1	m	Grundvandskvalitetskriterium 5 µg/l						
Indtrængningsdybde	1	m	Koc 99,82 l/kg						
Grundvandsspejl	14	m u.t	Max-koncentration i boring 0,4291 µg/l						
Spildareal	1	m <sup>2</sup>	Visning af resultater Resultat med plot						
Grundvandsdannelse	100	%							
Lag nr.	Sediment	Lagtykkelse	Tør bulkdensitet	Effektiv porøsitet	Dispersivitet	t <sub>1/2</sub>	K <sub>d</sub>	Afstrømning	Hydraulisk ledningsevne
-	-	m	kg/l		m	dage	l/kg	%	m/s
Lag 1	Sandjorde	0,01	1,43	0,2	1	10000	1,99632	0	0,00001
Lag 2	Sand, flint	11,99	1,46	0,2	1	10000	0,19829	0	0,00001
Lag 3	Dybe lerlag	2	1,62	0,1	2,5	10000	0,19829	0	0,00000001

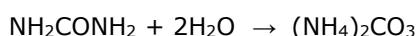
Figur 3.2: Screendump af BRIBE-beregning for toluen

Beregningerne viser, at et spild på 200 liter dieselolie i graveområdet ikke kan medføre en uacceptabel forringelse af vandkvaliteten i indvindingsboringerne på Vilstrup kildeplads.

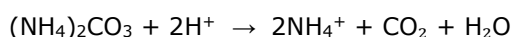
### 3.2.2 AdBlue

AdBlue er et tilsætningsstof, der omdanner miljøskadelige NO<sub>x</sub>-gasser, som dannes ved forbrændingen i dieselmotorer, til vanddamp og nitrogen. Stoffet leveres i 210 liters tromler, og 200 liter, svarende til næsten hele en tromles indhold, er vurderet at være en realistisk worst case-spilmængde.

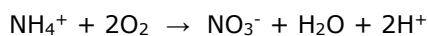
AdBlue består af 32,5 % urea (NH<sub>2</sub>CONH<sub>2</sub>) og 67,5 % vand. I jord hydrolyseres urea hurtigt til ammoniumcarbonat:



Ammoniumcarbonat er letopløseligt og spaltes i vand til ammonium og CO<sub>2</sub>:



Ammonium er en kation, der i vid udstrækning tilbageholdes i jorden, hvor planter kan anvende det som kvælstofkilde. Den andel, som ikke optages af planter, oxideres til nitrat ved processen nitrifikation:



Nitrat er således det potentielt grundvandskriske stof. Eftersom der ikke kan regnes på dannelse af nedbrydningsprodukter i BRIBE, er det antaget, at hele ureaindholdet momentant omdannes til nitrat, hvilket er konservativt. Det er desuden antaget, at nitrat hverken adsorberes eller nedbrydes undervejs til indvindingsboringerne.

200 liter AdBlue med 32,5 % urea (vægtprocent) indeholder 65 kg urea, som kan omdannes til 134,333 kg nitrat. Dette svarer til en ækvivalent nitratkoncentration på  $134.333.333 \text{ mg} / 200 \text{ l} = 671.666,7 \text{ mg/l}$ .

Et screendump fra BRIBE ses på figur 3.3. Det fremgår, at den beregnede maksimumskoncentration i indvindingsboringen er 870 µg/l. Maksimum indtræder efter blot 7,2 år (idet der ikke er regnet med nogen tilbageholdelse af nitrat). Spild af 200 liter AdBlue kan altså maksimalt medføre en koncentrationsstigning i nærmeste indvindingsboring på 0,87 mg/l nitrat.

BRIBE version 3.2																																					
			Vis/Skjul databaser		Egenskaber		Beregn																														
Parameter	Værdi	Enhed																																			
Stof	nitrat - 14797-55-8 Brugerdefineret																																				
Koncentration/opløselighed	671666,7	mg/l																																			
Spildmængde	200	l																																			
Nettonedbør	350	mm/år																																			
Oppumpning fra boring	91150	m <sup>3</sup> /år																																			
Tidsskridt	8.009142857	timer																																			
Antal år	10,3	år																																			
Cellehøjde	0,1	m																																			
Indtrængningsdybde	1	m																																			
Grundvandsspejl	14	m u.t																																			
Spildareal	1	m <sup>2</sup>																																			
Grundvandsdannelse	100	%																																			
<table border="1"> <tr> <td colspan="2">Forklaring:</td> <td></td> </tr> <tr> <td>xxx</td> <td>Værdien udregnes/indsættes automatisk</td> <td></td> </tr> <tr> <td>xxx</td> <td>Værdien indsættes manuelt af bruger</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Antal år = -1</td> <td>Ved Antal år = -1 stopper beregningerne når alle lag er under grundvandskvalitetskriteriet</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Beregningstid</td> <td>Er afhængig af dispersivitet, cellehøjde og nettonedbør</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Opløselighed</td> <td>1000000</td> <td>mg/l</td> </tr> <tr> <td>Grundvandskvalitetskriterium</td> <td>50000</td> <td>µg/l</td> </tr> <tr> <td>Koc</td> <td>0,00</td> <td>l/kg</td> </tr> <tr> <td>Max-koncentration i boring</td> <td>870,3843</td> <td>µg/l</td> </tr> </table>											Forklaring:			xxx	Værdien udregnes/indsættes automatisk		xxx	Værdien indsættes manuelt af bruger		Antal år = -1	Ved Antal år = -1 stopper beregningerne når alle lag er under grundvandskvalitetskriteriet		Beregningstid	Er afhængig af dispersivitet, cellehøjde og nettonedbør		Opløselighed	1000000	mg/l	Grundvandskvalitetskriterium	50000	µg/l	Koc	0,00	l/kg	Max-koncentration i boring	870,3843	µg/l
Forklaring:																																					
xxx	Værdien udregnes/indsættes automatisk																																				
xxx	Værdien indsættes manuelt af bruger																																				
Antal år = -1	Ved Antal år = -1 stopper beregningerne når alle lag er under grundvandskvalitetskriteriet																																				
Beregningstid	Er afhængig af dispersivitet, cellehøjde og nettonedbør																																				
Opløselighed	1000000	mg/l																																			
Grundvandskvalitetskriterium	50000	µg/l																																			
Koc	0,00	l/kg																																			
Max-koncentration i boring	870,3843	µg/l																																			
Visning af resultater <a href="#">Resultat med plot</a>																																					
Lag nr.	Sediment	Lagtykkelse	Tør bulkdensitet	Effektiv porøsitet	Dispersivitet	t <sub>v</sub>	K <sub>d</sub>	Afstrømning	Hydraulisk ledningsevne																												
-	-	m	kg/l	-	m	dage	l/kg	%	m/s																												
Lag 1	Sandjorde	0,01	1,43	0,2	1	1E+10	0	0	0,00001																												
Lag 2	Sand, flint	11,99	1,46	0,2	1	1E+10	0	0	0,00001																												
Lag 3	Dybe lerlag	2	1,62	0,1	2,5	1E+10	0	0	0,00000001																												

Figur 3.3: Screendump af BRIBE-beregning for nitrat (urea)

Den maksimale koncentrationsstigning for nitrat ligger en faktor 57,4 under kvalitetskravet til drikkevand på 50 mg/l. Med det aktuelle nitratniveau i vandværksvandet på 1 mg/l er et nitratbidrag af denne størrelsesorden ubetydeligt.

### 3.2.3 Hydraulikolie

Hydraulikolie er forholdsvis tung olie med høj viskositet og meget lav vandopløselighed. Der gives ikke oplysninger om eksakt sammensætning, men der er i sikkerhedsdatabladet oplyst CAS-numre på indeholdte oliefraktioner. For disse er programpakken EPI Suite /6/ anvendt til at estimere vandopløselighed og log(K<sub>ow</sub>). De fleste stoffraktioner har ekstremt lav mobilitet, men der oplyses et indhold af højrafineret mineralolie på <3 %. Dette er i EPI Suite angivet som "white mineral oil". I den udførte BRIBE-beregning er der regnet med en koncentration i hydraulikolie på 30.000 mg/l (=3 % vægt).

Der er regnet med en urealistisk lang halveringstid for den pågældende kulbrinte-fraktion på 10.000 dage i hele lagfølgen, og desuden er den horisontale transport frem til kildepladsen efter stofgennembrud til det primære sandmagasin ikke medregnet. Disse forhold gør samlet beregningerne særdeles konservative. Et screendump fra BRIBE ses på figur 3.4.

BRIBE version 3.2			Vis/Skjul databaser	Egenskaber	Beregn				
Parameter	Værdi	Enhed							
Stof	lite mineral oil - 8042-47-5	Brugerdefineret							
Koncentration/opløselighed	30000	mg/l	Forklaring:						
Spildmængde	200	l	xxx Værdien udregnes/indsættes automatisk						
Nettonedbør	350	mm/år	xxx Værdien indsættes manuelt af bruger						
Oppumpning fra boring	91150	m <sup>3</sup> /år	Antal år = -1 Ved Antal år = -1 stopper beregningerne når alle lag er under grundvandskvalitetskriteriet						
Tidskridt	8,009142857	timer	Beregningstid Er afhængig af dispersivitet, cellehøjde og nettonedbør						
Antal år	1000	år	Opløselighed 0,66 mg/l						
Cellehøjde	0,1	m	Grundvandskvalitetskriterium 9 µg/l						
Indtrængningsdybde	1	m	Koc 35253,32 l/kg						
Grundvandsspejl	14	m u.t.	Max-koncentration i boring 0,0000 µg/l						
Spildareal	1	m <sup>2</sup>	Visning af resultater Resultat med plot						
Grundvandsdannelse	100	%							
Lag nr.	Sediment	Lagtykkelse	Tør bulkdensitet	Effektiv porøsitet	Dispersivitet	t <sub>1/2</sub>	K <sub>d</sub>	Afstremning	Hydraulisk ledningsevne
-	-	m	kg/l	-	m	dage	l/kg	%	m/s
Lag 1	Sandjorde	0,01	1,43	0,2	1	10000	705,066	0	0,00001
Lag 2	Sand, fint	11,99	1,46	0,2	1	10000	59,1289	0	0,00001
Lag 3	Dybe lerlag	2	1,62	0,1	2,5	10000	59,1289	0	0,00000001

Figur 3.4: Screendump af BRIBE-beregning for højraffineret mineralolie

Beregningerne viser, at fuldt stofgennembrud ikke er opnået efter de 1000 år, som er den maksimale beregningsperiode i BRIBE. Efter 1000 år er den beregnede maksimumskoncentration i nærmeste indvindingsboring mindre end 10<sup>-50</sup> µg/l.

På ovenstående baggrund kan det udelukkes, at et spild på 200 liter hydraulisk olie indenfor graveområdet kan medføre en målelig påvirkning af vandkvaliteten i indvindingsboringerne på Vilstrup Kildeplads.

## 4 Konsekvenser af efterbehandling

Området efterbehandles til natur, evt. skov, og der vil fremover ikke blive anvendt gødning eller pesticider på arealet. Muldlaget reetableres, når råstofgravningen er tilendebragt. Der kan herfra i en periode fortsat frigives nitrat fra den pulje, som er opbygget i forbindelse med arealets tidligere anvendelse til landbrugsjord. Slutresultatet bliver imidlertid en væsentligt reduceret N-udvaskning (jf. afsnit 3.1.2). Dette vil medføre, at nitratfronten i det primære grundvandsmagasin vil bevæge sig langsommere, end tilfældet var, hvis arealet fortsat blev anvendt til landbrugsformål.

Reetableringen af muldlaget indebærer desuden, at sårbarheden overfor miljøfremmede stoffer reduceres i forhold til under råstofgravningen. Med den planlagte efterbehandling forekommer det imidlertid usandsynligt, at arealet fremover kan blive belastet med miljøfremmede stoffer.

## 5 Samlet vurdering og anbefalinger

Direkte vandkemiske ændringer som følge af råstofgravning over grundvandsspejlet begrænser sig til en maksimal pH-øgning fra 7,5 til 8,2 og et maksimalt forøget iltindhold fra 3,5 til 11,7 mg/l i det øverste grundvand. Dette påvirker

ikke grundvandets anvendelighed til drikkevandsforsyning, og de nævnte effekter aftager, når efterbehandlingen af råstofgraven er afsluttet. Eftersom der graves over grundvandsspejlet, hvor der er tilgang af atmosfærisk luft, indebærer råstofindvindingen ikke nogen risiko for iltning af reducerede (iltfri) sedimenter. Hermed undgås eksempelvis den ofte problematiske proces pyritoxidation, som bl.a. kan medføre frigivelse af nikkel og arsen til nedsivende regnvand.

Gennemgangen i de foregående afsnit peger således på, at det primære potentielle problem både under og efter råstofgravningen er en reduktion af grundvandets naturlige beskyttelse som følge af opgravning af dele af den umættede zone. Følgende faktorer er ikke fundet problematiske:

- > Barometerånding kan ikke forekomme, hverken under eller efter råstofindvindingen, idet betingelserne herfor ikke er til stede.
- > Udvaskning af organisk stof, idet der efterlades en tilstrækkeligt tyk umættet zone til at tilbageholde og nedbryde dette også efter råstofindvindingen.
- > Mikroorganismer, idet det primære grundvandsmagasins sårbarhed overfor mikrobiel forurening ikke ændres som følge af råstofindvindingen.
- > Spild af miljøfremmede stoffer, idet realistiske "worst case" spild af 200 liter dieselolie og 200 liter af tilsætningsstoffet AdBlue maksimalt kan medføre koncentrationsstigninger i nærmeste indvindingsboring på hhv. 0,43 µg/l toluen (kritisk stof i dieselolie), 0,87 mg/l nitrat, hvor grænseværdierne er hhv. 5 µg/l og 50 mg/l. Spild af 200 liter hydraulikolie vil ikke medføre målelige koncentrationsstigninger af kulbrinte forbindelser.

Under råstofindvindingen er det særligt vigtigt at undgå nedløb af overfladevand fra eksempelvis omkringliggende landbrugsarealer i råstofgraven. Aktuelt er området mod vest færdiggravet og efterbehandlet til natur, mens der er landbrugsarealer imod nord, øst og syd. Der er her følgende mulige afhjælpende foranstaltninger:

- > Rundt om råstofgraven etableres drængrøfter, hvor nedsivningen af overfladevand kan foregå.
- > Rundt om råstofgraven etableres der volde, eksempelvis af afrømmet muldjord, som blokerer for direkte tilløb af overfladevand, og bag hvilke nedsivningen kan foregå.
- > Eventuelle eksisterende dræn, som evt. kan lede vand til graven, fjernes eller afblændes.

I efterbehandlingsfasen er det af hensyn til grundvandets beskyttelse vigtigt med omhyggelig retablering af det oprindelige muldlag. Således bør man ved afrensningen af muldlaget undgå opblanding med andre sedimenter samt opbevare den afrømmede muld hensigtsmæssigt i graveperioden.

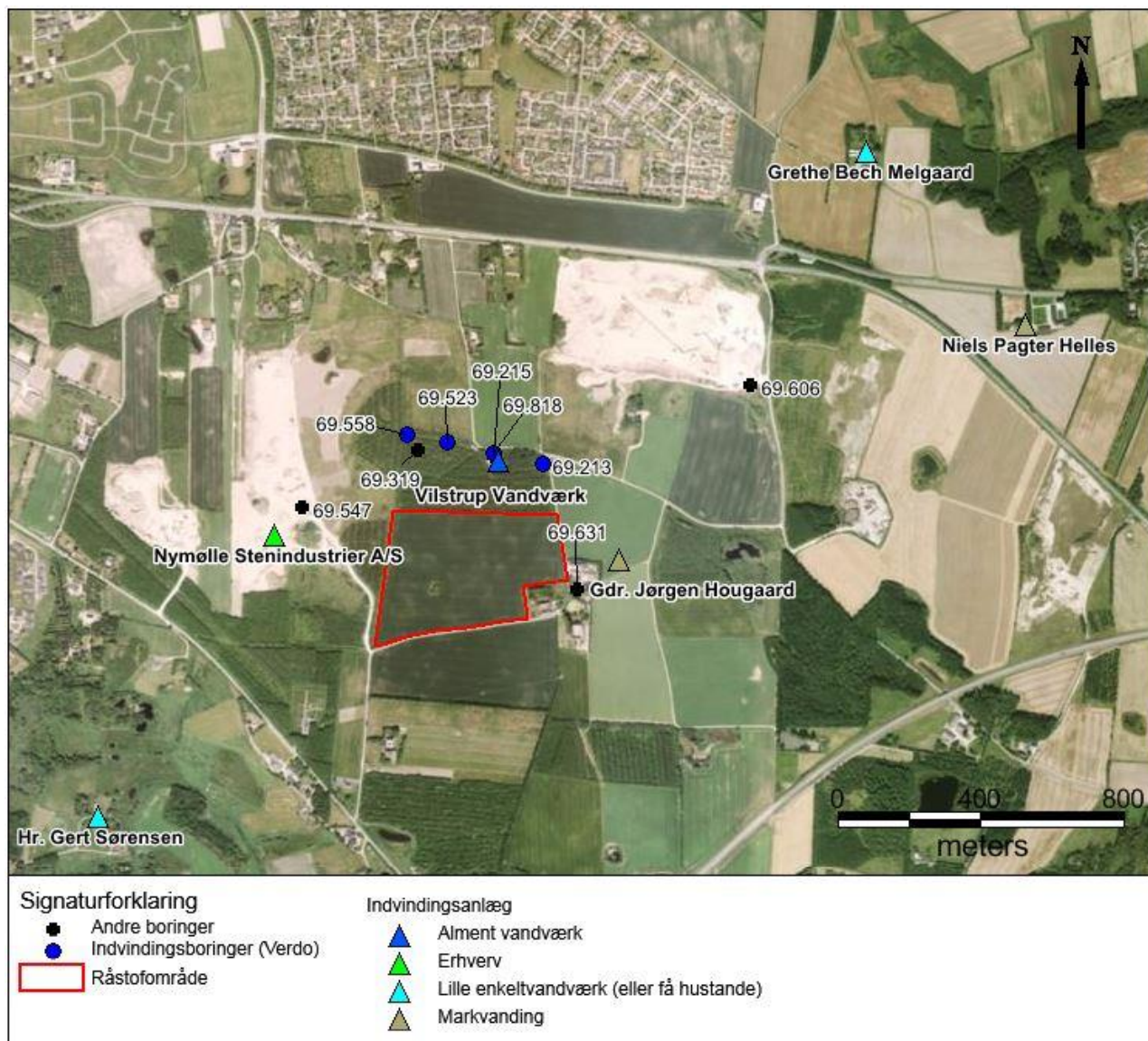
Det vurderes, at den planlagte efterbehandling til naturformål generelt vil medføre en reduceret udvaskning af nitrat og pesticider, set i forhold til den nuværende anvendelse som landbrugsjord, og dermed have en positiv effekt på grundvandskvaliteten.

## 6 Referencer

- /1/ Appelo, C.A.J. og Postma, D. 2005. Geochemistry, groundwater and pollution. 2. udg., Balkema.
- /2/ Grontmij A/S, 2011. Råstofindvindingens kvalitative påvirkning af grundvand. Teknisk notat, d. 30. juni 2011.
- /3/ Miljøstyrelsen, 2005. Nitratreduktion i den umættede zone. Miljøprojekt nr. 1023.
- /4/ [http://www.groundwateruk.org/downloads/Pathogens\\_and\\_groundwater\\_final%20version.pdf](http://www.groundwateruk.org/downloads/Pathogens_and_groundwater_final%20version.pdf)
- /5/ Miljøstyrelsen, 2008. Sammensætning af olie og benzin. Kemiske profiler til brug for risikovurdering. Miljøprojekt nr. 1220, 2008.
- /6/ EPI Suite, version 4.10. United States Environmental Protection Agency.



## Bilag A Oversigtskort







## Bilag B PHREEQC-outputfil

Input file: C:\Users\npa\AppData\Local\Temp\phrq0000.tmp  
 Output file: C:\Users\npa\Nymxlle\69-606.out  
 Database file: C:\Users\npa\Phreeqc\Databases\Phreeqc.dat

-----  
 Reading data base.  
 -----

SOLUTION\_MASTER\_SPECIES  
 SOLUTION\_SPECIES  
 PHASES  
 EXCHANGE\_MASTER\_SPECIES  
 EXCHANGE\_SPECIES  
 SURFACE\_MASTER\_SPECIES  
 SURFACE\_SPECIES  
 RATES  
 END

-----  
 Reading input data for simulation 1.  
 -----

TITLE 69-606  
 SOLUTION\_MASTER\_SPECIES  
 N(-3) NH4+ 0.0 N  
 SOLUTION\_SPECIES  
 NH4+ = NH3 + H+  
 log\_k -9.252  
 delta\_h 12.48 kcal  
 analytical\_expression 0.6322 -0.001225 -2835.76  
 NO3- + 10 H+ + 8 e- = NH4+ + 3 H2O  
 log\_k 119.077  
 delta\_h -187.055  
 gamma 2.50000 0.0000

SOLUTION 1 # Alle stoffer med over 1 µg/l medtaget  
 units mg/l  
 pH 7.5  
 temp 9.2  
 Ca 94  
 Mg 7.2  
 Na 14  
 K 1.5  
 Fe (2) 0.057  
 Mn (2) 0.014  
 N (5) 38 as NO3  
 N (3) 0.003 as NO2  
 N (-3) 0.008 as NH4  
 Ba 0.022  
 B 0.022  
 P 0.045

```

Cl          28
S(6)       46      as SO4
Alkalinity 233      as HCO3
F          0.15
O(0)       3.5

```

END

-----  
TITLE  
-----

69-606

-----  
Beginning of initial solution calculations.  
-----

Initial solution 1.

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
Alkalinity	3.820e-03	3.820e-03
B	2.036e-06	2.036e-06
Ba	1.603e-07	1.603e-07
Ca	2.346e-03	2.346e-03
Cl	7.901e-04	7.901e-04
F	7.899e-06	7.899e-06
Fe(2)	1.021e-06	1.021e-06
K	3.838e-05	3.838e-05
Mg	2.963e-04	2.963e-04
Mn(2)	2.550e-07	2.550e-07
N(-3)	4.437e-07	4.437e-07
N(3)	6.524e-08	6.524e-08
N(5)	6.131e-04	6.131e-04
Na	6.092e-04	6.092e-04
O(0)	2.189e-04	2.189e-04
P	1.454e-06	1.454e-06
S(6)	4.791e-04	4.791e-04

-----Description of solution-----

```

pH = 7.500
pe = 4.000
Specific Conductance (uS/cm, 9 oC) = 397
Density (g/cm3) = 1.00013 (Millero)
Activity of water = 1.000
Ionic strength = 8.725e-03
Mass of water (kg) = 1.000e+00
Total carbon (mol/kg) = 4.124e-03
Total CO2 (mol/kg) = 4.124e-03

```

Temperature (deg C) = 9.200  
 Electrical balance (eq) = -2.548e-04  
 Percent error,  $100 * (Cat - |An|) / (Cat + |An|)$  = -2.19  
 Iterations = 9  
 Total H = 1.110162e+02  
 Total O = 5.552226e+01

-----Redox couples-----

Redox couple	pe	Eh (volts)
N(-3)/N(3)	4.9527	0.2775
N(-3)/N(5)	6.1318	0.3435
N(3)/N(5)	9.6690	0.5417
O(-2)/O(0)	14.4122	0.8074

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log
Gamma					
OH-	9.485e-08	8.612e-08	-7.023	-7.065	-0.042
H+	3.439e-08	3.162e-08	-7.464	-7.500	-0.036
H2O	5.551e+01	9.998e-01	1.744	-0.000	0.000
B 2.036e-06					
H3BO3	2.006e-06	2.010e-06	-5.698	-5.697	0.001
H2BO3-	2.966e-08	2.698e-08	-7.528	-7.569	-0.041
BF(OH)3-	5.201e-12	4.731e-12	-11.284	-11.325	-0.041
BF2(OH)2-	1.268e-16	1.154e-16	-15.897	-15.938	-0.041
BF3OH-	4.201e-23	3.821e-23	-22.377	-22.418	-0.041
BF4-	3.894e-29	3.542e-29	-28.410	-28.451	-0.041
Ba 1.603e-07					
Ba+2	1.443e-07	9.956e-08	-6.841	-7.002	-0.161
BaSO4	1.368e-08	1.370e-08	-7.864	-7.863	0.001
BaHCO3+	2.173e-09	1.976e-09	-8.663	-8.704	-0.041
BaCO3	1.278e-10	1.281e-10	-9.893	-9.892	0.001
BaOH+	1.173e-13	1.067e-13	-12.931	-12.972	-0.041
C(4) 4.124e-03					
HCO3-	3.732e-03	3.405e-03	-2.428	-2.468	-0.040
CO2	3.181e-04	3.187e-04	-3.497	-3.497	0.001
CaHCO3+	5.198e-05	4.742e-05	-4.284	-4.324	-0.040
MgHCO3+	8.162e-06	7.424e-06	-5.088	-5.129	-0.041
CaCO3	7.120e-06	7.134e-06	-5.148	-5.147	0.001
CO3-2	4.938e-06	3.420e-06	-5.306	-5.466	-0.159
NaHCO3	1.057e-06	1.059e-06	-5.976	-5.975	0.001
MgCO3	4.970e-07	4.980e-07	-6.304	-6.303	0.001
FeHCO3+	1.976e-07	1.798e-07	-6.704	-6.745	-0.041
FeCO3	4.323e-08	4.332e-08	-7.364	-7.363	0.001
MnHCO3+	4.091e-08	3.721e-08	-7.388	-7.429	-0.041
MnCO3	3.325e-08	3.331e-08	-7.478	-7.477	0.001

NaCO <sub>3</sub> -	1.669e-08	1.518e-08	-7.777	-7.819	-0.041
BaHCO <sub>3</sub> +	2.173e-09	1.976e-09	-8.663	-8.704	-0.041
BaCO <sub>3</sub>	1.278e-10	1.281e-10	-9.893	-9.892	0.001
Ca	2.346e-03				
Ca+2	2.215e-03	1.534e-03	-2.655	-2.814	-0.160
CaSO <sub>4</sub>	7.176e-05	7.190e-05	-4.144	-4.143	0.001
CaHCO <sub>3</sub> +	5.198e-05	4.742e-05	-4.284	-4.324	-0.040
CaCO <sub>3</sub>	7.120e-06	7.134e-06	-5.148	-5.147	0.001
CaHPO <sub>4</sub>	3.117e-07	3.123e-07	-6.506	-6.505	0.001
CaF+	7.004e-08	6.371e-08	-7.155	-7.196	-0.041
CaPO <sub>4</sub> -	1.876e-08	1.706e-08	-7.727	-7.768	-0.041
CaH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> +	8.877e-09	8.074e-09	-8.052	-8.093	-0.041
CaOH+	8.846e-09	8.047e-09	-8.053	-8.094	-0.041
CaHSO <sub>4</sub> +	1.242e-11	1.129e-11	-10.906	-10.947	-0.041
Cl	7.901e-04				
Cl-	7.901e-04	7.176e-04	-3.102	-3.144	-0.042
FeCl+	5.749e-10	5.230e-10	-9.240	-9.282	-0.041
MnCl+	3.941e-10	3.585e-10	-9.404	-9.446	-0.041
MnCl <sub>2</sub>	1.121e-13	1.123e-13	-12.951	-12.950	0.001
MnCl <sub>3</sub> -	2.440e-17	2.219e-17	-16.613	-16.654	-0.041
F	7.899e-06				
F-	7.753e-06	7.039e-06	-5.111	-5.152	-0.042
MgF+	7.350e-08	6.685e-08	-7.134	-7.175	-0.041
CaF+	7.004e-08	6.371e-08	-7.155	-7.196	-0.041
NaF	2.236e-09	2.240e-09	-8.651	-8.650	0.001
HF	2.532e-10	2.537e-10	-9.597	-9.596	0.001
FeF+	4.086e-11	3.716e-11	-10.389	-10.430	-0.041
MnF+	6.565e-12	5.971e-12	-11.183	-11.224	-0.041
BF(OH) 3-	5.201e-12	4.731e-12	-11.284	-11.325	-0.041
HF <sub>2</sub> -	6.450e-15	5.867e-15	-14.190	-14.232	-0.041
BF <sub>2</sub> (OH) 2-	1.268e-16	1.154e-16	-15.897	-15.938	-0.041
BF <sub>3</sub> OH-	4.201e-23	3.821e-23	-22.377	-22.418	-0.041
BF <sub>4</sub> -	3.894e-29	3.542e-29	-28.410	-28.451	-0.041
Fe (2)	1.021e-06				
Fe+2	7.579e-07	5.279e-07	-6.120	-6.277	-0.157
FeHCO <sub>3</sub> +	1.976e-07	1.798e-07	-6.704	-6.745	-0.041
FeCO <sub>3</sub>	4.323e-08	4.332e-08	-7.364	-7.363	0.001
FeSO <sub>4</sub>	1.897e-08	1.900e-08	-7.722	-7.721	0.001
FeOH+	1.668e-09	1.517e-09	-8.778	-8.819	-0.041
FeHPO <sub>4</sub>	1.064e-09	1.066e-09	-8.973	-8.972	0.001
FeCl+	5.749e-10	5.230e-10	-9.240	-9.282	-0.041
FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> +	8.253e-11	7.507e-11	-10.083	-10.125	-0.041
FeF+	4.086e-11	3.716e-11	-10.389	-10.430	-0.041
FeHSO <sub>4</sub> +	4.275e-15	3.888e-15	-14.369	-14.410	-0.041
H (0)	1.470e-26				
H <sub>2</sub>	7.351e-27	7.366e-27	-26.134	-26.133	0.001
K	3.838e-05				
K+	3.832e-05	3.481e-05	-4.417	-4.458	-0.042
KSO <sub>4</sub> -	5.519e-08	5.020e-08	-7.258	-7.299	-0.041
KHPO <sub>4</sub> -	3.785e-11	3.443e-11	-10.422	-10.463	-0.041
KOH	3.808e-12	3.816e-12	-11.419	-11.418	0.001

Mg	2.963e-04					
Mg+2	2.794e-04	1.945e-04	-3.554	-3.711	-0.157	
MgHCO3+	8.162e-06	7.424e-06	-5.088	-5.129	-0.041	
MgSO4	8.130e-06	8.147e-06	-5.090	-5.089	0.001	
MgCO3	4.970e-07	4.980e-07	-6.304	-6.303	0.001	
MgF+	7.350e-08	6.685e-08	-7.134	-7.175	-0.041	
MgHPO4	5.344e-08	5.355e-08	-7.272	-7.271	0.001	
MgOH+	5.441e-09	4.949e-09	-8.264	-8.306	-0.041	
MgPO4-	3.209e-09	2.919e-09	-8.494	-8.535	-0.041	
MgH2PO4+	1.434e-09	1.304e-09	-8.844	-8.885	-0.041	
Mn (2)	2.550e-07					
Mn+2	1.760e-07	1.226e-07	-6.754	-6.911	-0.157	
MnHCO3+	4.091e-08	3.721e-08	-7.388	-7.429	-0.041	
MnCO3	3.325e-08	3.331e-08	-7.478	-7.477	0.001	
MnSO4	4.347e-09	4.356e-09	-8.362	-8.361	0.001	
MnCl+	3.941e-10	3.585e-10	-9.404	-9.446	-0.041	
MnOH+	2.812e-11	2.558e-11	-10.551	-10.592	-0.041	
MnF+	6.565e-12	5.971e-12	-11.183	-11.224	-0.041	
Mn (NO3) 2	1.563e-13	1.566e-13	-12.806	-12.805	0.001	
MnCl2	1.121e-13	1.123e-13	-12.951	-12.950	0.001	
MnCl3-	2.440e-17	2.219e-17	-16.613	-16.654	-0.041	
N (-3)	4.437e-07					
NH4+	4.415e-07	3.997e-07	-6.355	-6.398	-0.043	
NH3	2.207e-09	2.211e-09	-8.656	-8.655	0.001	
N (3)	6.524e-08					
NO2-	6.524e-08	5.915e-08	-7.185	-7.228	-0.043	
N (5)	6.131e-04					
NO3-	6.131e-04	5.559e-04	-3.212	-3.255	-0.043	
Mn (NO3) 2	1.563e-13	1.566e-13	-12.806	-12.805	0.001	
Na	6.092e-04					
Na+	6.074e-04	5.530e-04	-3.217	-3.257	-0.041	
NaHCO3	1.057e-06	1.059e-06	-5.976	-5.975	0.001	
NaSO4-	7.529e-07	6.848e-07	-6.123	-6.164	-0.041	
NaCO3-	1.669e-08	1.518e-08	-7.777	-7.819	-0.041	
NaF	2.236e-09	2.240e-09	-8.651	-8.650	0.001	
NaHPO4-	6.014e-10	5.470e-10	-9.221	-9.262	-0.041	
NaOH	1.153e-10	1.155e-10	-9.938	-9.937	0.001	
O (0)	2.189e-04					
O2	1.094e-04	1.096e-04	-3.961	-3.960	0.001	
P	1.454e-06					
HPO4-2	7.427e-07	5.073e-07	-6.129	-6.295	-0.166	
CaHPO4	3.117e-07	3.123e-07	-6.506	-6.505	0.001	
H2PO4-	3.117e-07	2.837e-07	-6.506	-6.547	-0.041	
MgHPO4	5.344e-08	5.355e-08	-7.272	-7.271	0.001	
CaPO4-	1.876e-08	1.706e-08	-7.727	-7.768	-0.041	
CaH2PO4+	8.877e-09	8.074e-09	-8.052	-8.093	-0.041	
MgPO4-	3.209e-09	2.919e-09	-8.494	-8.535	-0.041	
MgH2PO4+	1.434e-09	1.304e-09	-8.844	-8.885	-0.041	
FeHPO4	1.064e-09	1.066e-09	-8.973	-8.972	0.001	
NaHPO4-	6.014e-10	5.470e-10	-9.221	-9.262	-0.041	
FeH2PO4+	8.253e-11	7.507e-11	-10.083	-10.125	-0.041	

KHPO4-	3.785e-11	3.443e-11	-10.422	-10.463	-0.041
PO4-3	1.222e-11	5.182e-12	-10.913	-11.286	-0.372
S (6)	4.791e-04				
SO4-2	3.983e-04	2.746e-04	-3.400	-3.561	-0.162
CaSO4	7.176e-05	7.190e-05	-4.144	-4.143	0.001
MgSO4	8.130e-06	8.147e-06	-5.090	-5.089	0.001
NaSO4-	7.529e-07	6.848e-07	-6.123	-6.164	-0.041
KSO4-	5.519e-08	5.020e-08	-7.258	-7.299	-0.041
FeSO4	1.897e-08	1.900e-08	-7.722	-7.721	0.001
BaSO4	1.368e-08	1.370e-08	-7.864	-7.863	0.001
MnSO4	4.347e-09	4.356e-09	-8.362	-8.361	0.001
HSO4-	6.735e-10	6.126e-10	-9.172	-9.213	-0.041
CaHSO4+	1.242e-11	1.129e-11	-10.906	-10.947	-0.041
FeHSO4+	4.275e-15	3.888e-15	-14.369	-14.410	-0.041

## -----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-2.04	-6.38	-4.34	CaSO4
Aragonite	-0.03	-8.28	-8.25	CaCO3
Barite	-0.30	-10.56	-10.26	BaSO4
Calcite	0.13	-8.28	-8.41	CaCO3
CO2 (g)	-2.24	-3.50	-1.26	CO2
Dolomite	-0.75	-17.46	-16.70	CaMg (CO3) 2
Fluorite	-2.31	-13.12	-10.81	CaF2
Gypsum	-1.78	-6.38	-4.59	CaSO4:2H2O
H2 (g)	-23.05	-26.13	-3.08	H2
H2O (g)	-1.94	-0.00	1.94	H2O
Halite	-7.95	-6.40	1.54	NaCl
Hausmannite	-17.89	47.27	65.16	Mn3O4
Hydroxyapatite	-1.02	-2.96	-1.94	Ca5 (PO4) 3OH
Manganite	-5.75	19.59	25.34	MnOOH
Melanterite	-7.42	-9.84	-2.42	FeSO4:7H2O
O2 (g)	-1.20	-3.96	-2.76	O2
Pyrochroite	-7.11	8.09	15.20	Mn (OH) 2
Pyrolusite	-12.96	31.09	44.05	MnO2:H2O
Rhodochrosite	-1.31	-12.38	-11.07	MnCO3
Siderite	-0.96	-11.74	-10.79	FeCO3
Vivianite	-5.40	-41.40	-36.00	Fe3 (PO4) 2:8H2O
Witherite	-3.83	-12.47	-8.64	BaCO3

-----  
End of simulation.  
----------  
Reading input data for simulation 2.  
-----

EQUILIBRIUM\_PHASES 1 # Bring i ligevægt med atmosfæren

```

CO2 (g) -3.398          # 400 ppm
O2 (g)  -0.6789        # 21 %
Calcite   0.13         # Bevar den aktuelle calcitligevægt
USE SOLUTION 1
SAVE SOLUTION 2
END

```

-----  
Beginning of batch-reaction calculations.  
-----

Reaction step 1.

Using solution 1.

Using pure phase assemblage 1.

-----Phase assemblage-----

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage		
				Initial	Final	
Delta						
Calcite	0.13	-8.28	-8.41	1.000e+01	1.000e+01	1.213e-03
CO2 (g)	-3.40	-4.66	-1.26	1.000e+01	1.000e+01	1.517e-03
O2 (g)	-0.68	-3.44	-2.76	1.000e+01	1.000e+01	-2.570e-04

-----Solution composition-----

Elements	Molality	Moles
B	2.036e-06	2.036e-06
Ba	1.603e-07	1.603e-07
C	1.394e-03	1.394e-03
Ca	1.134e-03	1.134e-03
Cl	7.901e-04	7.901e-04
F	7.899e-06	7.899e-06
Fe	1.021e-06	1.021e-06
K	3.838e-05	3.838e-05
Mg	2.963e-04	2.963e-04
Mn	2.549e-07	2.550e-07
N	6.136e-04	6.136e-04
Na	6.092e-04	6.092e-04
P	1.453e-06	1.454e-06
S	4.791e-04	4.791e-04

-----Description of solution-----

```

pH = 8.222          Charge balance
pe = 13.821        Adjusted to redox equilibrium

```

Specific Conductance (uS/cm, 9 oC) = 259  
 Density (g/cm3) = 0.99997 (Millero)  
 Activity of water = 1.000  
 Ionic strength = 5.288e-03  
 Mass of water (kg) = 1.000e+00  
 Total alkalinity (eq/kg) = 1.393e-03  
 Total CO2 (mol/kg) = 1.394e-03  
 Temperature (deg C) = 9.200  
 Electrical balance (eq) = -2.548e-04  
 Percent error, 100\*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -3.64  
 Iterations = 16  
 Total H = 1.110162e+02  
 Total O = 5.551610e+01

-----Distribution of species-----

Species	Molality	Activity	Log Molality	Log Activity	Log
Gamma					
OH-	4.907e-07	4.544e-07	-6.309	-6.343	-0.033
H+	6.419e-09	5.993e-09	-8.193	-8.222	-0.030
H2O	5.551e+01	9.999e-01	1.744	-0.000	0.000
B					
	2.036e-06				
H3BO3	1.891e-06	1.894e-06	-5.723	-5.723	0.001
H2BO3-	1.447e-07	1.341e-07	-6.840	-6.873	-0.033
BF(OH) 3-	4.920e-12	4.561e-12	-11.308	-11.341	-0.033
BF2(OH) 2-	2.327e-17	2.157e-17	-16.633	-16.666	-0.033
BF3OH-	1.495e-24	1.386e-24	-23.825	-23.858	-0.033
BF4-	2.688e-31	2.492e-31	-30.571	-30.603	-0.033
Ba					
	1.603e-07				
Ba+2	1.425e-07	1.058e-07	-6.846	-6.976	-0.129
BaSO4	1.671e-08	1.673e-08	-7.777	-7.777	0.001
BaHCO3+	8.292e-10	7.687e-10	-9.081	-9.114	-0.033
BaCO3	2.626e-10	2.629e-10	-9.581	-9.580	0.001
BaOH+	6.451e-13	5.981e-13	-12.190	-12.223	-0.033
C (-4)					
	0.000e+00				
CH4	0.000e+00	0.000e+00	-154.394	-154.394	0.001
C (4)					
	1.394e-03				
HCO3-	1.342e-03	1.246e-03	-2.872	-2.904	-0.032
CO2	2.208e-05	2.211e-05	-4.656	-4.655	0.001
CaHCO3+	9.733e-06	9.040e-06	-5.012	-5.044	-0.032
CO3-2	8.874e-06	6.607e-06	-5.052	-5.180	-0.128
CaCO3	7.168e-06	7.177e-06	-5.145	-5.144	0.001
MgHCO3+	3.172e-06	2.940e-06	-5.499	-5.532	-0.033
MgCO3	1.039e-06	1.041e-06	-5.983	-5.983	0.001
NaHCO3	3.948e-07	3.953e-07	-6.404	-6.403	0.001
MnCO3	6.591e-08	6.599e-08	-7.181	-7.181	0.001
NaCO3-	3.226e-08	2.991e-08	-7.491	-7.524	-0.033
MnHCO3+	1.507e-08	1.397e-08	-7.822	-7.855	-0.033
BaHCO3+	8.292e-10	7.687e-10	-9.081	-9.114	-0.033



BaCO <sub>3</sub>	2.626e-10	2.629e-10	-9.581	-9.580	0.001
FeCO <sub>3</sub>	4.375e-19	4.380e-19	-18.359	-18.359	0.001
FeHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>	3.716e-19	3.445e-19	-18.430	-18.463	-0.033
Ca	1.134e-03				
Ca <sup>2+</sup>	1.073e-03	7.987e-04	-2.969	-3.098	-0.128
CaSO <sub>4</sub>	4.297e-05	4.302e-05	-4.367	-4.366	0.001
CaHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>	9.733e-06	9.040e-06	-5.012	-5.044	-0.032
CaCO <sub>3</sub>	7.168e-06	7.177e-06	-5.145	-5.144	0.001
CaHPO <sub>4</sub>	2.279e-07	2.282e-07	-6.642	-6.642	0.001
CaPO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	7.094e-08	6.577e-08	-7.149	-7.182	-0.033
CaF <sup>+</sup>	3.663e-08	3.396e-08	-7.436	-7.469	-0.033
CaOH <sup>+</sup>	2.385e-08	2.211e-08	-7.622	-7.655	-0.033
CaH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1.206e-09	1.118e-09	-8.919	-8.952	-0.033
CaHSO <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1.381e-12	1.281e-12	-11.860	-11.893	-0.033
Cl	7.901e-04				
Cl <sup>-</sup>	7.901e-04	7.318e-04	-3.102	-3.136	-0.033
MnCl <sup>+</sup>	4.044e-10	3.749e-10	-9.393	-9.426	-0.033
MnCl <sub>2</sub>	1.196e-13	1.198e-13	-12.922	-12.922	0.001
MnCl <sub>3</sub> <sup>-</sup>	2.604e-17	2.414e-17	-16.584	-16.617	-0.033
FeCl <sub>2</sub> <sup>+</sup>	1.234e-19	9.115e-20	-18.909	-19.040	-0.132
FeCl <sup>+</sup>	3.012e-21	2.792e-21	-20.521	-20.554	-0.033
FeCl <sub>2</sub> <sup>+</sup>	5.455e-22	5.057e-22	-21.263	-21.296	-0.033
FeCl <sub>3</sub>	3.696e-26	3.701e-26	-25.432	-25.432	0.001
F	7.899e-06				
F <sup>-</sup>	7.780e-06	7.205e-06	-5.109	-5.142	-0.033
MgF <sup>+</sup>	7.985e-08	7.402e-08	-7.098	-7.131	-0.033
CaF <sup>+</sup>	3.663e-08	3.396e-08	-7.436	-7.469	-0.033
NaF	2.335e-09	2.338e-09	-8.632	-8.631	0.001
HF	4.914e-11	4.920e-11	-10.309	-10.308	0.001
MnF <sup>+</sup>	6.761e-12	6.267e-12	-11.170	-11.203	-0.033
BF(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup>	4.920e-12	4.561e-12	-11.308	-11.341	-0.033
HF <sub>2</sub> <sup>-</sup>	1.256e-15	1.165e-15	-14.901	-14.934	-0.033
FeF <sub>2</sub> <sup>+</sup>	8.385e-17	6.193e-17	-16.076	-16.208	-0.132
BF <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> <sup>-</sup>	2.327e-17	2.157e-17	-16.633	-16.666	-0.033
FeF <sub>2</sub> <sup>+</sup>	1.571e-17	1.457e-17	-16.804	-16.837	-0.033
FeF <sub>3</sub>	1.570e-19	1.572e-19	-18.804	-18.804	0.001
FeF <sup>+</sup>	2.148e-22	1.991e-22	-21.668	-21.701	-0.033
BF <sub>3</sub> OH <sup>-</sup>	1.495e-24	1.386e-24	-23.825	-23.858	-0.033
BF <sub>4</sub> <sup>-</sup>	2.688e-31	2.492e-31	-30.571	-30.603	-0.033
Fe (2)	4.678e-18				
Fe <sup>2+</sup>	3.699e-18	2.764e-18	-17.432	-17.559	-0.127
FeCO <sub>3</sub>	4.375e-19	4.380e-19	-18.359	-18.359	0.001
FeHCO <sub>3</sub> <sup>+</sup>	3.716e-19	3.445e-19	-18.430	-18.463	-0.033
FeSO <sub>4</sub>	1.141e-19	1.143e-19	-18.943	-18.942	0.001
FeOH <sup>+</sup>	4.521e-20	4.191e-20	-19.345	-19.378	-0.033
FeHPO <sub>4</sub>	7.819e-21	7.829e-21	-20.107	-20.106	0.001
FeCl <sup>+</sup>	3.012e-21	2.792e-21	-20.521	-20.554	-0.033
FeF <sup>+</sup>	2.148e-22	1.991e-22	-21.668	-21.701	-0.033
FeH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1.127e-22	1.045e-22	-21.948	-21.981	-0.033
FeHSO <sub>4</sub> <sup>+</sup>	4.780e-27	4.431e-27	-26.321	-26.353	-0.033
Fe (HS) <sub>2</sub>	0.000e+00	0.000e+00	-312.510	-312.509	0.001

Fe (HS) 3-	0.000e+00	0.000e+00	-462.389	-462.422	-0.033
Fe (3)	1.021e-06				
Fe (OH) 3	8.595e-07	8.605e-07	-6.066	-6.065	0.001
Fe (OH) 2+	8.937e-08	8.285e-08	-7.049	-7.082	-0.033
Fe (OH) 4-	7.224e-08	6.697e-08	-7.141	-7.174	-0.033
FeOH+2	3.823e-12	2.824e-12	-11.418	-11.549	-0.132
FeF+2	8.385e-17	6.193e-17	-16.076	-16.208	-0.132
FeSO4+	1.805e-17	1.674e-17	-16.743	-16.776	-0.033
FeF2+	1.571e-17	1.457e-17	-16.804	-16.837	-0.033
Fe+3	1.298e-17	6.999e-18	-16.887	-17.155	-0.268
FeHPO4+	8.393e-19	7.781e-19	-18.076	-18.109	-0.033
FeH2PO4+2	1.924e-19	1.421e-19	-18.716	-18.847	-0.132
FeF3	1.570e-19	1.572e-19	-18.804	-18.804	0.001
FeCl+2	1.234e-19	9.115e-20	-18.909	-19.040	-0.132
Fe (SO4) 2-	1.167e-19	1.082e-19	-18.933	-18.966	-0.033
Fe2 (OH) 2+4	1.437e-21	4.276e-22	-20.843	-21.369	-0.526
FeCl2+	5.455e-22	5.057e-22	-21.263	-21.296	-0.033
FeHSO4+2	3.817e-25	2.819e-25	-24.418	-24.550	-0.132
Fe3 (OH) 4+5	2.293e-25	3.450e-26	-24.640	-25.462	-0.823
FeCl3	3.696e-26	3.701e-26	-25.432	-25.432	0.001
H (0)	0.000e+00				
H2	0.000e+00	0.000e+00	-47.219	-47.219	0.001
K	3.838e-05				
K+	3.831e-05	3.549e-05	-4.417	-4.450	-0.033
KSO4-	6.342e-08	5.880e-08	-7.198	-7.231	-0.033
KHPO4-	5.311e-11	4.924e-11	-10.275	-10.308	-0.033
KOH	2.050e-11	2.053e-11	-10.688	-10.688	0.001
Mg	2.963e-04				
Mg+2	2.817e-04	2.104e-04	-3.550	-3.677	-0.127
MgSO4	1.011e-05	1.012e-05	-4.995	-4.995	0.001
MgHCO3+	3.172e-06	2.940e-06	-5.499	-5.532	-0.033
MgCO3	1.039e-06	1.041e-06	-5.983	-5.983	0.001
MgHPO4	8.116e-08	8.126e-08	-7.091	-7.090	0.001
MgF+	7.985e-08	7.402e-08	-7.098	-7.131	-0.033
MgOH+	3.047e-08	2.825e-08	-7.516	-7.549	-0.033
MgPO4-	2.521e-08	2.337e-08	-7.598	-7.631	-0.033
MgH2PO4+	4.045e-10	3.750e-10	-9.393	-9.426	-0.033
Mn (2)	2.549e-07				
Mn+2	1.683e-07	1.257e-07	-6.774	-6.901	-0.127
MnCO3	6.591e-08	6.599e-08	-7.181	-7.181	0.001
MnHCO3+	1.507e-08	1.397e-08	-7.822	-7.855	-0.033
MnSO4	5.125e-09	5.131e-09	-8.290	-8.290	0.001
MnCl+	4.044e-10	3.749e-10	-9.393	-9.426	-0.033
MnOH+	1.493e-10	1.384e-10	-9.826	-9.859	-0.033
MnF+	6.761e-12	6.267e-12	-11.170	-11.203	-0.033
Mn (NO3) 2	1.673e-13	1.675e-13	-12.776	-12.776	0.001
MnCl2	1.196e-13	1.198e-13	-12.922	-12.922	0.001
MnCl3-	2.604e-17	2.414e-17	-16.584	-16.617	-0.033
Mn (3)	4.446e-20				
Mn+3	4.446e-20	2.248e-20	-19.352	-19.648	-0.296
N (-3)	0.000e+00				

NH4+	0.000e+00	0.000e+00	-75.089	-75.123	-0.034
NH3	0.000e+00	0.000e+00	-76.659	-76.658	0.001
N (0)	6.565e-24				
N2	3.282e-24	3.286e-24	-23.484	-23.483	0.001
N (3)	1.167e-17				
NO2-	1.167e-17	1.079e-17	-16.933	-16.967	-0.034
N (5)	6.136e-04				
NO3-	6.136e-04	5.678e-04	-3.212	-3.246	-0.034
Mn (NO3) 2	1.673e-13	1.675e-13	-12.776	-12.776	0.001
Na	6.092e-04				
Na+	6.079e-04	5.640e-04	-3.216	-3.249	-0.033
NaSO4-	8.653e-07	8.022e-07	-6.063	-6.096	-0.033
NaHCO3	3.948e-07	3.953e-07	-6.404	-6.403	0.001
NaCO3-	3.226e-08	2.991e-08	-7.491	-7.524	-0.033
NaF	2.335e-09	2.338e-09	-8.632	-8.631	0.001
NaHPO4-	8.441e-10	7.825e-10	-9.074	-9.107	-0.033
NaOH	6.209e-10	6.217e-10	-9.207	-9.206	0.001
O (0)	7.305e-04				
O2	3.653e-04	3.657e-04	-3.437	-3.437	0.001
P	1.453e-06				
HPO4-2	9.644e-07	7.116e-07	-6.016	-6.148	-0.132
CaHPO4	2.279e-07	2.282e-07	-6.642	-6.642	0.001
H2PO4-	8.131e-08	7.542e-08	-7.090	-7.123	-0.033
MgHPO4	8.116e-08	8.126e-08	-7.091	-7.090	0.001
CaPO4-	7.094e-08	6.577e-08	-7.149	-7.182	-0.033
MgPO4-	2.521e-08	2.337e-08	-7.598	-7.631	-0.033
CaH2PO4+	1.206e-09	1.118e-09	-8.919	-8.952	-0.033
NaHPO4-	8.441e-10	7.825e-10	-9.074	-9.107	-0.033
MgH2PO4+	4.045e-10	3.750e-10	-9.393	-9.426	-0.033
PO4-3	7.601e-11	3.835e-11	-10.119	-10.416	-0.297
KHPO4-	5.311e-11	4.924e-11	-10.275	-10.308	-0.033
FeHPO4+	8.393e-19	7.781e-19	-18.076	-18.109	-0.033
FeH2PO4+2	1.924e-19	1.421e-19	-18.716	-18.847	-0.132
FeHPO4	7.819e-21	7.829e-21	-20.107	-20.106	0.001
FeH2PO4+	1.127e-22	1.045e-22	-21.948	-21.981	-0.033
S (-2)	0.000e+00				
HS-	0.000e+00	0.000e+00	-151.917	-151.950	-0.033
H2S	0.000e+00	0.000e+00	-152.993	-152.993	0.001
S-2	0.000e+00	0.000e+00	-157.013	-157.142	-0.129
Fe (HS) 2	0.000e+00	0.000e+00	-312.510	-312.509	0.001
Fe (HS) 3-	0.000e+00	0.000e+00	-462.389	-462.422	-0.033
S (6)	4.791e-04				
SO4-2	4.250e-04	3.155e-04	-3.372	-3.501	-0.129
CaSO4	4.297e-05	4.302e-05	-4.367	-4.366	0.001
MgSO4	1.011e-05	1.012e-05	-4.995	-4.995	0.001
NaSO4-	8.653e-07	8.022e-07	-6.063	-6.096	-0.033
KSO4-	6.342e-08	5.880e-08	-7.198	-7.231	-0.033
BaSO4	1.671e-08	1.673e-08	-7.777	-7.777	0.001
MnSO4	5.125e-09	5.131e-09	-8.290	-8.290	0.001
HSO4-	1.439e-10	1.334e-10	-9.842	-9.875	-0.033
CaHSO4+	1.381e-12	1.281e-12	-11.860	-11.893	-0.033

FeSO4+	1.805e-17	1.674e-17	-16.743	-16.776	-0.033
Fe(SO4)2-	1.167e-19	1.082e-19	-18.933	-18.966	-0.033
FeSO4	1.141e-19	1.143e-19	-18.943	-18.942	0.001
FeHSO4+2	3.817e-25	2.819e-25	-24.418	-24.550	-0.132
FeHSO4+	4.780e-27	4.431e-27	-26.321	-26.353	-0.033

-----Saturation indices-----

Phase	SI	log IAP	log KT	
Anhydrite	-2.26	-6.60	-4.34	CaSO4
Aragonite	-0.03	-8.28	-8.25	CaCO3
Barite	-0.21	-10.48	-10.26	BaSO4
Calcite	0.13	-8.28	-8.41	CaCO3
CH4(g)	-151.67	-154.39	-2.72	CH4
CO2(g)	-3.40	-4.66	-1.26	CO2
Dolomite	-0.43	-17.13	-16.70	CaMg(CO3)2
Fe(OH)3(a)	2.62	7.51	4.89	Fe(OH)3
FeS(ppt)	-157.37	-161.29	-3.92	FeS
Fluorite	-2.57	-13.38	-10.81	CaF2
Goethite	7.92	7.51	-0.41	FeOOH
Gypsum	-2.01	-6.60	-4.59	CaSO4:2H2O
H2(g)	-44.14	-47.22	-3.08	H2
H2O(g)	-1.94	-0.00	1.94	H2O
H2S(g)	-152.18	-152.99	-0.81	H2S
Halite	-7.93	-6.38	1.54	NaCl
Hausmannite	7.56	72.72	65.16	Mn3O4
Hematite	17.77	15.02	-2.74	Fe2O3
Hydroxyapatite	0.90	-1.04	-1.94	Ca5(PO4)3OH
Jarosite-K	-5.66	-13.58	-7.93	KFe3(SO4)2(OH)6
Mackinawite	-156.64	-161.29	-4.65	FeS
Manganite	6.25	31.59	25.34	MnOOH
Melanterite	-18.64	-21.06	-2.42	FeSO4:7H2O
N2(g)	-20.28	-23.48	-3.20	N2
O2(g)	-0.68	-3.44	-2.76	O2
Pyrite	-258.43	-277.37	-18.94	FeS2
Pyrochroite	-5.66	9.54	15.20	Mn(OH)2
Pyrolusite	9.58	53.63	44.05	MnO2:H2O
Rhodochrosite	-1.01	-12.08	-11.07	MnCO3
Siderite	-11.95	-22.74	-10.79	FeCO3
Sulfur	-114.18	-108.91	5.27	S
Vivianite	-37.51	-73.51	-36.00	Fe3(PO4)2:8H2O
Witherite	-3.52	-12.16	-8.64	BaCO3

-----  
End of simulation.  
-----

-----  
End of run.  
-----