

Sophie Borrmann, Stephan Hannappel & Eike Barthel

Ableitung geogener Hintergrund- und Schwellenwerte für das Grundwasser in Sachsen-Anhalt

Determination of geogenic background and threshold values for groundwater in Saxony-Anhalt

Um die Anforderungen der Grundwasserrichtlinie zu erfüllen, wurden für die gesamte Landesfläche von Sachsen-Anhalt geogene Hintergrundwerte für das Grundwasser ermittelt und zugleich grundwasserkörperbezogene Schwellenwerte abgeleitet. Das bearbeitete Spektrum umfasste 47 Parameter. Flächenhafte Bezugsgrundlage waren die durch das Landesamt für Geologie und Bergwesen Sachsen-Anhalt festgelegten 14 hydrogeologischen Bezugseinheiten. Methodisch wurden zur Ermittlung der Hintergrundwerte Wahrscheinlichkeitsnetze eingesetzt. Bei diesem iterativen Verfahren wird durch Abtrennen von oberen und unteren hydrochemischen Anomalien die Hintergrundpopulation identifiziert. Zur Bearbeitung wurde eine seitens der Staatlichen Geologischen Dienste Deutschlands für die Ableitung von Hintergrundwerten programmierte Excel-Anwendung verwendet. Die Abtrennung bei deutlich anthropogener Überprägung erwies sich als schwierig. Im Resultat sind die aktuellen Werte gegenüber den bisher in Sachsen-Anhalt abgeleiteten Hintergrundgehalten häufig erhöht. Zudem wurden für einige Parameter innerhalb der quartären und tertiären Bezugseinheiten signifikante Konzentrationsunterschiede zwischen dem Locker- und Festgesteinsbereichen festgestellt. Deshalb wurden diese Bezugseinheiten zusätzlich untergliedert. Es hat sich ebenso durch den Vergleich mit den bundesweiten Hintergrundwerten gezeigt, dass die gewählte hydrogeologische Einheit von großer Bedeutung ist und somit die regionalspezifische Ausweisung empfehlenswert ist. Die Schwellenwerte wurden anschließend für neun Parameter (ohne Nitrat) der Grundwasserverordnung für jeden einzelnen Grundwasserkörper flächengewichtet mit den Hintergrundwerten der Bezugseinheiten darin ermittelt. Die Parameter Chlorid, Sulfat und Ammonium zeigen regional Abweichungen zu dem gesetzlichen Schwellenwert auf.

Schlagwörter: Grundwasser, Hintergrundwerte, Wahrscheinlichkeitsnetz, Normalpopulation

In order to meet the requirements of the EU Groundwater Directive, geogenic groundwater background levels were derived for the entire territory of the federal state of Saxony-Anhalt. Furthermore, threshold values were determined on the level of groundwater bodies. The array of examined parameters was comprised of 47 parameters. Fourteen hydrogeological reference units defined by the Saxony-Anhalt Federal State Office of Geology and Mining were chosen as areal reference basis. The natural background levels were defined using probability plots, whereby upper and lower hydro-chemical anomalies are excluded through an iterative process. This was done using an Excel application which was developed by the State Geological Services of Germany. The identification of the anthropogenic component proved to be difficult in areas with high human impact. As a consequence, the present background concentrations are often higher than the former ones. Moreover, significant concentration differences between areas of unconsolidated and consolidated rocks were found for some parameters within quaternary and tertiary reference units. Hence, these hydrogeological reference units were subdivided. Furthermore, a comparison with the background levels established on a national level showed that the chosen hydrogeological unit is of crucial importance, making the determination on a regional level highly recommended. The threshold values were determined for nine parameters (without nitrate) of the Groundwater Ordinance. They were calculated for each groundwater body based on the background levels of the corresponding hydrogeological reference units in an area-weighted manner. The parameters chloride, sulphate and ammonium show regional variations in relation to the legally fixed threshold values.

Keywords: groundwater, background levels, probability plot, normal population

1. Einleitung

Die Grundwasser-Richtlinie (GWRL) sieht für die im Grundwasser natürlich vorkommenden Stoffe oder Stoffgruppen die Bestimmung von Hintergrundwerten (HGW) sowie die Ausweisung von parameterspezifischen und grundwasserkörperbezogenen Schwellenwerten (SW) vor. Letztere beschreiben untere Grenzen für anthropogen verursachte Belastungen. Sie sind ein wichtiger Maßstab zur Beurteilung des chemischen Zustandes des Grundwassers. Um die natürliche Zusammensetzung des Grundwassers dabei berücksichtigen zu können, darf ein durch die Grundwasserverordnung (GrwV) festgelegter SW mit dem HGW in einem Grundwasserkörper gleichgesetzt werden, wenn dieser den SW überschreitet.

Der HGW eines chemischen Stoffes im Grundwasser kann in Anlehnung an die Definition von KUNKEL et al. (2004) als die Obergrenze der Konzentrationen definiert werden, die im Grundwasser der jeweils untersuchten hydrogeochemischen Einheit unter

dem Einfluss der natürlichen Einwirkungen entsteht. KUNKEL et al. (2004) verweisen jedoch zu Recht darauf, dass die aktuell ubiquitär vorhandenen anthropogenen Einflüsse in einem dicht besiedelten Land wie der Bundesrepublik Deutschland von natürlichen Einwirkungen nicht mehr abgetrennt werden können. Ähnlich argumentieren auch andere Autoren (SCHENK, 2003; WAGNER et al., 2014).

Sowohl die natürlichen Prozesse, als auch die anthropogenen Einflüsse können durch unterschiedliche räumliche und zeitliche Skalen charakterisiert sein. Daher können kleinräumige Anomalien geogener sowie anthropogener Natur in unterschiedlicher Intensität ausgeprägt sein und sich in der Häufigkeitsverteilung eines Parameters auch auf unterschiedliche Konzentrationsbereiche auswirken. Als Anomalie gelten Abweichungen von der für eine Umgebung charakteristischen parameterspezifischen Verteilung. Um den natürlich ubiquitär überprägten HGW eines Parameters in einer hydrogeochemischen Einheit festlegen zu können, sind diese Anomalien zu identifizieren und – abzielend

auf die Ausweisung einer sogenannten "Normalpopulation" – abzutrennen. Damit eine statistische Auswertung dieser Art möglich ist, sollte eine hydrogeochemische Einheit ausreichend groß sein, um einen angemessenen Stichprobenumfang zu erheben.

Darüber hinaus gibt es zur Ableitung von HGW verschiedene methodische Ansätze (GRUBE et al., 2000; HANNAPPEL, 1996; JAHNKE, 1999; MERTEN, 2002; SCHENK, 2003; SCHLEYER & KERNDORFF, 1992; TLUG, 1997). Für die statistischen Verfahren, die bereits auf Bundesebene Anwendung fanden, sei auf KUNKEL et al. (2004), LAWA (2017) und WAGNER et al. (2014) verwiesen. Mit der Novellierung der GrwV im Jahr 2017 wurde die Methodik zur Ableitung von HGW erstmals bundesweit vereinheitlicht, wie im Folgenden dargestellt wird: Vorgesehen für die Abgrenzung von Anomalien und zur Identifikation der Normalpopulation ist der Einsatz von Wahrscheinlichkeitsnetzen (nach DIN 53804-1 und WAGNER et al., 2014). Ein Wahrscheinlichkeitsnetz stellt die kumulative Häufigkeit einer Zufallsvariable grafisch dar. Folgt diese Variable gänzlich oder partiell der Normalverteilung werden entsprechende Abschnitte als Gerade abgebildet. Somit kann eine Normalpopulation über eine optische Prüfung einfach identifiziert werden (vgl. Kap. 3.1). Zudem können das 90. Perzentil, welches als HGW definiert wird, und die Verteilungsparameter Mittelwert und Standardabweichung schnell abgeleitet werden, um die verbleibende Normalpopulation zu charakterisieren. Das Verfahren wird aktuell in Deutschland weitverbreitet eingesetzt (NW, SL, BY) und ist auch für andere Umweltmedien geeignet. Seitens der Staatlichen Geologischen Dienste (SGD) Deutschlands wurde für die Ableitung von HGW eine Excel-Anwendung programmiert (sog. "Probnet") und bereits für die Ausweisung der Hintergrundwerte auf Bundesebene erprobt (WAGNER et al., 2014).

Veranlasst durch die gesetzlichen Neuerungen gab der Landesbetrieb für Hochwasserschutz und Wasserwirtschaft Sachsen-Anhalt (LHW) die Erarbeitung der geogenen HGW und SW in Auftrag (HYDOR, 2017). Hierfür konnten die hydrogeologischen Besonderheiten mit dem vom Landesamt für Geologie und Bergwesen Sachsen-Anhalt (LAGB) definierten hydrogeologischen Bezugseinheiten (BZE) berücksichtigt werden, die die flächenhafte Bezugsgrundlage für die Ermittlung

der HGW bildeten. Die SW wurden auf Ebene der Grundwasserkörper ermittelt. In diesem Beitrag liegt der Fokus auf der Umsetzung der Methodik zur Ausweisung von HGW und SW.

2. Datenauswahl und -aufbereitung

2.1 Zuordnung und Untergliederung der Bezugseinheiten

Die Zuordnung jeder einzelnen Messstelle zu einer der hydrogeologischen Bezugseinheiten (BZE) war für die Ableitung der Hintergrundwerte (HGW) und den Schwellenwerten (SW) von zentraler Bedeutung. Die vom LAGB im Jahr 2013 ausgewiesenen BZE basieren auf der Hydrogeologischen Übersichtskarte von Sachsen-Anhalt im Maßstab 1 : 400.000 (HÜK400). Insgesamt wurden auf diese Weise für das Land Sachsen-Anhalt 14 BZE definiert, die in der Tabelle 1 zusammengefasst sind. Für die flächenhafte Ausdehnung und Verbreitung der BZE sei auf die Abbildung 2 verwiesen. Die BZE Nummer 3 ist aus historischen Gründen nicht belegt.

Der Norden und Osten des Landes ist den norddeutschen Lockergesteinsgebieten (BZE 1,2,4 bis 6) zuzuordnen. Die für Sachsen-Anhalt bedeutsamen Grundwasservorkommen sind an die Sande

Tabelle 1 Übersicht zu den hydrogeologischen Bezugseinheiten (BZE) des Landes Sachsen-Anhalt und deren zusätzlichen Untergliederung. <i>Overview of the hydrogeological reference units of the federal state of Saxony-Anhalt and their subdivision.</i>			
BZE	Kurzbezeichnung	Langlegende	Untergliederung BZE
1	Flussauen und Niederungen	GWL in glazifluviatilen und fluviatilen Sedimenten der Flussauen und Niederungen	1 GR1 Nord+Süd 1 GR5+GR8+Saale EZG
2	Flussauen mit Auenlehmdecke	GWL in glazifluviatilen Sedimenten der Flussauen mit holozäner Auenlehm- oder organischer Decke	2 GR1 Nord+Süd 2 GR5+GR8+Saale EZG
4	Pleistozäne Hochflächen, unbedeckter GWL	GWL in glazifluviatilen Sedimenten der Endmoränen und Sander ohne Deckschichten	4 GR1 Nord 4 GR1 Süd 4 GR5+GR8+Saale EZG
5	Pleistozäne Hochflächen, bedeckter GWL	GWL in glazifluviatilen Sedimenten der Endmoränen und Sander, weitgehend unter Geschiebemergelbedeckung	5 GR1 Nord 5 GR1 Süd 5 GR5+GR8+Saale EZG
6	Tertiär	GWL in sandigen und schluffigen Sedimenten des Tertiärs	6 GR1 Nord+Süd 6 GR5+GR8+Saale EZG
7	Muschelkalk	GWL in Kalk-, Dolomit und Mergelstein, z. T. unter pleistozäner Bedeckung, im Harz devonischer Kalkstein	–
8	Buntsandstein	GWL in Sand- und Schluffsteinen des Buntsandsteins, z. T. unter pleistozäner Bedeckung	–
9	Keuper, Jura, Kreide	GWL in Sand- und Schluffsteinen, z. T. Kalk- und Mergelsteinen von Keuper-, Jura- und Kreide	–
10	Zechstein	GWL in Karbonat- und Sulfatgesteinen des Zechsteins	–
11	Permokarbon	GWL in Sandsteinen und Konglomeraten des Permokarbon	–
12	Altpaläozoikum	GWL in altpaläozoischen, metamorphen Gesteinen (Schiefer, Grauwacken, Quarzite, Metamorphite)	–
13	Saure Magmatite	GWL im Zersatz von Granit und Porphy	–
14	Basische Magmatite	GWL in basischen Ganggesteinen des Harzes	–
15	Anthropogen verändert (Tagebau beeinflusst)	Großflächig und tiefgründig durch Abgrabung, Verkippung und diffusen Schadstoffeintrag veränderte hydrogeologische Verhältnisse	–

und Kiese gebunden, die diesen Raum dominieren (LHW, 2012). Die Grundgebirge umfassen den Harz, sowie die Magdeburg-Flechtinger Hochlage. Die Festgesteine des Harzes bestehen im Wesentlichen aus Sauren Magmatiten (BZE 13) und Gesteinen, die hydrogeologisch dem Altpaläozoikum (BZE 12) zuzuordnen sind. Die Basischen Magmatite (BZE 14) bilden sehr kleinflächige Gänge im Gestein ab.

Die messstellenscharfe Zuordnung der BZE erfolgte unter Berücksichtigung verschiedener zur Verfügung stehender Informationen. Die Informationsdichte war von Messstelle zu Messstelle unterschiedlich. Im Folgenden werden die für die Zuordnung relevanten Informationen kurz benannt:

- a) Stammdaten (bereits zugeordnete Bezugseinheit, Angaben zur Stratigraphie, Filterlage, Einbautiefe)
- b) Schichtenverzeichnisse, Schichtdaten der Landesbohrdatenbank
- c) Karte der hydrogeologischen Bezugseinheiten Sachsen-Anhalts (HÜK400)
- d) Hydrogeologische Übersichtskarte im Maßstab 1 : 200.000 (HÜK200).

Bis auf die Informationen aus den Schichtenverzeichnissen oder den Schichtendaten waren alle Daten tabellarisch zusammengeführt. Fast 60 % der Messstellen besaßen stratigrafische Informationen. An erster Stelle wurde die Übereinstimmung dieser Zusatzinformationen und den Einträge der HÜK200 und HÜK400 geprüft. Dafür wurden die Einträge der HÜK200 jeweils einer BZE zugeordnet. Mehrheitlich konnte eine Übereinstimmung der hydrogeologischen Angaben festgestellt werden. Bei ungefähr 40 % der Messstellen wurden aufgrund von widersprüchlichen Informationen u. a. Schichtenverzeichnisse und die Schichtdaten der Landesbohrdatenbank, welche 24.270 Bohrungen umfasste, konsultiert, um die BZE festlegen zu können. Die zirka 660 Schichtenverzeichnisse lagen nur für Messstellen des Landes- und Ermittlungsmessnetzes vor. Die Bohrlochdaten wurden jedoch nur bei Messstellen zu Rate gezogen, bei denen die Filterlage bekannt war und die Entfernung der Messstelle zu der Bohrung weniger als 200 m betrug. Letztere Einschränkung wurde aufgrund der Heterogenität der Schichtfolge auf kleinräumiger Skala vorgenommen und sollte eine gesicherte Zuweisung garantieren. Bei fehlender Angabe zur Filterlage oder fehlenden Schichtdaten in näherer Umgebung wurde die Zuordnung einer BZE systematisch getroffen, indem den vorliegenden Informationen eine unterschiedliche Gewichtung zugesprochen wurde. Meistens war neben den Zusatzinformationen die HÜK200 entscheidend für die Zuweisung. Ein Vergleich der Kartenwerke HÜK200 und HÜK400 zeigt nämlich, dass vor allem auf lokaler Ebene Differenzen vorkommen und die HÜK200 ein detailliertes Bild der geologischen Eigenschaften gibt. Ein weiterer Aspekt war der Abgleich mit hydrochemischen Daten, die im Zweifelsfall typisch für die zugeordnete BZE sein sollten.

Im Allgemeinen kann man u. a. in Bezug auf die Parameter Chlorid und Sulfat ein Konzentrationsgefälle von Nord nach Süd feststellen, welches durch die Verbreitung von quartären und tertiären Gesteinen in den Lockergesteins- und Festgesteinsgebieten hervorgerufen wird. Daraus ergeben sich innerhalb der betreffenden

Bezugseinheiten Konzentrationsspannen, die einen erheblichen Einfluss auf die Ableitung der Hintergrundwerte hätten. Hierbei käme es zumindest für die Parameter Chlorid und Sulfat im Festgesteinsbereich zu einer Unterschätzung der Hintergrundwerte und im Lockgesteinsbereich zu einer Überschätzung. Zudem gelten derartige Mischpopulationen als ungeeignet für das Arbeiten mit dem Wahrscheinlichkeitsnetz. Daher wurden die BZE unter Verwendung der hydrogeologischen Großräume zusätzlich untergliedert (BGR & SGD, 2016).

Sachsen-Anhalt besteht aus den drei Großräumen "Nord- und mitteldeutsches Lockergesteinsgebiet" (GR1), dem "Mitteldeutschen Bruchschollenland" (GR5) und dem "West- und mitteldeutschem Grundgebirge" (GR8). Die Großräume 5 und 8 (GR5+GR8) wurden aufgrund der gemeinsamen Festgesteinscharakteristik zusammengefasst. Vor der Untergliederung wurde der Mann-Whitney-U-Test ($\alpha = 0.5$), welcher zu den nicht-parametrischen Testverfahren zählt, auf ausgewählte Parameter und Einheiten angewandt, um zu prüfen, ob sich die Populationen innerhalb der untergliederten Einheiten signifikant voneinander unterscheiden. Dabei stellte sich beispielsweise für den Parameter Chlorid in der BZE "Pleistozäne Hochflächen, unbedeckte GWL" ein signifikanter Unterschied heraus.

Das Ergebnis der Untergliederung ist in der Abbildung 2 kartografisch veranschaulicht und in der Tabelle 1 übersichtlich zusammengefasst. In Abhängigkeit von der zugewiesenen BZE und der Lokalisation in einer der drei verschiedenen Kompartimente (GR1 Nord, GR1 Süd oder GR5 + GR8 + Saale EZG) wurde für jede Messstelle eine neue hydrochemisch differenziertere Einheit definiert.

Die hydrochemische Zusammensetzung des Grundwassers ist auch einer tiefenabhängigen Komponente unterworfen. Dies betrifft vor allem die Lockergesteinsgebiete. Obwohl diese Tiefenzonierung in dem vorliegenden Datensatz eine Rolle spielt und sie in vorangegangenen Ableitungen von Hintergrundwerten berücksichtigt worden ist (HYDOR, 2008; WAGNER et al., 2014), wurde diese aufgrund der mangelhaften Datenbasis in Bezug auf Filterlagen nicht in das Konzept der Untergliederung integriert.

Neben dem beschriebenen Konzentrationsgefälle gibt es "Ballungsgebiete" mit Grundwasserleitern, die durch hoch mineralisierte Wässer charakterisiert sind. Insbesondere sind Regionen betroffen, die durch großflächige und tiefgründige anthropogene Veränderungen gekennzeichnet sind (Abgrabung, Verkipfung und diffuse Schadstoffeinträge). In der Regel werden diese Flächen durch die BZE "Anthropogen verändert (Tagebau beeinflusst)" (BZE 15) abgedeckt. Da die Einzugsgebiete dieser Gebiete über die definierte BZE hinausgehen, wurde eine Pufferzone von 2 km allseitig um die BZE eingerichtet (Abb. 1). Alle Messstellen in dem Bereich wurden der BZE 15 zugeordnet.

2.2 Aggregierung der Beschaffenheits- und Stammdaten

Für die Ausweisung von den Hintergrundwerten (HGW) auf Ebene der Bezugseinheiten (BZE) und der Bestimmung der Schwellenwerte (SW) auf Ebene der Grundwasserkörper war zunächst eine sorgfältige Datenauswahl und -aufbereitung notwendig. Zur Verfügung standen Beschaffenheits- und Stammdatensätze, die Daten des Landesmessnetzes Grundwasser-Beschaffenheit, von Ermittlungsuntersuchungen des Landesbetrieb für Hochwasserschutz und Wasserwirtschaft Sachsen-Anhalt (LHW),

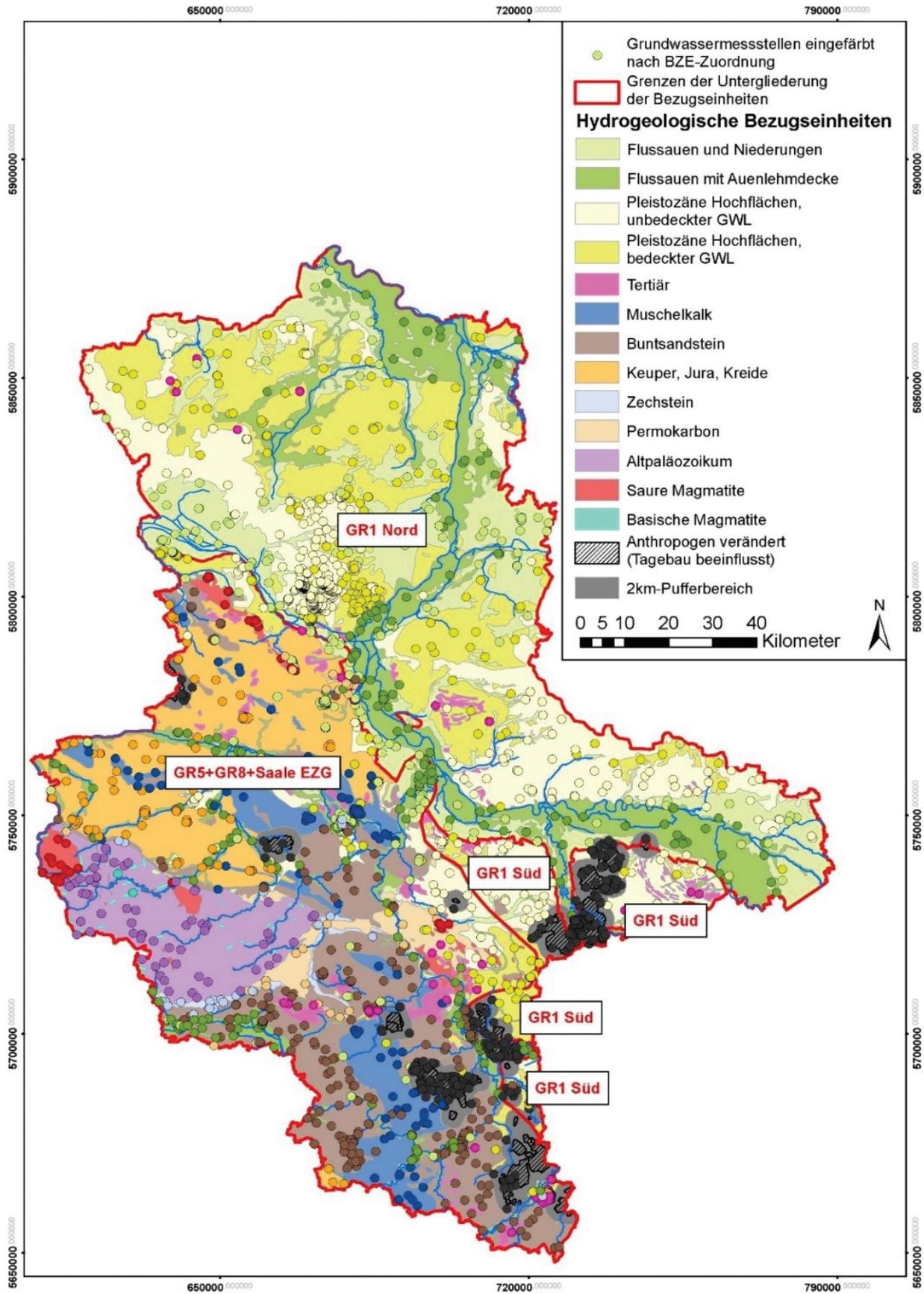


Abbildung 1
 Flächenhafte Ausdehnung und Verbreitung der hydrogeologischen Bezugseinheiten sowie Darstellung der zusätzlichen Untergliederung.
 Extent and distribution of the hydrogeological reference units as well as illustration of the subdivision.

Rohwasserdaten, Daten aus dem Bergbau, Sand- und Kiesabbau, sowie Daten, die Sondermessnetze umfassten. Zunächst wurden für jeden Analysedatensatz die relevanten Parameter ausgewählt. Zu den annähernd 50 Parametern zählten alle Haupt- und Nebeninhaltsstoffe des Grundwassers, sowie viele anorganische Spurenelemente. Zudem wurden alle Analysen ab dem Jahr 2000 selektiert. Der wesentliche Grund, nur Analysen ab dem Jahr 2000 zu berücksichtigen, lag darin begründet, dass somit bei den Spurenelementen weitgehend einheitliche Bestimmungsgrenzen (BG) vorlagen. Im Anschluss wurden die Datensätze aggregiert. Parallel dazu wurden die Stammdaten aufbereitet, die hauptsächlich aus Angaben zum Messstellenamen, zu einem Identifikationsschlüssel, zu Koordinaten und Ausbaudaten sowie aus stratigrafischen Angaben bestanden. Messstellenbezogen wurde den Stammdaten zudem die jeweilige Punktinformation der Hydrogeologischen Übersichtskarten im Maßstab 1 : 200.000 (HÜK200) und im Maßstab 1 : 400.000 (HÜK400) zugeordnet. Danach wurde der Beschaffenheits- und Stammdatensatz zusammengeführt. Im Resultat lag ein Datensatz vor, der ungefähr 17.500 Analysen von 3.210 verschiedenen Messstellen umfasste.

2.3 Plausibilitätsprüfung der Beschaffenheitsdaten

Im Anschluss an die Aggregation zu einem einheitlichen Datensatz wurden die Beschaffenheitsdaten einer stufenweisen Plausibilitätsprüfung unterzogen. An erster Stelle wurden Einzelwerte anhand von recherchierten parameterbezogenen Spannweiten geprüft. Die Spannweiten orientierten sich an Minimal- und Maximalwerten, die in geeigneten nationalen oder landesweiten hydrogeochemischen Berichten zu finden waren (KUNKEL et al., 2004; WAGNER et al., 2003). In der Regel sind Einzelwerte, die sich um mehr als eine Größenordnung nach oben bzw. nach unten von der oberen bzw. unteren Plausibilitätsgrenze unterschieden, aus dem Datensatz eliminiert worden. Im Ergebnis der Prüfung wurden im Mittel 0,7 % (max. 10 %) der Einzelwerte pro Parameter entfernt. Durchschnittlich wurden 16 (max. 105) Einzelwerte pro Parameter eliminiert. Nur bei den Parametern Nickel, Bismut, Bor, Bromid, Eisen, Silizium sowie Strontium waren mehr als 1 % der Einzelwerte von der Eliminierung betroffen.

Da aufgrund der Heterogenität des Datensatzes verschiedene Bestimmungsgrenzen (BG) für einen Parameter vorlagen, war es notwendig, die Werte unterhalb der BG einer zweiten separaten Plausibilitätsprüfung zu unterziehen. Denn deren Anzahl ist bei der Arbeit mit dem Wahrscheinlichkeitsnetz entscheidend und fällt insbesondere bei der Ableitung der Hintergrundwerte (HGW) für Spurenelemente ins Gewicht. Auch hier wurden untere und obere Plausibilitätsgrenzen festgelegt und alle Werte außerhalb dieser Grenzen eliminiert. Für die Festlegung der Plausibilitätsgrenzen wurden verschiedene Dokumentationen über Bestimmungsmethoden mit Angaben zur unteren Grenze des Anwendungsbereiches konsultiert (WAGNER et al., 2003; LAWA, 2004). Aufgrund des Alters dieser Dokumentationen und der Weiterentwicklung der Laboranalytik in den vergangenen Jahren dienten die angegebenen Anwendungsgrenzen nur als Richtwerte. Für die Festlegung der Plausibilitätsgrenzen waren Häufigkeitsverteilungen ausschlaggebend: Sowohl kleinere als auch größere BG eines Parameters wurden als unplausibel angenommen, wenn diese BG nur eine verhältnismäßig geringe Anzahl von Analysen betrafen. Da vor allem sehr hohe BG bei der Arbeit mit dem Wahrscheinlichkeitsnetz Störfaktoren darstellen, wurden diese großzügig entfernt. Hierbei wurden im Mittel 0,5 %

(max. 5 %) von Einzelwerten eliminiert. Pro Parameter wurden so durchschnittlich 21 (max. 215) Werte aus dem Datensatz herausgenommen.

An dritter Stelle wurde eine analysebezogene Prüfung durchgeführt. Hier war ein niedriger Ionenbilanzfehler ausschlaggebend für eine weitere Verwendung der Daten. Voraussetzung für die Berechnung des Fehlers war die Vollständigkeit der Analysen in Bezug auf die Hauptkationen und -anionen sowie die wichtigsten Nebeninhaltsstoffe. Diese Bedingung wurde von fast 50 % der Analysen des gesamten Beschaffenheitsdatensatzes erfüllt. Die Ionenbilanz berechnet sich anhand der molekularen Äquivalentgehalte aller relevanten Kationen und Anionen dann wie folgt:

$$\text{Ionenbilanzfehler (\%)} = \frac{\sum \text{Kationen (c,eq}^+) - \sum \text{Anionen (c,eq}^-)}{0,5 \cdot [\sum \text{Kationen (c,eq}^+) + \sum \text{Anionen (c,eq}^-)]} * 100 \quad (1)$$

Im Idealfall ist die Anzahl der positiv und negativ geladenen Ionen gleich. Abweichungen durch positive oder negative Ladungsüberschüsse deuten auf Analysefehler hin. In der Regel werden die Ionenbilanzrechnungen in Abhängigkeit von der Mineralisation (Ionensumme) der Probe bewertet. In der Vergangenheit wurden von der Ionensumme abhängig verschiedene plausible Vertrauensbereiche angewandt (DVVK 128/1992; LAWA, 1993; UBA, 2000). Für den vorliegenden Datensatz wurde die Grenze für alle zu prüfenden Analysen bei 10 % festgelegt. Übertragen auf den gesamten Datensatz wurden 2,5 % der Analysen als unplausibel eingestuft. Insgesamt standen nach erfolgter Selektion 17.055 Analysen von 3.156 Grundwassermessstellen zur Verfügung.

2.4 Verfahrensweise bei Mehrfachanalysen

Für mehr als 60 % der für die Ableitung der Hintergrundwerte (HGW) relevanten Messstellen liegen für den Zeitraum der Jahre 2000 bis 2016 Mehrfachanalysen vor. Um die Repräsentativität dieser Messstellen gleich zu gewichten, wurde für die statistische Auswertung mit dem Wahrscheinlichkeitsnetz mit einem Wert pro Messstelle operiert. Für die Herleitung eines Wertes pro Messstelle ist das arithmetische Mittel aller Analysen dieser Messstelle gebildet worden. Der Mittelwert gilt als guter Schätzer des Zentrums einer Verteilung und ist sensitiv gegenüber jedem Einzelwert der Verteilung. Letzteres bedeutet auch, dass er im Gegensatz zu dem Lagemaß Median stark durch Extremwerte beeinflusst werden kann. Dieser Effekt war gewünscht, da die Nivellierung von Extremwerten vor der Auswertung mit dem Wahrscheinlichkeitsnetz dessen Ergebnisse verzerren würde und die HGW auf diese Weise künstlich nach unten gedrückt werden würden. Aus diesem Grund wurde auch auf eine weitere Präselektion von Messstellen verzichtet.

Die Mittelwertbildung bei Parametern, bei denen Werte kleiner der Bestimmungsgrenzen (BG) auftraten, folgte einer speziellen Methode. Ziel war es, nach der Mittelwertbildung messstellenbezogene Werte kleiner der BG und Positivfunde klar trennen zu können. Dieses Vorgehen war für die Arbeit mit dem Wahrscheinlichkeitsnetz essentiell. Daher wurde der messstellenbezogene Mittelwert im Falle, dass die Werte mehrheitlich unter der BG lagen, nur mit den Werten unterhalb der BG gebildet. Waren die Analysen eines Parameters mehrheitlich Positivfunde bzw. war die Anzahl zwischen Werten kleiner der BG und Positivfunden gleich, wurde der Mittelwert nur auf Basis der Positivfunde abgeleitet. Das Verfahren bei Gleichstand steht auch in Zusammen-

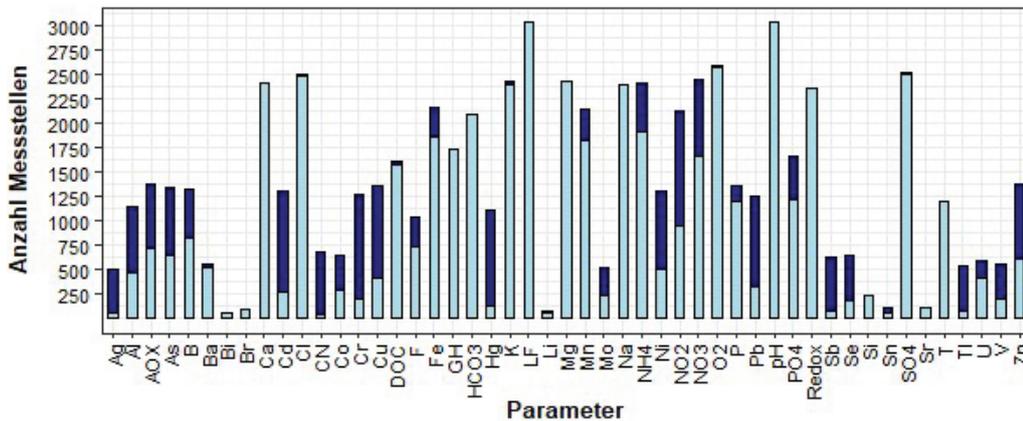


Abbildung 2
 Gesamtanzahl der (gemittelten) Werte pro Parameter. Differenziert wird zwischen der Anzahl der Positivfunde (hellblau) und der Anzahl der Werte unterhalb der Bestimmungsgrenze (dunkelblau).
 Total number of the (averaged) values per parameter. A distinction is made between the amount of positive values (light blue) and values below the limit of determination (dark blue).

hang mit der Mindestanzahl an Werten oberhalb der BG, die für die Herleitung des HGW mithilfe des Wahrscheinlichkeitsnetzes notwendig war.

Im Ergebnis ist in der Abbildung 2 die Datenbelegung für jeden einzelnen Parameter dargestellt. Es zeigt sich, dass für die Hauptparameter und die physikochemischen Parameter elektrische Leitfähigkeit, pH-Wert, Redoxpotential und Temperatur im Vergleich zu den Spurenstoffen ausreichend Daten zur Verfügung stehen. Bemerkenswert ist, dass insbesondere bei den Spurenstoffen ein hoher Anteil von Werten kleiner der Bestimmungsgrenze auftritt. Bei den Parametern Antimon, Cyanid, Chrom, Quecksilber, Silber und Thallium übersteigt der prozentuale Anteil sogar 80 %.

3. Methodik zur Ermittlung der Hintergrund- und Schwellenwerte

3.1 Ermittlung der Hintergrundwerte mittels Wahrscheinlichkeitsnetzen

Wahrscheinlichkeitsnetze wurden von LEPELTIER (1969) entwickelt und beruhen auf der Darstellung kumulativer Häufigkeiten. Es ist ein einfaches, grafisches Verfahren, um die Verteilung der Werte einer Variablen zu analysieren. Im Wahrscheinlichkeitsnetz ist auf der Abszisse die Verteilung x einer Zufallsvariable abgetragen. Auf der Ordinate hingegen werden nicht die Werte von x , sondern deren Verteilungsfunktionswerte dargestellt, die wie folgt berechnet werden:

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt \quad (2)$$

Auf diese Weise werden Normalverteilungen oder auch normalverteilte Abschnitte einer Zufallsvariable als Gerade abgebildet. Eine Normalpopulation ist dementsprechend durch optische Prüfung identifizierbar. Mischungen verschiedener Populationen – auch anomaler Populationen – erscheinen im Wahrscheinlichkeitsnetz als Teilgeraden unterschiedlicher Länge und Steigung. Darüber hinaus sind die Verteilungsparameter für den ausgewählten Geradenabschnitt einfach zu bestimmen. Der Mittelwert entspricht dem Median und die Steigung der Geraden gibt die Standardabweichung vor (Abb. 3).

Bei logarithmisch skaliertem Messwertachse können auch lognormale Verteilungen durch das Wahrscheinlichkeitsnetz analysiert werden. Mithilfe des Wahrscheinlichkeitsnetzes können Anomalien abgetrennt und somit die Hintergrundpopulation ermittelt werden. Für diese Population wird dann der Mittelwert, die Standardabweichung und das 90. Perzentil berechnet. Letzteres wird als natürlicher Hintergrundwert (HGW) dieser Normalpopulation definiert. Ausnahmen bilden pH-Wert und Sauerstoff: Bei diesen wird neben den

90. Perzentil auch das 10. Perzentil ausgewiesen. Die unteren Konzentrationsbereiche sind von höherer Relevanz in Bezug auf die Zustandsbewertung von Grundwasserkörpern, da so saure beziehungsweise sauerstoffarme Flächen identifiziert werden können.

Zur Identifizierung der Normalpopulation und Ermittlung der statistischen Kenngrößen wurde eine eigens für die Ableitung von HGW programmierte Excel-Anwendung eingesetzt – das sogenannte "Probnest". In dieser Anwendung kann zwischen normalen und lognormalen Verteilungen unterschieden werden. In der Regel wurde bei den Parametern von einer lognormalen Verteilung ausgegangen. Auch ist bereits der Umgang mit Werten unterhalb der Bestimmungsgrenze (BG) programmiert. Diese Werte gehen nicht direkt in die Ableitung des HGW ein, sondern nur deren prozentualer Anteil wird im unteren Bereich der Verteilung entsprechend extrapoliert. Das heißt, die Daten unterhalb der BG werden Probnest-intern gelöscht, aber durch die Extrapolation in vollem Umfang berücksichtigt. Da die Geradenparameter direkt über eine Regression berechnet werden, ist die Extrapolation in diesem Verfahren erlaubt.

In Abbildung 3 ist die Extrapolation im unteren Bereich exemplarisch für den Parameter Ortho-Phosphat dargestellt. Hier wird der im Probnest identifizierte Geradenabschnitt (dunkelblaue Linie), der durch die diskreten normalverteilten Werte (hellblaue Punkte) definiert wird, erweitert. Durch die Extrapolation (grün gestrichelte Linie) verschiebt sich der Wertebereich in der Grafik nach rechts und wird so verkürzt, als ob über den gesamten unteren Bereich Werte vorliegen würden. Entsprechend ändert sich auch die Steigung der Geraden.

Das kann – wie im vorliegenden Fall – den Effekt haben, dass der berechnete Mittelwert kleiner als das Minimum der vorliegenden Positivfunde der Normalpopulation ist. Würde man die Daten unterhalb der BG wie Positivfunde behandeln, käme es in der Darstellung im Wahrscheinlichkeitsnetz hingegen zu einer Stufenbildung, die die Auswertung verfälschen und erschweren würde. Da einige Parameter auch trotz dieses Vorgehens Stufen im unteren Bereich aufwiesen, wurden diese Konzentrationsabschnitte unter der Annahme, dass es sich dabei um nicht als un-

terhalb der Bestimmungsgrenze gekennzeichnete Werte handelt, gleichfalls Probnets-intern entfernt.

Außerdem integriert in die automatisierte Anwendung ist der Umgang mit Bereichen, in denen die Hintergrundpopulation durch andere Populationen überlagert wird. In diesen Fällen ist die Normalpopulation nicht eindeutig von Anomalien abgrenzbar. Deshalb werden die Daten im Überlappungsbereich zwar Probnets-intern gelöscht, deren Anzahl aber bei der Ableitung der Verteilungsparameter berücksichtigt.

Die Identifikation der Normalpopulation ist vom Sachverstand des Bearbeiters abhängig, da Kenntnisse der regionalen hydrogeologischen Verhältnisse hierfür von Bedeutung sind. Unterstützt wurde die Identifikation der Normalpopulation durch eine Probnets-unabhängige Visualisierung der Verteilung der Parameter in Histogrammen und Kastengrafiken. Zur Kontrolle der Ergebnisse sind im Probnets außerdem zwei verschiedene statistische Tests eingebaut, die prüfen, inwiefern die Population eines Geradenabschnittes signifikant normalverteilt ist.

Prüfgrößen sind einerseits der d'Agostino-Pearson-Test (D'AGOSTINO et al., 1990) und andererseits die Korrelationsanalyse nach RYAN & JOINER (1976).

Um einen statistisch gesicherten HGW zu erhalten, wurde die Mindestanzahl der Werte, die eine Normalpopulation beschreiben, auf zehn Werte oberhalb der BG festgelegt. Liegen mehr als 90 % der Werte unterhalb der BG vor, kann das 90. Perzentil nicht anhand diskreter Werte ermittelt werden. Vor allem die Neben- und Spurenstoffe waren davon betroffen. Daher wurden in diesen Fällen andere statistische Verfahren eingesetzt (vgl. Kap. 3.2). Bei der Auswertung mit dem Probnets wurde zumindest bei den Hauptkationen und -anionen darauf geachtet, dass nicht mehr als 45 % der Werte durch die Abtrennung von Anomalien entfernt worden. Dieses Kriterium konnte bei Neben- und Spurenstoffen aufgrund der hohen Anzahl an Werten unterhalb der BG nicht angewandt werden.

3.2 Anwendung weiterer statistischer Verfahren bei unzureichender Datenbasis

Die Anwendung des Probnets zur Ausweisung und Charakterisierung einer Normalpopulation wurde, wie beschrieben, auf eine Mindestanzahl von zehn Werten oberhalb der BG begrenzt. Wenn dementsprechend nach der Abtrennung von Anomalien weniger als zehn diskrete Werte vorlagen, wurden andere Methoden zur Ableitung eines HGW eingesetzt. Das betraf insbesondere die Neben- und Spurenstoffe. In der Einheit "Basische Magmatite"

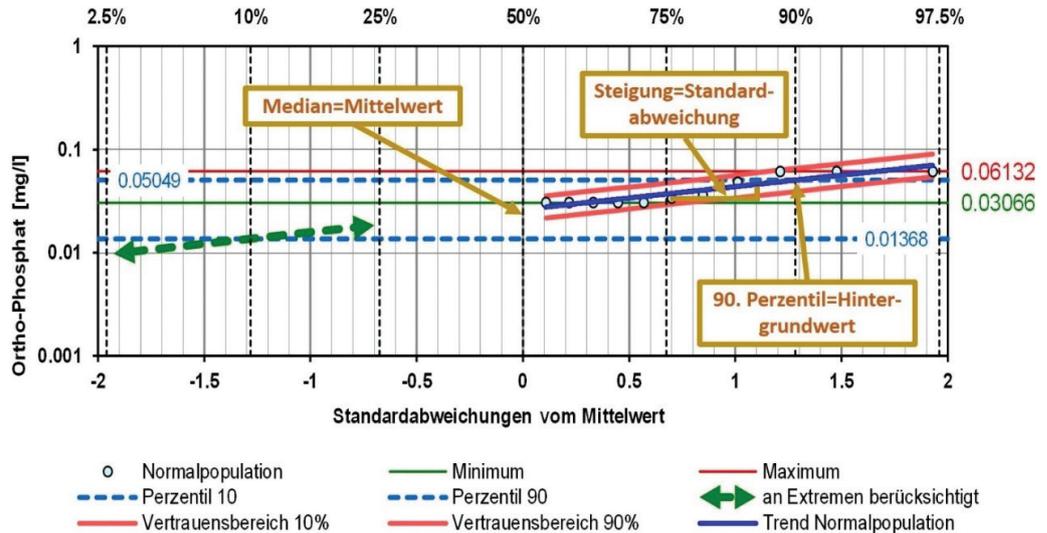


Abbildung 3

Exemplarische Konzentrationsverteilung von Ortho-Phosphat [mg/l] im Wahrscheinlichkeitsnetz. Darstellung wurde mithilfe des "Probnets" erzeugt.

Exemplarily probability plot displaying the concentration distribution of ortho-phosphate [mg/l]. The plot was generated using "Probnets".

(BZE 14) konnte das Wahrscheinlichkeitsnetz generell nicht eingesetzt werden, da hier nur zwei Messstellen vorlagen.

Für die alternativen statistischen Verfahren wurden aufgrund mangelhafter Datenlage nicht die messstellenbezogenen Mittelwerte, sondern die Einzelwerte von allen Analysen ausgewählter Messstellen einbezogen. Dafür wurden die Werte unterhalb der BG halbiert. Lagen insgesamt weniger als zehn Analysen vor, wurde der Mittelwert als HGW ausgewiesen. Bei weniger als zwei Analysen wurde kein HGW festgelegt – hier ist zur Ausweisung eines repräsentativen HGW vorerst eine weitere Datenerhebung erforderlich. Bei mehr als zehn Analysen wurde der HGW rangstatistisch berechnet und in Anlehnung an SCHLEYER & KERNDORFF (1992) über das 84,1 Perzentil bestimmt. Für die Parameter pH-Wert und Sauerstoff wurde zusätzlich das 15,9 Perzentil bestimmt.

Sowohl bei dem rangstatistischen Verfahren, als auch bei der Mittelwertbildung wurde von einer expliziten Ausweisung einer Normalpopulation und deren statistischen Charakterisierung abgesehen. Für die Anwendung von dem rangstatistischen Verfahren und die Mittelwertbildung wurde eine Präselektion der Daten vorgenommen, da durch diese Verfahren extrem hohe Analysewerte nicht identifiziert und abgetrennt werden können.

Um dem Ziel nahe zu kommen, nur die Analysen unbeeinflusster Messstellen zu berücksichtigen, wurden erstens nur Messstellen ausgewählt, deren Konzentrationen bei den Hauptparametern zu dem geogenen Normalbereich der jeweiligen Parameter in der jeweiligen Einheit zählten. Dafür wurden die Maximalwerte der im Wahrscheinlichkeitsnetz ermittelten Normalpopulationen als obere Schranken ausgewiesen. Messstellen, deren Mittelwerte die Schranke des jeweiligen Hauptparameters überschritten, wurden für die weiteren Berechnungen nicht berücksichtigt. Wies eine Messstelle zu einem Hauptparameter keine Analysen auf, wurde sie ebenfalls nicht in die weiteren Schritte einbezo-

gen. Insgesamt wurden auf diese Weise 1.200 Messstellen selektiert, die in Bezug auf die Konzentrationen der Hauptparameter, den geogenen Hintergrund in ihrer jeweiligen Einheit repräsentierten. Die Datenbasis wurde dadurch auf 8.471 Analysen beschränkt.

Insbesondere für Schwermetalle wurde festgestellt, dass diese Präselektion unzureichend ist. Dies betraf beispielsweise anthropogene Beeinflussungen, wie Deponien. Daher wurde hier noch eine zusätzliche Auswahl getroffen: Erstens wurden ausgewählte Messstellen aufgrund beträchtlicher anthropogener Beeinflussung ausgeschlossen. Zweitens wurde für die Metalle Arsen, Blei, Bor, Cadmium, Chrom, Kobalt, Kupfer, Nickel und Quecksilber einheitsbezogen das 90. Perzentil von der beschriebenen Datengrundlage bestimmt und die Einzelwerte oberhalb dieser Perzentile (parameter- und einheitsbezogen) entfernt. Zudem wurden Einzelwerte unterhalb der BG ausgeschlossen, die die Konzentration des jeweiligen Geringfügigkeitsschwellenwertes (LAWA, 2017) überschritt. Auf Basis der präselektierten Analysen wurde dann das 84,1 Perzentil parameterbezogen für Einheiten berechnet, die mehr als neun Analysen zählten. Es wurde zusätzlich eine Unterscheidung in Bezug auf den Anteil der Analysen unterhalb der BG getroffen. Lagen mehr als 84,1 % der Werte, auf deren Grundlage ein HGW abgeleitet wurde, unterhalb der BG, wurde dies gesondert gekennzeichnet. Grund hierfür war, dass in diesen Fällen der abgeleitete HGW auf oder zwischen eine BG fällt und dieser Aspekt beispielsweise bei dem Vergleich von HGW von Gewicht ist.

3.3 Ermittlung der Schwellenwerte pro Grundwasserkörper

Zur Ausweisung der Schwellenwerte (SW) für die neun zentralen Parameter der Grundwasserverordnung (GrwV, ohne Nitrat) auf Ebene der Grundwasserkörper wurde zunächst gemäß folgender Formel ein Vergleichswert für den betrachteten Grundwasserkörper (VW_{GWK}) ermittelt:

$$VW_{GWK} = \sum_{k=BZE1}^{BZE21} \left(\frac{A_{k,GWK}}{A_{GWK}} * HGW_k \right) \quad (3)$$

Dabei steht k für die verschiedenen Einheiten und HGW_k für den Hintergrundwert (HGW) in der jeweiligen Einheit. Die Gesamtfläche des Grundwasserkörpers wird durch A_{GWK} repräsentiert und die Teilfläche der jeweiligen Einheit durch $A_{k,GWK}$.

Der parameterbezogene Hintergrundwert HGW_k wurde nach den im vorherigen Abschnitt beschriebenen Methoden bestimmt. Besitzt eine Einheit keinen Flächenanteil im betrachteten Grundwasserkörper, hat der entsprechende Summand den Betrag Null.

Dem Grundwasserkörper wurde, wenn der grundwasserkörperbezogene Vergleichswert VW_{GWK} niedriger als der in der GrwV festgelegte SW war, der SW der GrwV zugewiesen. War der grundwasserkörperbezogene Wert höher als der gesetzlich vorgegebene SW, wurde der SW für diesen Grundwasserkörper auf den zuvor berechneten grundwasserkörperbezogenen Wert heraufgesetzt.

Die dargestellte Methode zur Ableitung der SW hat den Vorteil, dass dieses Verfahren einfach und schnell zu realisieren war. Zudem ist hiermit eine Vergleichbarkeit mit den auf Bundesebene angewandten Methoden zur Bestimmung der Geringfügigkeitsschwellenwerte gegeben (LAWA, 2016).

Nachteilig erweist sich, dass der SW räumlich nur eingeschränkt differenziert ausfällt. Denn lokal kann es zur Unter- bzw. Überschätzung der dort anzutreffenden Hintergrundkonzentration durch den SW kommen. Denn bei der Berechnung des grundwasserkörperbezogenen Vergleichswertes sind die HGW auf Ebene der Bezugseinheiten relevant. Diese wiederum werden durch alle Messstellen bestimmt, die zur Normalpopulation in dieser Einheit zählen – dementsprechend grundwasserkörperübergreifend. Auf der anderen Seite können mithilfe der Methode des flächengewichteten Mittels auch Grundwasserkörper mit einer geringen Anzahl an Messstellen einen SW zugewiesen bekommen. In Gebieten innerhalb eines Grundwasserkörpers mit großen Differenzen zwischen HGW und SW wäre eine Ausweisung eines abweichenden SW für einen Teil des Grundwasserkörpers möglich (§ 5, Absatz 3 GrwV). Jedoch zeigt sich diese Anwendung in Hinblick auf Bewirtschaftungspläne für die Grundwasserkörper als wenig praktikabel. Daher wurde von dieser Möglichkeit kein Gebrauch gemacht.

4. Ergebnisse und Diskussion zu den ausgewiesenen Hintergrund- und Schwellenwerten

4.1 Ergebnisse und Diskussion zu den Hintergrund- und Schwellenwerten ausgewählter Parameter

Hintergrundwerte (HGW) wurden für die sieben Hauptinhalts- und acht Nebeninhaltsstoffe, sowie 25 Spurenstoffe und sieben physikochemische Parameter ausgewiesen. Bei der Ableitung von HGW nicht berücksichtigt wurden die Parameter Nitrat und adsorbierbare organische Halogen-Verbindungen (AOX), deren deutliche anthropogene Überprägung die Identifikation einer geogenen Komponente mit den angewandten Methoden nicht ermöglicht. Bei Nitrat wird als HGW und Schwellenwert (SW) einheitlich der Wert aus der Grundwasserverordnung (GrwV) von 50 mg/l verwendet. Generell wird der geogene Anteil bei Nitrat als sehr gering eingestuft, da es aufgrund der hohen Löslichkeit von Nitratsalzen nur unter spezifischen Bedingungen zur Gesteinsbildung kommen kann. Hauptsächlich die Abbauprodukte organischer Substanzen im Boden und Grundwasser bilden den natürlichen Anteil. SCHLEYER & KERNDORFF (1992) stufen den geogenen Hintergrund im Lockergesteinsbereich bei 30 mg/l, im Festgesteinsbereich bei bis zu 35 mg/l (Kalkstein) ein. AOX als Summenparameter für adsorbierbare organische Halogenverbindungen und damit für überwiegend nicht geogen im Grundwasser vorkommende Substanzen ist ebenfalls nicht geeignet für die Ausweisung geogener Anteile.

Für mehrere Parameter lagen 90 % der Werte unter der Bestimmungsgrenze (BG), sodass nur alternative statistische Verfahren eingesetzt werden konnten. Exemplarisch hierfür steht Cyanid, bei dem auch ein anthropogener Einfluss bei sich leicht bildenden und sehr stabilen Metall-Cyano-Komplexen nicht ausgeschlossen werden kann. Daher wurden für diesen Stoff keine HGW abgeleitet. Für andere Parameter ohne diese deutlich ausgeprägte, anthropogene Komponente im Grundwasser hingegen schon: Antimon, Chrom, Quecksilber, Silber, Thallium und Zinn. Aufgrund der hohen Parameteranzahl werden im Folgenden exemplarisch nur die Ergebnisse zu den Parametern Chlorid, Sulfat und Ammonium dargestellt.

4.1.1 Chlorid

Die Hintergrundwerte (HGW) von Chlorid sind für die verschiedenen Bezugseinheiten (BZE) als Balkendiagramm in der Abbil-

dung 4 aufgetragen. In den Lockergesteinen im Norden des Landes Sachsen-Anhalts dominieren niedrige Konzentrationsbereiche von Chlorid. Entsprechend liegen die Mittelwerte der Normalpopulationen unter 50 mg/l. Gegenüber dem "Nord- und miteldeutschen Lockergesteinsbereich" (GR1) sind die Chloridgehalte in den quartären und tertiären Schichten im Festgesteinsbereich generell erhöht. Sehr hohe Chloridkonzentrationen wurden stellenweise entlang der Bode und Wipper sowie im Saalemündungsgebiet auf der Höhe von Barby verzeichnet. Der Salzeintrag ist hier als bergbaubedingt einzustufen. Des Weiteren können die Salzgehalte auf eine Beeinflussung durch den Altbergbau zurückgeführt werden. Die Abschnitte des Saaleals südlich der Halleschen Störung gelten zudem als Entlastungsgebiete salinar betonter, meist zechsteinbürtiger Tiefenwässer (LAGB, 2007). Aufgrund der genannten anthropogen verursachten und sekundär geogenen Versalzungserscheinungen nimmt die Salzbelastung der Saale sichtbar bis zur Mündung in die Elbe zu.

Die Salzfracht der Elbe wiederum wird besonders durch den Zufluss der Saale geprägt. Bei beiden Flüssen ist von Austauschprozessen zwischen Oberflächen- und Grundwasser auszugehen, d. h. hier bestimmt der Chloridgehalt des Oberflächenwassers auch den des Grundwassers. Dass der Süden Sachsen-Anhalts salzbelastet ist, wird gleichfalls durch die im Süden lokalisierten verschiedenen Binnensalzstellen belegt. Das ausgeprägt Nord-Südkonzentrationsgefälle wird durch die aktuellen HGW widerspiegelt.

Bei den Festgesteinen sind die BZE "Zechstein" und "Altpaläozoikum" durch niedrige Hintergrundkonzentrationen auffällig. Formationen der Einheiten "Muschelkalk", "Buntsandstein", "Keuper, Jura, Kreide", sowie "Sauren Magmatite" zeigen Hintergrundgehalte zwischen 120 bis 160 mg/l auf. In zuletzt genannten hy-

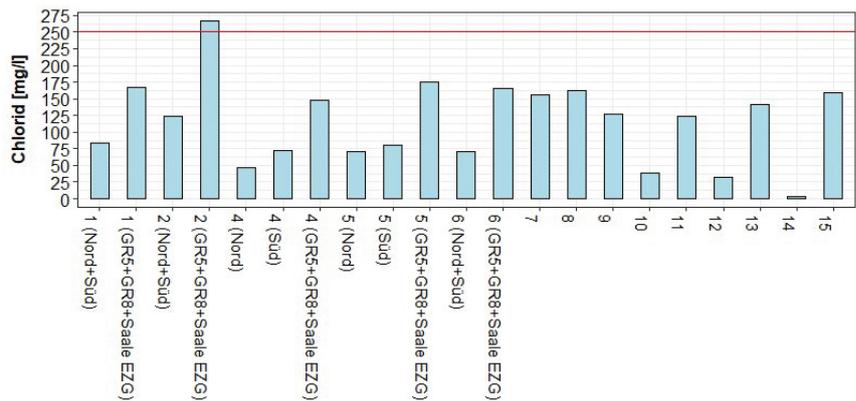


Abbildung 4

Einheitsbezogene Hintergrundwerte des Parameters Chlorid. Die rote horizontale Linie kennzeichnet die Höhe des Schwellenwertes laut Grundwasserverordnung von 250 mg/l. *Unit-based background levels of the parameter chloride. The red horizontal line marks the threshold of 250 mg/l defined by the Groundwater Ordinance.*

drogeologischen Einheiten treten Chloridkonzentrationen über 100 mg/l markant an den tektonischen Störungen zutage. Diese streichen hauptsächlich von Nordwest nach Südost und können das Aufsteigen hochmineralisierter Wässer begünstigen.

Erhöhte Chloridgehalte haben jedoch noch andere Ursachen. In der Einheit "Muschelkalk" mitbestimmend für einen HGW größer 150 mg/l sind beispielsweise die Schichtwässer des Staßfurtkarbonats. Teils handelt es sich dabei um saline Reliktlösungen (MÜHLENWEG et al., 1997). Höhere Konzentrationen im Buntsandstein sind wiederum zum Beispiel durch Proben vom ehemaligen Hüttenstandort Helbra beeinflusst. Das Mansfelder Land gilt als durch den Bergbau anthropogen stark überprägte Region. Für die "Sauren Magmatite" erscheint der ausgewiesene HGW relativ hoch. In der Regel gelten kristalline Gesteine als gering mineralisiert. Dies zeigen jedoch nur die Grundwasserproben der im Harz gelegenen Quellen. Die Intrusionsgesteine der Magdeburger-Flechtinger Hochlage und des Halleschen Vulkanitkomplexes hingegen weisen weitaus höhere Konzentrationen auf.

4.1.2 Sulfat

Die Hintergrundgehalte sind für den Parameter Sulfat in der Abbildung 5 als Balkendiagramm dargestellt. Der Schwellenwert (SW) nach der Grundwasserverordnung (GrwV, 2017) von 250 mg/l wird bei der Mehrheit der Einheiten überschritten.

Im Festgesteinsbereich zeichnen sich nur die Bezugseinheiten (BZE) "Altpaläozoikum", "Saure Magmatite" und "Basische Magmatite" durch niedrige Sulfatgehalte aus. Ähnlich wie bei Chlorid konzentrieren sich niedrige Konzentrationsbereiche auf die nördlich gelegenen quartären und tertiären Schichten. Sehr ausgeprägt sind die Unterschiede zwischen den Hintergrundwerten (HGW) der känozoischen Schichten im Lockergesteinsbereich im Südosten Sachsen-Anhalts bzw. im Festgesteinsbereich. In den känozoischen gefüllten Talbildungen und Randsenken im Bereich des Subherzyn sind durch sedimen-

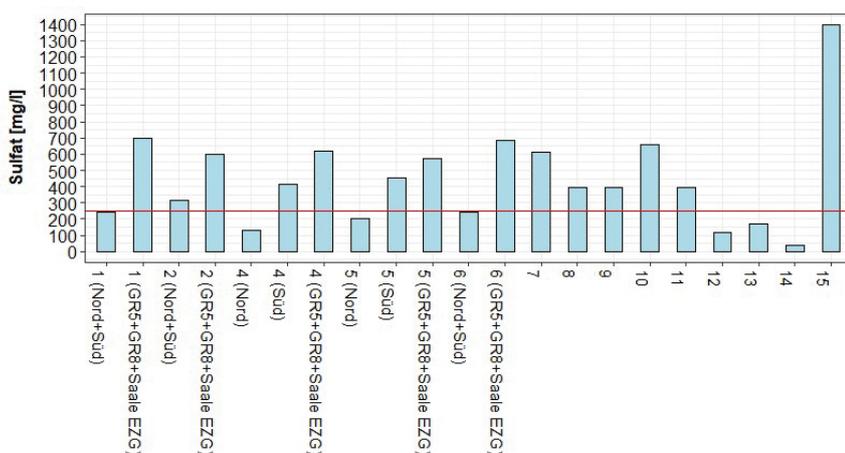


Abbildung 5

Einheitsbezogene Hintergrundwerte des Parameters Sulfat [mg/l]. Die rote horizontale Linie kennzeichnet die Höhe des Schwellenwertes laut Grundwasserverordnung von 250 mg/l. *Unit-based background levels of the parameter sulfate [mg/l]. The red horizontal line marks the threshold of 250 mg/l defined by the Groundwater Ordinance.*

täre Prozesse lokal auch mesozoische und teils sulfathaltige Materialien mit den Lockergesteinen vermischt. Zudem sind die Täler Entlastungsgebiete von Grundwässern, die in mesozoischen Festgesteinen gebildet wurden und dementsprechend auch durch diese hydrochemisch geprägt sind.

Den HGW für die quartären und tertiären Einheiten im Festgesteinsbereich, die zwischen 570 bis 700 mg/l schwanken, stehen in den nördlichen Lockergesteinseinheiten Werte von maximal 315 mg/l ("Flussauen mit Auenlehmedecke", GR1 Nord + Süd) gegenüber. Durch die geologischen Strukturen der Subherzynen Senke können diese hohen Konzentrationen in den Lockergesteinen erklärt werden.

Das Gebiet ist u. a. durch den Wechsel von silikatischen Schichten, Karbonaten und Salzgesteinen charakterisiert. Von einer Beeinflussung durch salinare Tiefenwässer in den Niederungsbecken ist auszugehen (LAGB, 2007). Weiterhin sind auch an der Saale auf der Höhe von Halle und im Saalemündungsgebiet sehr hohe Sulfatkonzentrationen anzutreffen. In diesen Bereichen ist jedoch auch aufgrund der nahegelegenen Industrie- und Bergbaugelände (Pyritverwitterung) von einem anthropogenen Einfluss auszugehen. Zumal die atmosphärische Deposition von Sulfat insbesondere an Kraftwerkstandorten im Süden des Landes im Vergleich zu den anderen Gebieten in Sachsen-Anhalt beträchtlich ist. Zudem ist für die Hauptterrassen des Ostens bis Südostens von Halle im Bereich der Halle-Störung oder auch im Raum Köthen, in denen die quartären Schichten direkt auf dem sulfatführenden Rupelton aufliegen, der Aufstieg hoch mineralisierte Wasser bekannt. Das Tertiär ist allgemein wegen der Braunkohle führenden Schichten durch eine hohe Hintergrundkonzentration von Sulfat gekennzeichnet.

Bei den Festgesteinen besitzt die BZE "Zechstein" mit einem HGW von 658 mg/l die höchste Hintergrundkonzentration. Dies ist aufgrund der gipshaltigen Schichten plausibel. Mit einem Hintergrundgehalt von 613 mg/l rangiert die BZE "Muschelkalk" an zweiter Stelle in Bezug auf die Konzentrationshöhe in den Festgesteinen. In den Hauptverbreitungsgebieten des Muschelkalles zeichnen sich die Grundwässer durch Calcium und Sulfat als Hauptkomponenten aus.

Für die BZE "Anthropogen verändert (Tagebau beeinflusst)" wurde ein HGW von annähernd 1.400 mg/l zugewiesen. Aufgrund der erheblichen anthropogenen Eingriffe kann man in diesen Gebieten die natürliche Hintergrundkonzentration nicht bestimmen.

4.1.3 Ammonium

Die Hintergrundgehalte sind für den Parameter Ammonium in Abbildung 6 als Balkendiagramm dargestellt.

Auffällig unter dem Aspekt eines Hintergrundgehaltes von mehr als 0,25 mg/l sind bei dem Parameter Ammonium folgende Bezugseinheiten (BZE): "Flussauen und Niederungen (GR1 Nord+Süd)", "Flussauen mit Auenlehmedecke", "Tertiär (GR5+GR8+Saale EZG)" und die "Anthropogen verändert (Tagebau beeinflusst)" (BZE 15). Dass Ammo-

niumpkonzentrationen unter anoxischen Bedingungen erhöht vorliegen können, wird bei der Gegenüberstellung der Hintergrundwerte (HGW) von bedeckten und unbedeckten Grundwasserleitern deutlich. Insbesondere die Niederungen sind durch diesen Konzentrationskontrast charakterisiert.

Es ist gleichfalls deutlich, dass die HGW in den quartären Einheiten im Lockergesteinsbereich höher als die Werte der vergleichbaren Einheiten im Festgesteinsbereich sind. Grundsätzlich wird in diesen Gebieten der anthropogen bedingte Eintrag von Ammonium in das Grundwasser gemessen an der Landnutzung relativ ähnlich sein. Die niedrigen Hintergrundgehalte in den Festgesteinen können jedoch mit dem Sauerstoffreichtum der hier vorkommenden Wässer erklärt werden.

Auf der anderen Seite sollte bei dieser Betrachtung auch berücksichtigt werden, dass organische Substanzen, deren Abbauprodukt Ammonium sein kann, auf natürliche Weise in verschiedenen geologischen Schichten angereichert worden. Somit liegt für das braunkohleführende Tertiär ein HGW von bis zu 0,52 mg/l vor. Der natürlich bedingte Nährstoffreichtum der Flussauen ist auch ein Erklärungsansatz für die hohen Ammoniumgehalte. Insbesondere Auenlehme sind durch die Anreicherung von schwach humosem Material charakterisiert. Die an fast 1 mg/l heranreichende Hintergrundkonzentration von Ammonium in der BZE 15 kann einerseits in den Tagebaugeländen auf das Vorhandensein der Braunkohle zurückgeführt werden. Andererseits liegen in diesen Gebieten auch oft Schwefel-Eisen-Verbindungen vor, so dass Nitrat unter reduzierenden Bedingungen zu Ammonium umgewandelt werden kann.

4.1.4 Schwellenwerte

Die auf Ebene der Bezugseinheiten (BZE) abgeleiteten Hintergrundwerte (HGW) können sich regional von den berechneten Vergleichswerten auf Ebene der Grundwasserkörper unterscheiden. Ursächlich hierfür ist die Methode der Bildung des flächengewichteten Mittels. Dementsprechend wird der auf Grundwasserkörperebene abgeleitete Vergleichswert durch die hydrochemische Ausprägung der BZE dominiert, die den größten Flächenanteil am Grundwasserkörper besitzen. Hierdurch

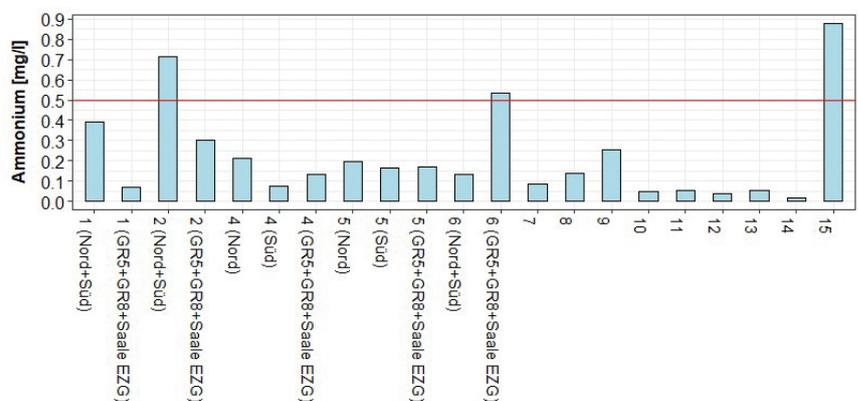


Abbildung 6

Einheitsbezogene Hintergrundwerte des Parameters Ammonium [mg/l]. Die rote horizontale Linie kennzeichnet die Höhe des Schwellenwertes laut Grundwasserverordnung von 0,5 mg/l. *Unit-based background levels of the parameter ammonium [mg/l]. The red horizontal line marks the threshold by of 0.5 mg/l defined by the Groundwater Ordinance.*

kann es zur lokalen Unterschätzung oder auch Überschätzung des eigentlichen Hintergrundgehaltes kommen.

Zudem ist noch auf einen weiteren Aspekt bei der Ermittlung der Schwellenwerte (SW) auf Ebene der Grundwasserkörper aufmerksam zu machen: Aufgrund der Bildung des flächengewichteten Mittels der HGW von den im Grundwasserkörper enthaltenen BZE wird der SW auch durch die hydrochemischen Analysen von Messstellen, die in anderen Grundwasserkörpern lokalisiert sind, bestimmt. Das heißt, ein direkter Abgleich von den Konzentrationen der im Grundwasserkörper enthaltenen Messstellen und den abgeleiteten SW sollte nur unter Berücksichtigung der eben beschriebenen Gesichtspunkte erfolgen.

Grundwasserkörper, deren Vergleichswerte oberhalb der gesetzlich vorgeschriebenen SW liegen, bekommen den Vergleichswert als SW zugewiesen. Im umgekehrten Fall entspricht der SW des Grundwasserkörpers dem gesetzlich vorgeschriebenen SW. Nur die Parameter Chlorid, Sulfat und Ammonium zeigen regional Abweichungen zu dem gesetzlichen SW auf.

Insbesondere bei dem Parameter Sulfat kommt es überregional zu Überschreitungen des SW von 250 mg/l. Insgesamt betroffen davon sind 56 % der Landesflächen. An zweiter Stelle rangiert Ammonium mit einem prozentualen Flächenanteil von 17 %, bei denen der SW überschritten ist. Bei Chlorid hingegen gibt es nur verhältnismäßig kleine Flächen mit einer Schwellenwertüberschreitung.

4.2 Vergleich mit anderen Verfahrensweisen

Die neu ausgewiesenen Hintergrundwerte (HGW) und Schwellenwerte (SW) können anhand der bereits im Jahr 2008 für das Land Sachsen-Anhalt ermittelten Werte gemessen werden (HYDOR, 2008) und auch mit den auf Bundesebene abgeleiteten Werten verglichen werden (WAGNER et al., 2014). Hierbei ist jedoch zu beachten, dass es nicht nur methodische Unterschiede gibt bzw. Unterschiede bei der Präselektion der Daten, sondern auch die gewählten Bezugseinheiten nur teilweise kongruent miteinander sind.

Festzuhalten ist, dass sich die Datengrundlage für das beschriebene Projekt gegenüber vergangenen Projekten erheblich verbessert hat. Dies betrifft nicht nur den Umfang des Analysedatensatzes, sondern auch die Qualität der Laboranalysen. Jedoch enthält der aktuelle Datensatz nur Analysen ab dem Jahr 2000 mit der Folge, dass dieser zwar einerseits aufgrund der hohen Messstellenanzahl und -dichte repräsentativer ist. Andererseits ist jedoch auch von einer stärkeren anthropogenen Überprägung auszugehen.

Methodisch wurden im Jahr 2008 die HGW durch Rangstatistik ermittelt. Zuvor wurden die Analysedaten nach bestimmten hydrogeologischen Kriterien vorselektiert und anhand von Schwellenwertüberschreitung verschiedenen Beeinflussungstypen (Typ Schwermetalle, Versauerung, Nährstoff, Versalzung, diffuse Beeinflussung) zugeordnet.

Die Schwellenwerte wurden auf Grundlage von hydrogeochemischem a-priori-Wissen durch verschiedene Perzentile definiert. Analysen mit Schwellenwertüberschreitung wurden aus dem Datensatz sukzessive entfernt. Letztlich wurden nur 33 % der Analysedaten als unbeeinflusst bewertet. Zur besseren Charak-

terisierung der unbeeinflussten Wässer wurden darüber hinaus Daten aus Berechnungsroutinen des Programmes KONTA⁰⁶ genutzt. Mithilfe dieses Programms können Beschaffenheitsmustern ermittelt werden (GABRIEL et al., 2007). Die Hintergrundgehalte selbst wurden auf Basis der als unbeeinflusst eingestuften Analysen über Spannweiten ausgewiesen, die das 15,9 und 84,1-Perzentil umfassten.

Bei der aktuellen Ausweisung von HGW wurden zumindest bei der Ermittlung mithilfe des Wahrscheinlichkeitsnetzes relativ wenige Messstellen bzw. einzelne Analysen aufgrund von hydrochemischen Auffälligkeiten ausgeschlossen, da Anomalien theoretisch mithilfe des Wahrscheinlichkeitsnetzes identifiziert und abgetrennt werden können. Durch dieses Vorgehen blieb die Datenbasis sehr umfangreich. Auf der anderen Seite führte dies jedoch dazu, dass Parameter mit einem hohen Anteil an anthropogen überprägten Analysen die Ableitung des HGW mithilfe des Wahrscheinlichkeitsnetzes erschwerten, da die anthropogen beeinflusste Population mit der Hintergrundpopulation vermischt war. Dies spiegelt sich dementsprechend durch gegenüber im Jahr 2008 häufig erhöhte Hintergrundgehalte wider.

Für die bundesweit seitens der Staatlichen Geologischen Dienste (SGD) und der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) ausgewiesenen HGW wurden hingegen Messstellen, bei denen eine anthropogene Beeinflussung bekannt war (z. B. Überwachungsmessstellen von Deponien und Altlasten) oder auffällige Analysen aus dem Umfeld von Bergbaugebieten aus dem für die Ermittlung der HGW relevanten Datensatz ausgeschlossen, obwohl auch hier Wahrscheinlichkeitsnetze Anwendung fanden. Zudem wurden in dem Lockergesteinsbereich aufgrund der bekannten geogenen Tiefenzonierung nur Analysen in den oberen 50 m berücksichtigt.

Bei der Arbeit mit dem Wahrscheinlichkeitsnetz wurde – sowohl auf Landes- wie auch auf Bundesebene – nur ein Wert pro Messstelle eingesetzt. Die aktuellen HGW wurden auf Basis von Mittelwerten bestimmt. Auf Bundesebene wurde zur Auswertung jeweils die neuste vollständige Analyse pro Messstelle herangezogen.

Die einheitsbezogene Ermittlung der HGW basierte im Jahr 2008 auf 13 hydrogeologischen Bezugseinheiten, die mit den 14 Bezugseinheiten (BZE) und deren Untergliederung nur teilweise kongruent waren. Für anthropogene Abgrabungs- und Aufschüttungsgebiete wurden 2008 keine HGW bestimmt. Entsprechend wurden diese gleichfalls nicht bei der Bestimmung der SW auf Ebene der Grundwasserkörper berücksichtigt.

Die HGW auf Bundesebene sind pro Hydrogeochemischer Einheit (HGC) ausgewiesen worden. Die Abgrenzung der HGC basiert auf der HÜK200 von Deutschland. Die verschiedenen Einheiten der HÜK200 wurden unter geologisch-genetischen und hydrogeologischen Gesichtspunkten zu den HGC aggregiert. Im Allgemeinen wird daher eine HGC als weitgehend homogen in Bezug auf deren hydrogeochemischen Charakteristika betrachtet. Aufgrund der lateralen und vertikalen Inhomogenitäten im Lockergesteinsbereich wurden die HGC anhand der hydrogeologischen Raumgliederung Deutschlands zusätzlich angepasst. Dennoch sind im Lockergesteinsbereich die vertikalen Lagerungsbedingungen durch die HGC nicht so differenziert wie durch die BZE abgebildet. Im Festgesteinsbereich hingegen wird durch die HGC

stärker der lithologische Charakter der grundwasserführenden Gesteinseinheit betont. Für Sachsen-Anhalt sind 54 verschiedene HGC von Relevanz. Beim Vergleich der Hintergrundgehalte ähnlicher Einheiten nach erfolgter Zuordnung von HGC zu BZE hat sich gezeigt, dass es zu größeren Differenzen kommen kann. Eine Ursache hierfür sind sicherlich auch die regionalen hydrochemischen Unterschiede in einer Einheit. Beispielsweise liegen im Allgemeinen die Hintergrundhalte für den Parameter Chlorid im Lockergesteinsbereich relativ nah beieinander. Ausnahme bildet jedoch die Einheit „Flussauen mit Auenlehmdecke“ (GR5 + GR8 + Saale EZG). Hier ist der ermittelte Hintergrundgehalt doppelt so hoch wie die Hintergrundkonzentrationen in vergleichbaren HGC. Bei dem Parameter Ammonium wiederum überschätzen die auf Bundesebene ausgewiesenen Hintergrundwerte die lokalen Hintergrundgehalte in fast allen Einheiten. Gleiches gilt für Ortho-Phosphat. Eine solche Gegenüberstellung macht deutlich, wie wichtig die Ausweisung von Hintergrundgehalten auf regionaler Ebene ist, um den lokalen hydrogeologischen Besonderheiten Rechnung zu tragen.

5. Schlussbetrachtung

Mithilfe von Wahrscheinlichkeitsnetzen und anderen statistischen Verfahren wurden die Hintergrundwerte für das Grundwasser in Sachsen-Anhalt für annähernd 50 Parameter bestimmt. Die Datenbasis umfasste nach erfolgter Aufbereitung etwa 17.060 Analysen von annähernd 3.160 Grundwassermessstellen. Da der Einsatz des Wahrscheinlichkeitsnetzes bei weniger als zehn gegebenen Analysewerten oberhalb der Bestimmungsgrenze an seine Grenzen stößt, fanden insbesondere bei den Spurenstoffen aufgrund einer unzureichenden Datenbasis alternative statistische Verfahren zur Ermittlung von Hintergrundwerten Anwendung. Hierfür war zudem einerseits eine stärkere Datenselektion notwendig, sodass die Datenbasis auf 1.200 Messstellen mit insgesamt 8.470 Analysen beschränkt wurde. Außerdem wurde jede Analyse und nicht ein pro Messstelle gemittelter Wert zur Berechnung des Hintergrundwertes eingespeist. Um für die betroffenen Parameter zukünftig repräsentative Hintergrundwerte ableiten zu können, ist eine Erweiterung der Datenbasis und die Verbesserung der laboranalytischen Verfahren erforderlich.

Bei der Arbeit mit dem Wahrscheinlichkeitsnetz erwies sich außerdem bei vom Menschen abstammender Überprägung die Abtrennung der anthropogenen Komponente als schwierig. Wie bereits angesprochen, ist jedoch davon auszugehen, dass ubiquitär vorhandene, anthropogene Einflüsse nicht mehr von natürlichen Einwirkungen abgetrennt werden können (KUNKEL et al., 2004).

Es hat sich gezeigt, dass die Auswahl der räumlichen Bezugsgrundlage von großer Bedeutung ist. Die Bezugseinheit ist so zu wählen, dass sie groß genug für einen ausreichenden Stichprobenumfang ist und zudem möglichst keine Mischpopulationen beinhaltet. Für die quartären und tertiären Bezugseinheiten wurde daher eine zusätzliche Untergliederung der hydrogeologischen Bezugseinheiten vorgenommen. Durch den Vergleich der aktuellen Hintergrundwerte für Sachsen-Anhalt mit den bundesweit durch die Staatlichen Geologischen Dienste ausgewiesenen Hintergrundwerte wird deutlich, dass eine regionalspezifische räumliche Untergliederung empfehlenswert ist. Für die Differenzen zwischen den Hintergrundwerten vergleichbarer Einheiten sind auch regionale hydrochemische Unterschiede ursächlich.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die Methoden für die Ableitung der Hintergrund- und Schwellenwerte auch auf andere Bundesländer übertragen werden können. Es ist jedoch notwendig, die Datenselektion und die räumliche Bezugsgrundlage individuell anzupassen.

6. Conclusions

Groundwater background levels in Saxony-Anhalt were determined for approximately 50 parameters by using probability plots and other statistical methods. The edited databases were comprised of around 17,060 analyses of about 3,160 groundwater observation wells. Since the use of probability plots requires data sets of at least ten values above the limit of determination, the background levels of trace substances with poor data bases were evaluated with alternative statistical methods. Therefore, stricter data selection was required, resulting in a smaller data set of 8,470 analyses of 1,200 observation wells. In addition, each analysis was used for determining the background level and not the averaged value per observation well. In order to derive representative background levels for these elements in the future, it is essential to extend the data base and improve the methods of the lab analysis.

The identification of the anthropogenic component did prove to be difficult in areas with high human impact in cases where probability plots were used. As stated before, it is to be assumed that the ubiquitous influence by humans is no longer separable from natural effects (cf. KUNKEL et al., 2004).

Moreover, it was demonstrated that the chosen hydrogeological unit is of vital importance. The unit size must be chosen accordingly to provide a sufficient sample size and avoid mixed populations. Therefore, the quaternary and tertiary reference units were subdivided. The comparison with background levels established by the German State Geological Services on a national level shows that the use of reference units fitted to the special regional features is recommended. This is due to the fact that hydrochemical disparities are also the reason for differences between comparable units on national and regional level.

In summary, it should be pointed out that the methods to determine background levels and threshold values can be applied in other federal states, but it is essential to adapt the data selection and spatial reference unit individually.

Anschriften der Verfasser

M.Sc. Sophie Borrmann
Dr. Stephan Hannappel
HYDOR Consult GmbH
Am Borsigturm 40
13507 Berlin
borrmann@hydor.de

Dipl. Ing. (FH) Eike Barthel
Landesbetrieb für Hochwasserschutz und Wasserwirtschaft
Sachsen-Anhalt
Willi-Brundert-Straße 14
06132 Halle (Saale)
Eike.Barthel@lhw.mlu.sachsen-anhalt.de

Literaturverzeichnis

- BGR & SGD (2016). Regionale Hydrogeologie von Deutschland: Die Grundwasserleiter: Verbreitung, Gestein, Lagerungsverhältnisse, Schutz und Bedeutung 163. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart.
- D'AGOSTINO, R. B., BELANGER, A. & D'AGOSTINO, R. B. JR. (1990). A suggestion for using powerful and informative tests of normality. *The American Statistician* 44 (4), 316–321.
- DVWK 128/1992 (1992). Regeln zur Wasserwirtschaft: Entnahme und Untersuchungsumfang von Grundwasserproben, 36. Hamburg, Berlin.
- GABRIEL, B., DOBERSTEIN, A. & KEIMLING, R. (2007). Handbuch KONTA06, Anwenderdokumentation, Fritz+Fröhlich Umweltinformationssysteme GmbH, im Auftrag Landesamt für Umwelt und Geologie des Freistaates Sachsen, Radebeul.
- GRUBE, A., WICHMANN, K., HAHN, J., & NACHTIGALL, K. H. (2000). Geogene Grundwasserversalzung in den Porengrundwasserleitern Norddeutschlands und ihre Bedeutung für die Wasserwirtschaft. DVGW-Technologiezentrum Wasser 9, 203.
- GRWL. Richtlinie 2006/118/EG (2006). Richtlinie 2006/118/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 12. Dezember 2006 zum Schutz des Grundwassers vor Verschmutzung und Verschlechterung.
- GrwV. Grundwasserverordnung vom 9. November 2010 (BGBl. I S.1513), die zuletzt durch Artikel 1 der Verordnung vom 4. Mai 2017 (BGBl. I S.1044) geändert worden ist (2017).
- HANNAPPEL, S. (1996). Die Beschaffenheit des Grundwassers in den hydrogeologischen Strukturen der neuen Bundesländer (Dissertation). Freie Universität Berlin, Berlin.
- HYDOR (2017). Geogene Hintergrundwerte für das Grundwasser in Sachsen-Anhalt und Ableitung von Schwellenwerten, im Auftrag Landesbetrieb für Hochwasserschutz und Wasserwirtschaft Sachsen-Anhalt, Halle (Saale).
- HYDOR (2008). Bestimmung von Hintergrundwerten für das Grundwasser Sachsen-Anhalt einschließlich Regionalisierung und Ableitung von Schwellenwerten, im Auftrag Landesbetrieb für Hochwasserschutz und Wasserwirtschaft Sachsen-Anhalt, Halle (Saale).
- JAHNKE, C. (1999). Ein neues Klassifikationssystem für Grundwässer und seine Anwendung in känozoischen Porengrundwasserleitern. *Grundwasser* 4 (2), 62–72.
- KUNKEL, R., VOIGT, H.-J., WENDLAND, F., & HANNAPPEL, S. (2004). Die natürliche, ubiquitär überprägte Grundwasserbeschaffenheit in Deutschland. *Schriften des Forschungszentrums Jülich* 47, 1–222.
- LAGB (2007). Sachsen-Anhalts verdeckte Ströme - Das Grundwasser im Spannungsfeld von Wasserwirtschaft, Industrie und Bergbau in Vergangenheit und Gegenwart, Mitteilungen zu Geologie und Bergwesen in Sachsen-Anhalt 13, 130.
- LAWA (1993). Grundwasser: Richtlinien für Beobachtung und Auswertung, Teil 3 - Grundwasserbeschaffenheit, 59, Länderarbeitsgemeinschaft Wasser, Essen.
- LAWA (2004). Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser, 33. Länderarbeitsgemeinschaft Wasser, Stuttgart.
- LAWA (2016): Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser, aktualisierte und überarbeitete Fassung 2016, herausgegeben von der Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA), Ministerium für Umwelt, Klima und Energiewirtschaft Baden-Württemberg, Stuttgart, Januar 2017.
- LAWA (2017). Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser, 28. Länderarbeitsgemeinschaft Wasser, Stuttgart.
- LEPELTIER, C. (1969). A simplified statistical treatment of geochemical data by graphical representation. *Economic Geology* 64, 538–550.
- LHW (2012). Bericht zur Beschaffenheit des Grundwassers in Sachsen-Anhalt 2001-2010, Magdeburg: Landesbetrieb für Hochwasserschutz und Wasserwirtschaft Sachsen-Anhalt.
- MERTEN, O. (2002). Versauerungserscheinungen in quartären Lockergesteins-Grundwasserleitern unter besonderer Berücksichtigung atmosphärischer Stoffeinträge (Dissertation). Brandenburgische Technische Universität Cottbus-Senftenberg, Cottbus.
- MÜHLENWEG, U., BRASSER, T., & HERTES, U. (1997). Charakterisierung von mineralisierten Tiefengrundwässern in nichtsalinaren Festgesteinen - Untersuchung von Wechselwirkungsreaktionen mit Abfällen bei der immissionsneutralen Ablagerung, 1–237, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig.
- RYAN, T. A., & JOINER, B. L. (1976). Normal probability plots and tests for normality (Technical Report). Statistics Department, The Pennsylvania State University.
- SCHENK, V. (2003). Natürliche Grundwasserbeschaffenheit. Definition und Abgrenzung gegen verwandte Begriffe. *Grundwasser* 8 (2), 122–124.
- SCHLEYER, R., & KERNDORFF, H. (1992). Die Grundwasserqualität westdeutscher Trinkwasserressourcen. Verlag VCH, Weinheim.
- TLUG (1997). Grundwasser in Thüringen - Bericht zu Menge und Beschaffenheit. Thüringer Ministerium für Landwirtschaft, Naturschutz und Umwelt, Erfurt.
- UBA (2000). Entwicklung von Erfassungs- und Auswerteverfahren für Grundwasserzustandsdaten zur Erfüllung internationaler Berichtspflichten des Bundes gegenüber der EU. Bericht der FUGRO Consult GmbH an das Umweltbundesamt, Berlin.
- WAGNER, B., BEER, A., BITZER, F., BROSE, D., BRÜCKNER, L., BUDZIAK, D., ... WOLTER, R. (2014). Erläuterung zum Web Map Service (WMS) "Hintergrundwerte im Grundwasser", 1–24.
- WAGNER, B., TÖPFNER, C., LISCHIED, G., SCHOLZ, M., KLINGER, R. & KLAAS, P. (2003). Hydrogeochemische Hintergrundwerte der Grundwässer Bayerns. *GLA Fachbericht* 21, 250. Bayerisches Geologisches Landesamt, München.