1. Datenerhebung

1.1. Probenahme (Angaben aus Röllig et al., 1990)

Die Entnahme der Bachsedimentproben erfolgte als Durchschnittsprobe aus dem Bach- bzw. Flussbett, bei stehenden Gewässern aus dem ufernahen Gewässerboden. Das gewonnene Sediment wurde in einem relativ zeitaufwändigen Prozess am Probepunkt unter Verwendung des Wassers aus dem beprobten Gewässer auf eine Korngröße von ≤ 0,2 mm nass gesiebt und in Polyethylenflaschen mit 500 cm^3 Fassungsvermögen abgefüllt. Das überstehende Wasser wurde nach mindestens 24 h nach der Probenahme dekantiert.

Die Wasserproben wurden vom jeweiligen Bachsediment getrennt als Schöpfprobe gewonnen und in 100 ml Polyethylenflaschen abgefüllt.

1.2. Probenaufbereitung (Angaben aus Röllig et al., 1990)

Die Aufbereitung der gewonnenen Bachsedimente begann zunächst mit einer Trocknung der Proben im Trockenschrank bei 80 °C. Nach einer Teilung der Probe mittels Riffelteiler wurde die eine Hälfte des Probenmaterials mit einer Scheibenschwingmühle, die andere Hälfte des Probenmaterials mit einer Planetenkugelmühle analysenfein (< 0,063 mm) gemahlen. Nach erneuter Teilung der jeweiligen Teilproben mittels Riffelteiler wurden die Proben analysiert. Die Analytik erfolgte dabei überwiegend aus der mit der Planetenkugelmühle gemahlenen Teilprobe. Nur für die Quecksilber- und Fluoranalytik wurde die mit der mit der Scheibenschwingmühle gemahlenen Teilprobe verwendet.

1.3. Analytik (Angaben aus Röllig et al., 1990)

Die Multielementanalyse der Bachsedimente erfolgte im Zentralen Geologischen Institut der DDR (ZGI) mittels Emissionsspektralanalyse (ESA) und Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA). Für die ESA wurde ein Plangitterspektrograph PGS-2 (VEB Carl Zeiss Jena, Auswertung: fotografische Registrierung mit anschließender halbautomatischer Vermessung der Spektrallinien am Mikrodensitometer MD 100 und Registrierung auf Lochstreifen) verwendet. Die RFA wurde mit einem Röntgenfluoreszenzanalysator VRA-20 mit Rh- und Au-Anode (VEB Präzisionsmechanik Freiberg, Auswertung: vollautomatische Erfassung der Messwerte mit anschließender Konzentrationsberechnung im online Verfahren und Ausgabe der Ergebnisse als Druckerprotokoll und auf Lochstreifen) durchgeführt. Abweichend davon fand für die Bestimmung der Wolfram- und Zinkgehalte ein Röntgenfluoreszenzanalysator ARF-6 Verwendung. Die Bestimmung von Fluor erfolgte durch Pyrohydrolyse mit komplexometrischer Endbestimmung unter Einsatz von Toron, die Bestimmung von Quecksilber mittels flammenloser AAS nach vorhergehender Amalgamierung an einer Goldfalle. Zur Qualitätssicherung der Multielementbestimmungen wurden attestierte Gesteinsstandards (Tonschiefer TB ST RGW 2301) verwendet.

Die pH-Wertbestimmung in den Wasserproben erfolgte potentiometrisch, die der spezifischen elektrischen Leitfähigkeit (in µS/cm) konduktometrisch. Die Fluoridgehalte in den Wasserproben wurden potentiometrisch mit Hilfe einer fluoridionensensitiven Elektrode analysiert.

Die für die einzelnen Elemente eingesetzten Analysemethoden und ihre Bestimmungsgrenzen sind in Tabelle 1 zusammengefasst. Werte außerhalb dieser Bestimmungsgrenzen sind als reine Rechengrößen zu betrachten. Siehe hierzu auch die Anmerkungen im Kapitel 2.3.

Tabelle 1 Bestimmungsmethoden und –grenzen

Element/ Parameter	Methode	Maßeinheiten	Bestimmungsgrenzen untere	obere
pH	potentiometrisch			
Leitf*	konduktometrisch	µS/cm		
F_{aqua}	potentiometrisch	mg/l	0,04	1,0
Ag	ESA[1]	mg/kg	1	1000
As	RFA[2]	mg/kg	15	1000
B	ESA[1]	mg/kg	20	1000
Ba	RFA[2, 3]	mg/kg	100	2000 (5000)
Be	ESA[1]	mg/kg	1	100
Bi	ESA[1]	mg/kg	10	1000
Co	ESA[1]	mg/kg	5	500
Cr	ESA[1]	mg/kg	5	500
Cu	ESA[1]	mg/kg	2	2000
Fe	RFA[2]	mg/kg	100	100000
F_{Sed}	Pyrolyse	mg/kg	200	40000
Ga	ESA1	mg/kg	5	500
Hg	AAS	ng/kg	5	5000
La	ESA[1]	mg/kg	30	1000
Li	ESA[1]	mg/kg	30	5000
Mn	RFA[2, 4]	mg/kg	80 (100)	3000 (10000)
Mo	ESA[1]	mg/kg	2	1000
Nb	RFA[2]	mg/kg	5	300
Ni	ESA[1]	mg/kg	5	1000
Pb	ESA[1]	mg/kg	5	500
Rb	RFA[2]	mg/kg	25	1000
Sc	ESA[1]	mg/kg	10	500
Sn	ESA[1]	mg/kg	5	2000
Sr	RFA[2]	mg/kg	25	1000
Ti	RFA[2, 3]	mg/kg	100	10000
V	ESA[1]	mg/kg	6	1000
W	RFA[5]	mg/kg	10	1000
Y	RFA[2]	mg/kg	5	300
Yb	ESA[1]	mg/kg	2	100
Zn	RFA[5]	mg/kg	10	2000
Zr	RFA[2, 4]	mg/kg	30 (100)	1000 (5000)

* spezifische elektrische Leitfähigkeit, [1] ESA: Emissionsspektralanalyse mit Plangitterspektrograph PGS-2 (VEB Carl Zeiss Jena), [2] RFA: Röntgenfluoreszenzanalyse mit VRA 20 (VEB Präzisionsmechanik Freiberg), [3] bis 1990 ESA[1] (Bestimmungsgrenzen in Klammern), [4] bis 1980 ARF 6 (Bestimmungsgrenzen in Klammern), [5] RFA: Röntgenfluoreszenzanalytik (ARF 6)

2. Aufbereitung der Daten für die digitale Bereitstellung 2023

2.1. Korrekturen im Merkmal Probenart

Die Verschlüsselung des Merkmals Probenart war teilweise widersprüchlich zu den vorhandenen Analysendaten. In 35 Fällen waren Proben als „Wasserprobe“ verschlüsselt, jedoch sind auch Analysendaten zum Bachsediment vorhanden. In 18 Fällen war die Probenart „Trockenprobe“ codiert, gleichzeitig existieren aber auch Analysendaten zum Wasser. In diesen Fällen wurde die Probenart in -9 (fehlerhafte Angabe) umcodiert.

Darüber hinaus gibt es in 69 Fällen zwei oder mehr Proben mit identischen Koordinaten (insgesamt 355 Proben). In 7 Fällen handelt es sich dabei um Niederschlagsproben (Probenart = 7, insgesamt 16 Proben). In allen anderen Fällen liegt die Vermutung nahe, dass es sich bei den jeweils zweiten (sowie auch den evtl. vorhandenen weiteren Proben) um Doppelproben handelt. Aber nur in einem Fall ist eine Codierung als Doppelprobe erfolgt. Da nicht entschieden werden kann, ob es sich um Doppelproben handelt und wenn ja, welche der Proben als Doppelprobe entnommen wurde, wurde die ursprüngliche Codierung beibehalten.

2.2. Koordinatenkorrektur und Koordinatentransformation

In einigen wenigen Fällen waren die Koordinaten in den bis 1990 abgelegten Originaldaten fehlerhaft, woraus eine Lage außerhalb des Untersuchungsgebietes resultierte. In der überwiegenden Anzahl der Fälle konnten die Koordinaten anhand noch vorhandener Aufzeichnungen (Probenahmeprotokolle, Probenahmekarten) korrigiert werden. Bei einer geringen Anzahl von Proben (< 10) war dies nicht möglich. Die entsprechenden Datensätze wurden aus der Datenbank entfernt.

Die Speicherung der Koordinaten erfolgte in den bis 1990 abgelegten Originaldaten je nach Lage in den Georeferenzierungen EPSG:31467, EPSG:31468 und EPSG:31469 (Gauß-Krüger-Abbildung, Ellipsoid Bessel 1841, Potsdam-Datum (Zentralpunkt Rauenberg), 3°-Meridianstreifen, Mittelmeridiane 9°, 12° bzw. 15°). Diese Koordinaten wurden unverändert in die Datei für die digitale Bereitstellung der Daten übernommen (Spalten RW & HW). Für die Kartendarstellungen erfolgte eine Transformation der Koordinaten in das System EPSG:31468 (Gauß-Krüger-Abbildung, Ellipsoid Bessel 1841, Potsdam-Datum (Zentralpunkt Rauenberg) (DHDN), Mittelmeridian 12°) sowie das modernere EPSG:35832 (UTM, Ellipsoid/Datum ETRS 1989, Zone 32N (Mittelmeridian 9°)). In den im Geoportal der BGR bereitgestellten geochemischen Daten sind die Koordinaten in beiden Georeferenzierungen enthalten (Spalten RW_GK4 & HW_GK4 bzw. RW_UTM_32N & HW_UTM_32N).

2.3. Korrekturen in den Identmerkmalen

Die Identmerkmale (Probenart, Gewässerordnung, Anthropogene Beeinflussung, Bodennutzung, Geochemie, Geologie, Stratigraphie, Petrologie und Formation) wurden auf Plausibilität der Angaben geprüft und gegebenenfalls korrigiert. So wurden einige Inkonsistenzen in der Codierung der Merkmale Stratigraphie, Petrologie und Formation beseitigt. Im Merkmal Stratigraphie gab es zum Beispiel für „Präkambrium“ ohne weitere Spezifizierung die Codenummern 100 und 199. Das resultierte sicherlich aus der Vereinigung der aus der Untersuchung der einzelnen Grundgebirgseinheiten hervorgegangenen Teildateien ohne vorherigen Abgleich der Codenummern. Derartige Inkonsistenzen wurden korrigiert. Im beschriebenen Fall wird in der digital bereitgestellten Datei beispielsweise für „Präkambrium“ ohne weitere Spezifizierung generell die Codenummer 100 verwendet, die Datensätze mit Codenummer 199 wurden entsprechend umcodiert.

Teilweise wurden in den Originaldaten auch Codenummern verwendet, die in den vorliegenden Codetabellen nicht vorhanden sind. So gab es im Merkmal Petrologie eine größere Anzahl von Proben mit der nicht erläuterten Codenummer „0000“. In solchen Fällen wurde die Codierung zu „-1“ (keine Angaben) geändert.

2.4. Korrekturen in den Analysendaten

Wie die Koordinaten und Identmerkmale wurden auch die Analysendaten für die digitale Bereitstellung der Daten im Geoportal der BGR auf Plausibilität geprüft.

Ein häufig auftretender Fehler war die Angabe von „0“ als analysierten Wert. In einigen Fällen wurde dies zur Codierung fehlender Analysenwerte verwendet, in anderen Fällen jedoch zur Codierung von Werten unterhalb der Bestimmungsgrenze. Möglicherweise ist ein Teil der als „0“ codierten Werte auch auf eine fehlerhafte Verwendung von Zahlenformaten zurückzuführen, wodurch Kommastellen verloren gegangen sind. In einer Vielzahl von Fällen konnte der Grund für die Codierung als „0“ nachvollzogen werden, z.B. wenn alle Gehalte innerhalb einer Grundgebirgseinheit als „0“ codiert wurden. Diese wurden dann in „-9999999“ (Fehlstelle) umcodiert. Andererseits traten auch als „0“ codierte Werte in Bereichen auch ansonsten sehr niedriger Gehalte auf. In diesem Fall wurden die betreffenden Werte als -1 * Bestimmungsgrenze verschlüsselt (kleiner Bestimmungsgrenze). Um eine Verfälschung der Daten zu verhindern, erfolgte im Zweifelsfall stets eine Umcodierung in „-9999999“ (Fehlstelle).

Als weiteres Problem erwies sich die Angabe von Analysenergebnissen unterhalb der in Röllig et al. (1990) angegebenen Bestimmungsgrenzen. Laut Röllig et al. (1990) sind diese als reine Rechengrößen zu betrachten. Untersuchungen der Verteilung dieser Werte in der Fläche ergaben aber teilweise durchaus plausibel flächenhafte Verteilungen mit deutlichem Bezug zur Geologie des Untersuchungsgebietes oder die Gehalte unterhalb der Bestimmungsgrenze traten in Bereichen auf, die ohnehin niedrige Gehalte des entsprechenden Elements aufweisen. Um ein generelles Verwerfen dieser Werte und damit den Verlust eventuell in ihnen enthaltener Informationen zu vermeiden, wurde eine Plausibilitätsprüfung der Verteilung im unteren Gehaltsbereich mittels CP-Plots durchgeführt. Während bei den meisten Elementen die Verteilung der Werte unterhalb der Bestimmungsgrenze deutliche Brüche aufweist, konnte für die Elemente As, Bi, Co, Sc, Sn und W eine durchaus plausible Verteilung der Werte in einem gewissen Bereich unterhalb der Bestimmungsgrenze beobachten werden. In diesen Fällen wurde die Bestimmungsgrenze abweichend von der in Röllig et al. (1990) angegebenen auf den kleinsten plausiblen Wert abgesenkt. Anschließend wurde untersucht, ob die flächenhafte Verteilung der Werte unter Verwendung der abgesenkten Bestimmungsgrenze plausibel ist. Dabei traten teilweise analytische Unterschiede zwischen den Teildateien der untersuchten Grundgebirgseinheiten zu Tage, wodurch die Bestimmungsgrenze wieder auf einen für das Teilgebiet mit der geringsten Analysenqualität plausiblen Wert angehoben werden musste (z.B. bei Bi). Eine Übersicht über die Maßeinheiten, die Bestimmungsgrenzen aus Röllig et al. (1990) sowie die für die Datenaufbereitung verwendete Bestimmungsgrenzen ist in den über das Geoportal der BGR bereitgestellten Dateien enthalten. Die verwendeten, von Röllig et al (1990) (Tabelle 1) abweichend Bestimmungsgrenzen sind in Tabelle 2 zusammengefasst.

Tabelle 2 Von Röllig et al. (1990) abweichend verwendete Bestimmungsgrenzen (mg/kg)

Element	Bestimmungsgrenze lt. Röllig et al. (1990)	verwendete Bestimmungsgrenze
As	15	2
Bi	10	5
Co	5	1
Sc	10	5
Sn	5	3
W	10	2

Alle Werte unter den festgelegten Bestimmungsgrenzen wurden auf -1 * Bestimmungsgrenze gesetzt.

Als problematisch erwies sich ebenfalls die teils zwischen den Teildateien der einzelnen Grundgebirgseinheiten, teils auch willkürlich variierende Rundung der Analysenwerte. Das führte in den CP-Plots zu einer Häufung auf bestimmten Werten (z.B. ganzzahligen Werten oder x,0 und x,5) und einer deutlich verringerten Verteilungsdichte zwischen diesen Werten. Zwecks Beseitigung dieser Unstetigkeiten in der Verteilung wurde dann der komplette Datensatz für diese Elemente entsprechend einheitlich gerundet.

Zum Zwecke der Nachvollziehbarkeit der beschriebenen Anpassungen der Daten enthält der Download der Geochemischen Daten im Geoportal der BGR die beschriebenen CP-Plots, wobei die jeweiligen Plots sowohl die Verteilung vor als auch nach der Datenanpassung wiedergeben. Gleichzeitig sind Tabellen mit statistischen Angaben zur Veranschaulichung der Datenqualität (Probenanzahl, Anzahl der bestimmten Werte, Anzahl der Werte unter der Bestimmungsgrenze) sowie der wichtigsten univariaten statistischen Maßzahlen enthalten. Für die Berechnung der statistischen Maßzahlen wurden die Werte unterhalb der Bestimmungsgrenze auf den Wert der halben Bestimmungsgrenze gesetzt. Statistische Maßzahlen, die unter der Bestimmungsgrenze liegen, werden als < Bestimmungsgrenze angegeben.

Literatur

Röllig, G., Berger, W., Birke, M., Enderlein, F., Grosche, G., Kaberdin, B., Kampe, A., Krull, P., Kruse, B., Kunz, I., Rauch, U., Rentzsch, J., Schwandtke, E., Sehm, K., Söllig, A., Thomas, U. & Wünsch, K. (1990): Vergleichende Bewertung der Rohstofführung in den Grundgebirgseinheiten im Südteil der DDR. Gesellschaft für Umwelt- und Wirtschaftsgeologie GmbH: S. 807; Berlin (Archiv der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover, Archivnummer 1004927).