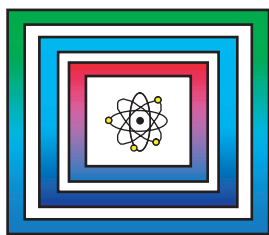


Projekt Gorleben

9GE332300000

Untersuchungen von Kohlenwasserstoffen im Erkundungsbergwerk Gorleben



Zwischenbericht

Hannover, Januar 2012

BUNDESANSTALT FÜR GEOWISSENSCHAFTEN UND ROHSTOFFE
HANNOVER

Projekt Gorleben

Untersuchungen von Kohlenwasserstoffen im
Erkundungsbergwerk Gorleben

Zwischenbericht 2011

Autoren:	Hammer, Jörg, Dr., Pusch, Maximilian, Häger, Andreas, Dr., Ostertag-Henning, Christian, Dr., Schlömer, Stefan, Dr., Mingerzahn, Gerhard, Scheeder, Georg, Shao, Hua, Dr., Paul, Benjamin, Schulze, Otto, Dr., Zaretzki, Britta, Hesser, Jürgen, Dr.
Auftraggeber:	Bundesamt für Strahlenschutz (BfS)
Auftragsnummer:	9GE332300000
Geschäftszeichen:	B3.4/B50123-10/2012-0002/001
Datum:	31.01.2012
TK-Nummer:	2934 Lenzen

Inhaltsverzeichnis	Seite
Verkürzte Zusammenfassung	6
1 Einleitung	7
2 Ziele der Untersuchungen und Untersuchungsprogramm	8
2.1 Ziele der Untersuchungen	8
2.2 Untersuchungsprogramm	9
2.2.1 Untersuchungen zu Vorkommen und Zusammensetzungen der flüs- sigen und gasförmigen Kohlenwasserstoffe	9
2.2.2 Mineralogisch-geochemische sowie gefügekundliche und mikrostruk- turelle Untersuchungen von Salzgesteinen	11
2.2.3 Analyse des Einflusses der Kohlenwasserstoffe auf die geomecha- nischen Gesteinseigenschaften	11
2.2.4 In-situ-Messungen in den Erkundungs- und Probennahmebohrungen	12
2.2.5 Geophysikalische Untersuchungen	12
2.2.6 Experimente zur Abschätzung des Verhaltens der Kohlenwasserstof- fe im Salzgestein bei Aufheizung	12
3 Grundlagen und bisheriger Kenntnisstand	13
3.1 Nomenklatur von Öl- und Gasphasen sowie ausgewählter weiterer Bestandteile	13
3.2 Methodisch bedingte Unterscheidung von Gasen in Salzgesteinen	13
3.3 Nomenklatur, Strukturbeispiele und ausgewählte Eigenschaften von Kohlenwasserstoffen	14
3.4 Fluoreszenz von Kohlenwasserstoffen	17
3.5 Zusammenfassung des Kenntnisstandes zur Kohlenwasserstoff- Führung des Salzstocks Gorleben bis März 2011	18
4 Untersuchungsmethoden für die Bestimmung der Gehalte und der Zusammensetzung der Kohlenwasserstoffe	23
4.1 Probennahme und Probenvorbereitung	23
4.1.1 Vorgehensweise der BGR bis Oktober 2000	23
4.1.2 Probennahmen ab März 2011	24
4.2 Bestimmung der Zusammensetzung und Gehalte der Kohlenwasser- stoffe	30
4.2.1 Analyse der flüchtigen Kohlenwasserstoffe Methan bis Hexan sowie ausgewählter Permanentgase	30
4.2.2 Kohlenstoff-Isotopenmessungen an Methan, Ethan und Propan	36

4.2.3	Analyse der niedrig siedenden Kohlenwasserstoffe von Heptan bis Decan	36
4.2.4	Analyse der höher siedenden Kohlenwasserstoffe zwischen Decan (C ₁₀) und Tetracontan (C ₄₀)	38
4.2.5	Ableitung der Gesamtgehalte an Kohlenwasserstoffen im Gestein	39
5	Makroskopisch sichtbare Verteilung der Kohlenwasserstoffe in den Bohrkernen	40
5.1	Darstellung der Untersuchungsbefunde	40
5.2	Schlussfolgerung aus der Kohlenwasserstoff-Verteilung in den Bohrkernen und Neuauffahrungen	47
6	Gefügekundlich-mikrostrukturelle Untersuchungen zur Klärung der Verteilung der Kohlenwasserstoffe	49
6.1	Eingesetzte Untersuchungsverfahren	49
6.1.1	Dünn- und Dickschliffe	49
6.1.2	Fluoreszenzmikroskopie	49
6.1.3	Analyse des Subkorngefüges und Paläopiezometrie	50
6.1.4	Computertomographie	51
6.1.5	Raman-Spektroskopie	52
6.2	Ergebnisse der gefügekundlichen und mikrostrukturellen Untersuchungen	53
6.2.1	Petrographische Beschreibung der Proben und Verteilung der Kohlenwasserstoffe im Dünnschliff	53
6.2.2	Fluoreszenzmikroskopische Untersuchungen	67
6.2.3	Schlussfolgerungen aus der Analyse der Kohlenwasserstoff-Verteilung im Dünnschliff	71
6.2.4	Ergebnisse der mikrostrukturellen Untersuchungen von Dickschliffen (Hellfeld)	72
6.2.5	Ergebnisse der Subkorn-Analysen	78
6.2.6	Erste Ergebnisse der computertomographischen Untersuchungen	82
7	Gehalte, Zusammensetzung und Genese der Kohlenwasserstoffe im Staßfurt-Hauptsalz	84
7.1	Überblick über die im Jahr 2011 untersuchten Gesteinsproben aus dem Querschlag 1 West	84
7.2	Gehalte der Kohlenwasserstoffe C ₁ -C ₄₀ im Hauptsalz im Querschlag 1 West	88
7.3	Räumliche Verteilung der Kohlenwasserstoff-Gehalte C ₁ -C ₄₀ im Bereich des Querschlages 1 West	92

7.4	Genetische, isotopengeochemische Charakterisierung der Kohlenwasserstoffe	94
8	Packerbohrungen zur In-situ-Quantifizierung der Kohlenwasserstoff-Vorkommen	101
8.1	Zielsetzung der Druckaufbaumessungen in den Kohlenwasserstoff-Packerbohrungen	101
8.2	Festlegung der Testlokationen im Querschlag 1 West und Instrumentierung der Bohrungen	102
8.3	Testausrüstung und Dokumentation der Messdaten	105
8.4	Auswerteverfahren und Gasvolumenbestimmung	107
8.5	Ergebnisse und ihre Bewertung	116
9	Permeabilitätsmessungen in den Kohlenwasserstoff-Kurzbohrungen	120
10	Laboruntersuchungen zu den thermo-mechanischen Eigenschaften von Steinsalz mit Kohlenwasserstoff-Imprägnationen	124
10.1	Einleitung	124
10.2	Wirkung von Kohlenwasserstoff-Einschlüssen auf Spannung und Verformung	125
10.3	Dilatanzgrenze	127
10.4	Dilatanz-Wirkung: Entwicklung von Duktilität, Auflockerung und Schädigung	131
10.5	Zum Einfluss von Kohlenwasserstoff-Einschlüssen auf den Spannungszustand	132
10.6	Temperatur-Einwirkung	134
10.7	Transport-Eigenschaften	135
10.8	Bisherige Laboruntersuchungen und deren Ergebnisse	136
10.8.1	Dilatanz-Wirkung der Kohlenwasserstoffe auf das Kriechverhalten von z2-Hauptsalz	136
10.8.2	Untersuchungen zum thermisch induzierten Ausdehnungsverhalten	154
10.9	Zusammenfassung	161
11	Experimente zur Analyse des Verhaltens der Kohlenwasserstoffe im Salzgestein bei Aufheizung	162
11.1	Problemstellung	162
11.2	Experimentelle Ansätze für die Aufheizexperimente	164
11.2.1	Aufheizversuche an Hauptsalz-Prüfkörpern	164
11.2.2	Aufheiz-Experimente an Modellsystemen in Goldkapseln	166
11.2.3	Aufheizversuche an Dickschliffen	167
11.3	Erste Ergebnisse der Aufheizversuche unter Normaldruck	167
12	Zusammenfassung	170

Literaturverzeichnis	173
Abkürzungsverzeichnis	181
Tabellenverzeichnis	182
Abbildungsverzeichnis	184
Anhangsverzeichnis	197

Verkürzte Zusammenfassung

Autoren:	Hammer, Jörg, Dr., Pusch, Maximilian, Häger, Andreas, Dr., Ostertag-Henning, Christian, Dr., Schlömer, Stefan, Dr., Mingerzahn, Gerhard, Scheeder, Georg, Shao, Hua, Dr., Paul, Benjamin, Schulze, Otto, Dr., Zaretzki, Britta, Hesser, Jürgen, Dr.
Titel:	Untersuchungen von Kohlenwasserstoffen im Erkundungsbergwerk Gorleben - Zwischenbericht 2011
Stichwörter:	Aufheizung, Endlagerung, Fluide, Gase, geologische Erkundung, Gorleben, Haupt- salz, Kohlenwasserstoffe, untertägige Er- kundung

In diesem Zwischenbericht werden die im Zeitraum März 2011 bis Mitte Dezember 2011 erzielten Untersuchungsergebnisse zur Kohlenwasserstoff-Führung des Staßfurt-Hauptsalzes im Bereich des Querschlages 1 West im Salzstock Gorleben dargestellt. Neben der Ermittlung der Gehalte und der räumlichen Verteilung der Kohlenwasserstoffe (KW) bilden gefügekundlich-mikrostrukturelle und organogeochemische Analysen sowie geomechanische Laborexperimente, Aufheizversuche und geophysikalisch-geotechnische In-situ-Messungen die Schwerpunkte der Arbeiten. Dazu wird ein breites Spektrum von Untersuchungsmethoden eingesetzt, wie z. B. Analysen von Dünn- und Dickschliffen, Fluoreszenzmikroskopie, Computertomographie, EBSD-Messungen, Paläopiezometrie und Rasterelektronenmikroskop.

Die KW sind überwiegend an die Korngrenzen von Steinsalz- und Anhydritkristallen in rekrystallisierten Hauptsalzbereichen gebunden. Die KW-Gehalte variieren zwischen den Bohrungen sowie innerhalb der Bohrungen stark und reichen von 0,02 bis 443 mg/kg Salzgestein. Die mikrostrukturellen Untersuchungen sowie die molekulare Zusammensetzung und die $\delta^{13}\text{C}$ -Werte der KW bestätigen die in früheren Arbeiten der BGR getroffenen Aussagen zur Herkunft der KW. Erste, neu ermittelte Daten zum thermomechanischen Verhalten KW-führender Gorleben-Hauptsalzproben werden dargestellt. Die mitgeteilten Untersuchungsergebnisse repräsentieren einen Zwischenstand der Arbeiten, die bis Ende 2013 fortgeführt werden.

1 Einleitung

Kohlenwasserstoffe (KW) sind in den meisten sedimentären und metamorphen Gesteinen der Erdkruste enthalten und gehören auch zum natürlichen Stoffbestand von Salzformationen. Sie bilden sich aus abgestorbenen Organismen, die im Zuge der Sedimentation in die Gesteine eingeschlossen, durch nachfolgende Sedimente überdeckt und im Verlaufe der Versenkung durch Temperaturerhöhung teilweise zu flüssigen und/oder gasförmigen KW umgewandelt wurden. Eine derartige (autochthone) Bildung von KW erfolgt auch in Salzsedimenten, wenn organisches Ausgangsmaterial zusammen mit den aus dem Meerwasser durch Überschreitung der entsprechenden Löslichkeitsprodukte ausgeschiedenen Evaporitmineralen abgelagert wurde. Autochthone KW-Bildungen sind in sehr geringen Konzentrationen (i. d. R. im ppb-Bereich, siehe GERLING et al. 1991) in allen Salzgesteinen enthalten, leicht erhöhte autochthone KW-Konzentrationen werden in den Kaliflözen der mitteleuropäischen Zechstein-Salzlagerstätten nachgewiesen.

Ergänzend zu dieser primären KW-Führung von Salzgesteinen werden in den meisten Salzformationen KW detektiert, die unter bestimmten Voraussetzungen aus dem liegenden karbonatisch-tonigen Teil der Salzablagerungen oder aus dem Nebengebirge in den halitischen oder anhydrit-dominierten Teil der Salzstruktur hinein gelangen konnten. Im Verlaufe der erdgeschichtlichen Entwicklung kann durch Sedimentüberdeckung oder regionalgeologische bzw. tektonische Prozesse eine Absenkung der Gesteine in tiefere Krustenniveaus erfolgen, d. h. sie werden erhöhten Druck- und Temperaturbedingungen ausgesetzt. Die dabei aus den organischen Substanzen gebildeten flüssigen und gasförmigen KW haben aufgrund ihrer im Vergleich zu Wasser geringeren Dichte das Bestreben, in höher gelegene Schichten der Erdkruste aufzusteigen. Eine Migration der KW in die undurchlässigen Steinsalzsichten ist dabei nur dann möglich, wenn in einer abdichtenden Steinsalzsicht im Zuge tektonischer Beanspruchung räumlich und zeitlich begrenzt Rissnetzwerke entstehen, und wenn die hydraulischen Drücke in einer an eine Salzstruktur angrenzenden KW-Lagerstätte Werte in der Größenordnung des petrostatischen Teufendrucks annehmen. KW, die unter solchen Bedingungen zum Beispiel aus den liegenden karbonatisch-tonigen Partien der Salinarformation in andere Bereiche einer Salzstruktur vorgedrungen sind und im Zuge des Salzkriechens bzw. des Verheilens der gestörten Bereiche in die Salzgesteine eingeschlossen wurden, können durch Materialverlagerungen innerhalb der Salzstruktur beispielsweise im Zuge eines Salzaufstiegs weiter umgelagert werden. Die Verteilung von KW innerhalb einer Salzlagerstätte gehorcht demzufolge lithologischen und v. a. strukturgeologischen, mit der Genese und dem Aufbau der Salzstruktur zusammenhängenden Gesetzmäßigkeiten.

2 Ziele der Untersuchungen und Untersuchungsprogramm

2.1 Ziele der Untersuchungen

Die Untersuchungen über die Verteilung der KW-Vorkommen im Hauptsalz des Salzstockes Gorleben sowie über die Eigenschaften KW-führender Gesteinspartien wurden im Jahr 2000 durch das Erkundungsmoratorium unterbrochen. Von der BGR in Abstimmung mit dem Bundesamt für Strahlenschutz (BfS) bereits im Jahr 1995 erarbeitete längerfristige Untersuchungsprogramme zur Analyse der Verteilung und der Eigenschaften der KW-Vorkommen konnten danach nicht mehr umgesetzt werden. Die im Jahr 2010 durch das BMU in Auftrag gegebene „Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben“ kann daher nur von vorläufigen Untersuchungsergebnissen und Annahmen ausgehen (WEBER et al. 2011). Die bis zum Jahr 2000 zur KW-Führung der Gesteine des Salzstockes Gorleben erzielten Untersuchungsergebnisse wurden ausführlich in zahlreichen Berichten und Publikationen dargestellt, wie z. B. GERLING & FABER (2001) und GERLING et al. (2002). Die während des Auffahrens des Erkundungsbergwerkes Gorleben und in den Erkundungsbohrungen festgestellten freien Gas- und Kondensatzutritte wurden im „Lösungskataster Gorleben“ (BfS 2002) dokumentiert und in BGR-Berichten ausgewertet.

Die Untersuchung der KW-Vorkommen stellt einen Schwerpunkt der seit November 2010 erfolgenden geologisch-geotechnischen Weitererkundung des Salzstockes Gorleben dar (BfS 2009, HAMMER et al. 2012). Zur Klärung möglicher langzeitsicherheitlicher Auswirkungen der gasförmigen und flüssigen KW im Salzstock Gorleben auf ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle werden seit März 2011 umfangreiche In-situ- und Laboruntersuchungen mit den folgenden wesentlichen Zielstellungen durchgeführt:

- Untersuchungen zur Klärung der räumlichen Verteilung, der Gehalte und der Zusammensetzungen der flüssigen und gasförmigen KW in den Gesteinen des Hauptsalzes im Erkundungsbergwerk Gorleben,
- Gefüge- und Mikrostrukturanalyse der Gesteine zur Klärung der Bindungsformen; Genese und Verteilungsgesetzmäßigkeiten der KW im Hauptsalz,
- Bestimmung der Herkunft und Genese der KW im Hauptsalz anhand der molekularen Zusammensetzung der KW und isotopengeochemischer Parameter,
- Untersuchungen zu Vorkommen, Verbreitung und Ausbildung von KW-Migrationswegen im Bereich von Auflockerungszonen um bergmännische Hohlräume und zu den daran gebundenen KW-Migrationsprozessen sowie von durch Migration bedingten KW-Fraktionierungen; Abschätzungen von KW-Zutrittsraten ins Grubengebäude,

- Analyse des Verhaltens der flüssigen und gasförmigen KW während einer Aufheizung des Wirtsgesteins.

Als Ergebnis dieser Untersuchungen soll eine vorläufige Bewertung der KW-Vorkommen im Hinblick auf ihre sicherheitstechnische Bedeutung für die Eignung des Wirtsgesteins für die Endlagerung radioaktiver wärmeentwickelnder Abfälle sowie ggf. die Erarbeitung der Grundlagen für die Festlegung von Sicherheitsabständen zu langzeitsicherheitsrelevanten KW-Vorkommen erfolgen.

2.2 Untersuchungsprogramm

Für das Erreichen der in Kap. 2.1 genannten Zielstellungen werden umfangreiche, thematisch breit gefächerte In-situ- und Labor-Untersuchungen durchgeführt. Die einzelnen Erkundungsmaßnahmen und Untersuchungsschwerpunkte werden nachfolgend detailliert erläutert.

2.2.1 Untersuchungen zu Vorkommen und Zusammensetzungen der flüssigen und gasförmigen Kohlenwasserstoffe

Die seit Beginn der geologischen Erkundung des Salzstocks Gorleben durchgeführten Arbeiten zur Bestimmung von Menge, Zusammensetzung und Raumverteilung der KW (siehe z. B. GERLING & FABER 2001, GERLING et al. 2002) werden durch eine für das Hauptsalz statistisch abgesicherte, methodisch im Vergleich zu früheren Untersuchungen geänderte Beprobung und KW-Analyse von Gesteinsproben ergänzt. Dazu werden im Erkundungsbereich 1 (EB1) und im Umfeld des Erkundungsbereichs 1 vollständig gekernte, möglichst kurze Erkundungs- bzw. Probennahmebohrungen sowie zusätzlich lange, das gesamte Hauptsalz erfassende Erkundungsbohrungen (systematische Aussagen zur Verteilung der KW im z2HS) gestoßen. Die räumliche Anordnung dieser Bohrungen erfolgt so, dass

- frisches Probenmaterial zur Klärung der deutlichen Unterschiede bezüglich KW-Vorkommen zwischen Querschlag 1 W und Querschlag 1 E zur Verfügung steht,
- durch den Einsatz geeigneter Bohrungen Aussagen zur räumlichen Verteilung der KW im Hauptsalz in größerer Tiefe (mindestens bis 1000 m u. GOK) möglich sind,
- EMR- und ggf. Ultraschall-Durchstrahlungsmessungen zur Klärung der Verteilung von KW zwischen den neuen Bohrungen und den Querschlägen möglich sind (Klärung der Möglichkeiten eines zerstörungsfreien, geophysikalischen Nachweises von KW über größere Entfernungen),

- in 6 m langen Kurzbohrungen, die mit speziellen Packersystemen ausgerüstet werden, die Erfassung der Größe von KW-Vorkommen sowie Abschätzungen möglicherweise vorhandener Migrationswege/-geschwindigkeiten erfolgen können,
- Permeabilitäts-Messungen in den Bohrungen zum indirekten Nachweis von KW-Migrationsprozessen im Umfeld von Streckenauffahrungen durchgeführt werden können.

Neben langen Erkundungsbohrungen werden zur Entnahme von frischem Probenmaterial zwecks Analyse der Verteilung, Bindungsform und der Anreicherungsmechanismen der KW im Hauptsalz an gleichmäßig über das gesamte Hauptsalz verteilten Standorten in den Querschlägen 1 W und 1 E jeweils 6 m lange Bohrungen (88 mm Bohrdurchmesser) gestoßen. Für die Analyse der KW werden Proben aus dem Bereich hinter der Auflockerungszone (hintere 1,5 bis 2 m der Bohrungen) genommen und vor Ort sofort in gasdichte Gefäße überführt. Parallel dazu werden leicht ansteigende 6 m-Bohrungen (46 mm Bohrdurchmesser) gestoßen, in denen Packersysteme installiert werden. Mittels Packern wird der Bereich der Auflockerungszone (EDZ) vom Messintervall zwischen 3 m und 6 m Tiefe abgetrennt. Im Messintervall werden die Druckverhältnisse registriert und die in den Bereich der Druckentlastung einströmenden Gase und Kondensate erfasst, d. h. Zuflussexperimente in abgepackerten Bohrungen durchgeführt. Eine regelmäßige Beprobung der sich hinter dem Packer ansammelnden gasförmigen und flüssigen KW dient zur Quantifizierung der Zutrittsraten und Mengen von KW in die Druckentlastungsbereiche sowie zur Gewinnung von KW-Proben für die geochemische Analyse.

Für die Erfassung und Darstellung der räumlichen Verteilung der KW im Hauptsalz wird die Kartierung unter UV-Licht und die Fotodokumentation in neu aufgefahrenen Grubenbereichen (Strecken und Bohrrörter) vortriebsbegleitend fortgesetzt, ebenso wie die dementsprechende Untersuchung der Bohrkerne neu gestoßener Erkundungs- und Probenahmebohrungen. Die Fotos dienen zur Dokumentation der makroskopischen Gefügemerkmale und zur Ausweisung von Kernbereichen mit unterschiedlicher Fluoreszenz-Intensität. Von fluoreszierenden Bereichen werden exemplarisch Untersuchungen der KW-Gehalte und molekularen Zusammensetzungen der KW in Kombination mit gefügekundlichen, mikroskopischen Untersuchungen durchgeführt. Die Fluoreszenzintensitäten werden mit den KW-Gehalten und -Zusammensetzungen verglichen, um mögliche Korrelationen zwischen den Parametern zu überprüfen.

In Ergänzung zu den bis zum Jahr 2000 realisierten Arbeiten erfolgt eine sofortige Beprobung der Bohrkerne aus den Kurzbohrungen sowie die molekulare Charakterisierung und Quantifizierung der KW in den Kernproben und in den Gas- und Kondensat-Zutritten über den gesamten Siedebereich. Im Labor werden für alle unmittelbar aus den Salzgesteinen entnommenen Proben die gasförmigen und höhersiedenden KW von C₁ bis C₃₅ mit zur

Qualitätskontrolle überlappend aufgestellten gaschromatographischen Analyseverfahren und die gasförmigen Nicht-KW-Gase (CO_2 , N_2 , O_2 , H_2 , Ar, CO) quantifiziert (vorausgesetzt die Konzentrationen sind hoch genug).

An einer repräsentativen Auswahl der Proben werden die Kohlenstoff-Isotopenverhältnisse von Methan, Ethan und Propan sowie von CO_2 bestimmt, entsprechende Konzentrationen vorausgesetzt. Für flüssige KW werden für ausgewählte Proben die Kohlenstoff-Isotopenverhältnisse der stabilisierten Gesamt-KW bestimmt. Auf der Grundlage dieser Daten erfolgen Aussagen zur Genese der KW.

2.2.2 Mineralogisch-geochemische sowie gefügekundliche und mikrostrukturelle Untersuchungen von Salzgesteinen

Die Gefüge- und mikrostrukturellen Untersuchungen dienen vor allem zur Analyse der Verteilungsgesetzmäßigkeiten sowie zur Identifizierung und Dokumentation der Bindungs- bzw. Einschlussformen der KW im Salzgestein. Durch licht- und lumineszenzmikroskopische Untersuchungen von Dünn- und Dickschliffen sowie kleinen 3D-Probenkörpern (aus Hauptsalzbereichen mit deutlich unterschiedlichen KW-Gehalten) wird geklärt, ob die KW intrakristallin, an Korngrenzen oder an verheilte Mikroklüfte (microcracks) gebunden sind. Durch Subkornanalysen und spezielle Texturuntersuchungen wird analysiert, ob erhöhte KW-Konzentrationen an Bereiche mit erhöhten Strain- bzw. Deformationsraten gebunden sind und ob Gesteinsanisotropien Einfluss auf die KW-Verteilung haben. Außerdem wird eine quantitative Beschreibung der Porentypen sowie der Verteilung und Ausbildung der Poren im Gestein (Geometrie, Verbindung der Poren untereinander) vorgenommen. Dazu werden die lichtmikroskopischen Untersuchungen durch computertomographische (CT) Bestimmungen des Porenraums bzw. -volumens ergänzt.

2.2.3 Analyse des Einflusses der Kohlenwasserstoffe auf die geomechanischen Gesteinseigenschaften

An mehreren neu entnommenen, besonders schonend gewonnenen Kernproben (Kerndurchmesser 102 mm) werden triaxiale Festigkeits- bzw. Kriechversuche zur Bestimmung des Einflusses von Porendruck-Variationen auf das Kriechverhalten des Steinsalzes durchgeführt (Porendruck-Änderungen durch Variation des Manteldruckes und/oder der Temperatur). Die Laborexperimente werden von mikroskopischen bzw. gefügekundlichen Untersuchungen der Probenkörper (vor und nach den Experimenten) begleitet. Gleichzeitig wird das Dilatanzverhalten von Proben untersucht, die deutlich erhöhte KW-Gehalte aufweisen.

2.2.4 In-situ-Messungen in den Erkundungs- und Probennahmebohrungen

Neben Permeabilitätsmessungen in den für die Probengewinnung neu gestoßenen Kurzbohrungen werden aktive Druckaufbau-Messungen in einigen der 6 m langen, 88 mm-Kurzbohrungen mit erhöhten KW-Gehalten realisiert (dynamische Permeabilitätstests). Ziel dieser Arbeiten ist es, die Änderung der Permeabilitäten bzw. die Permeabilitätsverteilung im angrenzenden Salzgebirge nach Entweichen der gasförmigen und flüssigen KW in die Bohrungen zu beschreiben. In speziellen Packerbohrungen (46 mm Bohrdurchmesser, 6 m lang) erfolgt eine genaue Erfassung der Zutrittsraten der gasförmigen und flüssigen KW v. a. mit dem Ziel, ausgehend von diesen Messdaten eine Abschätzung der Größe der KW-Vorkommen vornehmen zu können.

2.2.5 Geophysikalische Untersuchungen

Für die Erkundung der räumlichen Verteilung und Ausdehnung einzelner, nicht durch Bohrungen aufgeschlossener Gas- und/oder Kondensateinschlüsse wird mittels Einsatz unterschiedlicher geophysikalischer Methoden geprüft, ob geeignete Verfahren bzw. modifizierte Messmethoden zur Klärung dieser Fragestellungen identifiziert werden können. Ausgehend von den in der BGR vorhandenen Erfahrungen werden durch spezielle Bohrungsanordnungen und durch Modifizierung der eingesetzten Messverfahren die Möglichkeiten des Einsatzes von EMR- bzw. Radarmessungen sowie Ultraschall-Verfahren analysiert und geklärt, ob sie bei der weiteren Bearbeitung dieser Aufgabenstellung zur Anwendung kommen können. Es gilt zu prüfen, ob die EMR- und Ultraschall-Verfahren in der Lage sind, die Verteilung von KW-Vorkommen zwischen Bohrungen bzw. zwischen Bohrungen und Strecken zu detektieren.

2.2.6 Experimente zur Abschätzung des Verhaltens der Kohlenwasserstoffe im Salzgestein bei Aufheizung

Zur Bestimmung der temperaturabhängigen Umwandlung bzw. Freisetzung von KW und zur Bewertung möglicher Rissbildungen bzw. Auflockerungen durch ansteigenden Porendruck sowie von geochemischen, durch Temperaturerhöhung induzierten Prozessen werden in Ergänzung zu den geomechanischen Laborexperimenten im Labor Aufheizversuche und Entgasungsmessungen an Hauptsalz-Proben durchgeführt. Dabei sollen die Menge an freigesetzten Gasen ermittelt und geochemische Reaktionen der KW mit im Salzgestein enthaltenen anorganischen Verbindungen (thermochemische Sulfatreduktion) betrachtet werden. Parallel dazu finden Aufheizexperimente an Dickschliffen mittels Heiztisch-Mikroskopie statt, um die durch den Aufheizvorgang in den Gesteinen möglicherweise verursachten Gefüge- und Phasenänderungen im mikroskopischen Maßstab zu beobachten.

3 Grundlagen und bisheriger Kenntnisstand

3.1 *Nomenklatur von Öl- und Gasphasen sowie ausgewählter weiterer Bestandteile*

Als Erdöl werden natürlich vorkommende flüssige KW-Gemische bezeichnet, deren dynamische Viskosität bei der Lagerstättentemperatur geringer als $10 \text{ kg}/(\text{m}^*\text{s})$ ist. Substanzen mit höherer Viskosität werden als Bitumen bezeichnet. Als Kondensat werden KW-Ansammlungen bezeichnet, die unter Lagerstättenbedingungen gasförmig sind, aber unter Atmosphärendruck bei $15,6 \text{ }^\circ\text{C}$ eine Flüssigkeit mit einer Dichte größer als $0,78 \text{ g}/\text{cm}^3$ bilden. Als Erdgas bezeichnet man die Gasphase von Rohöl, die unter Normalbedingungen nicht kondensiert. Es enthält typischerweise 70 % bis 100 % Methan, 1 % bis 10 % Ethan und geringe Anteile höherer KW (HUNT 1996), bei möglichen größeren Schwankungen, z. B. von N_2 oder CO_2 .

3.2 *Methodisch bedingte Unterscheidung von Gasen in Salzgesteinen*

Hinsichtlich der Form ihrer Vorkommen im Salzgestein können die KW in Gas- bzw. Kondensatzutritte und mineralgebundene KW unterschieden werden. Gas- oder Kondensatzutritte treten in den norddeutschen Salzstöcken fast ausschließlich in anhydritdominierten Salinarschichten auf. Aufgrund ihres kompetenten Deformationsverhaltens können anhydritdominierte Salinalgesteine über das für eine KW-Speicherung erforderliche Speichervolumen in Form von Klüften oder kavernen Hohlräumen verfügen. Daneben sind Gas- und Kondensatanreicherungen in Störungs- bzw. Zerrüttungszonen möglich, die in halitdominierten Bereichen von Salzstöcken aufgrund des Kriechvermögens von Steinsalz i. d. R. verheilt sind. Außerdem werden Gas- und Kondensatanreicherungen relativ häufig in Kaliflözen sowie im Umfeld von Basaltgängen, die das Salz durchschlagen (z. B. im Werra-Revier), beobachtet.

Als freie Gase oder auch „schnittgebundene“ Gase werden Gase bezeichnet, die in den Gesteinen flächenhaft auf Bruchformen wie Schnitten, Spalten oder Klüften oder in kavernen Hohlräumen eingeschlossen sind.

Mineralgebundene Gase oder salzgebundene Gase bezeichnen Gase, die im Mineralkorn und/oder zwischen den einzelnen Mineralkörnern fixiert sind. Es werden zwei Gruppen mineralgebundener Gase unterschieden:

- Von intrakristallinen, inkristallinen, ingranularen oder intragranularen Gasen wird gesprochen, wenn die Gase im Mineralkorn in Form mikroskopisch kleiner Bläschen bzw. in Hohlräumen eingeschlossen sind. Sie können mit Lösungseinschlüssen assoziiert sein. Die intrakristallin gebundenen Gase sind im Dünnschliff häufig als eng beieinander liegende Fluideinschlüsse zu beobachten, die das Kristallkorn entweder regellos durchsetzen oder entsprechend kristallographischen Vorzugsrichtungen angeordnet sind. Der Durchmesser der Gaseinschlüsse kann von weniger als einem bis zu hunderten Mikrometern betragen.
- Von interkristallinen oder intergranularen Gasen wird gesprochen, wenn die Gase auf den Korngrenzen der Minerale fixiert sind (HERRMANN 1987; SIEMANN 2007).

Interkristalline Einschlüsse in Salzmineralen können Durchmesser bis 10 mm aufweisen, meist haben sie Abmessungen im μm -Bereich. Nach HERRMANN & KNIPPING (1993a,b) überwiegen in Salzgesteinen interkristallin gebundene KW, oft liegen mehr als 90 Vol.-% der KW interkristallin vor. Eine Freisetzung mineralgebundener KW aus dem Salzgestein ist im Zuge von Gefügebrauchungen, wie sie beim Auffahren von Strecken und beim Abteufen von Schächten im Nahbereich um die Grubenbaue entstehen, möglich.

GERLING et al. (2002) vermuten, dass ein Teil der im Gestein befindlichen Gase dieses bereits nach Veränderung der untertägigen Bedingungen, v. a. durch den Druckabfall bei Entnahme aus dem Gesteinsverband, verlässt. Daher wurden alle Gesteinsproben aus dem Salzstock Gorleben bei der Probennahme in Acrylbehältern verschlossen und das sich im Gasraum des Behälters ansammelnde Gas separat vermessen. Diese Gase wurden als Headspace-Gase bezeichnet (GERLING & FABER 2001).

3.3 Nomenklatur, Strukturbeispiele und ausgewählte Eigenschaften von Kohlenwasserstoffen

Mit dem Begriff KW werden Stoffe bezeichnet, deren Moleküle überwiegend aus den Elementen Kohlenstoff (C) und Wasserstoff (H_2) aufgebaut sind. In der Natur kommen KW als Gemische verschiedener, kettenartig aufgebauter KW-Moleküle unterschiedlicher Länge sowie cyclisch (aromatisch) aufgebauter Verbindungen vor.

KW werden in aliphatische und aromatische KW differenziert. Unter aromatischen KW versteht man cyclische, planare KW mit einem delokalisierten π -Elektronenpaar, welches die

Hückel-Regel erfüllt: aromatische KW besitzen $4n + 2 \pi$ -Elektronen. Die am aromatischen System beteiligten Atome sind sp^2 -hybridisiert. KW, die nicht aromatisch sind, werden als aliphatische KW bezeichnet. Wichtige Stoffgruppen unter den aliphatischen KW sind n-, Iso- und Cycloalkane, -alkene und -alkine. n-Verbindungen sind geradkettig, iso-Verbindungen verzweigt und cyclo-Verbindungen ringförmig. Alkane sind gesättigte KW mit C-C-Einfachbindungen, Alkene sind ungesättigte KW mit C-C-Doppelbindungen und Alkine ungesättigte KW mit C-C-Dreifachbindungen. In Abb. 1 sind die Strukturformeln einiger KW dargestellt.

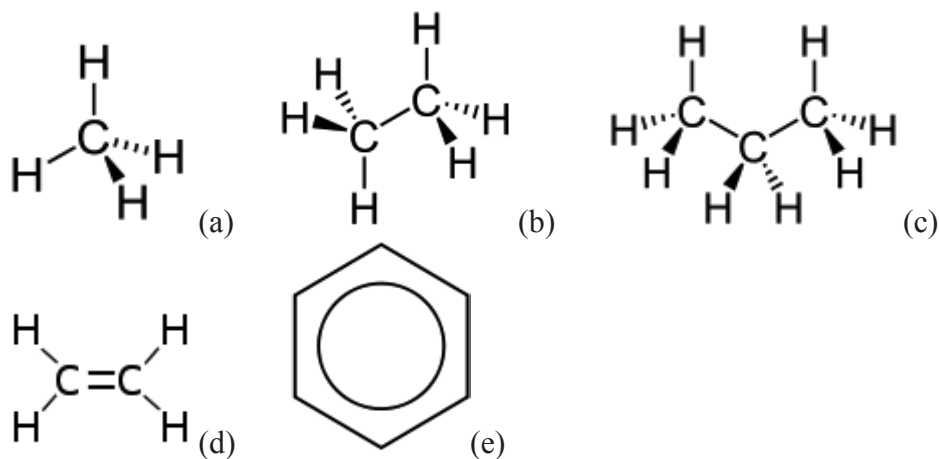


Abb. 1: Strukturformeln von Methan (a), Ethan (b), Propan (c), Ethen (d) und Benzol (e).

Je nach Struktur des KW-Moleküls und Anzahl der darin gebundenen Atome besitzen KW unterschiedliche Eigenschaften. Alkane sind mit weniger als fünf Kohlenstoffatomen unter Normalbedingungen gasförmig und mit mehr als 17 Kohlenstoffatomen fest. Flüssige Mischungen aus KW können auch langkettige Anteile mit wesentlich mehr als 17 Kohlenstoffatomen enthalten.

In Tab. 1 sind die Schmelz- und Siedepunkte einiger ausgewählter KW dargestellt (HOWARD et al. 1997). Unter Gebirgsbedingungen bei erhöhtem Druck kann der Aggregatzustand der KW von den Angaben in Tab. 1 abweichen. Dies ist am Beispiel des Phasendiagramms von n-Pentan gezeigt (Abb. 2).

Tab. 1: Schmelz- und Siedepunkte ausgewählter KW unter Normalbedingungen (1,013 bar und 298,15 K)

Verbindung	Formel	Schmelzpunkt [°C]	Siedepunkt [°C]
Methan	CH ₄	-182,6	-161,4
Ethan	C ₂ H ₆	-172	-88
Propan	C ₃ H ₈	-187,6	-42,1
Butan	C ₄ H ₁₀	-138,2	-0,5
Pentan	C ₅ H ₁₂	-129,7	36,1
Hexan	C ₆ H ₁₄	-95,3	69
Benzol	C ₆ H ₆	5,53	80,09
Heptadecan	C ₁₇ H ₃₆	22	302
Hexatriacontan	C ₃₆ H ₇₄	76,5	
Tetracontan	C ₄₀ H ₈₂	81-83	

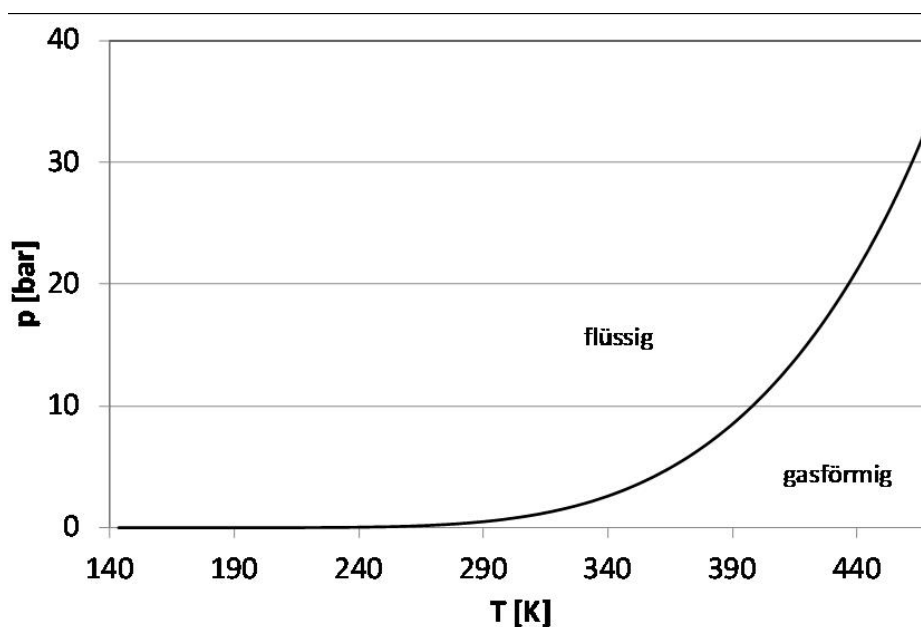


Abb. 2: Ausschnitt aus dem Phasendiagramm von n-Pentan (Daten aus der NIST Standard Reference Database 69: NIST Chemistry WebBook).

3.4 Fluoreszenz von Kohlenwasserstoffen

Einige KW fluoreszieren bei Anregung mit UV-Strahlung. Bei der Fluoreszenz handelt es sich um die Emission elektromagnetischer Strahlung, die beim Übergang eines elektronisch angeregten Systems in einen Zustand niedrigerer Energie freigesetzt wird. Der Elektronenübergang ist spinerlaubt, er gehorcht der Auswahlregel $\Delta S = 0$. Aus diesem Grund endet die Fluoreszenz mit dem Ende der Anregung, während die Phosphoreszenz, bei der ein spinverbotener Elektronenübergang angeregt wird, nach der Anregung länger andauert, temporär also noch gespeicherte Energie in Form elektromagnetischer Strahlung emittiert wird. Die Frequenz der emittierten elektromagnetischen Strahlung ist bei der Fluoreszenz geringer als die Erregerfrequenz.

Die Mehrzahl der fluoreszierenden organischen Stoffe sind aromatische Verbindungen. In Tab. 2 sind die Fluoreszenzfarben einiger aromatischer KW dargestellt (FÖRSTER 1982). Unter den aliphatischen Verbindungen ist Fluoreszenz selten. Von den KW dieser Reihe scheint kein einziger fluoreszenzfähig zu sein. An den gesättigten KW wie Ethan, Hexan, Cyclohexan oder einfach ungesättigten wie Ethen ist auch bei Erregung durch kurzweilige ultraviolette Strahlung – entsprechend der Lage der Absorptionsgebiete – keine sichtbare oder ultraviolette Fluoreszenz zu beobachten. Sogar der rote Kohlenwasserstoff Lycopin ($C_{40}H_{56}$), der seine langwellige Absorption einer Konjugation von 11 C-C-Doppelbindungen verdankt, fluoresziert nicht (FÖRSTER 1982).

Tab. 2: Fluoreszenzfarben ausgewählter aromatischer KW

Verbindung	Fluoreszenzfarbe
Benzol	ultraviolett
Naphtalin	ultraviolett
Pyren	blau
Triphenylen	blau
Pentacen	rot
Benzpyren	blauviolett
Perylen	blau
Hexaphen	grünblau
Coronen	blau
Dibenzcoronen (2,3 ; 8,9)	grün

Von den, durch Substitution aus aromatischen Grund-KW entstehenden alkylaromatischen Verbindungen sind die meisten ebenfalls fluoreszenzfähig (FÖRSTER 1982).

3.5 Zusammenfassung des Kenntnisstandes zur Kohlenwasserstoff-Führung des Salzstocks Gorleben bis März 2011

Untersuchungen der Mengen/Gehalte, Zusammensetzung und Genese der bei der über- und untertägigen geologischen Erkundung des Salzstockes Gorleben in den Salinargesteinen angetroffenen Fluide erfolgen seit Beginn der Erkundungsarbeiten, z. B. in den tiefen Erkundungsbohrungen Go1002 und Go1005 oder beim Abteufen der Schächte. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in zahlreichen Berichten dargestellt, wie z. B. GRÜBLER 1984, GERLING et al. 1988, 1991, GERLING 1991, GERLING & FABER 2001, GERLING et al. 2002, BORNEMANN et al. 2008).

Nach den Ergebnissen dieser früheren Untersuchungen ist Methan der dominierende gasförmige Bestandteil der KW. Der Methangehalt in den untersuchten Salzproben des Salzstockes Gorleben beträgt zwischen 1 ppb und 19,89 ppm, im Mittel sind es 254 ppb. Der Gesamt-Gehalt der KW C₁ bis C₅ beträgt im Mittel 452 ppb (GERLING 1991, GERLING & FABER 2001). Die bei der Erkundung zugetretenen Kondensate und/oder Gase kamen häufig kombiniert mit salinaren Lösungen vor.

Die beim Auffahren des Erkundungsbergwerkes Gorleben sowie in den über- und untertägigen Erkundungsbohrungen bis Oktober 2000 nachgewiesenen freien Gas- und Kondensatzutritte wurden im „Lösungskataster Gorleben“ (BfS 2002) dokumentiert. Signifikante, messtechnisch erfassbare Zutritte stammten ausschließlich aus anhydritangereicherten Gesteinspartien der Leine-Folge (z3). Die z. B. in der Bohrung Go5001 festgestellten Gas- und Kondensatzutritte (insgesamt traten ca. 5 m³ Kondensat in die Bohrung zu) wurden ebenso wie die in der Schachtvorbohrung Go5002 dem Bank-/Bändersalz (z3BK/BD) oder der Gorleben-Bank (z3OSM) zugeordnet.

Durch eine engständige Beprobung der Bohrungen Go1002 und Go1004 haben GERLING (1991) und GERLING et al. (2002) den KW-Gehalt als Funktion der Teufe (und der fein-stratigraphischen Position der aufgeschlossenen Schichten) dargestellt. Dabei ergab sich, dass methanreichere Abschnitte v. a. in carnallitischen Lagen im Kaliflöz Staßfurt vorkommen, sowie im Liniensalz (z3LS) und im Bänderanyhdrit (z3HA11). Im Schacht 1 wurde etwa alle 10 m eine Probe genommen. Die Methangehalte der salzgebundenen Gase liegen meist unter 20 ppb, im z3LS und im Orangesalz (z3OS) wurden vereinzelt höhere Werte, jedoch unter 100 ppb ermittelt. Auch im Schacht 2 wurden etwa alle 10 m Proben gewonnen. Hier variierte der Methangehalt über einen größeren Bereich, der von <10 ppb bis wenig über 1000 ppb reicht. Erhöhte Methangehalte traten in der Gorleben-Bank und im z3BK/BD in 826 m Teufe auf. In den von übertage abgeteufte Erkundungsbohrungen wurden die höchsten Gasgehalte in den Knistercarnalliten sowie gelegentlich im Orangesalz und insbesondere in der Gorleben-Bank (z3OSM) gefunden (GERLING et al. 2002).

Während der untertägigen Erkundung wurden ausschließlich in den Gesteinen der Leine-Folge (z3) im Infrastrukturbereich beim Stoßen der Bohrungen RB217 (Kluftzone in der Nähe der Gorleben-Bank - z3OSM) und RB218 (Anhydrit-Bank im Basissalz - z3BS) sowie beim Auffahren von Strecken im Bereich der Gorleben-Bank Gaszutritte beobachtet. Die zugetretenen Gasmengen waren i. d. R. so gering, dass sie nicht gemessen werden konnten. In dem als Salzbrekzie vorliegenden Hauptsalz der Staßfurt-Folge (dem eigentlich geplanten Einlagerungsbereich) wurden im Salzstock Gorleben bis zum Moratorium im Jahr 2000 nur in vier Bohrungen volumenmäßig erfassbare Gaszutritte beobachtet. Dies entspricht den Beobachtungen in anderen, halokinetisch entstandenen Salzstrukturen Norddeutschlands, in denen sich die Volumina der zutretenden Gase auf wenige Liter bis maximal einige Kubikmeter beschränken (HEMPEL 1974, GERLING et al. 1991, 1996). Nach GERLING et al. (1991) weist das Staßfurt-Steinsalz in den norddeutschen Salzstöcken Gasgehalte (mit Methan als dominierendem KW) von überwiegend unter 0,3 g KW je t Gestein (meist kleiner 10 – 40 mg KW je t Gestein) auf. Lediglich in Kaliflözen und in carnallitischen Klüften im Hauptanhydrit wurden höhere Gaskonzentrationen bis 2 bzw. 20 g KW je t Gestein nachgewiesen. Vereinzelt deutlich höhere Gaszutrittsvolumina wurden infolge des tertiären Basaltvulkanismus in den flach lagernden Salzlagerstätten der Werra-Fulda-Region nachgewiesen.

Im EB1 des Erkundungsbergwerkes Gorleben wurde das im Querschlag 1 Ost, im Querschlag 1 West und in der Nördlichen Richtstrecke aufgeschlossene Staßfurt-Hauptsalz i. d. R. alle 5 m beprobt. Im Querschlag 1 Ost schwankt der Methangehalt mehrfach zwischen höheren und geringen Werten. Der Methangehalt in der Nördlichen Richtstrecke liegt hingegen relativ gleichmäßig zwischen etwa 20 ppb und 40 ppb. Nur wenige Werte liegen darüber, bleiben jedoch unter 80 ppb.

Die im Staßfurt-Steinsalz des Salzstockes Gorleben enthaltenen gasförmigen KW kommen nur in sehr seltenen Fällen als freie Gaszutritte vor und liegen überwiegend als salzgebundene, durch Auflösung des Gesteins im Salzblender erfassbare Gase auf Korngrenzen bzw. im sehr geringen Porenraum der Salzgesteine vor (BORNEMANN et al. 2008). Intrakristalline Gas- und Kondensateinschlüsse spielen nur eine untergeordnete Rolle. Die überwiegend interkristallinen Einschlüsse sind bei Druckentlastung (z. B. Auflockerung des Gesteinsgefüges bei Auffahrung von Strecken) und Temperaturerhöhung prinzipiell mobilisierbar.

Während in den Schachtvorbohrungen und Schächten (insbesondere in den oberen Abschnitten) sowie in einigen Gasproben aus Gesteinen der Leine-Folge Stickstoff dominiert, überwiegt in den freien Gaszutritten in Steinsalzbereichen der Tiefbohrungen i. d. R. Methan, bei gleichzeitig geringen Gehalten von H₂ und CO₂ sowie meist noch deutlich geringeren Gehalten von H₂, H₂S, Ethan, Propan und höherkettigen KW

(GERLING & FABER 2001). Die in sehr geringen Konzentrationen im Staßfurt-Hauptsalz vorkommenden salzgebundenen Gase sind nach den bis März 2011 vorliegenden Untersuchungsergebnissen durch eine N₂-Dominanz und relativ hohe O₂-Gehalte charakterisiert, Methan spielt ebenso wie CO₂ nur eine untergeordnete Rolle.

PROHL (1998) hat die gasförmigen KW-Einschlüsse des Salzstocks Gorleben mittels Laser-Raman-Spektroskopie untersucht. Es wurden Einschlüsse gefunden:

- die lediglich N₂ führen,
- die N₂ und O₂ beinhalten,
- in denen neben N₂ und O₂ Methan vorliegt,
- die N₂, Methan und Ethan führen,
- die Methan, Ethan, N₂ und H₂ führen,
- die N₂, Methan und H₂S beinhalten und
- solche, die abgesehen von O₂ alle aufgeführten Gase aufweisen.

In unmittelbarer Nachbarschaft sind häufig lösungsfreie Einschlüsse vorhanden:

- die nur Methan führen,
- Einschlüsse, in denen ein N₂/Methan-Gemisch neben H₂O vorliegt und
- solche, die lediglich Lösung und damit verbunden H₂O in der Gasphase enthalten.

Die für den Salzstock Gorleben bisher analysierten Kondensat-Proben bestehen überwiegend aus niedrig siedenden flüssigen KW (C₆ bis C₁₆, meist ≤ C₁₀), höhere Homologe kommen nur in vergleichsweise geringen Konzentrationen vor. Analysen der im Hauptsalz im Bohrort 3.1 angetroffenen Kondensate ergaben 55,9 – 79,3 Vol.-% gesättigte KW; 5,8 – 10,8 Vol.-% aromatische KW; 1,6 – 2,1 Vol.-% Heteroverbindungen; 0,2 – 0,4 Vol.-% Asphaltene und zwischen 13 und 31 Vol.-% schwankende Abdampfverluste von leichtflüchtigen Verbindungen.

Zur besseren Erfassung der Verteilung der KW-Vorkommen wurde im Rahmen der geologischen Kartierung eine Kartierung unter UV-Strahlung vorgenommen, da aromatische KW fluoreszieren und diese als Anzeiger für die Anwesenheit weiterer KW verwendet werden können. Die Auswertung der UV-Kartierung ergab, dass die Verteilung der makroskopisch erkennbaren KW-Einschlüsse unregelmäßig ist. Die einzelnen Vorkommen sind isoliert und weisen keine Verbindung untereinander auf. Sie sind im seltenen

Fall einer länglichen bandartigen Erstreckung annähernd in der Schichtung ausgerichtet oder verlaufen dazu spitzwinklig. Sie treten auf

- in diffus wolkigen Formen mit unscharfen Übergängen zu KW-freien Bereichen,
- in bandartig dezimeterbreiten, eng begrenzten Lagen mit scharfem Übergang zu KW-freien Bereichen,
- in Resten von Kleinfalten, die durch diffus verteilte KW-Vorkommen abgebildet werden und
- in eckigen Brocken mit scharfer Begrenzung zu KW-freiem Steinsalz (BORNEMANN et al. 2001).

Die KW-Zutritte stellen sich als i. d. R. schwach sichtbare, oft erst mittels UV-Lampe detektierbare und meist isolierte Feuchtstellen an Stoß bzw. Firste und auf Bohrkernen dar. Die Zutritte werden aus der sich um bergmännische Auffahrungen bildenden Auflockerungszone des Gesteins gespeist und trocknen i. d. R. nach kurzer Zeit ab. Dieser Befund spricht gegen größere, mit KW gefüllte Hohlräume und für eine nur geringe Vernetzung der isolierten KW-Nester/Schlieren. Häufig sind die Feuchtstellen an Ankerbohrlöcher sowie an Risse in Pfeilerecken gebunden.

Nach dem Kenntnisstand von Oktober 2000 konzentrieren sich die Kondensatvorkommen auf das Knäuelsalz (z2HS1) im westlichen Teil des EB1. In Richtung Querschlag 1 Ost nehmen ihre Häufigkeit und Ausdehnung stark ab (BORNEMANN et al. 2008). Die KW-impregnierten Bereiche sind innerhalb des Knäuelsalzes sehr inhomogen verteilt. Neben nestartigen und schlierenförmigen sowie diffus verteilten KW werden auch scharf abgegrenzte KW-Zonen beobachtet, die über kurze Abschnitte lagig oder schichtartig, d. h. etwa horizontbeständig angeordnet sind. Die im Querschlag 1 West festgestellten, mittels UV-Lampe detailliert kartierten KW scheinen sich auf „Flächen“ anzureichern, die parallel zum Streichen des z2HS-Sattels orientiert sind (BORNEMANN et al. 2008).

Die Kondensate sind unregelmäßig über das Knäuelsalz verteilt, ggf. vorliegende lithologische und/oder struktureologisch-tektonische Ursachen oder Einflussfaktoren auf die Kondensatverteilung konnten bis zum Oktober 2000 nicht endgültig geklärt werden. Von der BGR in Abstimmung mit dem BfS im Jahr 2000 diesbezüglich begonnene Untersuchungen konnten bis zum Jahr 2011 nicht durchgeführt werden.

Nach den bis März 2011 vorliegenden gefügekundlichen Untersuchungsbefunden sind die Kondensate auch im mikroskopischen Bild inhomogen und bevorzugt auf den Korngrenzen der Minerale verteilt sowie entlang von verheilten Rissen/Mikrorissen und Bruchstrukturen angereichert. Dieser Befund steht in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Unter-

suchungen von HERRMANN & KNIPPING (1993) an zahlreichen deutschen Salzstöcken. Nur ein sehr geringer Teil der Kondensate liegt in Form intrakristalliner Einschlüsse im Halit, meist in der Nähe der Korngrenzen der Steinsalzkristalle vor. KW-imprägnierte Hauptsalz-Abschnitte unterscheiden sich nach Befunden von POPP et al. (2002) deutlich im Korngefüge von den KW-freien Hauptsalz-Bereichen. KW-führende Hauptsalz-Bereiche sind feinkörniger und besitzen demnach eine stärkere Ausrichtung des Korngefüges. Beide Gesteinstypen gehen nicht diffus ineinander über.

Die von FISCHER (2000) bzw. POPP et al. (2002) an drei Kernproben der Bohrungen RB032 und RB341 durchgeführten mikroskopischen Untersuchungen ergaben für unterschiedlich mit Kondensaten angereicherte Proben eine Schwankungsbreite der Kondensatgehalte zwischen 40 und 250 ml/m³, wobei in den meisten Dünnschliffen weniger als 100 ml/m³ bestimmt wurden. Bezüglich dieser Werte müssen die relativ lange Liegezeit der nicht speziell aufbewahrten Kernproben und daher zu unterstellende KW-Verflüchtigungen sowie die ungleichförmige Verteilung der Kondensate berücksichtigt werden.

Die häufige Bindung der KW-Vorkommen an rekristallisierte (metamorphisierte) Steinsalzbereiche und verheilte Klüfte deutet auf eine tektonische Beanspruchung dieser Hauptsalz-Partien und eine daran gebundene Platznahme der KW hin. Die scharfe Abgrenzung der KW-imprägnierten und KW-freien Bereiche lässt darauf schließen, dass die Fixierung der KW im Steinsalz in frühen Phasen des Salzaufstieges erfolgte. Deutlich spätere, tektonisch bedingte Mobilisierungen bzw. Umverteilungen der KW können auf der Grundlage der bis März 2011 vorliegenden Untersuchungsbefunde ausgeschlossen werden (BORNEMANN et al. 2008).

Die im Salzstock Gorleben bis März 2011 nachgewiesenen KW weisen hinsichtlich ihrer Stoffgruppen-Zusammensetzungen sehr große Ähnlichkeiten mit den KW-Gaschromatogrammen vieler Erdöle auf, wobei insbesondere kurz-kettige Alkane und die C₃₀-C₄₀-Verbindungen nur einen geringen Anteil an der KW-Gesamtkonzentration im Gestein ausmachen. Die im Vergleich zu Erdölen deutlich geringeren Gehalte der flüchtigen KW-Komponenten sind möglicherweise auf Verflüchtigungen beim Bohren oder bei der Probenpräparation zurückzuführen. Die im Salzstock Gorleben nachgewiesenen KW sind ausgehend von ihren molekularen und isotopengeochemischen Zusammensetzungen höchstwahrscheinlich durch thermokatalytische Prozesse aus der organischen Substanz des Staßfurt-Karbonates entstanden (GERLING et al. 1996, 2002, BORNEMANN et al. 2008). Die KW-Zusammensetzungen widersprechen einer In-situ-Genese der KW im Staßfurt-Hauptsalz. Auch eine Herkunft der KW aus dem Kupferschiefer kann nach GERLING et al. (1996, 2002) ausgeschlossen werden. Die thermogenen Gase/Kondensate sind im Zuge der Halokinese aus dem liegenden Teil der Salinarformation, dem Staßfurt-Karbonat, in die Steinsalzsichten der Staßfurt-Folge eingearbeitet worden. Lediglich für die freien

Gaszutritte aus dem Hauptanhydrit (z3HA) wurde ein Mischgas dieser autochthonen Zechstein-Gase mit 40 – 45 % Gas aus dem relativ älteren Rotliegend nachgewiesen; das Rotliegend-Gas ist im Zeitraum Ende Jura bis Anfang Unterkreide in den deformierten Hauptanhydrit eingewandert (GERLING et al. 2002).

4 **Untersuchungsmethoden für die Bestimmung der Gehalte und der Zusammensetzung der Kohlenwasserstoffe**

4.1 *Probennahme und Probenvorbereitung*

4.1.1 **Vorgehensweise der BGR bis Oktober 2000**

In Arbeiten der BGR bis zum Erkundungsmoratorium wurden verschiedene Arten von Proben gewonnen: Gasproben sowie Öl- bzw. Kondensatproben aus Zutritten in Erkundungsbohrungen und in den Schächten, Gesteinsproben aus Bohrkernen der Erkundungsbohrungen sowie gebrochene Gesteinsproben aus dem Sprengabraum des Vortriebs der Querschläge 1 West und 1 Ost sowie der Nördlichen Richtstrecke im EB1. Es wurden keine speziell auf die Gewinnung von Proben zur KW-Analytik ausgerichteten Bohrungen durchgeführt. Dadurch waren Effekte auf die erhobenen KW-Gehalte, wie z.B. Erhöhung der Gehalte durch Kontamination während der Bohr- und Sprengarbeiten oder auch Erniedrigung durch Freisetzung von flüchtigen KW aus dem Gestein durch erhöhte Temperatur während eines schnellen Bohrvortriebs, durch die Aufbereitung des Gesteins oder durch lange Lagerung nicht einzugrenzen. Auch konnte die Probennahme meist nicht durch speziell eingewiesene Mitarbeiter erfolgen, so dass nicht von einer Gleichbehandlung der Proben während der Probennahme auszugehen ist.

In den bisherigen Arbeiten der BGR wurden seit Beginn des Schachtabteufens alle Gesteinsproben bei der Probennahme in Acrylbehältern verschlossen und das sich im Gasraum ansammelnde Gas vor der Probenbearbeitung im Salzblender (siehe weiter unten) vermessen. Diese Gase werden in den entsprechenden früheren Berichten der BGR als *Headspace-Gase* bezeichnet. Technisch betrachtet handelt es sich bei diesen Gasen um die Fraktion der Gesamtgase, die das Salzgestein (zum Beispiel aufgrund des aufgelockerten Gefüges durch die Druckentlastung) verlassen kann. Die Untersuchung der Probenbehälter ergab jedoch, dass diese häufig nicht gasdicht verschlossen waren. Ursache hierfür waren meist feinkörnige Salzpartikel im Behälterverschluss. Durch abgeänderte Behälterverschlüsse und verbesserten Probennahme-Ablauf konnte dieses Problem nur teilweise behoben werden (GERLING & FABER 2001). Auf die Daten dieser

Headspace-Gase wird aufgrund der geschilderten Probleme im vorliegenden Bericht nicht weiter eingegangen.

Die in Laboren der BGR untersuchten Proben wurden generell vor der Auflösung nicht zerkleinert. Dies ist nicht der Fall bei Proben, die – im frühen Zeitraum der Erkundung – in einem beauftragten, externen Labor analysiert wurden. Die Vermutung, dass ein Teil der im Gestein befindlichen Gase dieses bereits nach Veränderung der untertägigen In-situ-Bedingungen und v. a. bei einer Zerkleinerung verlässt, wird durch neuere Literatur bestätigt. Danach lassen sich Gase, die an den Korngrenzen gespeichert sind, durch Zerkleinern der Salzgesteinsprobe teilweise freisetzen (SIEMANN 2007). Die Zerkleinerung der Salzproben vor dem Auflösen ist in Anbetracht dieser Erkenntnis als Schwachstelle anzusehen. Darüber hinaus liegt teilweise ein größerer Zeitraum zwischen Probennahme und Analyse (einige Wochen bis Jahre, GERLING 1991).

Die Analyse der salzgebundenen Gase - also der Gase, die erst durch komplettes Auflösen des Salzes freigesetzt werden können – wurde durch unterschiedliche Bearbeiter/Labore durchgeführt. Die Bestimmung der Gas-Gehalte und –Zusammensetzungen erfolgte dabei in einem so genannten Salzblender. Hierbei wurden etwa 200 g bis 400 g Salzgestein in vorher entgastem Wasser aufgelöst und das dabei freigesetzte Gas im vorher evakuierten Kopfraum des Reaktionsgefäßes aufgefangen. Das Verhältnis von Wasser und Salzgestein wurde so gewählt, dass nach dem Auflösen eine nahezu gesättigte Salzlösung vorlag, um eine Rücklösung der Gase in die Salzlösung zu vermindern (GERLING & FABER 2001). Nachdem die Probe komplett aufgelöst war, wurde durch Zufuhr von entgaster Sperrflüssigkeit der Kopfraum komprimiert. Die absolute freigesetzte Gasmenge errechnete sich dann aus dem Volumen des Kopfraumes und dem gemessenen Druck. Anschließend wurde ein Aliquot der Probe auf die molekulare und isotopische Zusammensetzung hin untersucht (Gaschromatographie, Isotopen-Massenspektrometrie).

Alle in diesem Zwischenbericht zitierten Daten aus früheren BGR-Berichten wurden ungeachtet der beschriebenen Probleme bei der Probennahme und -vorbereitung bei der Interpretation der ab März 2011 ermittelten Daten berücksichtigt und in einigen Abbildungen zu Vergleichszwecken mit dargestellt (siehe Abb. 59 und 63 bis 66). Im AP-Abschlussbericht erfolgt eine detaillierte Bewertung des Einflusses der geänderten Probenvorbereitung auf die Analyseergebnisse.

4.1.2 Probennahmen ab März 2011

Ausgehend von der bisherigen Vorgehensweise (siehe Kap. 4.1.1) bestand hinsichtlich der Methodik der Probennahme in Bezug auf die ungestörte Gewinnung bzw. die Verpackung und Konservierung der Proben für die Analysen im Labor Optimierungsbedarf (Einsatz

von verbesserten Probennahmetechniken und Probengefäßen). Dazu mussten vor dem Beginn der Arbeiten die Methoden der Probennahme im Erkundungsbergwerk getestet und optimiert werden. Zudem mussten die Analysenmethoden intern neu validiert werden.

Für die im Rahmen des AP 9GE332300000 durchzuführenden Arbeiten wurden folgende Festlegungen getroffen:

Für die Entnahme von Proben zur Ermittlung des KW-Gehaltes im Gestein werden spezielle Kurzbohrungen erstellt. Diese werden ausgehend von der Ortsbrust 6 m als gekernte Bohrung in das Gebirge hinein ausgeführt, um Proben im letzten Kernmarsch (4,5 – 6 m), d. h. außerhalb des Auflockerungsbereiches der Strecken gewinnen zu können. Dies sollte den ansonsten möglichen Verlust von KW durch Migration im Auflockerungsbereich der vor mehr als 10 Jahren aufgefahrenen Querschläge minimieren. Die Bohrungen werden komplett gekernt, wobei der Vortrieb in dem Bereich 4,5 bis 6 m so schonend gestaltet wird, dass die Temperatur des Kerns nicht über 45 °C steigt und damit nicht wesentlich höher liegt als die vorherrschende In-situ-Gebirgstemperatur. Dies wird direkt nach Gewinnung des letzten Kernmarsches an der Krone des Kerns mittels Kontaktthermometer überprüft. Für das Schmieren der Bohrgestänge unter Tage wird nach Voruntersuchungen der BGR ausschließlich Teflon-Spray eingesetzt, das keine höher siedenden KW enthält.

Die Kerne werden mit einem Kerndurchmesser von 72 mm erbohrt. Geringe Bohrgeschwindigkeiten und Anpressdrücke gewährleisten den Erhalt großer, intakter, nicht fragmentierter Kernstücke und minimieren damit die Wahrscheinlichkeit des Verlustes flüchtiger KW. Der für die KW-Analysen zu beprobende letzte Kernmarsch wird unverzüglich einem Mitarbeiter der BGR übergeben, der für die Beprobung vor Ort zuständig ist. Aus dem Kern werden schonend intakte Scheiben gleicher Dicke gesägt, die unmittelbar in die für die Analysen eingesetzten gasdichten Probengefäße überführt werden. Somit sind Verluste von flüchtigen KW im Verlauf der Probengewinnung und Probennahme und auch die Gefahr der Kontamination minimiert und einheitlich für die gesamte Probenserie. Ein wesentlicher Unterschied der in diesem Bericht dargestellten Ergebnisse und früheren Daten liegt also darin, dass durch das zeitnahe Überführen der Proben in die Untersuchungsbehälter sowohl die mobilen als auch die salzgebundenen Gase weitgehend komplett erfasst werden.

Statistischer Ansatz zur Analyse der Kohlenwasserstoff-Gehalte im Gestein; Festlegung der Probennahmelokationen

Die bis zum Moratorium durchgeführten Untersuchungen hatten nicht zum Ziel, eine statistisch abgesicherte Aussage zu Gesamtgehalten an KW im Gestein zu treffen. Um in diesem Arbeitspaket eine statistisch abgesicherte Aussage zu den KW-Gehalten und deren Verteilung treffen zu können, wurde von der BGR ein festes Raster von Probennahme-Kurzbohrungen im Querschlag 1 West und Querschlag 1 Ost zur Gewinnung der Proben vorgegeben, das - soweit aufgrund bestehender untertägiger Ausbauten möglich - einen Abstand der Bohransatzpunkte von je ca. 10 m vorsieht. Aus jeder dieser Kurzbohrungen werden dann gemäß einem vorgegebenen Raster (s. weiter unten) jeweils 5 Einzelproben aus dem letzten Kernmarsch gewonnen. Zum Zeitpunkt dieser Berichtserstellung stehen aus dem Querschlag 1 West 90 Proben für die statistische Analyse zur Verfügung.

Modifikation der Probengefäße

In früheren Arbeiten wurden verschiedene Probennahmegefäße für Gesteinsproben verwendet, die in einigen Fällen nicht gasdicht waren. Dies führte zu Verlusten an flüchtigen KW und Permanentgasen und evtl. auch zur Änderung der Isotopenverhältnisse der verbliebenen gasförmigen KW. Auch wurden für die Mehrzahl der Gesteinsproben nur gasförmige KW untersucht. Gehaltsangaben in mg/t (oder ppb) wurden ausschließlich für gasförmige KW im Gestein bestimmt. Diese gasförmigen KW wurden in einem in GERLING et al. (2002) beschriebenen Verfahren aus zerbrochenem Gestein in einem Glasgefäß durch Auflösung des Gesteins mit Wasserzugabe unter Rühren freigesetzt.

Für die Arbeiten im Rahmen des AP 9GE332300000 wurden folgende Änderungen eingeführt:

Die Probengefäße wurden so dimensioniert, dass eine große intakte Kernscheibe von ca. 200 g untersucht werden kann. Dies ermöglicht die Detektion von sehr geringen Konzentrationen an KW im Gestein. Daneben wird durch die weitgehend inerten Gefäßmaterialien Glas und deaktivierter Edelstahl die Gefahr von Kontaminationen oder Reaktionen an der Wandung minimiert.

Die Probennahme erfolgte sofort in das gasdichte Gefäß, das direkt an die Analysengeräte zur Bestimmung der gasförmigen und niedrig siedenden KW gekoppelt werden kann. Durch die Vorlage von entgastem Wasser im Gefäß und die sofortige Zugabe eines Helium-Gasraumes wurden Grubenluftanteile weitestgehend aus dem Gefäß verdrängt. Durch die direkte Kopplung an die Analysengeräte Fast-RGA und HS-GC ist eine verlustfreie Messung möglich. Der Aufschluss der Gesteinsproben erfolgt an der BGR auf dem Schütteltisch durch Auflösen des Salzes in der Wasservorlage im verschlossenen Gefäß.

In Abb. 3 sind das Fließschema und eine Methodenübersicht für die durchgeführten Untersuchungen dargestellt.

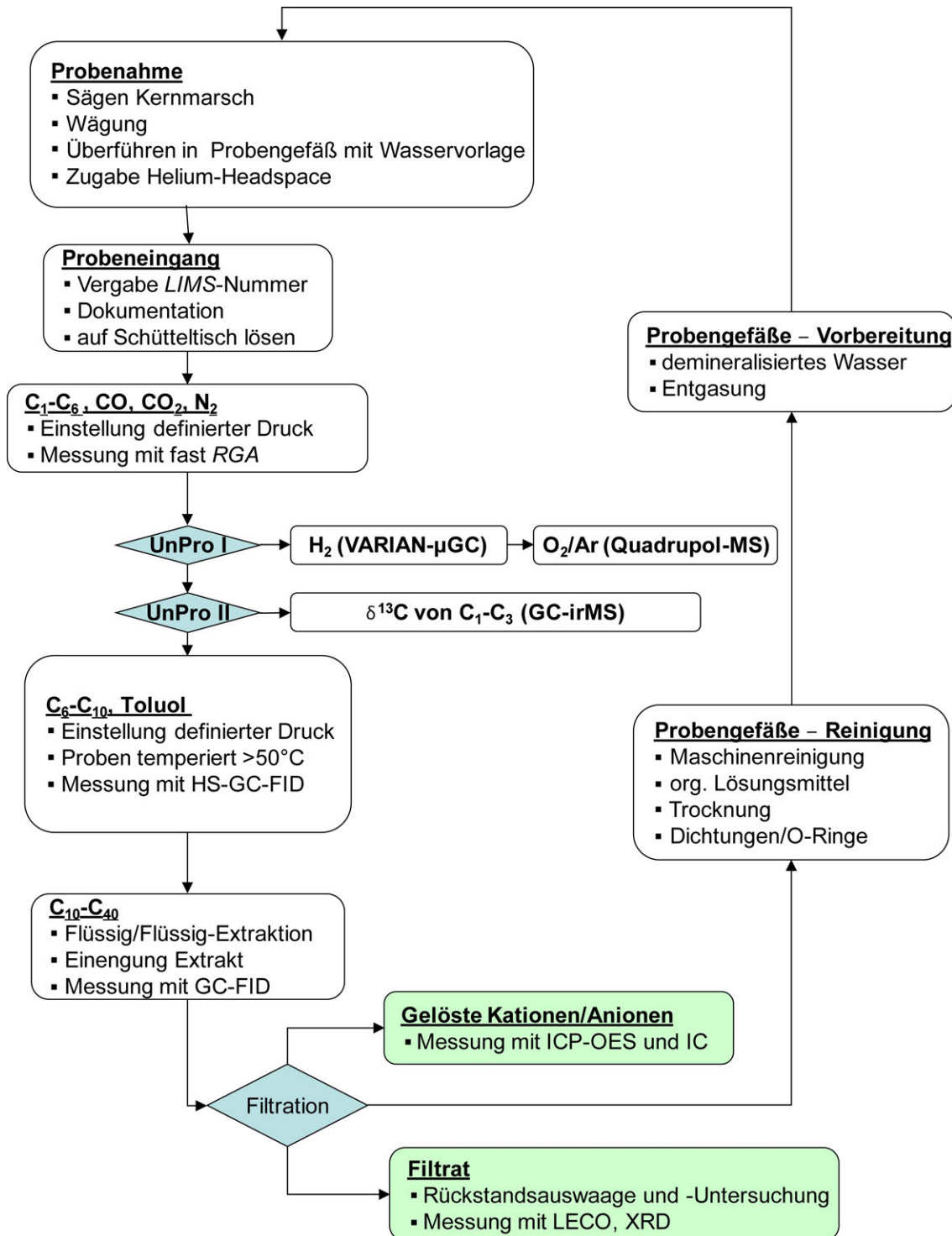


Abb. 3: Fließschema und Methodenübersicht der aktuellen KW-Untersuchungen der BGR.

Vorbereitung der Probengefäße und Beprobung der Kerne

Ein gereinigtes, nummeriertes Probengefäß wird mit 900 ml demineralisiertem Wasser gefüllt und der dazu gehörende Ventildeckel aufgelegt. Nach Überprüfung des korrekten Sitzes der Dichtung wird das Probengefäß mit dem Überwurfdeckel verschlossen. Das Probengefäß und damit das vorgelegte Wasser werden ca. 5 Minuten im Ultraschallbad mit einer an das Mikro-Ventil angeschlossenen Membranpumpe entgast. Anschließend wird der entstandene Unterdruck mit Helium auf einen leichten Überdruck gebracht. Dieser verhindert den Zutritt von Luftkomponenten in das Gefäß bis zur Probenahme.

Während aller Arbeiten am Bohrkern werden Handschuhe getragen, um eine Kontamination der Kerne zu vermeiden. Der 1,5 m lange letzte Kernmarsch wird im ersten Schritt mit einer UV-Lampe von allen Seiten auf eine etwaige Fluoreszenz hin untersucht. Die Position der Abschnitte, die fluoreszieren, wird dokumentiert und die Stärke der Fluoreszenz wird qualitativ mit gering, mittel oder stark beschrieben.

Beginnend bei der Krone werden aus dem Bohrkern fünf Proben mit einer Masse von je 200 g +/- 20 g durch Ansägen mit einer Handsäge markiert. Bei einem Kerndurchmesser von 72 mm entspricht dies einem Kernabschnitt von ca. 23 mm. Die einzelnen Proben beginnen ausgehend von der Krone bei 12 cm, 42 cm, 72 cm, 102 cm und 132 cm. Die Proben werden mit einer Stichsäge aus dem Kern gesägt, deren Sägeblätter zuvor mit Aceton gereinigt wurden. Motordrehzahl und Pendelhub sind so eingestellt, dass sich ein ausreichender Vortrieb bei geringer thermischer Belastung der Probe ergibt. Nachdem die Proben aus dem Kern gesägt sind, werden sie gewogen und die Masse [g] notiert. Diese Proben werden intern mit dem Namen der Bohrung und den Buchstaben A (12 cm) bis E (132 cm) bezeichnet, bevor sie an der BGR eine LIMS-Nummer erhalten.

Für die im AP durchzuführende Aufheizversuche wird aus jeder Kurzbohrung eine Probe mit einer Masse von ca. 1000 g genommen, dies entspricht einem Kernabschnitt von ca. 12 cm. Dieser wird ebenfalls markiert und aus dem Kern gesägt. Diese Probe beginnt typischerweise bei 30 cm ausgehend von der Krone. Sie wird mit dem Namen der Bohrung und dem Kürzel H bezeichnet.

Werden bei der ersten Kernansprache fluoreszierende Bereiche gefunden, wird zusätzlich ein Kernabschnitt von 5 cm Länge aus dem Bereich höchster Fluoreszenz markiert und eine Zusatz-Probe entnommen, welche aber nicht Bestandteil des Statistikproben-Datensatzes ist. Diese Probe wird zweigeteilt: eine der Hälften wird ebenso weiterbehandelt, wie die Proben mit einer Masse von 200 g. Die andere Hälfte steht als Referenzkernhälfte für komplementäre mikroskopische Untersuchungen zur Verfügung. Sofern weitere fluoreszierende Bereiche des Kerns ausgebildet sind, wird ein weiterer Abschnitt von 12 cm Länge aus dem fluoreszierenden Bereich für zukünftige Aufheizversuche entnommen.

Die Probe(n) für die Aufheizversuche mit einer Masse von ca. 1000 g werden in leere Probengefäße ohne Wasservorlage verpackt und dicht verschlossen.

Die in die Wasservorlage überführten Proben mit einer Masse von ca. 200 g dienen zur qualitativen und quantitativen Bestimmung der KW. Sie werden in die Probengefäße gegeben, die mit entgastem und demineralisiertem Wasser befüllt sind und einen Head-space aus Helium besitzen. Bei diesen Gefäßen muss vor dem Öffnen ein Druckausgleich zum Umgebungsdruck erfolgen. Nach der Zugabe der Salzprobe werden die Gefäße mit entgastem und demineralisiertem Wasser aufgefüllt, bis der Meniskus des Wassers konvex über den Glasrand hinausreicht. Der Ventildeckel wird aufgelegt und mit dem Überwurfdeckel verschraubt. Durch den überstehenden Wassermeniskus ist damit eine weitestgehend luftfreie Beprobung möglich. Mit einer Spritze werden anschließend 2 x 100 ml Helium durch die Öffnung des Ventils in das Probengefäß injiziert und dabei ein entsprechendes Volumen des Wassers verdrängt. Hierdurch wird der nötige Gasraum für die beim Auflösen des Salzkernabschnittes freiwerdenden Gase geschaffen.

Im Verlauf der Probennahme werden Teufe [m], die Salzmasse [g], das Volumen des zugegebenen Heliums [ml], die Probengefäß-Nummer und das Datum der Probennahme sowie der Name des Probennehmers dokumentiert.

Reinigung, Kontrolle und Lagerung der verwendeten Glasbehälter

Nachdem die Proben den kompletten Analysenweg durchlaufen haben, werden alle Komponenten der Glasbehälter inklusive Deckel mehrstufig gereinigt und visuell auf Beschädigungen überprüft.

Die Gläser werden maschinell gereinigt, anschließend mit nachdestilliertem Isohexan ausgespült und 2h bei 80 °C im Trockenschrank ausgeheizt. Metallteile werden in einem ersten Schritt gespült und im Trockenschrank getrocknet. Die zuvor abgeschraubten Mikro-Ventile werden zerlegt, alle Dichtringe werden verworfen und durch neue ersetzt, um eine Kontamination mit Isohexan bei wiederholter Verwendung auszuschließen. Metallische Bestandteile der Ventile werden zuerst 5 min in einem Ultraschallbad gereinigt und 2h bei 80 °C getrocknet. Dieser Reinigungsschritt wird mit Isohexan anstelle von Wasser wiederholt, um hydrophobe Verunreinigungen zu entfernen. Alle so gereinigten und getrockneten Teile werden mit den neuen Dichtringen zusammengesetzt und das komplett zusammengesetzte Glas mit Deckel bei 200 mbar Helium-Überdruck auf Dichtigkeit getestet. Anschließend werden die Glasbehälter bis zum Einsatz geschlossen gelagert.

4.2 Bestimmung der Zusammensetzung und Gehalte der Kohlenwasserstoffe

Es werden durch drei überlappend aufgestellte Analysenverfahren die im löslichen Gestein enthaltenen gasförmigen (Fast-RGA), niedrig siedenden (HS-GC) und höher siedenden KW (GC-MKW) an einer Probe bestimmt. So kann in guter Annäherung der Gesamt-KW-Gehalt ermittelt werden. Daneben werden in Fortsetzung der früheren Arbeiten der BGR bei ausreichender Menge die Isotopenzusammensetzungen ausgewählter gasförmiger KW bestimmt.

4.2.1 Analyse der flüchtigen Kohlenwasserstoffe Methan bis Hexan sowie ausgewählter Permanentgase

Die qualitative und quantitative Bestimmung der gasförmigen KW (C_1 - C_6) und Permanentgase (CO_2 , N_2 , O_2/Ar , CO und molekularer Wasserstoff) erfolgt mittels zweier gaschromatographischer Analysengeräte und eines Quadrupol-Massenspektrometers.

Fast-RGA

Die Proben werden zuerst an einem GC HP 7890 mit geheiztem Ventilsystem und Säulenschaltung gemessen. Hierbei handelt es sich um einen modifizierten FAST-RGA („fast refinery gas analyzer“) nach ASTM D1945 (Standard Test Method for Analysis of Natural Gas by Gas Chromatography) & D1946 (Standard Practice for Analysis of Reformed Gas by Gas Chromatography). Die Probenaufgabe erfolgt generell über eine vorgeschaltete Gasaufgabe-Einheit (*gas injection control unit*). Über mehrere Ventile und eine Membranpumpe wird das System evakuiert (< 6 mbar). Nach Anschließen des Entech-Probenbehälters werden die Probenschleifen (s. u.) mit einem definierten Druck gefüllt. Das Totvolumen der Gasaufgabeeinheit einschließlich aller Probenschleifen beträgt 6,8 ml. Die Einzelkomponenten werden parallel auf drei Kanälen quantifiziert.

Auf dem ersten Kanal werden die KW Methan bis Hexan bestimmt. Die Probenaufgabe erfolgt über eine 1ml-Probenschleife mit nachgeschaltetem Split/Splitless-Injektor (Split 1:1 oder 1:30, abhängig vom Gehalt an KW). Die Vortrennung der Komponenten erfolgt auf einer unpolaren Polysiloxan-Polymer-Säule (HP1, 4 m). Die Trennung der Komponenten C_1 - C_6 erfolgt auf der nachgeschalteten 50 m Al_2O_3 -Säule (HP Plot), höher molekulare Komponenten werden zurückgespült. Beide Säulen werden mit einem Ofenprogramm betrieben (50 °C für 3 min, mit 20 °C/min bis 180 °C, Halten für 5 min). Alle Komponenten werden an einem Flammenionisationsdetektor (FID) erfasst, Trägergas ist Helium.

Auf dem zweiten Kanal werden die Permanentgase außer Helium und Wasserstoff gemessen. Die Probenaufgabe erfolgt mittels einer 250µl-Probenschleife mit nachgeschaltetem Splitless-Injektor. Über eine Säulenschaltung mit zwei gepackten Plot Q-Säulen

(1 m und 2 m) und einer 1 m Molsiebsäule (MS5A) werden die Komponenten CO_2 , N_2 , CH_4 , CO und der Summenpeak O_2/Ar chromatographisch isotherm bei 70 °C getrennt. CO eluiert als letzte Komponente nach 4,5 min, Trägergas ist Helium. Die Komponenten werden an einem Wärmeleitfähigkeitsdetektor erfasst.

Auf dem dritten Kanal können Wasserstoff und Helium bestimmt werden. Zur Erhöhung der Empfindlichkeit wird Argon als Trägergas verwendet. Die Probenschleife hat ein Volumen von 125 μl . Auf zwei Säulen 2 m Plot Q (2 m) und einer 1 m Molsieb 5A werden Helium und Wasserstoff bei einer isothermen Temperatur von 70 °C getrennt und nachfolgend an einem Wärmeleitfähigkeitsdetektor erfasst.

Für die hier beschriebene GC-Analytik ist das Verfahren zur Bestimmung von Nachweis- und Bestimmungsgrenzen der einzelnen Komponenten auf der Basis von gemessenen Blindwerten nicht möglich, da ein Teil der Verbindungen in Blindproben nicht nachweisbar war. Eine Festlegung der entsprechenden Kennwerte erfolgt bis zum AP-Abschlussbericht über andere Methoden.

Wasserstoff-Bestimmung

Da die Matrix des Gasvolumens im Probenbehälter aus dem bei der Beprobung vorgelegten Helium besteht, ist die Bestimmung von Wasserstoff in Spuren aufgrund der nahe zusammenliegenden Retentionszeiten nicht ohne weiteres möglich. Daher wird die Menge an Wasserstoff an einem zweiten Gaschromatographen (Varian GC 3800) bestimmt. Von dem entnommenen Aliquot des Headspace-Gases werden 0,2 ml mit einer gasdichten Spritze injiziert. Die Auftrennung des Gasgemisches erfolgt über eine Hayesep T (0,5 m), eine Hayesep Q (0,5 m) und eine Molsiebsäule 13x (1,5 m). Das Temperaturprogramm für die Permanentgase startet mit einer isothermen Phase von 10 min bei 50 °C , es folgt ein Aufheischritt von $10\text{ °C}/\text{min}$ auf 180 °C , diese Temperatur wird 10 min gehalten. Wasserstoff wird an einem Wärmeleitfähigkeitsdetektor erfasst.

Beide gaschromatographischen Analysengeräte werden mit kommerziellen Gasstandards kalibriert, deren Zusammensetzungen durch Analysenzertifikate der Hersteller belegt sind.

Sauerstoff/Argon-Bestimmung

Am Fast-RGA tritt Argon als Koelution von Sauerstoff auf, da diese beiden Gase in der vorliegenden Säulenkombination nicht getrennt werden können. Das Verhältnis von Sauerstoff und Argon in den Proben wird daher mit einem Quadrupol-Massenspektrometer (Balzers Omnistar GSD 3000) bestimmt. Vor Beginn der Messungen werden die Geräteeinstellungen für die Massen von Argon, Sauerstoff, Stickstoff und Kohlendioxid mit Luftproben kalibriert. Für die Analyse der Gasproben werden insgesamt 80 fortlaufende Zyklen von jeweils 1 Sekunde Messzeit generiert. Für die ersten 30 Zyklen wird die

Umgebungsluft durch die Probennahmesonde eingelassen und dann das Probengas gemessen. Die Messungen werden im SIM-Modus durchgeführt. Die Verweilzeit beträgt 0,2 sec/Masse bei einer Spannung von 1300 Volt am Sekundärelektronenvervielfacher (SEV).

Aus der Luftmessung werden der Mittelwert und die Standardabweichung des Sauerstoff/Argon-Verhältnisses gebildet. Über das echte Verhältnis von Sauerstoff/Argon in der Luft (22,5225806), dividiert durch den berechneten Mittelwert, wird der Faktor für die Korrektur der Probenmessung ermittelt. Der Mittelwert für das Probengas wird berechnet und mit dem Korrekturfaktor multipliziert. Über dieses Verhältnis werden anschließend aus dem Sauerstoff/Argon-Peak der Messung am Fast-RGA die Volumenprozent der beiden Einzelkomponenten berechnet.

Berechnung der Gehalte der Kohlenwasserstoffe Methan bis Hexan im Gestein

In früheren BGR-Studien zu den KW im Salzstock Gorleben wurden i.d.R. nur die KW-Gehalte (Gesamt- oder Einzelkomponenten) auf Basis der Headspace-Konzentrationen sowie des Volumens und des Druckes berechnet. In der wässrigen Phase gelöste Gase wurden nicht berücksichtigt. Im Rahmen dieses AP werden zusätzlich die im Wasser gelösten Gasmengen berechnet, um die Gesamtkonzentrationen (pro Masse Gestein) genauer bestimmen zu können.

Die Löslichkeiten von Gasen in Fluiden lassen sich durch verschiedene Parameter beschreiben. Der sogenannte Oswald-Koeffizient ist definiert als das Verhältnis aus dem Volumen des gelösten Gases bezogen auf das Volumen des reinen Lösungsmittels bei den entsprechenden Druck-Temperatur-Bedingungen. Der Bunsen-Koeffizient ist identisch definiert, jedoch wird die Angabe des Gasvolumens auf Normalbedingungen bezogen ($T = 273,15 \text{ K}$, $P = 0,101325 \text{ MPa}$). Häufig wird in der Praxis der technische Lösungskoeffizient angegeben, welcher das Volumen des gelösten Gases im Normalzustand pro Masse Lösungsmittel und Partialdruck beschreibt (SCHÖN 2005).

Um die Löslichkeit von Gasen in Fluiden zu berechnen, wird i. d. R. das Gesetz von Henry angewendet:

$$k_{H,norm} \stackrel{def}{=} \frac{c_a}{p_g} \quad (1)$$

mit c_a = Konzentration des Gases in der fluiden Phase und p_g = Partialdruck des Gases. Der Index *norm* besagt, dass sich die Henry-Konstante auf die Bedingung $T = 293,15 \text{ K}$ bezieht. Diese Beziehung gilt jedoch nur, solange die Gasphase als ideal angesehen werden kann (Partialdruck $< 1 \text{ bar}$) und bei nicht zu großen Gaslöslichkeiten.

Die Löslichkeit von Gasen in (hoch-)salinaren Lösungen wird jedoch durch die hydratisierten Ionen deutlich herabgesetzt. Dies wird in der Literatur als Aussalzungseffekt beschrieben. Nur für einige der untersuchten Komponenten (C_1 - C_6) stehen entsprechende, experimentell ermittelte Löslichkeiten zur Verfügung. Die meisten Daten sind nicht für die vorliegenden Randbedingungen (~Raumtemperatur, nahezu gesättigte NaCl-Lösung, niedrige Partialdrücke) anwendbar, da sie i. d. R. für geogene Systeme bestimmt wurden (hohe Druck-Temperatur-Bedingungen).

Für die Berechnung der im Salzwasser gelösten Gase wird daher für die vorliegende Interpretation ein anderer Ansatz gewählt. Nach der sogenannten Sechenov-Beziehung ist der Logarithmus der Löslichkeit eine lineare Funktion der Salzkonzentration (bei konstanter Temperatur).

$$\log \frac{S_{kh,salz}}{S_{kh,0}} = -K_{set} \cdot C_{salz} \quad (2)$$

Dabei sind K_{set} die Sechenov-Konstante [$l \cdot mol^{-1}$] und C_{salz} die Salzkonzentration der Lösung [$mol \cdot l^{-1}$], $S_{kh,0}$ die Henry-Konstante in Wasser [$mol \cdot m^{-3} \cdot Pa^{-1}$] und $S_{kh,salz}$ die Henry-Konstante in der entsprechenden salinaren Lösung [$mol \cdot m^{-3} \cdot Pa^{-1}$]. Für die Komponenten Methan, Ethan, Ethen und Propan stehen experimentell ermittelte Sechenov-Konstanten aus der Literatur zur Verfügung (vergl. Tab. 3). NI & YALKOWSKI (2003) zeigten, dass ein linearer Zusammenhang zwischen der Sechenov-Konstanten und dem Oktanol-Wasser-Partitionskoeffizienten (K_{ow}) besteht. Für die weiteren gasförmigen KW (Propen, i-/n-Butan, i-/n-Pentan und i-/n-Hexan) wurden die entsprechenden Konstanten daher nach der folgenden Beziehung berechnet:

$$K_{set_i} = 0,040 \cdot \log K_{ow} + 0,114 \quad (3)$$

Tab. 3: Henry-Koeffizienten und Sechenov-Konstanten der untersuchten KW C₁-C₆.
 log K_{ow} berechnet mit KOWWIN v1.68 (US EPA 2011)

	S _{khi,0} [mol m ³ Pa ⁻¹]	Sechenov-Konstante [l mol ⁻¹]	Quelle	log K _{ow}
CH ₄	1,28E-05	0,1270	MASTERTON & LEE (1970)	-
C ₂ H ₆	1,97E-05	0,1620	MASTERTON & LEE (1970)	-
C ₂ H ₄	4,84E-05	0,1270	MASTERTON & LEE (1970)	-
C ₃ H ₈	1,38E-05	0,1940	MORRISON & BILLET (1952)	-
C ₃ H ₆	4,74E-05	0,1848	berechnet aus Log K _{ow}	1,770
i-C ₄ H ₁₀	1,09E-05	0,2013	berechnet aus Log K _{ow}	2,232
n-C ₄ H ₁₀	7,20E-06	0,2062	berechnet aus Log K _{ow}	2,306
i-C ₅ H ₁₂	7,99E-06	0,222	berechnet aus Log K _{ow}	2,723
n-C ₅ H ₁₂	7,60E-06	0,226	berechnet aus Log K _{ow}	2,797
i-C ₆ H ₁₄	5,72E-06	0,242	berechnet aus Log K _{ow}	3,214
n-C ₆ H ₁₄	7,60E-06	0,244	berechnet aus Log K _{ow}	3,288

Der Partitionskoeffizient Oktanol-Wasser der Komponenten Propen, iso- bzw. n-Butan, iso- bzw. n-Pentan sowie iso- und n-Hexan wurde mit der Software KOWWIN (Version v1.68) berechnet. Der Algorithmus basiert auf der Berechnungsmethode nach MEYLAN & HOWARD (1995). Die Berechnung der Absolutgehalte (Yield_{gas,i}) erfolgt dann nach der im Folgenden beschriebenen Methodik. Die gemessenen prozentualen Gasgehalte der Einzelkomponenten im Gasvolumen des Entech-Containers (Messung am FAST-RGA) sowie der Wasserstoffmessung am Varian-Gaschromatographen werden aufsummiert und auf 100% normiert (C_{gas,i} [%]). Der tatsächliche Druck P_{HS} im Entech-Container wird nach folgender Formel berechnet:

$$P_{HS} [Pa] = 100 \cdot \frac{P_{GICU} [mbar] \cdot (V_{HS} + V_{tot})}{V_{HS}} \quad (4)$$

Hierbei ist P_{GICU} der gemessene Einlass-Druck in die Probenschleifen, V_{HS} das gemessene Volumen des Headspaces (~ 200 ml) und V_{tot} das Totvolumen der Gas Injection Control Unit und der Probenschleifen (6,8 ml). Der Partialdruck der einzelnen Komponenten P_{gas,i} berechnet sich dann nach:

$$P_{gas,i} [Pa] = P_{HS} \cdot C_{gas,i} / 100 \quad (5)$$

Die Berechnung der Salzkonzentration der Lösung C_{salz} erfolgt unter der Annahme, dass es sich bei der Einwaage um 100% Steinsalz (Molgewicht 58,44 g mol^{-1}) handelt und unter Vernachlässigung eventueller Lösungsrückstände nach:

$$C_{\text{salz}} \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}} \right] = \frac{(\text{Einwaage}) \left[\frac{\text{g}}{\text{ml}} \right] \cdot 10^3 \cdot \frac{1 \left[\frac{\text{mol}}{\text{g}} \right]}{58.44 \left[\frac{\text{g}}{\text{mol}} \right]}}{V_{\text{Lösung}} \left[\text{ml} \right]} \quad (6)$$

Mit der Sechenov-Konstanten $K_{\text{seti}} \left[\text{l mol}^{-1} \right]$ und der Henry-Konstanten in reinem Wasser $S_{\text{khi},0} \left[\text{mol m}^{-3} \text{Pa}^{-1} \right]$ für die Gasspezies i wird die Henry-Konstante $S_{\text{khi,salz}}$ in der entsprechenden salinaren Lösung $\left[\text{mol m}^{-3} \text{Pa}^{-1} \right]$ berechnet:

$$S_{\text{khi,salz}} \left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \cdot \text{Pa}} \right] = 10^{-K_{\text{seti}} \left[\frac{\text{l}}{\text{mol}} \right] \cdot C_{\text{salz}} \left[\frac{\text{mol}}{\text{l}} \right]} \cdot S_{\text{khi},0} \quad (7)$$

Die Berechnung der Löslichkeit der betrachteten Gaskomponenten $\left[\text{mol m}^{-3} \right]$ und des gelösten Gases in der salinaren Lösung $\left[\text{mol} \right]$ erfolgt dann nach:

$$\text{Löslichkeit}_i \left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right] = S_{\text{khi,salz}} \cdot P_{\text{gas},i} \quad (8)$$

und

$$\text{Gas}_{i,\text{Lösung}} \left[\text{mol} \right] = \frac{\text{Löslichkeit}_i \cdot V_{\text{Lösung}} \left[\text{ml} \right]}{10^6} \quad (9)$$

Die entsprechende Berechnung der Gasmengen im Headspace-Volumen der Entech-Container ($\text{Gas}_{i,\text{HS}}$) erfolgt auf der Basis des idealen Gasgesetzes (Gaskonstante $R = 8,314472 \text{ J/K/mol}$, Temperatur = 298,15K) nach:

$$\text{Gas}_{i,\text{HS}} \left[\text{mol} \right] = \frac{P_{\text{gas},i} \cdot V_{\text{HS}} \left[\text{ml} \right]}{R \cdot T \cdot 10^6} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}^2} \cdot \text{m}^3 \cdot \frac{\text{s}^2 \cdot \text{K} \cdot \text{mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{kg}} \cdot \frac{1}{\text{K}} \right] \quad (10)$$

Die Berechnung der Gas-Gehalte bezogen auf die Masse Salz (Angabe in mg/kg) erfolgt dann unter der Verwendung der entsprechenden Molgewichte MG_i nach:

$$\text{Yield}_{\text{gas},i} \left[\frac{\text{mg}}{\text{kg}} \right] = \frac{\text{Gas}_{i,\text{Lösung}} + \text{Gas}_{i,\text{HS}} \left[\frac{\text{mol}}{\text{g}} \right]}{\text{Einwaage}} \cdot MG_i \left[\frac{\text{g}}{\text{mol}} \right] \cdot 10^6 \quad (11)$$

4.2.2 Kohlenstoff-Isotopenmessungen an Methan, Ethan und Propan

Die Isotopen-Analyse erfolgt an einem Thermofischer MAT253 Isotopen-Massenspektrometer, gekoppelt mit einem AGILENT-GC 6890 (GC-irMS mit Direkteinlass-System). Die Probe wird entweder über einen Split/Splitless-Injektor direkt auf die Säule oder durch eine Probenschleife zugegeben. Die Trennung der Komponenten Methan, Ethan und Propan sowie CO₂ erfolgt auf einer Poraplot Q-Säule (ID 0,32 mm, Länge 25 m). Zur besseren Trennung von N₂ und Methan auf der Säule kann diese initial mit einer Kryokühlung auf -20 °C temperiert und erst anschließend mit 8 °C/min auf 180 °C aufgeheizt werden. Die KW werden nach der chromatographischen Trennung mit Trägergas Helium in einem Oxidationsofen bei 960 °C quantitativ zu CO₂ umgewandelt. Höher molekulare KW werden zurückgespült, um eine Überlastung des Ofens zu vermeiden. Das sequentiell eluierende CO₂ der einzelnen Verbindungen wird über ein Split-System (GC Combustion-Interface) der Ionenquelle zugeführt.

Aus der beheizten Kathode werden Elektronen freigesetzt, die durch eine zwischen Anode und Filament angelegte Spannung beschleunigt werden. Die in die Ionenquelle eintretenden elektrisch neutralen Gasteilchen werden durch einen Elektronenstoß ionisiert. Die Menge der dabei entstehenden elektrisch geladenen Ionen des Kohlendioxids wird in einem starken Magnetfeld entsprechend ihrem Masse/Ladungsverhältnisses (44, 45, 46) aufgetrennt und an drei unterschiedlichen Detektoren erfasst. Der Isotopenwert wird aus den Masseverhältnissen errechnet und in der Standard-Notation in Promil [‰] gegen den internationalen Standard PDB (Pee Dee Belemnite) angegeben.

Die Messgenauigkeit der Isotopenanalyse ist abhängig von der Gaskonzentration in der injizierten Probe und der Komponente (Ethan und Propan erzeugen bei der Verbrennung die 2- bzw. 3-fache Menge an CO₂). Für eine Methankonzentration im Gas von 10-100ppm beträgt der Messfehler ±0,5‰, bei Konzentrationen > 1000 ppm ±0,1‰. Bei den untersuchten salzgebundenen Gasen entspricht eine Konzentration von 50 ppm Methan im Gasvolumen etwa einer Menge von $4,2 \cdot 10^{-2} \text{ mg}_{\text{CH}_4} / \text{kg}_{\text{Salz}}$, eine Propan-Konzentration von 10 ppm etwa einer Menge von $1,2 \cdot 10^{-2} \text{ mg}_{\text{C}_3\text{H}_8} / \text{kg}_{\text{Salz}}$.

4.2.3 Analyse der niedrig siedenden Kohlenwasserstoffe von Heptan bis Decan

Die betrachteten KW im Bereich n-Heptan bis n-Decan besitzen einen hinreichend hohen Dampfdruck, um diese in der Gasphase zu analysieren. Dies ermöglicht die Anwendung der sog. „Headspace“-Technik, bei welcher direkt ein Gasraum über einer flüssigen Phase beprobt wird. Der Headspace-Autosampler (Autosampling Headspace Inlet 7500 A, Fa. ENTECH®) entnimmt 20 ml direkt aus den 1000 ml-Probengefäßen, die Gefäße können optional vor einer Messung einzeln beheizt werden (hier: 60 min mit einer Zieltemperatur von 90 °C). Da beim Aufheizen der Probengefäße im Ofen des

Autosamplers Undichtigkeiten festgestellt wurden, erfolgte eine Reihe von Modifikationen der Gläser und Deckel.

Vor der chromatographischen Trennung erfolgt eine Aufkonzentration der Analyte auf Adsorbentien (Falle 1: Glasperlen und Falle 2: Tenax® poly(2,6-Diphenyl-1,4-Phenylene Oxide)). Für die Adsorption werden die Fallen mit flüssigem Stickstoff auf Temperaturen von bis zu – 170 °C gekühlt und zur Desorption der Analyten mit bis zu 180 °C wieder ausgeheizt. Diese Aufkonzentration erfolgt im „Preconcentrator 7100 A“ (Fa. ENTECH®). Die Probenauftrennung und Detektion erfolgt mittels Agilent 7890-Gaschromatograph mit Flammenionisationsdetektor. Weiter erfolgte die Quantifizierung über eine Mehrpunkt-kalibration, bei welcher vier Standards auf einer angefertigten Salzlauge verwendet werden.

Der Injektor des Gaschromatographen wird konstant bei 250 °C und einem Splitverhältnis von 10:1 betrieben. Während der Injektionszeit von 2 Minuten wird der Helium-Trägergasstrom auf 0,5 ml/min gehalten und anschließend für die chromatographische Trennung während der Messung auf 3 ml/min erhöht. Die Trennung der Analyten findet auf einer 60 m langen DB-1-Säule (60 m x 0,32 mm x 1 µm) der Firma J&W Agilent statt. Die Anfangstemperatur des Ofenprogramms beträgt 40 °C, welche 2 Minuten gehalten wird. Mit einer Rate von 15 °C/min wird bis zur Endtemperatur von 320 °C aufgeheizt, welche ebenfalls für 2 Minuten gehalten wird. Zur Detektion der so getrennten Verbindungen wird der Flammenionisationsdetektor auf 325 °C mit einem Wasserstoff-Fluss von 35 ml/min und einem Luft-Fluss von 350 ml/min betrieben.

Unter diesen Bedingungen wurden mittels eines Standards Wiederholungsmessungen durchgeführt (n=4). Der Standard enthielt aliphatische und aromatische Komponenten (unter anderem: n-Hexan, 2,4-Dimethylpentan, n-Heptan, Toluol, n-Octan, p-Xylol, Propyl-Benzol und n-Decan). Die daraus resultierenden relativen prozentualen Standardabweichungen vom Mittelwert als Wiederholpräzision betragen für die unterschiedlichen KW-Komponenten zwischen 17% und 33%. Eine Abschätzung der Nachweis- und Bestimmungsgrenzen erfolgte auf der Grundlage der Streuung von Analytgehalten in Blindwertmessungen. Diese Blindwertmessungen wurden verteilt über den Messzeitraum der Proben bestimmt. Nach einem Ausreißertest (Grubbs) wurden für die unterschiedlichen betrachteten Analyten Nachweisgrenzen zwischen 0,1 und 1,1 µg/kg Salzgestein sowie Bestimmungsgrenzen zwischen 0,2 und 4,0 µg/kg Salzgestein ermittelt.

4.2.4 Analyse der höher siedenden Kohlenwasserstoffe zwischen Decan (C_{10}) und Tetracontan (C_{40})

Der Gehalt an höhersiedenden KW im aufgelösten Gestein wird durch Flüssig-Flüssig-extraktion mit Lösemittel bestimmt. Dazu wird dem Probengefäß mit der in Wasser aufgelösten Gesteinsprobe über das Ventil 75 ml Isohexan (mit 2 mg/l Tetracontan) zugegeben und dieses für 60 min liegend bei 120 Umdrehungen je Minute geschüttelt. Ein Aliquot von 50 ml des Isohexan-Extrakts wird nach Öffnen des Gefäßes abgenommen, über eine mit Natriumsulfat gepackte Chromatographiesäule zur Entfernung von Wasserresten gespült und anschließend schonend im Turbovap1 auf ca. 1 ml Restvolumen eingeengt. Nach Überführen in einen 2 ml Messkolben wird das Endvolumen durch Zugabe von Isohexan auf exakt 2 ml eingestellt und ein Aliquot für die nachfolgende gaschromatographische Untersuchung entnommen.

Diese Analyse erfolgt an einem Gaschromatographen mit Flammenionisationsdetektor in Anlehnung an die für Mineralöl-KW in Wässern (DIN / EN ISO 9377-2) entwickelte Methode. Diese erfasst KW zwischen Decan und Tetracontan als Summenparameter über Integration des gesamten Detektorsignals nach Untergrundkorrektur zwischen diesen beiden Verbindungen. Die Injektion von 2 µl des Extraktes erfolgt durch einen Agilent 7693-Autosampler an einem Agilent 6890-Gaschromatographen splitlos in einen anfänglich kühlen PTV-Injektor (56 °C), der nach 0,3 min mit 720 °C/min auf 320 °C aufgeheizt wird. Diese Temperatur wird für 3 min gehalten. Der Ofenraum wird von für die ersten 2 min gehaltenen 40 °C mit 35 °C/min auf 315 °C aufgeheizt, nach zwei Minuten bei dieser Temperatur mit 35 °C/min auf die Endtemperatur von 330 °C gebracht, die für 3 min gehalten wird. Der Detektor wird kontinuierlich bei 325 °C betrieben. Als Chromatographiesäule wird eine 30 m DB-1 mit einem Innendurchmesser von 0,25 mm und einer Schichtdicke von 0,25 µm eingesetzt, der Trägergasstrom von Wasserstoff ist konstant mit 3 ml/min.

Die Kalibration erfolgt mit Standardgemischen höher siedender KW (zertifiziertes Diesel-/Mineralölgemisch BAM CRM 5004). Die mit dieser Methode erreichte Bestimmungsgrenze für die höher siedenden KW liegt bei 0,8 mg/kg Gestein. Die Reproduzierbarkeit bzw. Wiederholpräzision der ermittelten Gehalte ist besser als 10 %.

4.2.5 Ableitung der Gesamtgehalte an Kohlenwasserstoffen im Gestein

Da keine einzelne Methode existiert, den Gesamt-KW-Gehalt der Gesteinsproben zu ermitteln, wird im Folgenden die Summe der bestimmten, in Tab. 4 aufgeführten einzelnen KW plus dem Summenwert der KW zwischen Decan und Tetracontan als Gesamt-KW-Gehalt bezeichnet. Dabei werden die Gehalte an KW bis Hexan aus den Ergebnissen der Messungen am Fast-RGA (vgl. Kap. 4.2.1), die der KW von Heptan bis Decan aus den Ergebnissen der Messungen am HS-GC-FID (vgl. Kap. 4.2.3) und die der KW zwischen Decan und Tetracontan aus den Ergebnissen der GC-FID-Analysen (vgl. Kap. 4.2.4) übernommen.

Tab. 4: Auflistung der in die Summe KW C₁-C₄₀ eingehenden Verbindungen bzw. Elutionsbereiche

Verbindung	Methode	Verbindung	Methode
Methan	Fast-RGA	Heptan	HS-GC-FID
Ethan	Fast-RGA	Octan	HS-GC-FID
Propan	Fast-RGA	Toluol	HS-GC-FID
Iso-Butan	Fast-RGA	Nonan	HS-GC-FID
Butan	Fast-RGA	Decan	HS-GC-FID
Iso-Pentan	Fast-RGA		
Pentan	Fast-RGA	Summe zwischen Decan und Tetracontan	GC-FID
Iso-Hexan	Fast-RGA		
Hexan	Fast-RGA		

Diese Summe stellt aus verschiedenen Gründen eine Unterschätzung dar. Einige niedrig siedende KW-Isomere sind nicht berücksichtigt, treten allerdings gegenüber den quantifizierten Verbindungen stark zurück (d. h. bei linearer Ansprechempfindlichkeit werden nur sehr kleine Peakhöhen beobachtet). Es ist nicht auszuschließen, dass auch hoch siedende Verbindungen größer Nonatriacontan vorhanden sind – in Chromatogrammen der sehr KW-reichen Proben deutet sich dies an. Doch sind diese Verbindungen wiederum in ihrer Menge gegenüber den quantifizierten Verbindungen zu vernachlässigen.

5 Makroskopisch sichtbare Verteilung der Kohlenwasserstoffe in den Bohrkernen

5.1 Darstellung der Untersuchungsbefunde

Für die Untersuchung der KW-Verteilung im Salzstock Gorleben wurden im Jahr 2011 im Knäuel- bzw. Streifensalz (z2HS1 und z2HS2) im Querschlag 1 W 25 Kurzbohrungen und 10 Packerbohrungen von jeweils 6 m Länge schräg zum Streichen der Schichten gestoßen. Im Zuge der Bohrungsbearbeitung wurden für die Kurzbohrungen RB643 bis RB662 und RB778 bis RB782, sowie für die Packerbohrungen RB683 bis RB692 und für den gekernten Standrohrbereich aus der Vorbohrung RB642 im Bohrort 1.2, UV-Profile der Bohrkern unter UV-Licht bei 254 nm bzw. bei Kunst-/Tageslicht erstellt (Anhang 1.1 bis 1.25 sowie 2.1 bis 2.10).

Die Kerne der Erkundungsbohrungen RB132 (820 m-Sohle) und RB639 (Bohrort 1.2, 840 m-Sohle) wurden ebenfalls unter UV-Licht betrachtet und die UV-aktiven Bereiche dokumentiert. Beide Bohrungen schließen über weite Abschnitte das Staßfurt-Hauptsalz auf, zeigen allerdings nur wenige fluoreszierende Kernbereiche. Freie Gaszutritte wurden aus dem Bereich des Hauptsalzes nicht festgestellt. Ein vollständiges UV-Profil dieser beiden Bohrungen konnte bislang nicht erstellt werden, da einzelne Bohrabschnitte zwecks weiterer Bearbeitung noch eingeschweißt sind.

Für die Erstellung der UV-Profile (Anhang 1.1 bis 1.25, Anhang 2.1 bis 2.10) erfolgte eine optische Einteilung der Bohrkern in sieben Klassen. Bei den 5 ausgehaltenen UV-Klassen handelt es sich um eine vereinfachte, von dem makroskopisch sichtbaren Befund ausgehende Klassifizierung der KW-Vorkommen in den Bohrkernen. Diese Charakterisierung der Gesteine ist keinesfalls als flächenhaft durchgängige Verbreitung von KW zu interpretieren, sondern weist nur UV-aktive Bereiche in einer Bohrung aus – unabhängig von deren struktureller Ausprägung und räumlicher Verbreitung (siehe auch Abb. 17). Als Klassen wurden definiert:

▪ **„optisch unauffällig“**

keine optisch auffälligen Bereiche an den Bohrkernen und keine UV-Aktivität (Fluoreszenz) bei 254 nm bzw. 352/368 nm festzustellen (Abb. 4).



Abb. 4: Als „optisch unauffällig“ eingestufte Probenkörper RB653-008 (Teufe 5,70 m bis 5,86 m) im Kunstlicht (links) und unter UV-Licht ohne sichtbare Fluoreszenz (rechts).

▪ **„optisch auffällig“**

unter Tageslicht auffällige Bereiche an den Bohrkernen. Hierzu zählen sichtbare Kondensataustritte an der Kernmantelfläche, poröse Bereiche mit Poren bis zu einer maximalen Größe von 1 cm x 3,5 cm (siehe Abb. 5, Porengröße bis 2 cm), sowie eine gelbliche Verfärbung des Bohrkerns (Abb. 6) oder der darin befindlichen Anhydritknäule bzw. Porenwände.



Abb. 5: Als „optisch auffällig“ eingestufte Probenkörper RB648-022 (Teufe 3,00 m bis 3,33 m) im Kunstlicht. Im Liegenden der Probe (rechts) ist eine ca. 1 cm x 2 cm x 1 cm große und mit gelblichem Salzstaub belegte Pore zu erkennen.

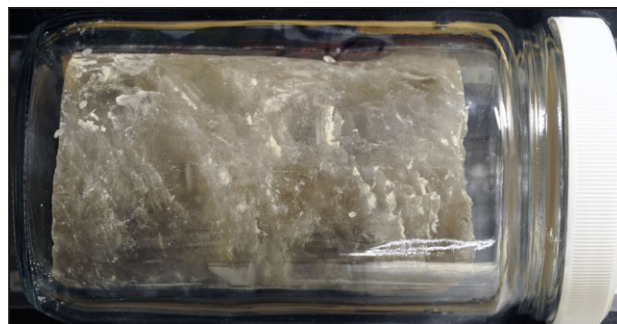


Abb. 6: Als „optisch auffällig“ eingestufte Probenkörper RB650-019 (Teufe 0,36 m bis 0,48 m) im Kunstlicht. Das Kernsegment zeigt eine auffällig gelbliche Eigenfarbe. Da es sich um eine Probe für Aufheizversuche handelt, musste die Probe im verschlossenen Probengefäß dokumentiert werden.

▪ **„KW-führender Bereich schwach UV-aktiv“**

Bereiche mit schwacher bis schwach glimmender, fahl bläulich-weißer Fluoreszenz bei 254 nm (Abb. 7).

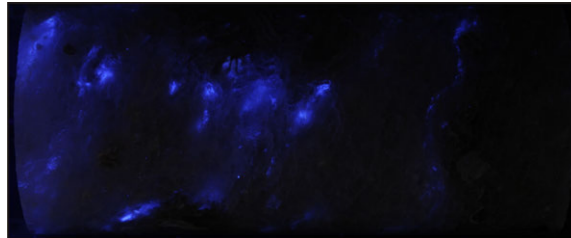


Abb. 7: Als „schwach UV-aktiv“ eingestufte Probenkörper RB654-013 (Teufe 0,68 m bis 0,84 m) unter UV-Licht (254 nm). Der als „schwach UV-aktiv“ eingestufte Probenkörper weist bei 254 nm nur eine schwach glimmende, fahl bläulich-weiße Fluoreszenz auf.

▪ **„KW-führender Bereich schwach UV-aktiv (porös)“**

Schwach poröse Bereiche mit schwacher bis schwach glimmender, fahl bläulich-weißer Fluoreszenz bei 254 nm.

▪ **„KW-führender Bereich stark UV-aktiv“**

Bereiche mit stark fahl bläulich-weißer oder, in seltenen Fällen, mit fahl gelblicher Fluoreszenz bei 254 nm (Abb. 8).



Abb. 8: Als „stark UV-aktiv“ eingestufte Probenkörper RB649-003 (Teufe 0,31 m bis 0,48 m) unter UV-Licht (254 nm). Die Probe weist einen auffälligen „Diesel“-Geruch auf und zeigt bei 254 nm eine ausgeprägte, fahl bläulich-weiße Fluoreszenz entlang der Korngrenzen und der eingeschalteten Anhydritlagen.

▪ **„KW-führender Bereich stark UV-aktiv (porös)“**

Schwach poröse Bereiche mit stark fahl bläulich-weißer oder in seltenen Fällen fahl gelblicher Fluoreszenz bei 254 nm (Abb. 9).

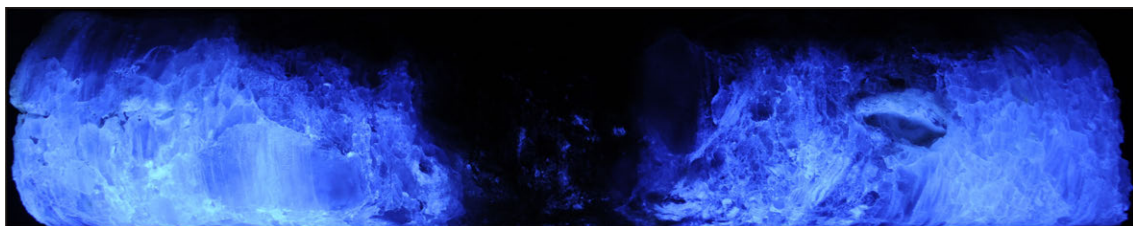


Abb. 9: Als „stark UV-aktiv (porös)“ eingestufte Probenkörper RB648-022 (Teufe 3,00 m bis 3,33 m) unter UV-Licht (254 nm). Der Kern weist bei 254 nm eine bereits im Kunstlicht auffällige Pore (siehe Abb. 5) und intensive fahl bläulich-weiße Fluoreszenz auf.

▪ **„KW-führender Bereich stark UV-aktiv mit Austritten“**

Bereiche mit Kondensataustritten an der Kernmantelfläche und starker fahl bläulich-weißer bzw. in seltenen Fällen fahl gelblicher Fluoreszenz bei 254 nm. Entsprechende Bereiche mit sichtbaren Kondensataustritten konnten nur im ersten Kernmarsch der Bohrung RB649 für kurze Zeit nach der Kerngewinnung beobachtet werden.

Kernsegmente, aus denen Proben für die quantitative und qualitative KW-Analyse gewonnen wurden (sofortige Überführung der Salzproben nach ihrer Gewinnung in eine Wasservorlage), standen für die Dokumentation unter UV-Licht nicht mehr zur Verfügung. Die entsprechenden Kernabschnitte wurden in den UV-Profilen (Anhang 1.1 bis 1.25) als „KW-Probe für Geochemie“ gekennzeichnet und durch Interpolation über die angrenzenden Kernabschnitte einer UV-Klasse zugeordnet.

Die nach der organochemischen Beprobung verbliebenen UV-aktiven Bereiche der Kurzbohrungen wurden zur BGR nach Hannover überführt und unter Kunstlicht, Durchlicht und UV-Licht bei 254 nm photographisch dokumentiert. Unter UV-Licht kommt es in der näheren Umgebung der fluoreszierenden Bereiche durch die Transparenz der Halitkristalle oft zu einem fahl bläulichweiß schimmernden Halo-Effekt in den angrenzenden Halitkristallen. Durch den Halo erscheinen UV-aktive Bereiche deutlich größer, als dies in Wirklichkeit der Fall ist (Abb. 12). Besonders deutlich wird dieser, bei der Bewertung der UV-Bilder zu berücksichtigende Halo-Effekt auch, wenn für die Probenmarkierung UV-aktive Textmarker verwendet wurden. Zum Teil genügt das von einem 5 mm großen Textmarker-Kreuz ausgehende Fluoreszenzlicht, um einem Bereich von 5 cm Durchmesser eine scheinbare Fluoreszenz zu verleihen.

Die Dokumentation der sofort nach der Kerngewinnung entnommenen Aufheizproben (Abb. 6) erfolgte in den luftdicht geschlossenen Probengefäßen, um keine Veränderung der Probenatmosphäre und damit eine Verfälschung der Messwerte hervorzurufen. Da die Probengefäße bei 254 nm eine gelblich-weiße Eigenfluoreszenz aufwiesen und somit die vom Bohrkern ausgehende Fluoreszenz überstrahlen, wurden die Heizproben durch Anregung mit UV-Licht der Wellenlänge 352/368 nm dokumentiert. Aufgrund der geringeren Anregungsenergie und der Abschottung durch die Probengefäße weisen die Heizproben eine geringere Fluoreszenzintensität im Vergleich zu den übrigen Proben auf, die sich auch in der Photodokumentation niederschlägt.

Zwecks anschaulicherer Darstellung der Besonderheiten der Verteilung der KW bzw. der UV-aktiven Bereiche in den Bohrkernen wurden aus den einzelnen, paarweise deckungsgleich vorliegenden Kunstlicht- und UV-Aufnahmen jeweils Kombinationsaufnahmen „Auflicht und UV-Licht“ (Abb. 10) bzw. „Durchlicht und UV-Licht“ (Abb. 11) erzeugt.

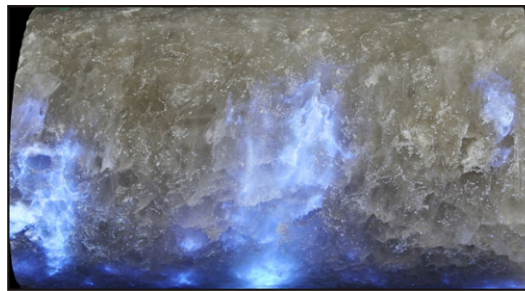


Abb. 10: Kombinationsaufnahme „Auflicht und UV-Licht“ (Probenkörper RB659-012 bei Teufe 1,70 m bis 1,82 m). Durch die Kombination von Kunstlicht- und UV-Aufnahme werden die bei UV-Licht eintretenden Halo-Effekte (Abb. 12) reduziert und die Bildinformationen der Auflichtaufnahme durch die UV-Informationen ergänzt.



Abb. 11: Kombinationsaufnahme „Durchlicht und UV-Licht“ (Probenkörper RB659-012 bei Teufe 1,70 m bis 1,82 m). Durch die Kombination von UV- und Durchlichtaufnahme werden Halo-Effekte (Abb. 12) reduziert und die Bildinformationen der Durchlichtaufnahme durch die UV-Informationen ergänzt.



Abb. 12: Beispiel für den in allen Proben beobachteten Halo-Effekt (Probenkörper RB659-012 bei Teufe 1,70 m bis 1,82 m) in einer Kombinationsaufnahme „Kunstlicht und UV-Licht“ (A) bzw. unter UV-Licht bei 254 nm (B; Kernsegment geschnitten). Die an die UV-aktiven Bereiche (i. d. R. Korngrenzen) angrenzenden Halitkristalle werden durch das bei UV-Anregung emittierte Fluoreszenzlicht blau beleuchtet.

Ausgehend von der KW-Kartierung der Bohrkerne und Untertage-Aufschlüssen konzentrieren sich die UV-aktiven Bereiche in den Salzgesteinsproben überwiegend auf den Korngrenzen der Halit-/Anhydritkristalle bzw. auf sekundäre Risse im Halit (z. B. in Proben aus den Auflockerungsbereichen der Strecken bzw. entstanden durch mechanische Schädigung bei der Probengewinnung bzw. Präparation). In der halitischen Matrix sind die UV-aktiven Bereiche als Schlieren, auskragende Wolken, Inseln, Fetzen und gelegentliche Lagen (im z2HS2) ausgebildet, die sowohl bereichsweise zusammenhängend als auch voneinander isoliert vorliegen.

Aufgrund der makroskopischen Beobachtungen an den Bohrkernen und in den Aufschlüssen ist die KW-Imprägnation im Hauptsalz als überwiegend interkristallin einzustufen. Vor allem an geschnittenen Kernen (Abb. 13) bzw. an frischen Bruchflächen der Proben oder an den Schnitt-/Bruchflächen in den untertägigen Aufschlüssen tritt der interkristalline Charakter der KW-Vorkommen deutlich hervor. Vereinzelt und bislang ausschließlich in Proben aus dem Streifensalz im Bohrort 1.2 (Vorbereitung RB773 und RB642) konnten intrakristalline, würfelförmige Fluideinschlüsse mit fahl bläulich-weißer Fluoreszenz beobachtet werden (Abb. 14).

Ein weiteres vergleichsweise seltenes Vorkommen stellen gelegentlich auftretende, fahl bläulich-weiß fluoreszierende Schlieren und Knäule von Anhydrit dar, die von einer UV-inaktiven Halitmatrix umgeben sind (Abb. 15). Viele der im Knäuelsalz eingeschalteten Schlieren und Knäule von Anhydrit weisen hingegen keine sichtbare Fluoreszenz auf, auch wenn diese von einer UV-aktiven Halitmatrix umgeben sind (Abb. 16).

Da nur UV-aktive, i. d. R. aromatische KW-Verbindungen unter UV-Licht sichtbar sind, ist anzunehmen, dass sich auch die UV-inaktiven KW auf den Korngrenzen der Proben befinden. Diese Annahme wird durch die Befunde aus den Dünnschliffen bestätigt.

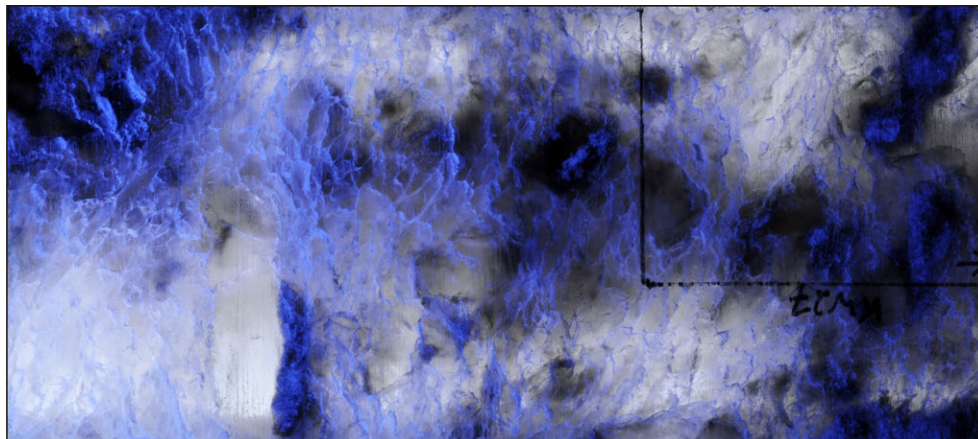


Abb. 13: Kombinationsaufnahme „Durchlicht und UV-Licht“ (Probenkörper RB649-003 bei Teufe 0,41 m bis 0,47 m) mit angezeichnetem Dünnschliff „KW27“. Die UV-aktiven Bereiche konzentrieren sich überwiegend auf den Korngrenzen der Halitkristalle, teilweise auch auf Anhydritknäule; die Halitkristalle selbst sind frei von Einschlüssen.

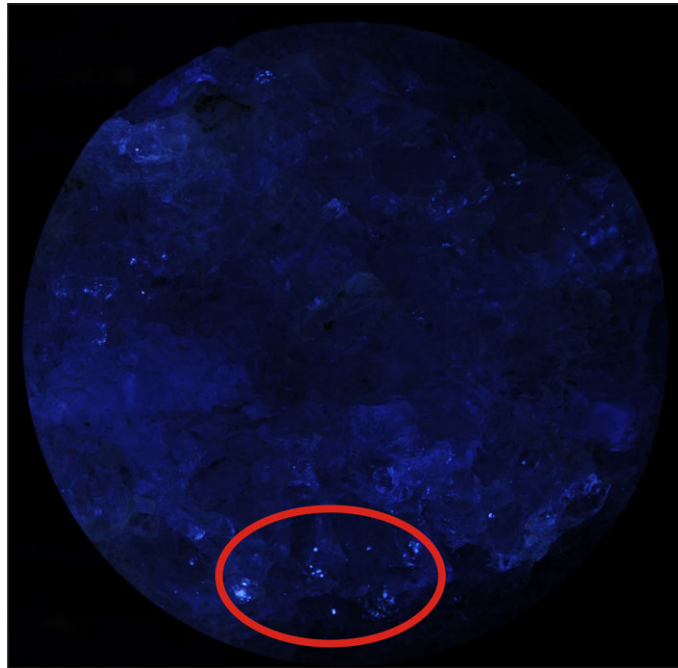


Abb. 14: Intrakristalline, würfelförmige und bei 254 nm UV-aktive Fluideinschlüsse (rot umrandet) in einem Probenkörper der Vorbohrung RB773 (Probe RB773-005 bei einer Teufe von 1,50 m bis 1,56 m; Blick auf den Kernquerschnitt bei 1,50 m).

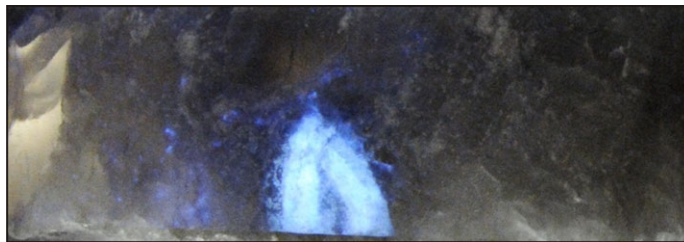


Abb. 15: Stark UV-aktives Anhydritknäuel umgeben von UV-inaktiver Halitmatrix (Probenkörper RB659-011 bei Teufe 1,63 m bis 1,67 m; Liegendes: Bildunterkante).

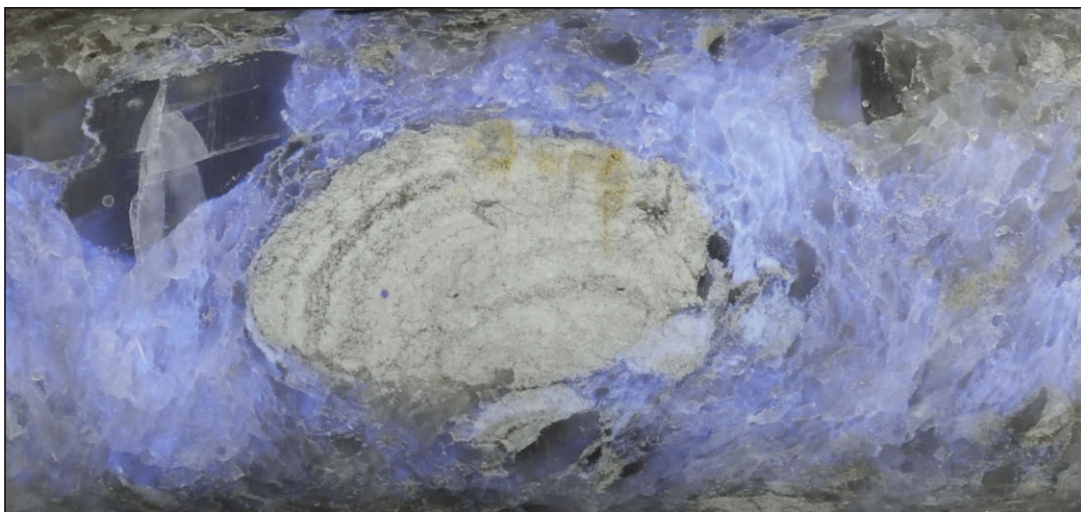


Abb. 16: UV-inaktives Anhydritknäuel umgeben von einer stark UV-aktiven Halitmatrix (Probenkörper RB652-008 bei Teufe 2,23 m bis 2,61 m).

5.2 Schlussfolgerung aus der Kohlenwasserstoff-Verteilung in den Bohrker- nen und Neuauffahrungen

Sowohl die UV-Profile der KW-Kurzbohrungen (Anhang 1.1 bis 1.25) als auch die der Packerbohrungen (Anhang 2.1 bis 2.10) und die UV-Dokumentation einzelner Kernseg-
 mente aus diesen Bohrungen weisen auf eine heterogene Verteilung der UV-aktiven KW
 im Querschlag 1 W hin. Die ungleichmäßige Verteilung der unter UV-Licht sichtbaren
 KW lässt vermuten, dass es sich bei den Vorkommen der KW im z2HS (Knäuelsalz bis
 Streifensalz) um voneinander isolierte Vorkommen bzw. KW-Anreicherungen handelt, die
 nicht miteinander in Verbindung stehen. Bohrungen mit wenigen KW-Indikationen oder
 ohne fluoreszierende Bereiche befinden sich im Kernbereich des Salzstock-Hauptsattels
 häufig in direkter Nachbarschaft zu Bohrungen mit einer intensiven Fluoreszenz. Bereiche,
 die bei Tageslicht durch Poren oder gelbliche Verfärbungen auffallen, lassen sich gut mit
 dem Vorkommen UV-aktiver Bohrkernsegmente korrelieren, da sie unter UV-Licht häufig
 eine intensive Fluoreszenz aufweisen.

Die größte Verbreitung UV-aktiver Bereiche findet sich in den Bohrungen RB655,
 RB654, RB652, RB649, RB648 sowie in den, in direkter Nachbarschaft zu der Bohrung
 RB648 befindlichen Bohrungen RB778 und RB779 (Abb. 17). Bohrungen, die im z2HS2
 (Streifensalz) gestoßen wurden, weisen keine bzw. nur vereinzelt geringfügig UV-aktive
 Bereiche auf. Eine Häufung von UV-aktiven Zonen im Bereich der Bohransatzpunkte
 bzw. in den ersten 1 – 3 m einiger Kurzbohrungen ist vermutlich auf den Einfluss der
 Auflockerungszone und der damit geschaffenen Wegsamkeiten zurückzuführen. Über
 die genaue Verbreitung UV-inaktiver KW ist makroskopisch keine Aussage möglich, da
 die entsprechenden organischen Verbindungen nicht mittels Fluoreszenz, sondern nur
 analytisch oder mikroskopisch nachzuweisen sind.

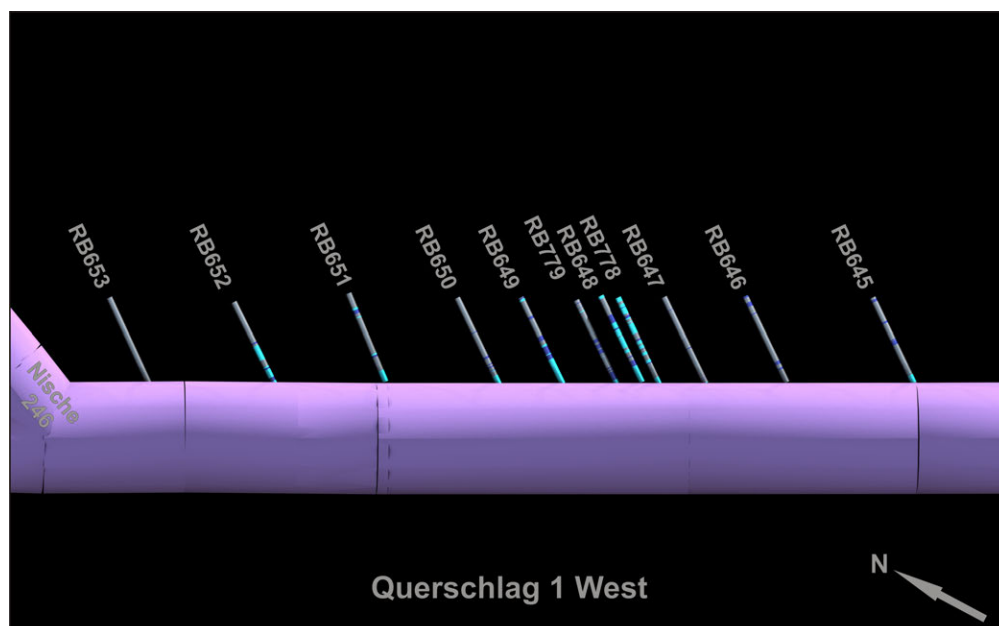


Abb. 17: Verbreitung der UV-aktiven Bereiche (stark fluoreszierend – Cyan, schwach fluoreszierend –
 dunkelblau) in den KW-Kurzbohrungen im Zentralteil des Querschlages 1 West.

Bei den UV-aktiven KW-Bereichen im z2HS handelt es sich wahrscheinlich überwiegend um die während des weiteren Salzaufstieges zerrissenen und verknäuelten Relikte der ursprünglichen, früh-halokinetischen KW-Migrationspfade oder KW-Kluftspeicher (Anhydrit-Lagen), wie sie u. a. in den Bohrungen RB773 und RB639 im z2HS2 (Streifen-salz) erbohrt wurden (Abb. 18) oder in den Bohrorten 1.2 (Abb. 19, im z2HS2) bzw. 5.0 (im z2HS3, Kristallbrockensalz) aufgeschlossen sind. Es ist anzunehmen, dass die KW im Zuge des Salzaufstieges entlang von Scher- bzw. Rekristallisationsbahnen oder temporär beim Salzaufstieg vorhandenen Rissen aus dem Muttergestein in das Salz migrierten, zusammen mit diesem aufstiegen und im Salzstock verteilt wurden, was die unregelmäßige Verteilung der KW im Salz erklärt.

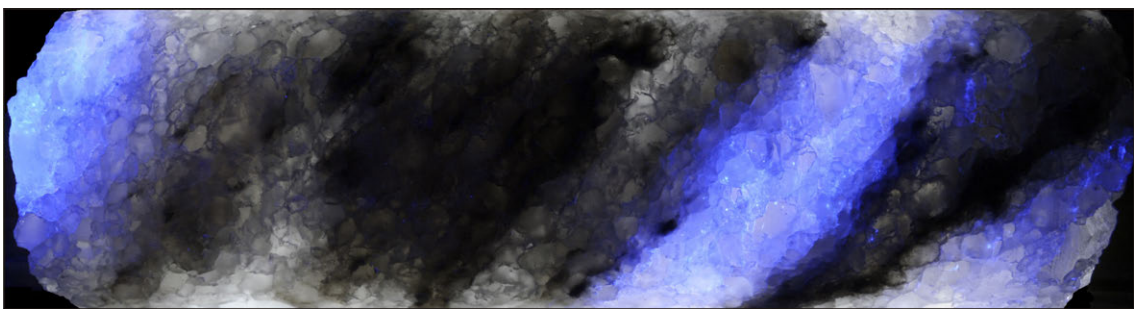


Abb. 18: Kombinationsaufnahme „Durchlicht und UV-Licht“ aus dem Streifensalz (Probenkörper RB773-00; Teufe 0,70 m bis 0,94 m). Die lagenartig ausgebildeten, UV-aktiven Bereiche befinden sich innerhalb des Kernsegmentes ausschließlich an den Korngrenzen klarer, rekristallisierter Halitkristalle.

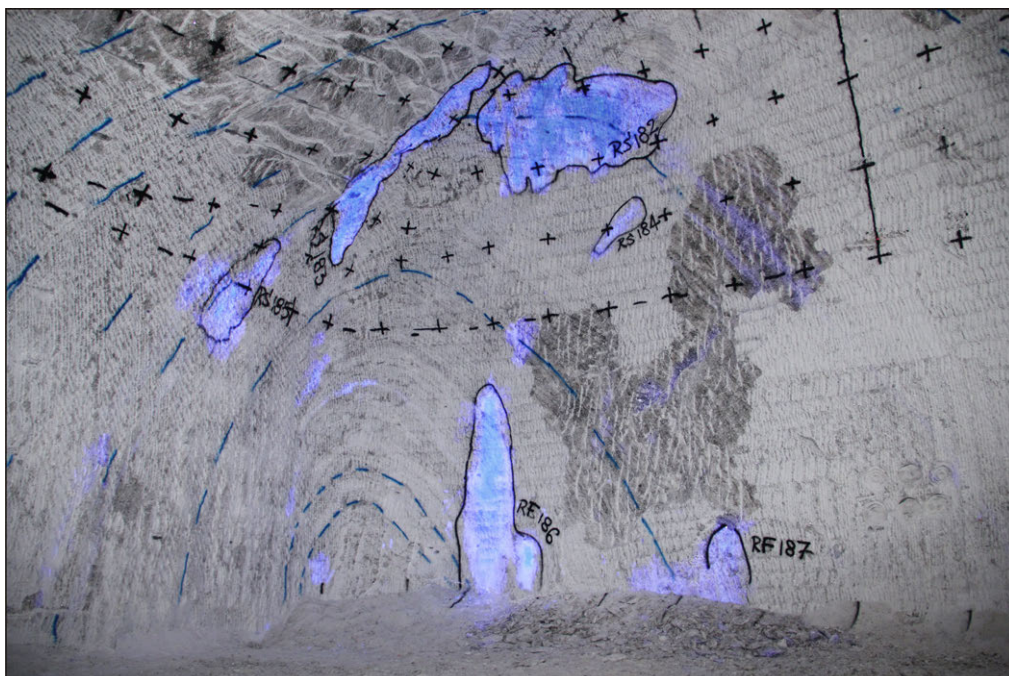


Abb. 19: Kombinationsaufnahme „Kunstlicht und UV-Licht“ aus den Stoß-Aufnahmen im Bohrort 1.2 (Quelle: DBE). Die UV-aktiven KW sind der Schichtung folgend lagig in dünnmächtigen Anhydritschichten oder anhydritreichen Halitschichten des z2HS2 angeordnet, die beim Salzaufstieg verfaultet wurden. Bereichsweise treten die KW in Folge der Auflockerung des Gebirges durch die Bohrortsauffahrung aus und verteilen sich infolge großflächig als Kondensatflecken und -fahnen am Stoß, wodurch ein scheinbar großflächiges Vorkommen suggeriert wird (Größe der Feuchtstelle RF 187 im unteren Bildteil etwa 1 m²).

6 Gefügekundlich-mikrostrukturelle Untersuchungen zur Klärung der Verteilung der Kohlenwasserstoffe

6.1 Eingesetzte Untersuchungsverfahren

6.1.1 Dünn- und Dickschliffe

Neben detaillierten lichtmikroskopischen, mineralogisch-petrographischen und gefügekundlichen Untersuchungen von Dünnschliffen erfolgten umfangreiche Studien an Dickschliffen. Salz eignet sich aufgrund seiner Lichtdurchlässigkeit für die Anfertigung von Dickschliffen, wodurch mehrere Fokusebenen betrachtet werden können. Dickschliffe eignen sich deshalb hervorragend zur Erfassung dreidimensionaler Gefügemerkmale, Strukturen und der räumlichen Verteilung von Fluidphasen. Ein weiterer Vorteil liegt in der Robustheit und der Möglichkeit der Weiterbearbeitung der Dickschliffe. Im Anschluss an die Anwendung eines Ätzverfahrens der Schliffe für Subkornanalysen können Dickschliffe nach der Analyse erneut poliert und wiederverwendet werden.

Die Aufnahmen mehrerer Fokusebenen eines in die Tiefe reichenden Strukturelementes können durch das Programm *ImageJ* oder *CombineZP* aneinander gefügt werden, sodass ein Bild mit ausgeprägter Tiefenschärfe, d. h. ein Bilderstapel (Z-Stapel) berechnet wird. Diese Darstellungsform gestattet deutlich bessere Visualisierungsmöglichkeiten und die Schliffbeschreibungen reduzieren sich nicht nur auf eine Betrachtungsebene, wie es bei Dünnschliffen der Fall ist.

6.1.2 Fluoreszenzmikroskopie

KW können unter Einwirkung von kurzwelligem UV-Licht fluoreszieren (siehe Kap. 3.4). Diese Eigenschaft wird bei der Fluoreszenzmikroskopie genutzt, um das Vorkommen und die Verteilung von KW im Mikromaßstab untersuchen zu können. Hierbei wird mit einer Quecksilber-Hochdruck-Dampfampe kurzwelliges Licht (etwa 450 nm) auf die Probe gestrahlt. Das emittierte längerwellige Fluoreszenzlicht wird durch einen Sperrfilter im Mikroskop (*Leica DM 4500 P*) vom Anregungslicht getrennt, wodurch die KW (filterabhängig) durch ihr grünes Leuchten im Schliff deutlich zu erkennen sind. Eine Mengenabschätzung der KW-Einschlüsse über die Fluoreszenz ist nur bedingt möglich. Die analysierten Schliffe werden nach ihrer Fluoreszenzintensität in Kategorien (sehr stark, stark, mittel, schwach, sehr schwach fluoreszierend) eingeteilt. Durch das diffuse Strahlen erscheinen Fluoreszenzstrukturen teilweise größer als sie in Wirklichkeit sind. Ebenso können Fremd Beimengungen (z. B. Anhydrite) angestrahlt werden und suggerieren fälschlicherweise eine Eigenfluoreszenz (siehe auch FISCHER 2000).

6.1.3 Analyse des Subkorngefüges und Paläopiezometrie

Eine etablierte Methode zur Spannungsabschätzung in Halitgesteinen ist die Analyse der Subkorngrößen (CARTER et al. 1993; FRANSSEN 1993; SCHLÉDER & URAI 2005). Hierbei ist die Größe (Durchmesser des Kreisäquivalentes der Subkornfläche) antiproportional zur Differentialspannung (σ' bzw. $\sigma_1 - \sigma_3$; Abb. 20) und kann durch folgende Beziehung nach CARTER et al. (1993) formuliert werden:

$$D [\mu\text{m}] = 215 \sigma'^{-1,15} [\text{MPa}] \quad (12)$$

oder

$$\sigma' [\text{MPa}] = 107 D^{-0,87} [\mu\text{m}] \quad (13)$$

mit D = Subkorndurchmesser, σ' = Differentialspannung ($\sigma_1 - \sigma_3$)

Voraussetzung für die Anwendung dieser Beziehung ist, dass die Subkörner im Halit unbeeinflusst von Mineralphasen wie Anhydrit sind (ZULAUF et al. 2010) und einem stationären Deformationszustand zuzuordnen sind (TWISS & MOORES 1992).

Die Subkörner werden in Anlehnung an URAI et al. (1987) mit einer untersättigten 5,5 molaren NaCl-Lösung durch oberflächliches Anlösen der Schliffoberfläche sichtbar gemacht. In der Lösung enthaltenes Eisenchlorit ($\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) setzt sich vornehmlich an Subkorn Grenzen ab. Das Ätzverfahren erfolgt für etwa 40 Sekunden unter Schwenken der Probe, um ein gleichmäßiges Anlösen der Schliffoberfläche gewährleisten zu können. Anschließend werden die Schriffe mit n-Hexan abgewaschen und mit Druckluft getrocknet.

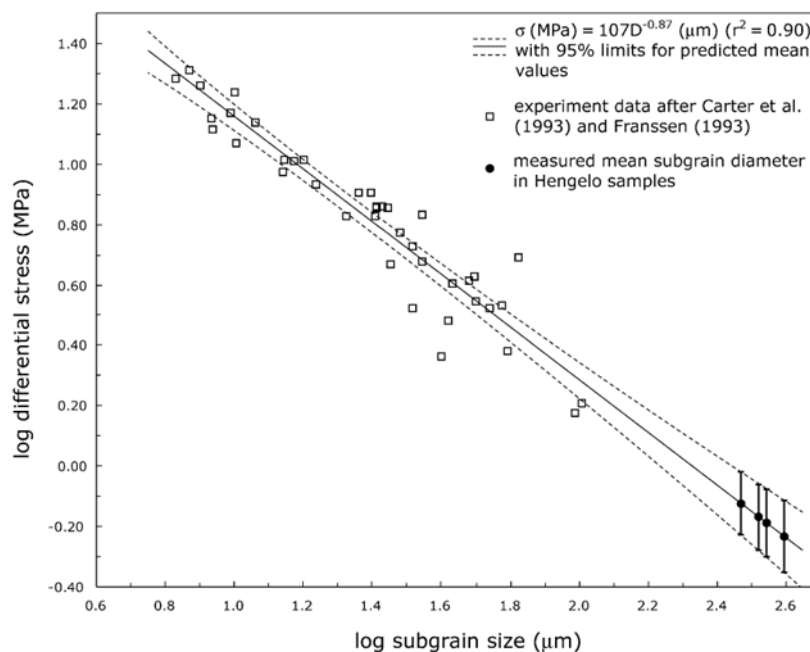


Abb. 20: Invers proportionale Beziehung der Subkorngröße in Halit zur Differentialspannung (aus: SCHLÉDER & URAI 2005).

Die auf diese Art sichtbar gemachten Subkörner (Abb. 50) werden mit *Adobe Illustrator* abgezeichnet und als Subkornmaske mit *ImageJ* vermessen. Aus den Subkornflächen werden unter Annahme einer Kreisgeometrie die Korndurchmesser errechnet, die unter Verwendung der Formel (14) die Paläodifferentialspannungen liefern.

Nach CARTER et al. (1993) kann für geringe Spannungswerte und Strain- bzw. Verzerungsraten folgendes Fließgesetz formuliert werden:

$$\dot{\epsilon} = A \cdot \sigma'^{3.4} \cdot \exp\left(-Q / R \cdot T \cdot 10^{-3}\right) \quad (14)$$

$\dot{\epsilon}$ = Strainrate, A = Materialkonstante, σ' = Differentialspannung, Q = Aktivierungsenergie, R = Gaskonstante, T = Temperatur

mit A = $8,1 \cdot 10^{-5}$ MPa⁻ⁿs⁻¹, Q = 51,6 kJ/mol, R = 8,31451 J/K·mol, T = 423,15 K

Unter Verwendung der errechneten Paläodifferentialspannungen kann somit eine Einschätzung der Strainraten erfolgen, die bei der Verformung des Staßfurt-Hauptsalzes herrschten.

6.1.4 Computertomographie

Mit Hilfe der Computertomographie (CT) können interne Strukturen von Gesteinen je nach Materialeigenschaften (Atomzahl, Dichte) zerstörungsfrei dreidimensional dargestellt und quantifiziert werden. Durch die Verwendung des Computertomographen *nanotom s* der Firma *General Electric – phoenix/x-ray* ist es möglich, Strukturen im Hauptsalz im μ m-Bereich zerstörungsfrei sichtbar zu machen. Durch den Dichtekontrast zwischen Halit und Anhydrit können beide Phasen röntgenographisch gut voneinander unterschieden werden. Anhydritkristalle heben sich hellgrau von der dunkelgrauen Steinsalzmatrix ab. Weiterhin sind Risse als dunkle Linien oder Streifen erkennbar. Sie lassen sich durch ihren meist geraden Verlauf und ihre Ausprägtheit von intakten Korngrenzen unterscheiden, welche dünner und unregelmäßiger verlaufen. Kreisförmige Strukturen auf den CT-Darstellungen sind Ringartefakte und entstehen durch Pixelfehler bei den Aufnahmen während der Rotation der Probe. Im Knäuelsalz sind demzufolge Fluideinschlüsse, Risse, Anhydritverteilungen, Poren (in Abhängigkeit vom Auflösungsvermögen der Messungen) und Korngrenzen darstellbar. CT-Analysen zur 3D-Rissanalyse werden von der Erdölindustrie seit den 1980er Jahren eingesetzt und gehören heute zur Standardtechnik bei der Untersuchung von Bohrkernen (MEES et al. 2003).

Je kleiner die zu untersuchenden Salzproben sind, desto besser ist die Auflösung. Das *nanotom s* im Institut für Geowissenschaften der Universität Frankfurt/M. ist in der Lage,

bei kleinen Probengrößen (ca. 2 mm) eine Auflösung $<1 \mu\text{m}$ zu erzielen. Ein Scanvorgang dauert je nach ausgewählten Parametern (Bildanzahl, Belichtungszeit, etc.) bis zu 6 Stunden. Die NanoCT-Scans werden mit programmspezifischen Modulen nachbearbeitet, um typische Störeffekte zu beseitigen und die Qualität der Aufnahmen zu optimieren („Beam Hardening“, Ringartefakte, Achsenabweichungen oder eventuelle Filter). Im Anschluss können aus der Volumendatei des Datensatzes mittels *VGStudioMax (Volume Graphics)* erkennbare Strukturen manuell oder automatisch extrahiert und bearbeitet werden. So ist es möglich, alle erkennbaren Fluidvorkommen zu exportieren, als dreidimensionales Geflecht darzustellen und deren Anteil am Gesamtvolumen (entsprechend Vol.-%) auszurechnen (siehe weiter unten).

Die Problematik der Methode besteht darin, dass nicht alle im Mikroskop erkennbaren Fluidphasen sichtbar gemacht werden können. Im Grenzbereich der Auflösungs-möglichkeiten können Effekte wie Rauschen oder Abweichungen in der Rotationsachse während der Messungen zu qualitativ schlechten Aufnahmen führen. Die maximale Scanauflösung bedingt nicht nur reglementierte Probengrößen von etwa 2 mm, sondern erfordert auch extreme Rechenleistungen, die momentan noch nicht zur Verfügung stehen, weshalb z. Zt. nur kleine Ausschnitte der Volumendateien berechnet und bearbeitet werden können.

6.1.5 Raman-Spektroskopie

Die Anwendung der Raman-Spektroskopie ermöglicht Aussagen über die Zusammensetzung von Fluideinschlüssen. Bei ersten exemplarischen Messungen an zwei Proben aus dem Querschlag 1 W wurde ein Raman-Spektrometer *Renishaw RM 1000* mit einem He/Ne-Laser (rot, 633 nm) am Institut für Geowissenschaften der Universität Frankfurt/M. verwendet. Messungen mit kürzerer Anregungswellenlänge (grüner Laser, 488 nm) konnten aufgrund des starken Fluoreszenzsignals nicht durchgeführt werden. Durch die mehrere Größenordnungen stärkere Fluoreszenzstrahlung im Vergleich zum Raman-Signal (FERRARO & NAKAMOTO 1994) wird der Detektor des Raman-Spektrometers bei zu starker Fluoreszenz gesättigt und liefert keine Ergebnisse. Die Kalibrierung des Geräts erfolgte anhand der 520er Wellenzahl (cm^{-1}) von standardisiertem Silizium. Im Laufe der Messreihen zeigte sich, dass bei dreifachem Messdurchlauf von je 30 sec die Raman-Banden von CH_4 und Anhydrit zu erkennen sind.

Das starke Fluoreszieren der Schiffe verschleiert eindeutige Raman-Spektren. Durch Basislinienkorrekturen können auftretende Peaks nachträglich besser sichtbar gemacht werden, klassische Raman-Peaks sind allerdings nur beim Anhydrit zu erkennen. Neben der starken Fluoreszenz kommt für die geringe Qualität der bisher vorliegenden Raman-Spektren auch eine bei den ersten Messungen noch möglicherweise unzureichende Fokussierung des Laserstrahls in Frage. Dadurch werden Strukturen in tieferen Schiffspartien

nicht exakt getroffen und es können undeutliche Signale entstehen. Die Arbeiten werden unter Berücksichtigung neu erschlossener methodischer Untersuchungen anderer Autoren an weiteren Hauptsalzproben fortgesetzt.

6.2 *Ergebnisse der gefügekundlichen und mikrostrukturellen Untersuchungen*

6.2.1 Petrographische Beschreibung der Proben und Verteilung der Kohlenwasserstoffe im Dünnschliff

Für die gefügekundlichen und mikrostrukturellen Untersuchungen der Hauptsalz-Proben wurden aus den Kurzbohrungen im Querschlag 1 W Proben für Dünn- und Dickschliffe ausgewählt, welche im Hellfeld bzw. unter gekreuzten Polarisatoren analysiert wurden. Bei den Proben aus dem Querschlag 1 W handelt es sich überwiegend um Proben aus dem Knäuelsalz (z2HS1) der Staßfurt-Folge, sowie aus dem Übergangsbereich Knäuelsalz - Streifensalz bzw. aus dem Liegenden des Streifensalzes (z2HS2). Jeder Schliff wurde zusätzlich mittels Diascanner (im Maßstab 1:1 mit einer Scanauflösung von 4000 DPI) im Hellfeld und unter Zuhilfenahme von Polarisationsfolie bei gekreuzten Polarisatoren (Abb. 21) vollflächig dokumentiert.

Für die Anfertigung von 43 Dünnschliffen aus dem Querschlag 1 W wurden Probenkörper von jeweils 6 cm x 4 cm aus dem Zentralbereich der Bohrkerns gewonnen. Zusätzlich zu den Dünnschliffen aus den Kurzbohrungen wurden Dünnschliffe aus den Proben der felsmechanischen Prüfkörperbohrungen RB452 und RB459 für die mikroskopische Begleitung der felsmechanischen Versuche vor und nach der Versuchsdurchführung angefertigt.

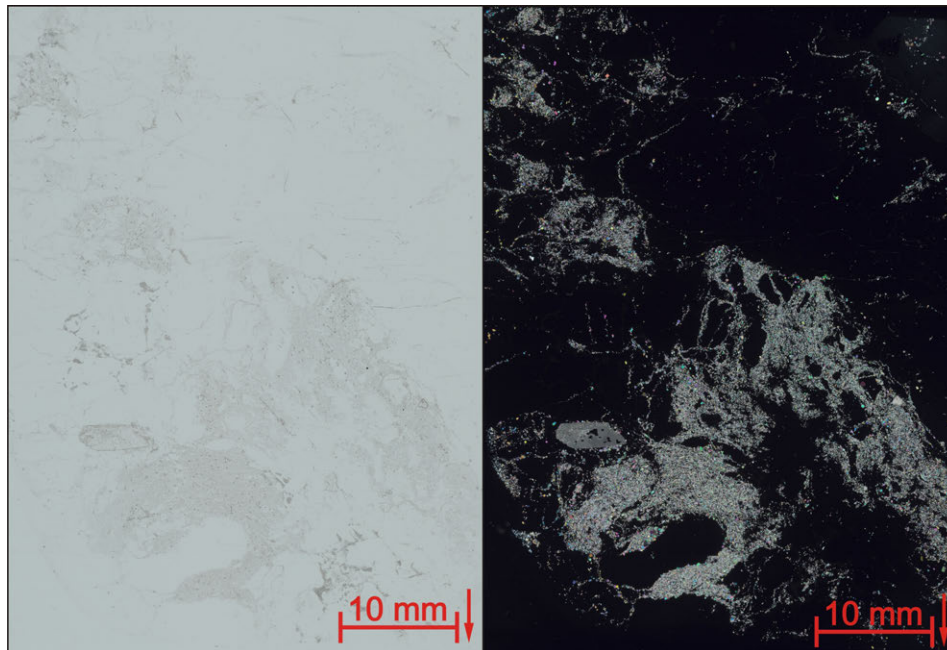
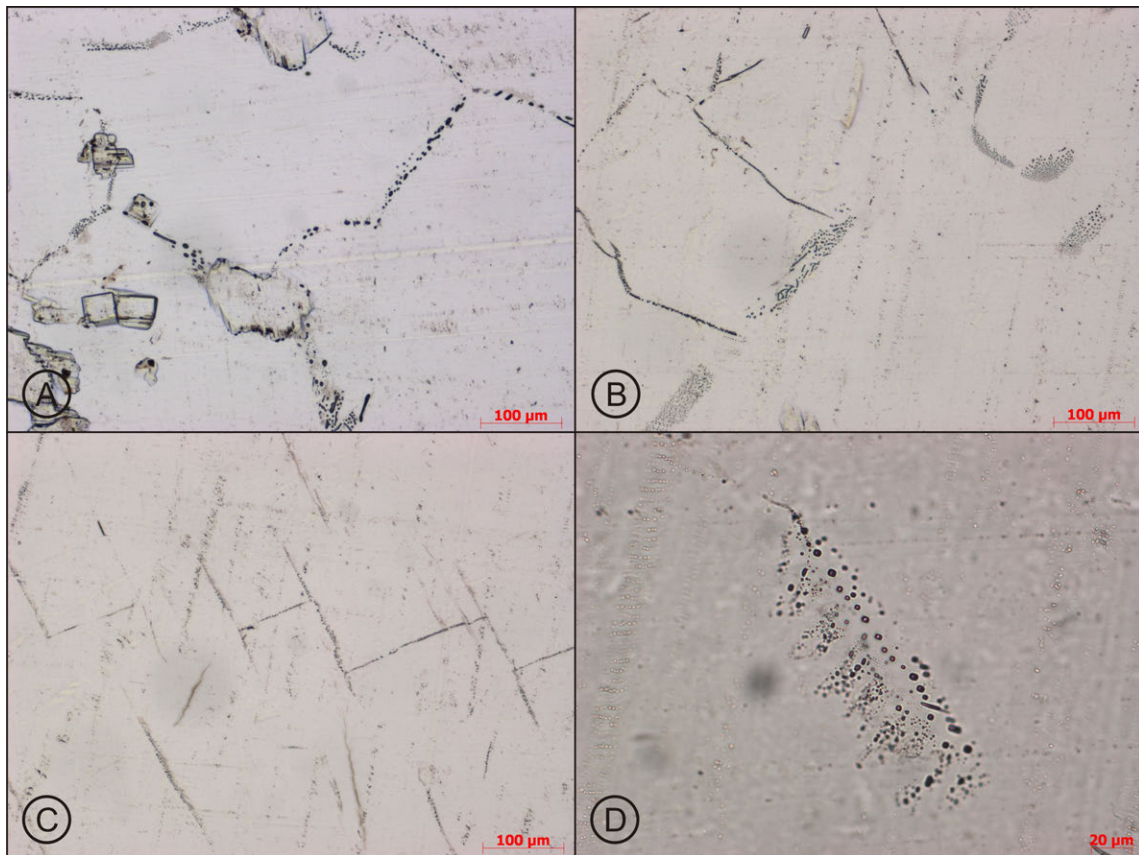


Abb. 21: Übersichtsscan eines ca. 6 cm x 4 cm großen Dünnschliffes aus der RB648 bei Teufe 3,03 m bis 3,09 m. Links der Dünnschliff im Hellfeld und rechts mit gekreuzten Polarisatoren. Durch die hohe Auflösung kann der Schliff bis auf Mikroskopniveau vollständig dokumentiert und gegebenenfalls auch nach dessen alterungsbedingter Zerstörung untersucht werden.

Die in den Dünnschliffen analysierte Gesteinsmatrix besteht aus fein- bis grobkristallinen, xeno- bis hypidiomorphen Halitkristallen bis ca. 1 cm Korngröße, durchsetzt von Schlieren und 1 cm bis 2 cm großen Knäueln von Anhydrit bzw. Bruchstücken verfalteter ehemaliger Anhydritlagen bis ca. 4 cm x 7 cm. Gelegentlich treten cm-große Einkristalle von Halit auf, an denen teilweise Anhydritlagen anhaften. Die Korngrenzen der Halitkristalle sind oft von interkristallinen Fluideinschlüssen (salinare Lösungen und KW) – i. d. R. dendritisch bis kleinflächig, gelegentlich punktiert ausgebildet – gesäumt (Abb. 22A). KW-haltige Fluideinschlüsse erscheinen ölig-schwärzlich bis bräunlich-schwarz und führen bei einem präparativ bedingten Anschnitt der Korngrenzen zu bräunlichen Verschmierungen auf den benachbarten Kristallen. Erste Fluid-Volumenabschätzungen auf der Basis der bisher ausgewerteten Schliffbilder ergaben (bei einer Schliffdicke von ca. 25 µm) einen Gesamtfluidgehalt (KW und saline Lösung) von 0,005 bis 0,027 Vol.-% für das jeweilige Schliffbild.

Gelegentlich und bevorzugt in Einkristallen treten in der halitischen Gesteinskomponente, verursacht durch mechanische Belastungen, offene bis verheilte Risse (Abb. 22B) auf, die mit Fluideinschlüssen (salinare Lösungen und KW) gefüllt sind. Die Mehrheit der Risse (Abb. 22C) ist eindeutig auf anthropogen bedingte, mechanische Belastung des Probenbereiches (z. B. Auflockerungsbereiche im Umfeld von Strecken, Bohr-/Probenpräparationsprozesse etc.) zurückzuführen. Die Halitkristalle selbst sind überwiegend rekristallisiert und frei von Fluideinschlüssen bzw. Verunreinigungen; nur vereinzelt

sind Tressenstrukturen (Abb. 22D) mit reliktsch erhaltenen, primären, würfelförmigen Fluideinschlüssen ausgebildet.



- Abb. 22A: Fluideinschlüsse an den Korngrenzen der Halitkristalle bzw. auf der Oberfläche von an den Korngrenzen gelegenen Anhydrit (RB658, Teufe 2,91 m bis 2,97 m, Hellfeld).
- Abb. 22B: Offene bzw. teilweise verheilte, sekundäre Risse innerhalb eines Haliteinkristalls mit punktuellen, dendritischen und z. T. flächenhaften Fluideinschlüssen aus salinaren Lösungen und schwarzbraunen KW (RB658, Teufe 4,89 m bis 4,94 m, Hellfeld).
- Abb. 22C: Sekundäre, durch mechanische Belastung bedingte und mit Fluiden besetzte Risse entlang der Spaltbarkeit des Halitkristalls (RB658, Teufe 4,89 m bis 4,94 m, Hellfeld).
- Abb. 22D: Tressenstruktur aus primären, würfelförmigen Fluideinschlüssen innerhalb eines Haliteinkristalls (RB658, Teufe 4,89 m bis 4,94 m, Hellfeld).

Die Lage der KW auf natürlichen, durch Deformation beim Salzaufstieg, oder bergmännisch induzierten Klüften verdeutlicht, wie in derartigen Auflockerungszonen Migrationspfade für den Fluidtransport (unter der Voraussetzung eines Gradienten des Porenfluiddruckes) in Form von transgranularen Rissen und aufgelockerten Korngrenzen geschaffen wurden.

Die Salzgesteine des Knäuelsalzes sind durch eine Foliation gekennzeichnet, die durch die oftmals korngrenzengebundenen Anhydritvorkommen und eine leichte Kornformanisotropie der Halitkörner manifestiert wird (Abb. 23A). Die Halitkorngrenzen verlaufen mehrheitlich undulierend und unregelmäßig, was auf Drucklösung oder auf

straininduzierte Grenzflächenwanderung bzw. Rekristallisation hindeutet. Klassische 120° -Korngrenzenwinkel sind selten. Teilweise idiomorphe Kristallflächen von Halitkörnern (Abb. 23B) weisen auf Rekristallisation hin. Zudem fehlen primäre Merkmale wie Chevronstrukturen. Nur vereinzelt werden reliktsche, primäre Fluideinschlüsse z. B. in Tressenstrukturen beobachtet. Elongierte Halitkörner lassen auf Lösungs-Fällungs-Kriechen schließen.

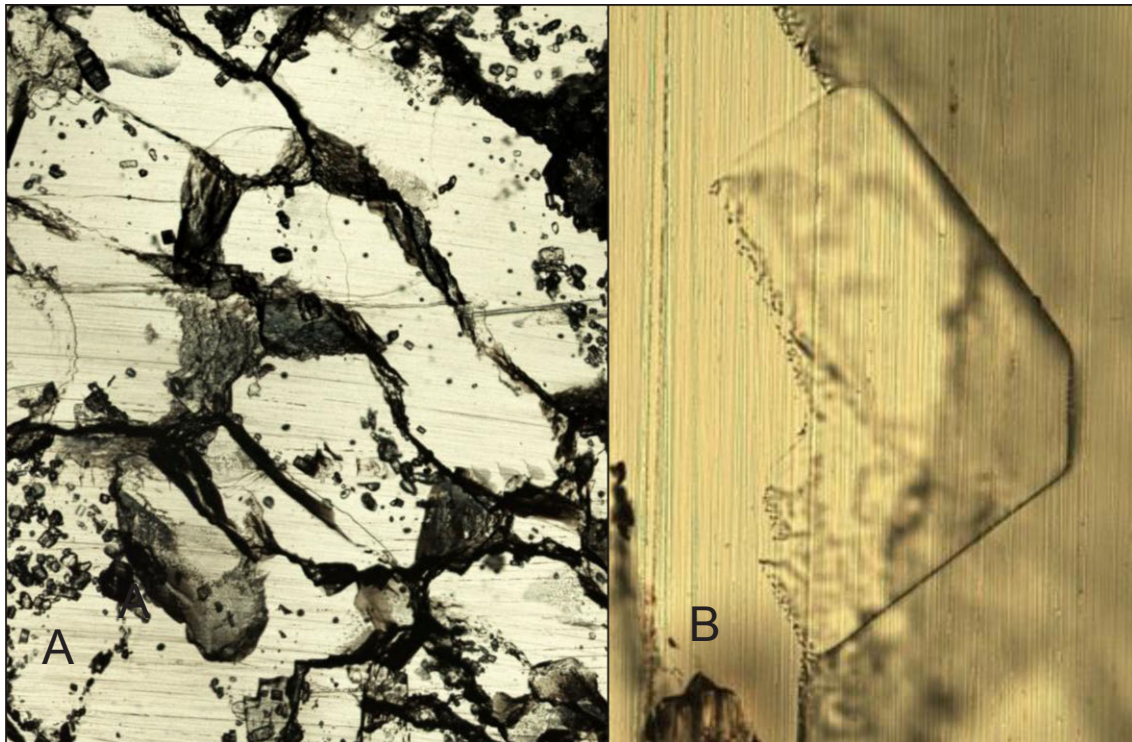


Abb. 23A: Erkennbare Foliation im Knäuelsalz, bedingt durch die Kornformanisotropie der Halitkörner (RB658.013_2s). Bildbreite (BB) = 800 μm . Beide Abbildungen mit parallelen Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 23B: Idiomorph ausgebildete Kristallflächen zeigen vermutlich Rekristallisation an (RB757). BB = 500 μm . Beide Abbildungen mit parallelen Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.

Der Hauptanteil der Fluidmenge ist an interkristalline Grenzflächen (Korngrenzen) gebunden, was den Beobachtungen von HERRMANN & KNIPPING (1993) entspricht. Die Fluidphasen können blasenförmig, verästelt, wurmartig oder als örtlich begrenzte Filme auftreten und befinden sich fast ausschließlich auf den Korngrenzen der Halit- und Anhydritkristalle (Abb. 24 und 25). Die Ausprägung der Fluideinschlüsse wird vermutlich primär durch die Menge der lokal vorhandenen Fluide beeinflusst. So treten Blasenformen nur dann auf, wenn geringe Mengen an Fluiden auf intakten Korngrenzen lokalisiert sind, wohingegen aufgerissene Korngrenzen Fluid-Filme beherbergen, die durch ein großes Platzangebot und vermutlich zum Zeitpunkt des Einschlusses der Fluide geringe Umgebungsspannungen begünstigt werden.



Abb. 24: Interkristalline Fluideinschlüsse auf Halit-Korngrenze (RB757). Die hellen Zentren der blasen- und wurmförmigen Flüssigkeitsphasen sind optische Reflexe. Bei Kontakt einzelner Tropfen können örtlich begrenzt Filme ausgebildet werden (Bildmitte oben). BB = 500 µm. Parallele Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.

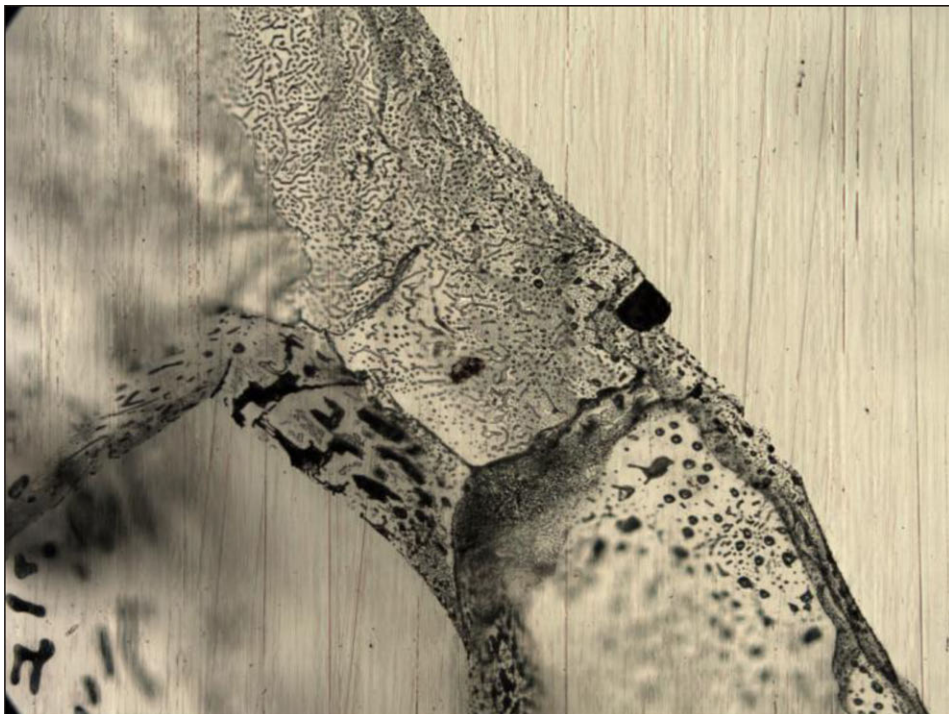
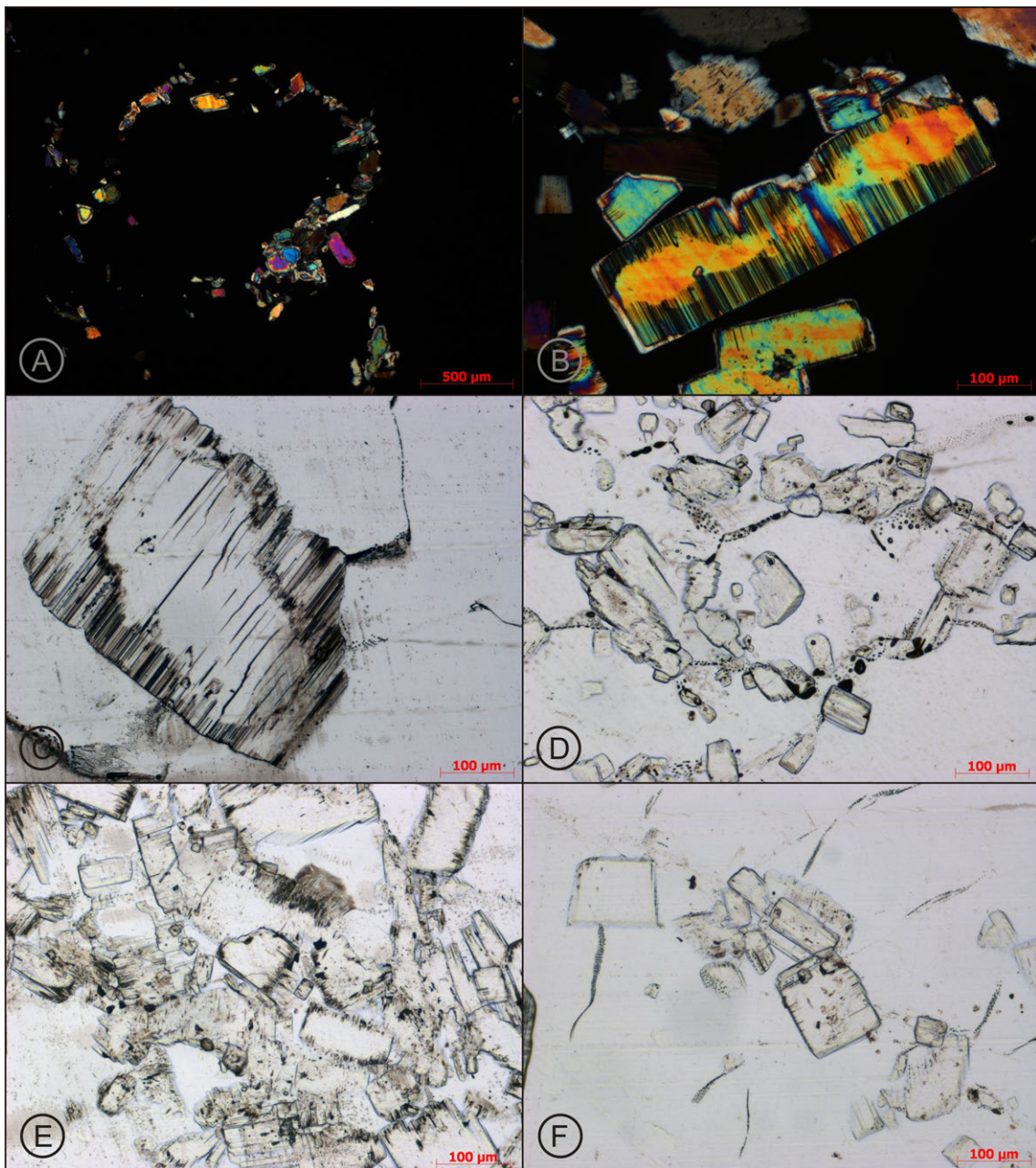


Abb. 25: Fluide verschiedenster Ausprägung dominieren vor allem die Korngrenzenbereiche (RB757). BB = 1,6 mm. Parallele Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.

Die in den Dünnschliffen beobachteten Anhydritkristalle erreichen eine Größe von bis zu 900 µm und sind i. d. R. stängelig bis tafelig oder stark verfilzt ausgebildet. Außer in Schlieren und Knäueln (Abb. 21) treten die Anhydritkristalle auch entlang der Korngrenzen der Halitkristalle (Abb. 26A) und als Einschlüsse im Halit auf. In den Dünnschliffen aus dem Querschlag 1 W lassen sich mindestens 3 Anhydritgenerationen ausmachen. Überwiegend sind stängelige bis tafelige, hypidio- bis idiomorphe Anhydritkristalle, z. T. mit einem randlichen Alterationssaum zu beobachten, die sowohl entlang der Korngrenzen der Halitkristalle eingeregelt, als auch innerhalb der Anhydritschlieren und -knäule anzutreffen sind. Daneben finden sich z. T. stark alterierte, randlich ausgefranzte oder intakte, idiomorphe Anhydritkristalle bzw. gelegentlich Pseudomorphosen von Polyhalit nach Anhydrit.

Bemerkenswert ist das Auftreten eines Anhydrittyps, welcher eine vom Kornrand ausgehende Parallelstreifung (Abb. 26B) entlang der Spaltbarkeit (Abb. 26C) aufweist. Bei der Parallelstreifung handelt es sich um bis zu 100 µm lange und bis ca. 5 µm durchmessende Kapillaren, welche mit KW, salinärer Lösung bzw. Gas (Abb. 27A) und Feststoffen (Abb. 27B) gefüllt sein können. In fluid- und KW-reichen Zonen sind in den Kornwickeln der Anhydritkristalle bzw. an Ausbrüchen, Stufen und Kanten häufig sekundäre Fluideinschlüsse (Abb. 26D) eingeschlossen. In diesen Bereichen sind auch häufig an der Oberfläche der Anhydritkristalle anhaftende, meniskenförmige Fluidtropfen (Abb. 26D) zu finden. Handelt es sich bei den Anhydritkristallen um randlich alterierte Kristalle mit einem Kapillarsaum, so erinnert die Kornoberfläche mit den anhaftenden Fluidtropfen an ein „Feld von Erdpyramiden“ (Abb. 26E). Vor allem in Bereichen mit erhöhter Lösungskonzentration sind bei Gegenwart von Anhydritkristallen sekundäre, oft teilweise bis vollständig verheilte, 50 µm bis 200 µm lange, gebogene Risse zu beobachten, welche, häufig von den Kornkanten bzw. Ecken der Anhydritkristalle ausgehend in die umliegenden Halitkristalle hineinreichen (Abb. 26F).



- Abb. 26A: Intakte bis alterierte Anhydritkristalle säumen die Korngrenzen der Halitkristalle und sind nur vereinzelt als Fremdkörper in den Halitkristallen eingeschlossen (RB656, Teufe 4,79 m bis 4,85 m, X-Pol).
- Abb. 26B: Idiomorpher, randlich alterierter Anhydritkristall mit zahlreichen, vom Kornrand ausgehenden, spaltflächenparallelen Kapillaren (RB452, Teufe 9,32 m bis 9,34 m, X-Pol).
- Abb. 26C: Anhydritkristall mit vom Kornrand ausgehenden Kapillaren sowie sichtbar parallel verlaufenden Spaltflächen (RB655, Teufe 5,47 m bis 5,53 m, Hellfeld).
- Abb. 26D: Anhydritkristalle mit an der Kornoberfläche anhaftenden KW-Phasen, sowie KW-besetzte Korngrenzen der Halitkristalle (RB648, Teufe 3,03 m bis 3,09 m, Hellfeld).
- Abb. 26E: Starke KW-Imprägnierung der Korngrenzen und Kapillare im Anhydrit mit bräunlicher Verfärbung des Schliffes, verstärkt durch die Verteilung der bei der Schliffherstellung freigesetzten KW auf der Schliffoberfläche (RB655, Teufe 5,47 m bis 5,53 m, Hellfeld).
- Abb. 26F: Von eingeschlossenen Anhydritkristallen ausgehende, fluidbesetzte und in der Ausdehnung begrenzte Risse im Halit (RB655, Teufe 5,47 m bis 5,53 m, Hellfeld).

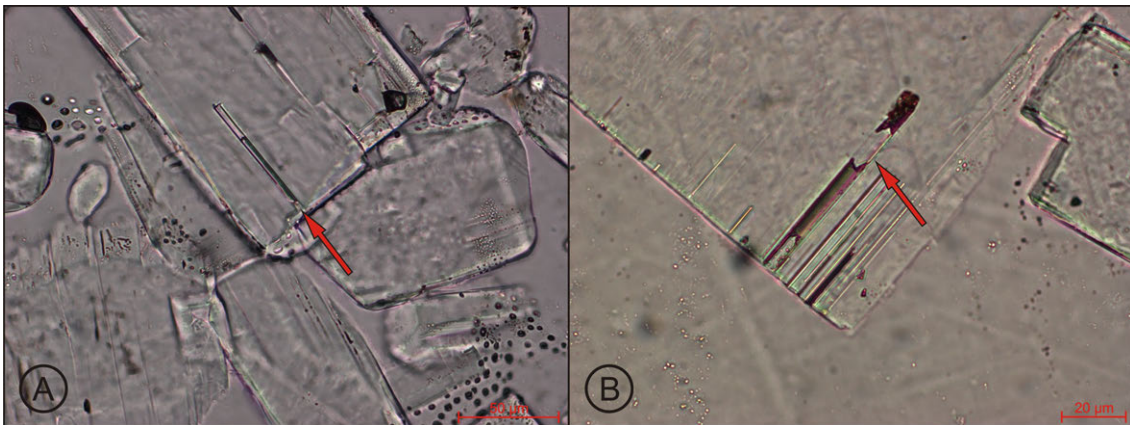


Abb. 27A: Gas- und Lösung gefüllte Kapillare mit konvexen Menisken in einem Anhydritkristall (RB648, Teufe 3,03 m bis 3,09 m, Stack-Aufnahme über 6 µm, Hellfeld).

Abb. 27B: Gas- und Lösungsgefüllte Kapillare mit konkaven Menisken und einem am Kapillarfuß befindlichen Rest von Organika innerhalb eines Anhydritkristalls (RB659, Teufe 1,73 m bis 1,79 m, Stack-Aufnahme über 5 µm, Hellfeld).

Anhydriteinschlüsse als Einkristalle in der Steinsalzmatrix zeigen auf ihren Oberflächen Fluidphasen in Tropfen- und Streifenform (Abb. 28). Die Fluidphasen bilden teils einen Meniskus zwischen Anhydrit und Halit. Das Streifenmuster ist vermutlich durch die Spaltflächen des Anhydrits bedingt, wodurch oftmals die Stirnseite eines Anhydritkristalls mit einzelnen Tropfen bekleidet ist und die restlichen Kristallflächen mit Fluidphasen in Streifenform benetzt sind (Abb. 28). Auch diese Fluidvorkommen sind mengenmäßig stark unterrepräsentiert.

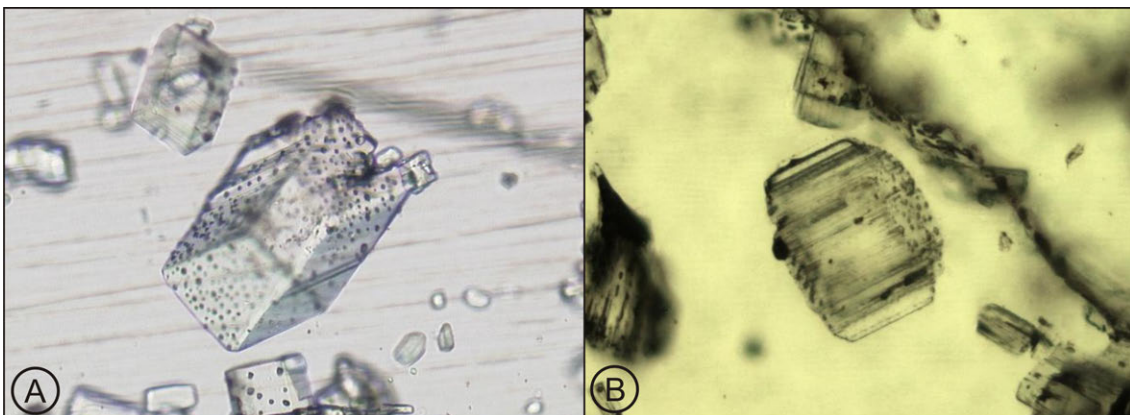


Abb. 28A: Streifen- und Tropfenmuster von Fluidphasen auf Anhydriteinkristallen in Halitmatrix. Die Fluidphasen sind auf den Grenzflächen zwischen Anhydrit und Halit lokalisiert. A) BB = 1 mm (RB652.010_2). Parallele Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 28B: BB = 500 µm (RB659.015_1s). Parallele Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.

Weitere Flüssigkeitseinschlüsse sind auf Rissen vorhanden (Abb. 29). Vermutlich entstehen diese Risse bei der Probenahme bzw. Präparation. Gekennzeichnet sind sie durch einen teils transkristallinen und vor allem besonders geraden Verlauf. Sie

treten vorrangig im Randbereich der Schlitze parallel zueinander auf. Darüber hinaus können intakte Korngrenzen durch anderweitige mechanische Beanspruchungen (Auflockerungszone) oder Wärmeeinwirkung aufbrechen, wodurch kurzfristig potenzielle Bereiche für Fluidmigration geschaffen werden (Verheilen der Klüfte durch das Kriechen des Salzes). Alle beobachteten Risse sind mit Fluidfilmen dekoriert.

Intrakristalline singuläre Fluideinschlüsse in Negativkristallen innerhalb eines Halitkorns stellen eine weitere und nach unseren Beobachtungen letzte Möglichkeit von Fluidansammlungen dar. Sie treten mengenmäßig jedoch deutlich untergeordnet auf. Hierbei handelt es sich um primäre oder sekundäre, meist quaderförmige Negativabdrücke, die aneinandergereiht *tracks* von Fluideinschlüssen bilden oder gehäuft als Scharen auftreten (Abb. 30). Sie können neben Flüssigkeit auch Gas beinhalten.

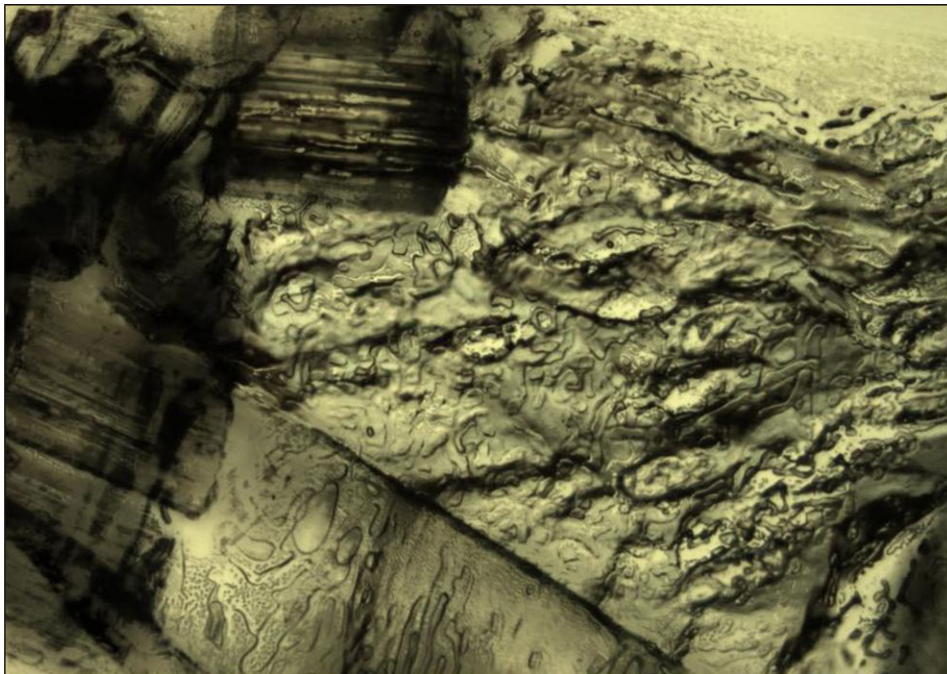


Abb. 29: Vermutlich durch Präparation bedingter Riss, der mit Fluiden besetzt ist (RB658.013_2). BB = 1 mm. Parallele Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thieme.

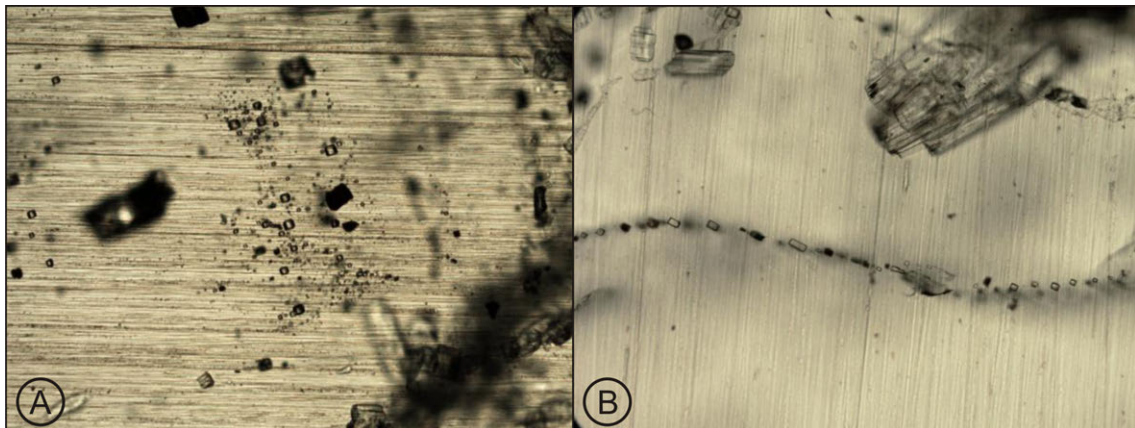
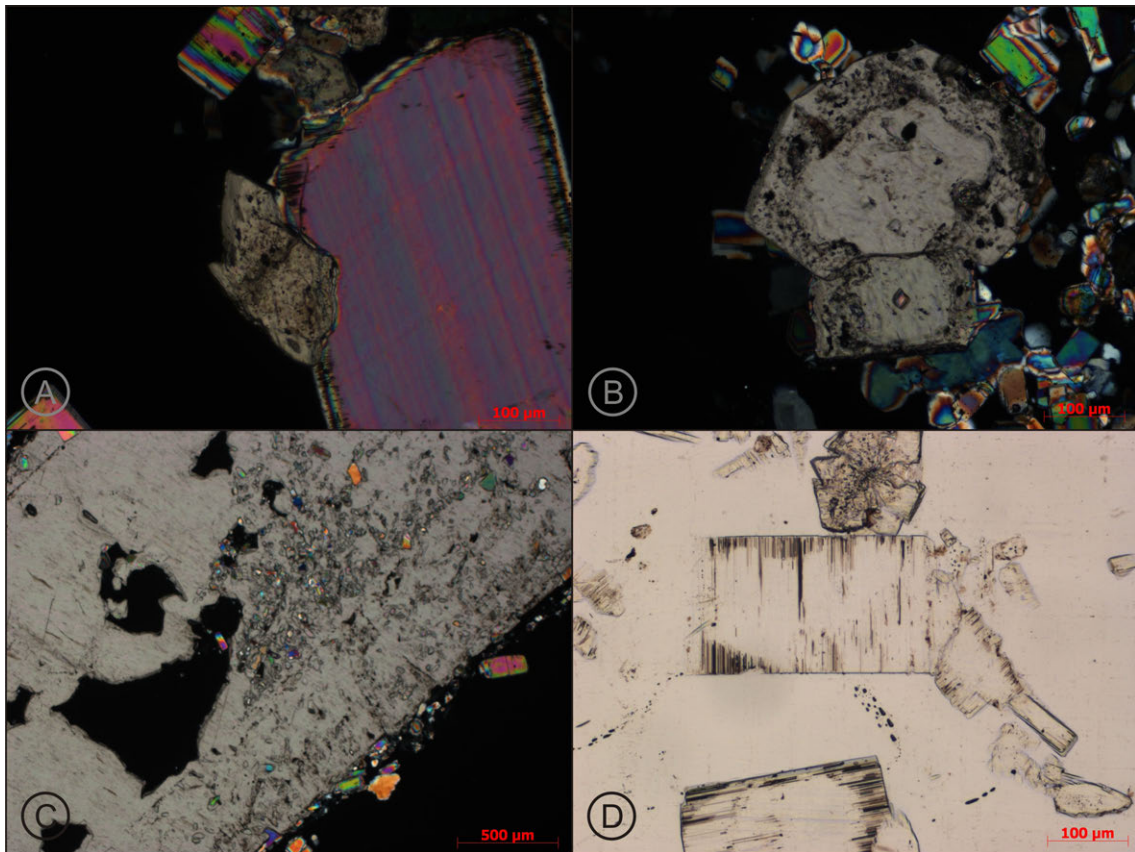


Abb. 30A: Schar von vermutlich primären Fluideinschlüssen, die aufgrund ihrer Anordnung vermutlich einer gemeinsamen Bildungsphase zuzuordnen sind (RB655.016_2). BB = 2,2 mm. Abbildung mit parallelen Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 30B: Spur von vermutlich sekundären Fluideinschlüssen, die teilweise Gasphasen beinhalten (RB757). BB = 1 mm. Abbildung mit parallelen Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.

In sämtlichen Dünnschliffen konnten akzessorisch (d. h. es wurden Vorkommen einzelner Körner beobachtet, wie z. B. in der RB648 in einer Teufe von 3,03 m bis 3,09 m ein geschätzter Gehalt von $<\sim 0,25$ Vol.-% bis maximal 0,6 Vol.-%) hypidio- bis idiomorphe Kristalle, Bruchstücke oder Aggregate von Karbonatmineralen (Abb. 31), sowie idiomorphe Kristalle von Pyrit – meist Würfel und gelegentlich Pentagondodekaeder – (Abb. 32) nachgewiesen werden. Die bis maximal 6 mm x 2 mm großen Karbonate mit ihren typischen schwarzen Einschlüssen liegen überwiegend als eigenständige Körner innerhalb der Anhydritschlieren und -knäuele vor und sind nur vereinzelt an den Korngrenzen der Halitkristalle zu beobachten. Gelegentlich treten Verwachsungen zwischen Karbonat und Anhydrit, sowie löchrige, mit Halit verheilte Kristalle auf. Teilweise sind Karbonate zu beobachten, die einen deutlichen Anwachsraum mit zahlreichen Verunreinigungen aufweisen. Eine exakte mikroskopische Bestimmung der Karbonatspezies ist nicht möglich; EDX-Messungen im ESEM (Environmental Scanning Electron Microscope) weisen auf magnesiumhaltige Karbonate (Dolomit) hin. Exakte mineralchemische Analysen mittels Mikrosonde sind angelaufen.



- Abb. 31A: Verwachsung eines idiomorphen Karbonatkristalls mit einem großen Anhydritkristall (RB659, Teufe 1,73 m bis 1,79 m, X-Pol).
- Abb. 31B: Idiomorphe Karbonatkristalle mit einem verunreinigten Anwachssaum und aufgewachsenem Anhydrit (RB648, Teufe 3,03 m bis 3,09 m, X-Pol).
- Abb. 31C: Bildausschnitt aus einem 6 mm x 2 mm großen, idiomorphen Karbonatkristall mit eingeschlossenen Anhydritkristallen, einem verunreinigten Anwachssaum und randlich aufgewachsenem Anhydrit. Die Löcher im Kristall (schwarz erscheinend) sind mit Halit und kleinen Anhydritkristallen gefüllt (RB648, Teufe 3,03 m bis 3,09 m, X-Pol).
- Abb. 31D: Idiomorpher Anhydritkristall mit spaltflächenparallelen Kapillaren neben einem rosettenförmigen Karbonataggregat (RB659, Teufe 2,55 m bis 2,61 m, Hellfeld).

Die immer idio- bis hypidiomorph ausgebildeten Pyritkristalle erreichen Durchmesser von 8 μm bis 80 μm . Sie sind überwiegend im Umfeld der Anhydritschlieren bzw. -knäuele zu beobachten und vergleichsweise selten am Kornrand von Halit oder innerhalb der Halitkristalle eingeschlossen. Gelegentlich treten Verwachsungen von Anhydrit mit Pyrit auf, bei denen der Pyrit von Anhydrit umgeben ist. Der Anhydrit kann im Umfeld des Pyritkristalls leicht alteriert bis intakt ausgebildet sein. In seltenen Fällen sind die Pyritkristalle zu mm-großen und damit makroskopisch sichtbaren Aggregaten verwachsen oder liegen in Form radialstrahliger, sphärischer Aggregate als Pyrit/Markasit vor.

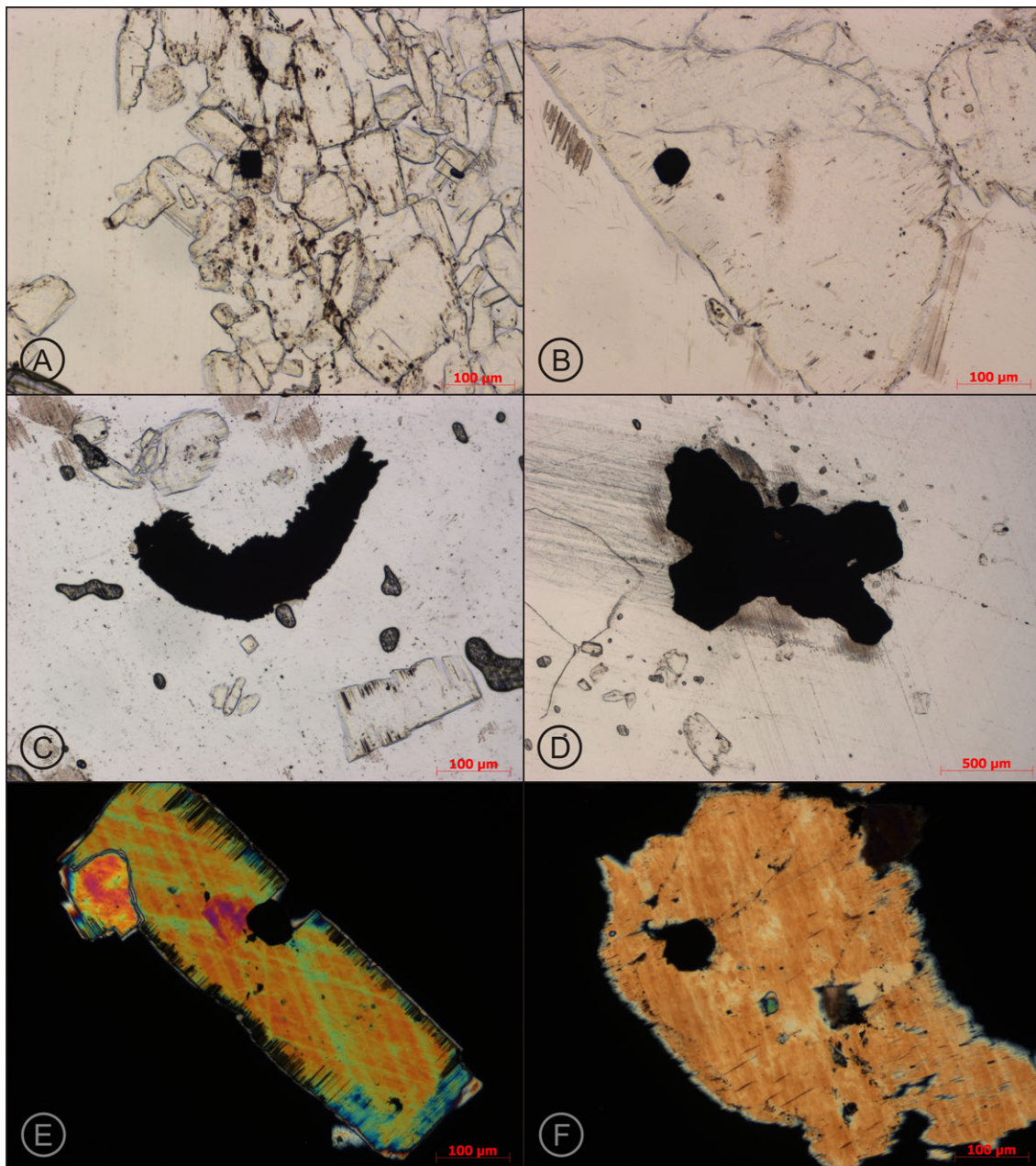


Abb. 32A: Idiomorpher, scharfkantiger Pyritwürfel, umgeben von alteriertem Anhydrit und organischen Phasen (RB648, Teufe 3,78 m bis 3,83 m, Hellfeld).

Abb. 32B: Verzerrter, kantengerundeter Pyritkristall (Würfel bis Pentagondodekaeder), eingeschlossen in einem stark alterierten Anhydrit (RB659, Teufe 4,70 m bis 4,76 m, Hellfeld).

Abb. 32C: Ausgefranstes, gebogenes Aggregat von radialstrahligen Pyrit-/Markasitnadeln in Halitmatrix zusammen mit Anhydrit (RB659, Teufe 1,73 m bis 1,79 m, Hellfeld).

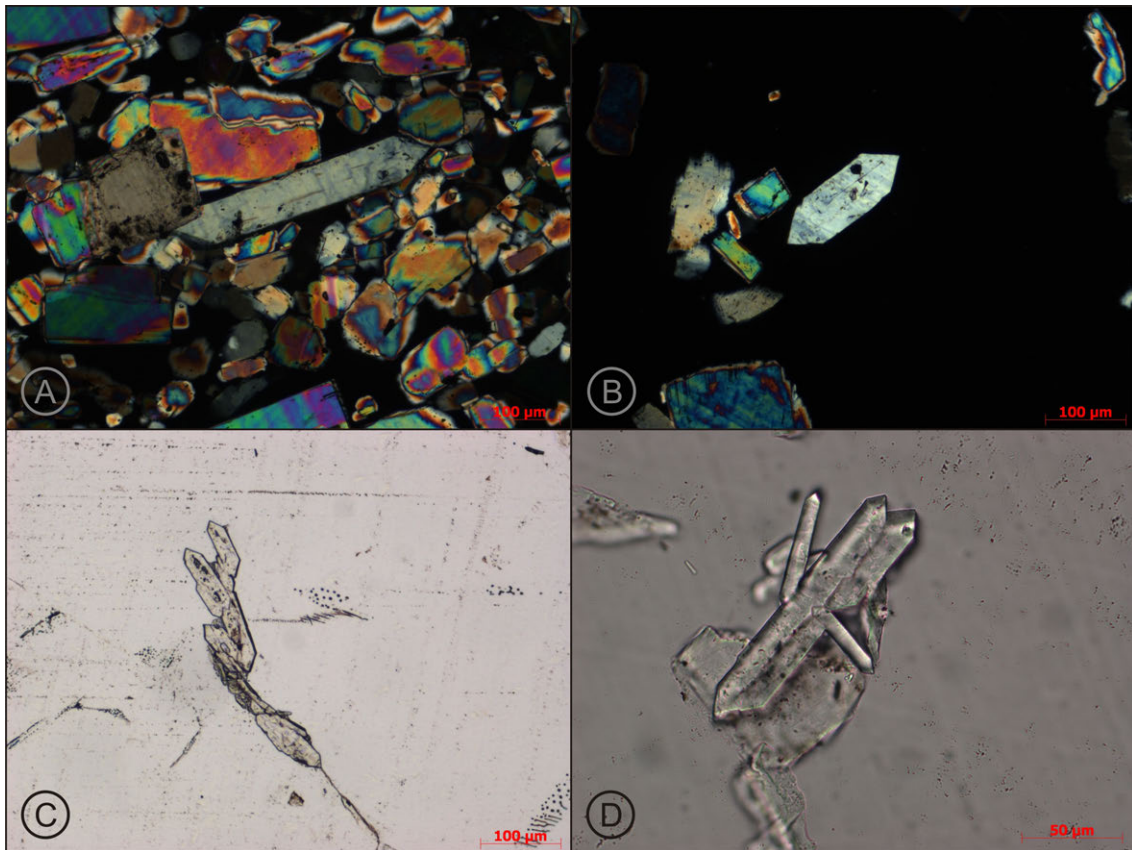
Abb. 32D: Bereits makroskopisch sichtbares, 1,2 mm x 1 mm großes Aggregat aus idiomorphen Pyritkristallen an einer Korngrenze im Halit (RB656, Teufe 4,79 m bis 4,85 m, Hellfeld).

Abb. 32E: Leicht alterierter, idiomorpher Anhydritkristall mit spaltflächenparallel verlaufenden Kapillaren und einem eingeschlossenen, hypidiomorphen Pyritkristall (RB452, Teufe 9,32 m bis 9,34 m, X-Pol).

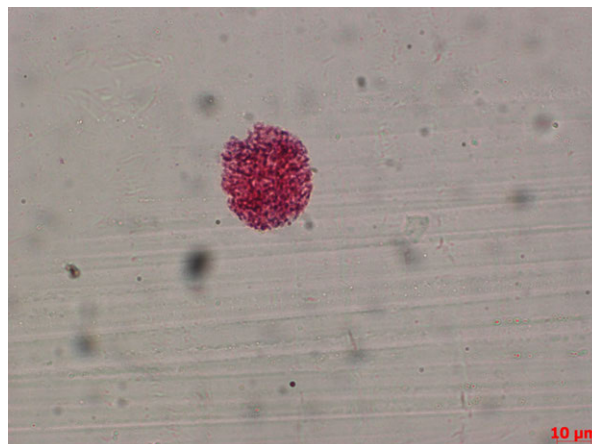
Abb. 32F: Korrodierter, xeno- bis hypidiomorpher Anhydritkristall mit einem eingeschlossenen, idiomorphen Pyritkristall (RB659, Teufe 4,70 m bis 4,76 m, X-Pol).

Die in den Dünnschliffen nachgewiesenen Karbonate und Sulfide sind möglicherweise Reaktionsprodukte der thermochemischen und/oder bakteriellen Sulfatreduktion. Ihre Menge ist v. a. abhängig von der Verfügbarkeit der Ausgangsmaterialien (CaSO_4 , KW), vom geochemischen Milieu sowie von den herrschenden Temperaturen (siehe z. B. GOLDSTEIN & AIZENSHTAT 1994, MACHEL et al. 1995). Die sehr geringen Mengen von Karbonaten und Eisensulfiden in den bisher untersuchten Hauptsalzproben belegen, dass derartige Sulfatreduktionsprozesse nach derzeitigem Wissensstand nur in sehr begrenztem Umfang und lokal eng begrenzt im Salzstock stattgefunden haben. Auswirkungen auf die Porosität und die Wassergehalte der Gesteine wurden nicht festgestellt. Zur weiteren Klärung des Ablaufes dieser Prozesse und ihres Einflusses auf die Barriereigenschaften des Hauptsalzes sind weiterführende geochemische, inklusive isotopengeochemische Untersuchungen angelaufen. Anhand von Untersuchungen der $\delta^{34}\text{S}$ -Werte der Sulfate und Sulfide sowie der $\delta^{13}\text{C}$ -Werte der Karbonate (die thermochemische Sulfatreduktion führt zur Bildung isotopisch leichterer Karbonate, siehe z. B. MACHEL et al. 1995) soll z. B. das Ausmaß der thermochemischen und/oder bakteriellen Sulfatreduktion bewertet werden.

Als seltene Akzessorien sind, bevorzugt im Umfeld von Anhydritschlieren und -knäueln, aber auch an den Korngrenzen von Halitkristallen, vereinzelt authigen gewachsene, idiomorphe, länglich gestreckte und teilweise miteinander verwachsene Kristalle von Coelestin enthalten. Sie wurden bislang nur in Dünnschliffen aus den Bohrungen RB648, RB757 und RB452 nachgewiesen (Abb. 33). Daneben konnten in den Bohrungen RB648, RB658 und RB659 einzelne Hämatitschuppen beobachtet werden (Abb. 34). Im Rasterelektronenmikroskop wurden für eine Probe aus der RB659 zusätzlich einzelne Körner von Quarz und Albit nachgewiesen (Abb. 35).



- Abb. 33A: Länglicher, idiomorpher Coelestinkristall neben einem idiomorphen Karbonatkristall innerhalb eines Anhydritknäuels (RB648, Teufe 3,78 m bis 3,83 m, X-Pol).
- Abb. 33B: Idiomorpher Coelestinkristall innerhalb eines Halitkristalls zusammen mit Anhydrit (RB648, Teufe 3,78 m bis 3,83 m, X-Pol).
- Abb. 33C: Ansammlung mehrerer, idiomorpher und miteinander verwachsener Coelestinkristalle, gewachsen in einem/r Riss/Kluft im Halit (RB658, Teufe 4,89 m bis 4,94 m, Hellfeld).
- Abb. 33D: Idiomorphe, nadelige und miteinander verwachsene Coelestinkristalle auf Anhydrit in Halitmatrix (RB452, Teufe 9,32 m bis 9,34 m, Hellfeld).



- Abb. 34: Hämatitschuppe in halitischer Matrix in einem Dünnschliff aus der Bohrung RB658 bei Teufe 4,89 m bis 4,94 m im Hellfeld.

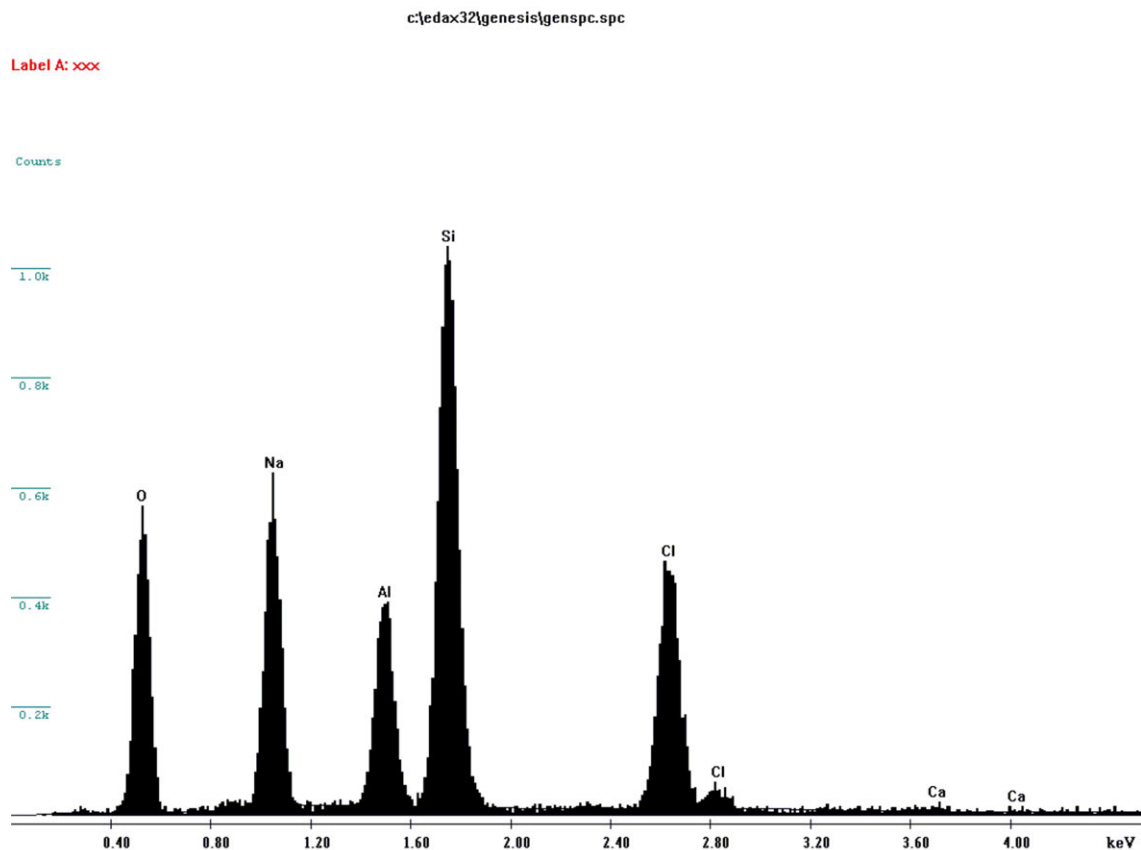


Abb. 35: EDX-Plot eines Albitkristalls (in halitischer Matrix) aus der Bohrung RB659 bei Teufe 2,55 m bis 2,61 m.

6.2.2 Fluoreszenzmikroskopische Untersuchungen

Makroskopisch zeigen die KW-führenden Kerne z. T. eine foliationsgebundene Verteilung der KW (siehe Kap. 5). So folgen die fluoreszierenden KW vordefinierten Strukturelementen wie Korngrenzen, Rekristallisationsbahnen oder Rissen. Mit Hilfe der Fluoreszenzmikroskopie kann die Verteilung der KW im mikroskopischen Maßstab detailliert betrachtet werden. Die Menge an KW wird primär durch die Strahlkraft repräsentiert, wenn auch nicht alle KW-Verbindungen fluoreszieren (TISSOT & WELTE 1984). Aufgrund ihrer teils sehr hohen Strahlkraft und der damit einhergehenden Streuung des Fluoreszenzlichtes ist die exakte Form der KW-Einschlüsse teilweise nur unzureichend erkennbar.

Die KW erscheinen auf den Halitkorngrenzen oftmals als Schleier (Abb. 36). Die Halitkorngrenzen enthalten nach jetzigem Stand der Untersuchungen die größten Mengen an organischer Substanz. Durch die überwiegend korngrenzenbezogene Verteilung der KW werden im Idealfall das Korngefüge und das Korngrenzennetzwerk im Schliff durch die Fluoreszenz abgebildet (Abb. 37).

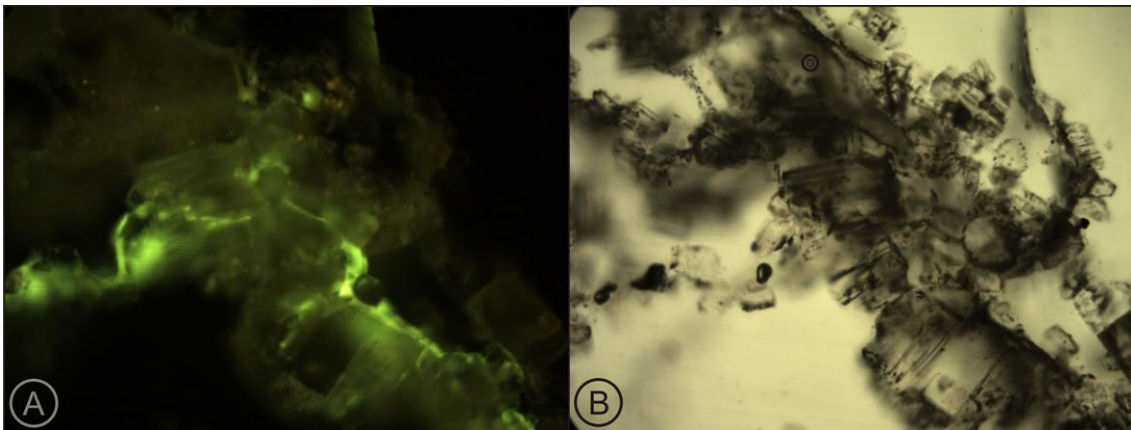


Abb. 36A: KW-Vorkommen auf Korngrenzen. Der im Schliff vorhandene Anhydrit fluoresziert schwach orange (Bildmitte oben). Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 36B: Äquivalenter Bildausschnitt ohne Fluoreszenz bei parallelen Nicols im Durchlicht (RB659.015_1s). BB = 1,6 mm, Photo: N. Thiemeyer.

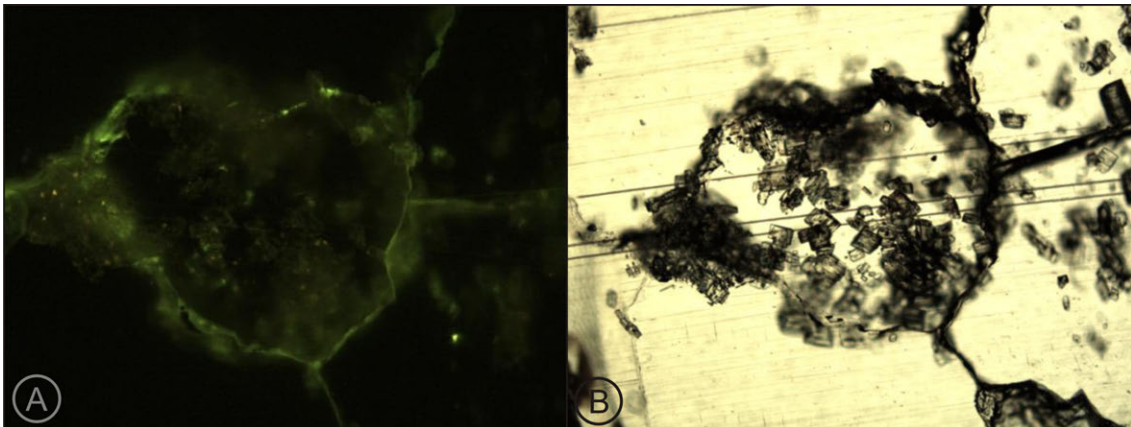


Abb. 37A: Die KW zeichnen durch ihre Korngrenzengebundenheit den Verlauf der Korngrenzen nach. Intrakristallin gebundene organische Substanz tritt nur untergeordnet auf. Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 37B: Selbe Darstellung wie in A ohne Fluoreszenz unter parallelen Nicols im Durchlicht (RB659.015_1s). BB = 3,3 mm, Photo: N. Thiemeyer.

Singuläre Anhydriteinschlüsse kommen sowohl auf Halitkorngrenzen als auch untergeordnet intragranular in Halitkörnern vor. Besonders bei intragranularen Anhydriten ist ein charakteristisches Streifen- und Tropfenmuster deutlich erkennbar (Abb. 38). Anhydritkristalle auf Halitkorngrenzen können unter dem Fluoreszenzmikroskop durch die auf den Korngrenzen vorhandenen KW angestrahlt werden und erscheinen in einer einheitlichen schwachen grünen Färbung (Abb. 39).

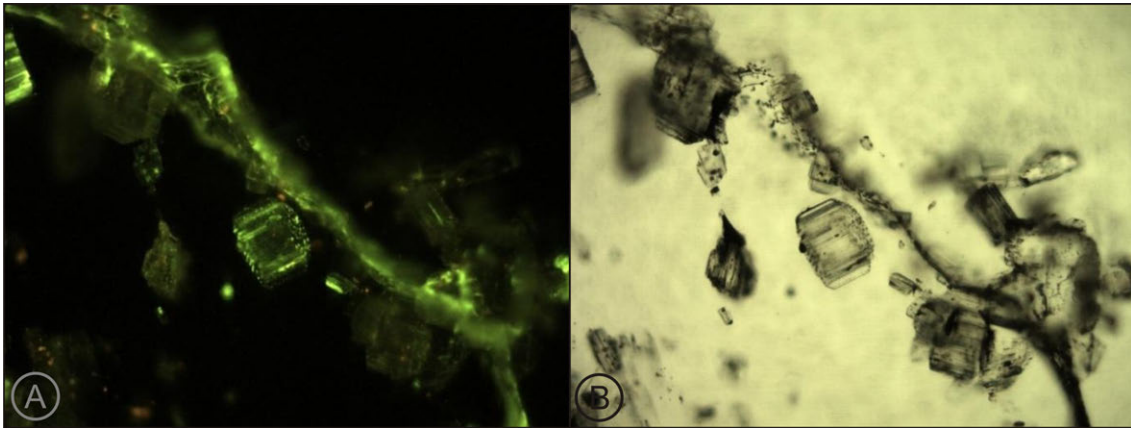


Abb. 38A: KW können als Ummantelung bei Anhydritkristallen (Bildmitte) die charakteristischen Tropfen- und Streifenmuster ausbilden. Photo: N. Thiemeyer.

Abb 38B: Äquivalenter Ausschnitt wie in A ohne Fluoreszenz bei parallelen Nicols im Durchlicht (RB659.015_1s). BB 1,6 mm, Photo: N. Thiemeyer.

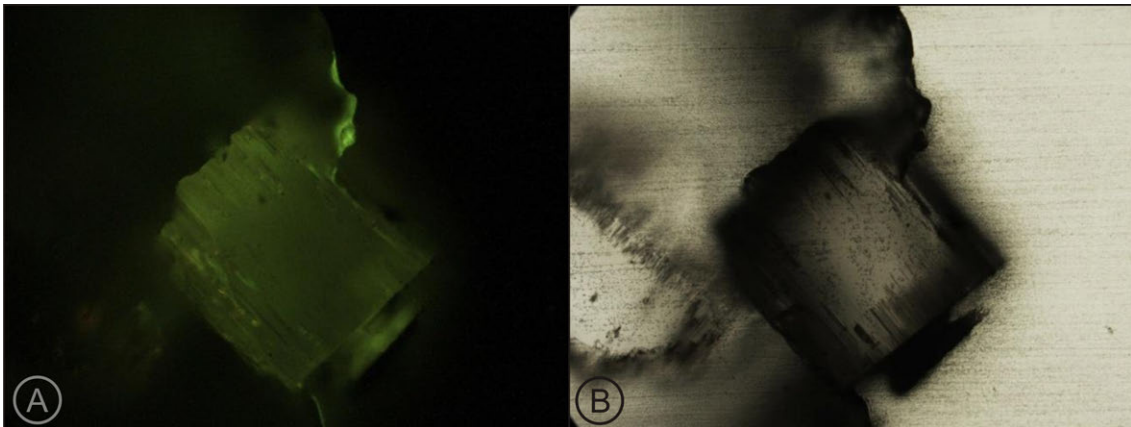


Abb. 39A: Anhydritkristalle können durch Anstrahlen, verursacht durch die KW-Korngrenzenfluide, im Fluoreszenzmikroskop in einem gleichmäßigen Grün erscheinen. Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 39B: Gleicher Bildausschnitt ohne Fluoreszenz bei parallelen Nicols im Durchlicht (RB659.015_1). BB = 800 µm, die dunkle Schattierung entsteht durch Ablöseerscheinungen vom Objektträger und Anlaufen des Salzes. Photo: N. Thiemeyer.

Cluster (oder Nester) aus Anhydritkristallen enthalten ebenfalls einen Teil der KW. So finden sich leicht fluoreszierende Vorkommen in Kernabschnitten, die unter Verwendung einer UV-Niedrigdruckdampfampe (Anregungswellenlänge = 254 nm) keine KW-Vorkommen anzeigen. Die gitterförmige Verteilung fluoreszierender Substanzen innerhalb der Anhydritnester spiegelt die relativ große Oberfläche solcher Cluster, bedingt durch die enorme Anzahl der Anhydritkristalle, wider (Abb. 40).

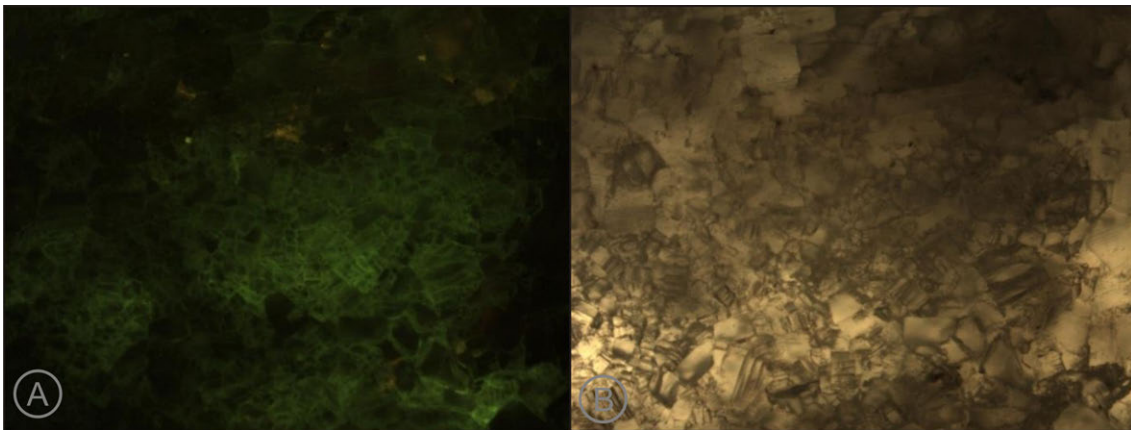


Abb. 40A: Geflecht von KW innerhalb eines Anhydritclusters. Durch die große Oberfläche können sich hier größere Mengen von Fluidphasen ansammeln. Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 40B: Wie A unter parallelen Nicols bei Durchlicht (RB661.006). BB = 700 µm, Photo: N. Thiemeyer.

In Proben mit geringem KW-Anteil reduziert sich die Fluoreszenz organischer Substanzen neben den Anhydritnestern auf transgranulare Risse. Vergleichbar zu Halitkorgrenzen zeigt sich auf den Rissen ein gleichförmiger, auch teils sehr heller Film von fluoreszierendem Material (Abb. 41). Einzelne Blasen oder Tropfen wie bei den Anhydriteinschlüssen sind nicht zu erkennen. Als Risse können auch durch die Probennahme oder Präparation aufgerissene, ehemals intakte Korngrenzen im weiteren Sinne verstanden werden. Diese neu geschaffenen Risse sind in der Lage, deutlich mehr Fluide zu führen als es die intakten Korngrenzen vermögen (Abb. 42).

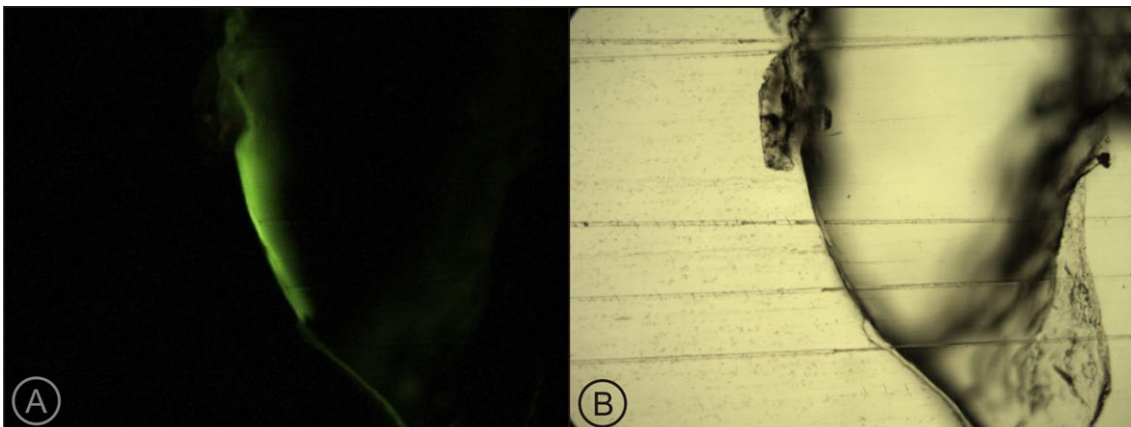


Abb. 41A: Mit KW dekoriertes Riss. (RB659.015_1s). Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 41B: Wie A ohne Fluoreszenz unter parallelen Nicols bei Durchlicht. BB = 1,6 mm, Photo: N. Thiemeyer.

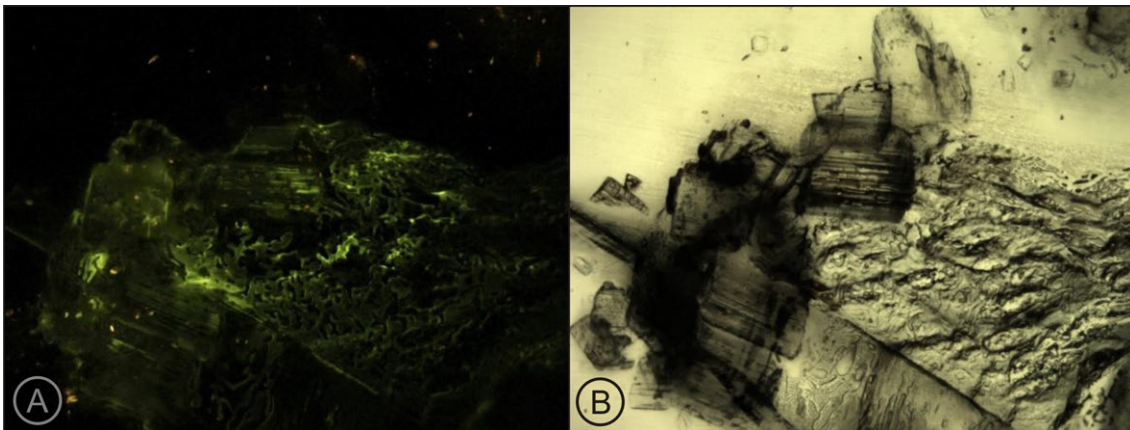


Abb. 42A: Vermutlich ehemals intakte Korngrenze, die im Zuge mechanischer Beanspruchung (bei Probenahme und -präparation) aufgerissen ist (RB658.013_2). Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 42B: Bildäquivalent (ebenso zu Abb. 29) unter parallelen Nicols im Durchlicht. BB = 1,37 mm, Photo: N. Thiemeyer.

In seltenen Fällen sind intragranulare negative Kristallabdrücke in Halitkörnern mit organischer Substanz gefüllt (Abb. 43). Diese Vorkommen sind mengenmäßig aber sehr klein (weniger als 0,1 % des Gesamtgehaltes).

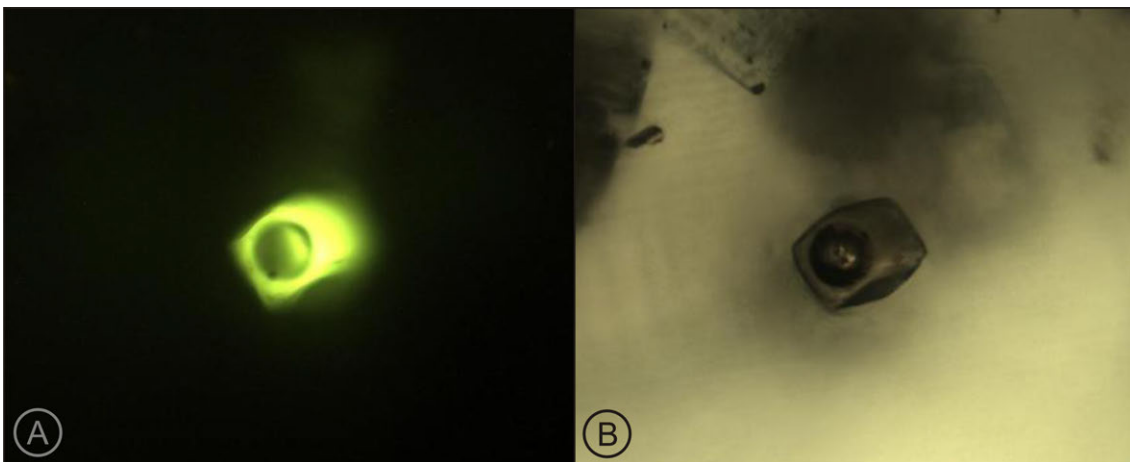


Abb. 43A: Stark fluoreszierender intrakristalliner Einschluss mit organischem Material (RB659.015_1). Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 43B: Wie A unter parallelen Nicols im Durchlicht. BB = 600 µm, Photo: N. Thiemeyer.

6.2.3 Schlussfolgerungen aus der Analyse der Kohlenwasserstoff-Verteilung im Dünnschliff

Insgesamt enthalten die Korngrenzen der Halitkristalle (und deutlich untergeordnet die Korngrenzen der Anhydritkristalle) den Großteil der in den Dünnschliffen zu beobachtenden Fluideinschlüsse. Den zweiten KW-Speichertyp bilden poröse, von spaltflächenparallelen Kapillaren durchzogene Anhydritkristalle und deren Oberflächen. Bereiche mit intakten

Anhydritkristallen weisen vergleichsweise wenig KW und wenn, dann überwiegend an Kornwickeln auf. Sekundäre Fluideinschlüsse entlang verheilter Risse in Halitkristallen oder reliktsch erhaltenen, intrakristalline primäre Fluideinschlüsse sind vergleichsweise selten und bezüglich der in ihnen enthaltenen Fluidmenge sehr gering.

Sowohl die Halitkristalle der Matrix als auch die Anhydritkristalle entlang der Korngrenzen der Halitkristalle oder innerhalb der Anhydritschlieren und -knäule weisen eine z. T. kleinräumig variierende Korneinregelung auf, welche die intensive Verfallung und Deformation der primären Struktur des Knäuelsalzes dokumentiert. Die Halitkristalle entlang von Scherbahnen sind eingeregelt, überwiegend klar und frei von Verunreinigungen durch Fremdminerale oder Fluideinschlüsse. Die Korngrenzen der Halitkristalle sind von Anhydritkristallen sowie dendritischen bis teilweise flächenhaften oder punktuellen Fluideinschlüssen gesäumt. Intrakristalline, nicht im Verlaufe der beim Salzaufstieg ablaufenden Deformationsprozesse unverteilte Fluideinschlüsse kommen aufgrund der stark rekristallisierten Halitkristalle nur selten vor. Die regellos verteilten, in ihren Randbereichen rekristallisierten Anhydritknäule, sowie die an die Korngrenzen verdrängten Fluideinschlüsse und Anhydritkristalle weisen, zusammen mit der Einregelung von Halit- und Anhydritkristallen, auf eine intensive, entlang von Scherbahnen abgelaufene Deformation hin. Die dadurch bedingte Rekristallisation der Halitkristalle führte zu einer Reinigung der Halite und zu einer Verdrängung der Fremdmineral- und Fluideinschlüsse sowie unlöslicher Phasen an die Korngrenzen.

Die gelegentlich vorkommenden offenen und von Fluiden besetzten Risse (Abb. 22C) sind auf die mechanische Beanspruchung des Salzgesteins durch den Bohrprozess, Druckentlastungserscheinungen oder die Probenvorbereitung zurückzuführen. Bei den darin enthaltenen Fluiden handelt es sich um durch die Rissbildung mobilisierte, ursprünglich im Gestein vorhandene Fluide. Die bevorzugt von Anhydriteinschlüssen bzw. Fremdmineralen ausgehenden und von Fluiden besetzten Risse im Halit sind in ihrer räumlichen Erstreckung auf den Wirtskristall begrenzt. Ein Kontakt zu den Korngrenzen ist nur bei einer Kornrandlage der Fremdmineraleinschlüsse zu beobachten. Sie sind i. d. R. auf die Deformationsprozesse während des Salzaufstiegs zurückzuführen. Anthropogen bedingte Risse bzw. Risscharen, die im Zuge der Probengewinnung/-aufbereitung entstanden sind, sind durch durchgehend offene und i. d. R. vollflächig fluidbesetzte Oberflächen gekennzeichnet, an denen noch kein Heilungsprozess zu beobachten ist.

6.2.4 Ergebnisse der mikrostrukturellen Untersuchungen von Dickschliffen (Hellfeld)

Die Dickschliffe wurden hinsichtlich der räumlichen Verteilung und der Lokalisierung der KW bzw. Fluide im Gefüge der Salzgesteine untersucht. Für die Dokumentation der Befunde wurden Stack-Aufnahmen (Bilderstapel entlang der Z-Achse) angefertigt, um die räum-

liche Lage der Fluideinschlüsse besser darstellen zu können, wobei durch die Berechnung eines Stapelbildes ein durchgehend scharfes Abbild der beobachteten Struktur entsteht. Für die Erstellung der Stapelbilder wurden die mit der Software AxioVision von Zeiss aus unterschiedlichen Fokusebenen aufgenommenen Mikroskopbilder mit CombineZP zu einer einzigen Aufnahme zusammengerechnet. Da derartige Aufnahmen jedoch nicht den menschlichen Sehgewohnheiten entsprechen, geht die Zunahme der Bildschärfe mit einem gleichzeitigen Verlust der Tiefenwahrnehmung einher. Um dem entgegen zu wirken, wurde für jede Stack-Aufnahme ein ergänzender Kurzfilm generiert. Durch die Stapeltechnik kommt es in den berechneten Stack-Aufnahmen häufig zu Interferenzeffekten, wodurch die Korngrenzen grünlich-rötlich und die schwärzlich-braunen Fluideinschlüsse/KW zum Teil bläulich schimmern können.

Zum gegenwärtigen Zeitpunkt wurden, ergänzend zu den Dünnschliff-Untersuchungen, fünf anpolierte und nicht abgedeckte Dickschliffe im Format 6 cm x 4 cm angefertigt, von denen bisher drei Schliffe aus den Bohrungen RB659 (UV-aktiv), RB652 (UV-aktiv) und RB647 (UV-inaktiv) untersucht wurden. Gleichzeitig wird jeder Dickschliff als Übersichtsscan (im Maßstab 1:1 mit einer Scanauflösung von 4000 DPI) vollflächig im Hellfeld sowie teilweise (falls möglich) bei gekreuzten Polarisatoren dokumentiert.

In allen untersuchten Dickschliffen wurden unterschiedliche Mengen von KW an den Korngrenzen der Halitkristalle bzw. anhaftend an Anhydritkristallen und entlang von Rissen beobachtet. Die KW erscheinen in den Dickschliffen als schwärzlich bis bräunlich schimmernde Fluideinschlüsse; die salinaren Lösungen stellen farblose bis gräuliche Fluideinschlüsse dar. Die Untersuchungen der Dickschliffe bestätigen die Beobachtungen aus den Dünnschliffen. Die in den Proben enthaltenen salinaren Lösungen und KW konzentrieren sich überwiegend auf den Korngrenzen der Halitkristalle. Dort bilden sie ein unterschiedlich stark verzweigtes Netzwerk aus dendritischen bis kleinflächigen (Abb. 44) bzw. punktuellen Fluideinschlüssen (Abb. 45). Bei Auflockerung oder mechanischen Belastungen kann es durch eine temporäre Bildung von Wegsamkeiten zu lokal begrenzten Freisetzungen bzw. Mobilisierungen und zur Vernetzung der an den Korngrenzen fixierten Fluide kommen. Die Fluide können über die neu entstehenden Wegsamkeiten lokal begrenzt durch das Salz migrieren und gegebenenfalls an anderer Stelle wieder fixiert werden oder z. B. an Stößen von Streckenauffahrungen austreten. Derartige Prozesse finden im Bereich der Auflockerungszone von Auffahrungen statt.

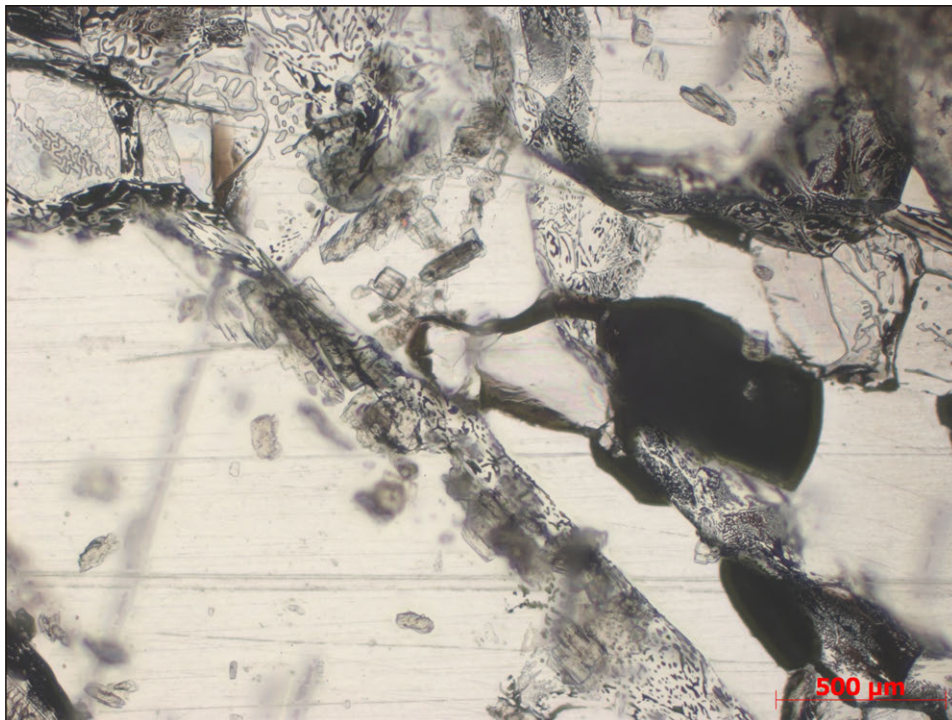


Abb. 44: Typisches, dendritisch ausgebildetes Netzwerk aus schwärzlich-bräunlichen (KW) und farblosen (salinare Lösungen) Fluideinschlüssen entlang der Korngrenzen der Halitkristalle (RB647, Teufe 4,10 m bis 4,16 m, Stack-Aufnahme über 400 µm, Hellfeld).

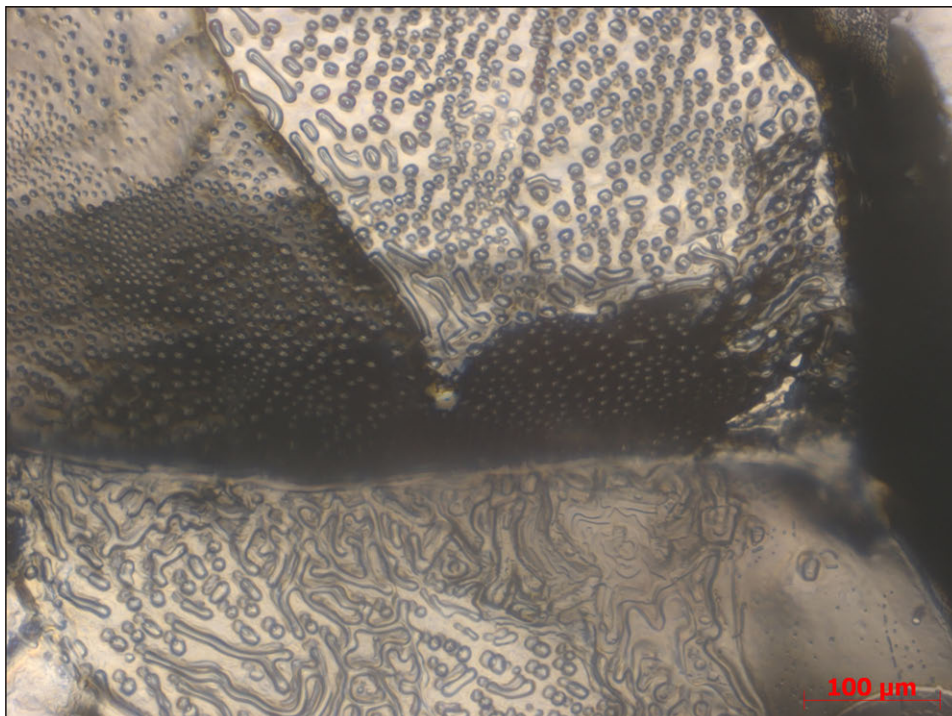


Abb. 45: Dendritisch ausgebildetes Netzwerk und punktuelle, voneinander isolierte Fluideinschlüsse (salinare Lösung + KW) auf der Korngrenzen-Oberfläche eines Halitkristalls. Es dominieren deutlich Einschlüsse salinärer Lösungen. Die schwärzlich-braune Farbe wird durch an den Korngrenzen befindliches Kondensat hervorgerufen. Aufgrund der Beleuchtung und der Stapeltechnik werfen zahlreiche Fluideinschlüsse einen Schatten auf die Kornoberfläche (RB647, Teufe 4,10 m bis 4,16 m, Stack-Aufnahme über 200 µm, Hellfeld).

Neben den Korngrenzen der Halitkristalle sind auch an der Oberfläche von Anhydritkristallen zum Teil KW in Form anhaftender Menisken, Tropfen oder Filme zu beobachten. Die spaltflächenparallelen Kapillaren in einzelnen Anhydritkristallen bzw. die Kornzwickel zwischen mehreren Anhydritkörnern können ebenfalls KW/Fluideinschlüsse enthalten (Abb. 46 und 47). Die Menge dieser KW ist jedoch deutlich geringer als die der Fluideinschlüsse, die sich an den Korngrenzen der Halitkristalle befinden.

Einen weiteren Typ von KW-Einschlüssen im Salzgestein stellen sekundäre Risse im Halit (Abb. 48A-C) bzw. Anhydrit dar (Abb. 48C-D), welche sowohl durch natürliche deviatorische Belastungen, beispielsweise im Zuge des Salzaufstiegs, als auch vor allem durch anthropogene Einflüsse (Auflockerungszone, Probengewinnung/ -aufbereitung) entstehen können. Die KW bilden hier durchgehend bräunlich bis schwarze, flächenhafte Fluidfilme auf der Oberfläche des Risses. Sie entstammen benachbarten, im Ergebnis der Deformation freigesetzten KW-Vorkommen, wie Korngrenzen und/oder Kapillaren. Bei den beobachteten Rissen handelt sich nicht um großflächig offene Rissysteme, sondern vielmehr immer um lokal und auf wenige 100 μm bis wenige mm Ausdehnung begrenzte Risse, in die die unter Druck stehenden Fluide eingedrungen sind. Eine großflächige Verbreitung von Rissen konnten in den Proben nicht beobachtet werden.

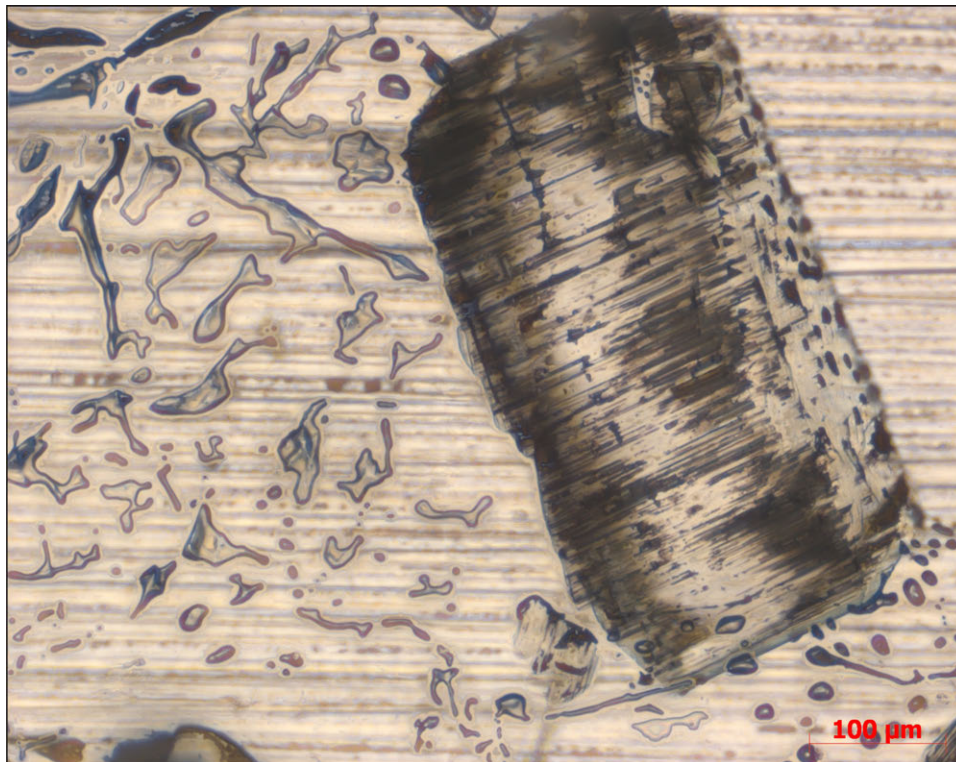
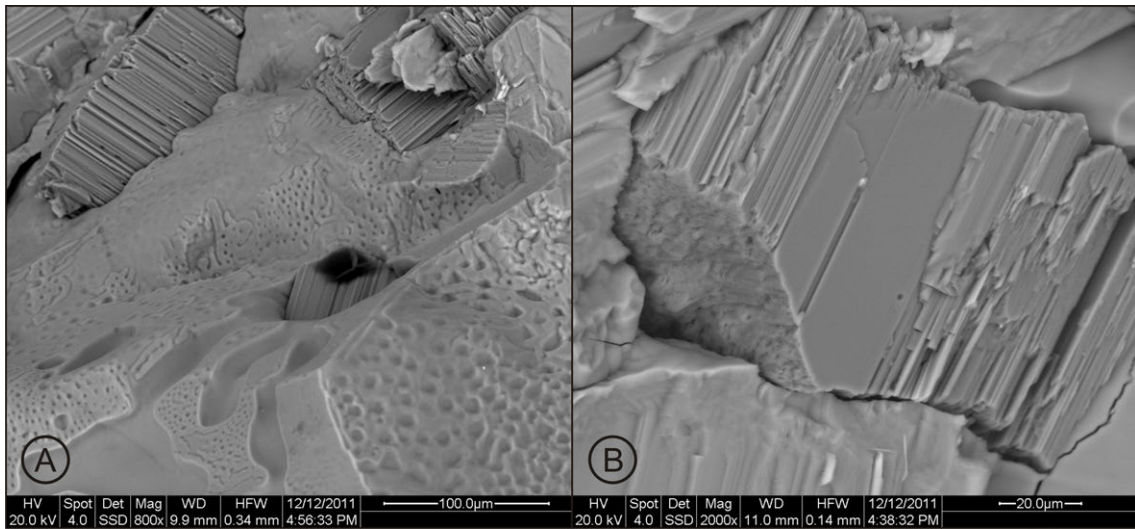
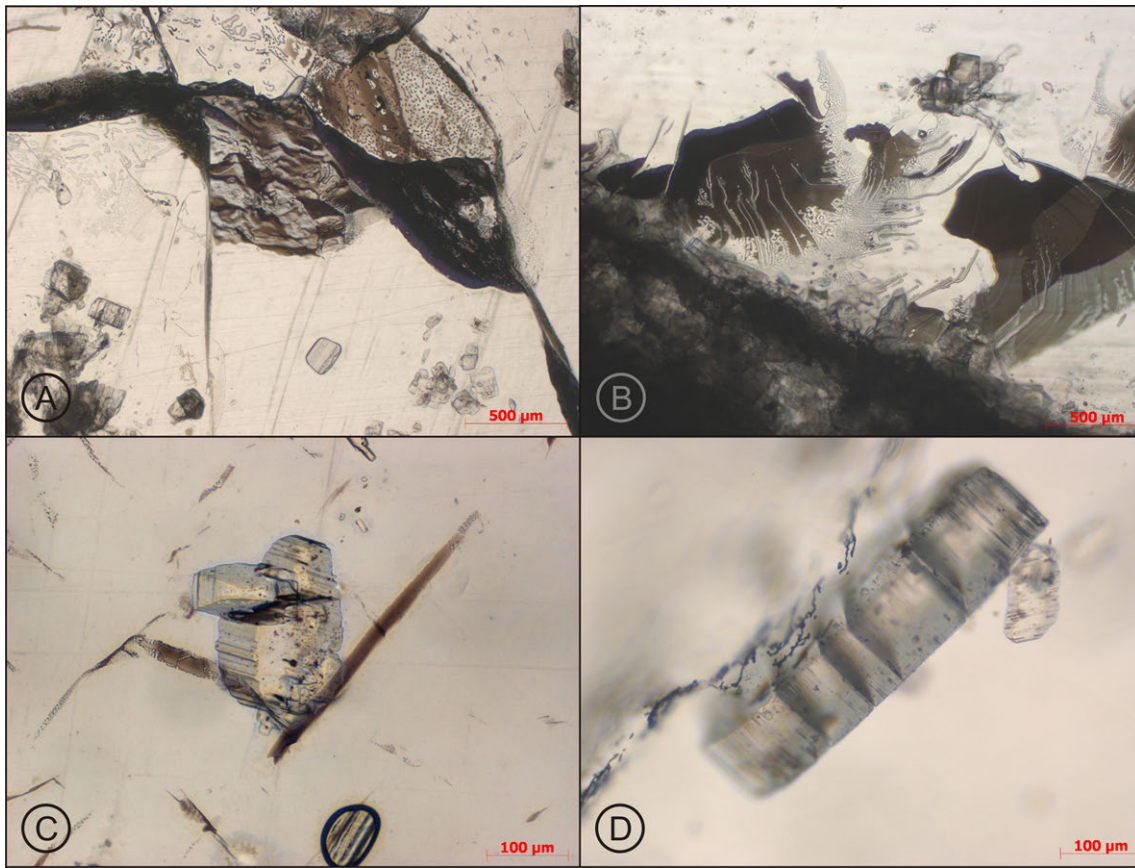


Abb. 46: Anhydritkristall mit spaltflächenparallelen, KW-gefüllten Kapillaren. An der Oberfläche haften, senkrecht zum Verlauf der Kapillare, KW-Tropfen. Die Fluideinschlüsse im benachbarten Halit enthalten saline Restlösung bzw. KW. Bei den Streifen im Bildhintergrund handelt es sich um präparationsbedingte Schleifspuren (RB659, Teufe 2,55 m bis 2,61 m, Stack-Aufnahme über 150 μm , Hellfeld).



- Abb. 47: Aufnahmen der Korngrenzen der Anhydrit-/Halitkristalle an einer Probe aus der Bohrung RB659 bei einer Teufe von 2,55 m bis 2,61 m im Rasterelektronenmikroskop (ESEM).
- Abb. 47A: Anhydritkristalle mit spaltflächenparallelen Kapillaren in Halitmatrix. Die Oberfläche der Matrix zeigt das kapillare Netzwerk an den Korngrenzen der Halitkristalle. An dem zentral gelegenen Anhydritkristall haften noch Reste von KW (schwarz, der KW-Nachweis erfolgte durch die EDX-Analyse).
- Abb.47B: Anhydritkristall mit stark vernarbter und von Kapillaröffnungen durchzogener Oberfläche. Auf der Spaltfläche (Bildmitte) wurde eine Kapillare angeschnitten (im REM-Bild sind selbst die Menisken der eingeschlossenen Lösung noch sichtbar).



- Abb. 48: Verschiedene, KW-besetzte Risse aus einer Probe der Bohrung RB647 (48A bis C) bei der Teufe 4,10 m bis 4,16 m und RB652 (48D) bei der Teufe 2,43 m bis 2,49 m im Hellfeld.
- Abb. 48A: Stack-Aufnahme über 680 µm. Aufgelockerte, KW-besetzte Korngrenze (schwarz bis bräunlich) mit neu entstandenen, offenen Rissen, die durch eindringende KW bräunlich verfärbt sind. Der blaue Schimmer auf der Korngrenze entsteht durch die Berechnung der Stack-Aufnahme durch Bildinterferenzen.
- Abb. 48B: Stack-Aufnahme über 350 µm. Sekundäre, KW-besetzte Risse im Halit neben einer benachbarten Anhydritlage. Die Risse entstanden durch die mechanische Beanspruchung während der Schliffpräparation; bei dem bläulichen Schimmer handelt es sich um einen Interferenzeffekt.
- Abb. 48C: Stack-Aufnahme über 100 µm. KW-führender Anhydritkristall innerhalb eines Halits. Die umliegenden Risse sind KW-führend und in ihrer Ausdehnung stark begrenzt. Eine aufgerissene Spaltfläche im Anhydrit ist ebenfalls mit bräunlichen KW besetzt.
- Abb. 48D: Stack-Aufnahme über 45 µm. Anhydritkristall mit mehreren KW-besetzten Spaltflächen, sowie Kapillaren und oberflächlich anhaftenden KW-Menisken.

Primäre, intrakristalline Fluideinschlüsse bzw. sekundäre, intrakristalline Fluideinschlüsse (verheilte Altrisse) sind nur vereinzelt und dann überwiegend in nicht rekristallisierten, „originären“ Halitkristallen enthalten, wo sie ein typisches Muster aus würfelförmigen Fluideinschlüssen oder vernetzten, lokal begrenzten Kammern bilden. Neben salinaren Lösungen sind in diesen Einschlüssen auch Gasblasen (vermutlich Methan bzw. Stickstoff) enthalten (Abb. 49).

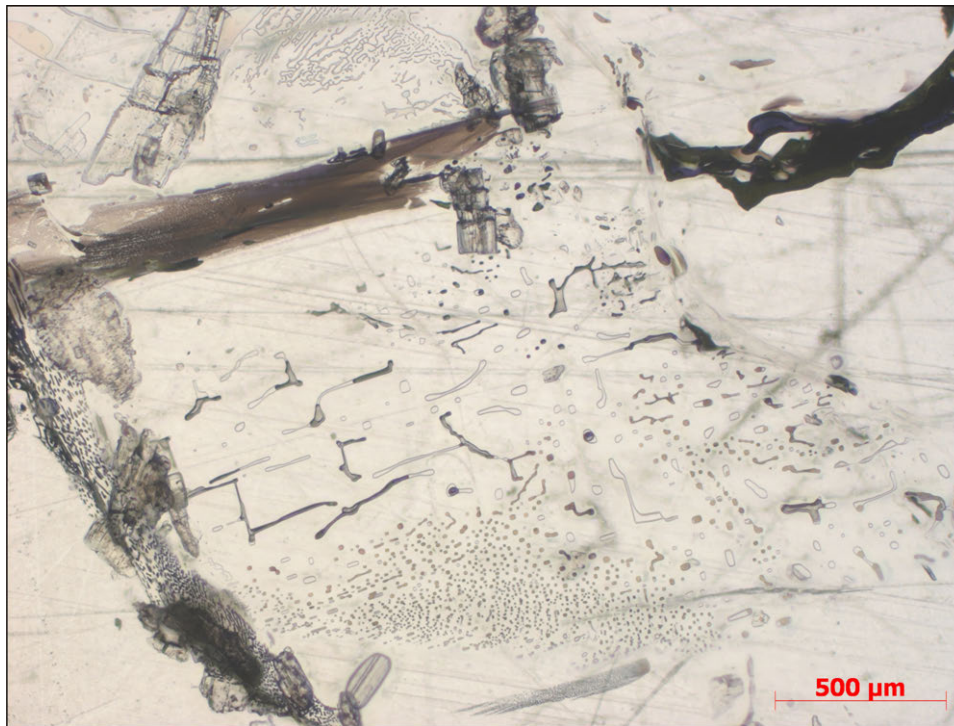


Abb. 49: Reliktisch erhaltene, primäre, würfelförmige bis leicht vernetzte Fluideinschlüsse mit einer Gasphase innerhalb eines primären, nicht rekristallisierten Halitkristalls. Die Korngrenzen sind von Anhydrit und schwärzlich-braunen Fluideinschlüssen (KW) gesäumt. In der oberen Bildhälfte befinden sich eine durch KW schwarz verfärbte Korngrenze, sowie ein offener und durch KW bräunlich verfärbter, sekundärer Riss im Halit (RB647, Teufe 4,10 m bis 4,16 m, Stack-Aufnahme über 600 µm, Hellfeld).

6.2.5 Ergebnisse der Subkorn-Analysen

Die Subkorn-Analysen erfolgten an Knäuelsalz-Proben, die mittel- bis grobkristallin ausgebildet sind (PAPE 1993). Die Steinsalzkörner sind teilweise elongiert und schwanken in ihrer Größe zwischen etwa 50 µm und mehreren Zentimetern. Die Halitgroßkristalle sind als sekundäre, diagenetische Bildungen aus Porenlösungen im noch nicht vollständig verfestigten Salzsediment zu deuten, was sich durch fehlende Chevronstrukturen und erhöhte Br-Werte ausdrückt (POPP et al. 2002). Es könnte sich allerdings auch um Drucklösungsstrukturen von Altkörnern handeln, was die saumartige Anreicherung von Anhydritkristallen im Randbereich der Kristalle erklären würde. Subkörner deuten auf kristallplastische Deformation hin und können durch eine tektonisch induzierte Verformung der Halitgroßkristalle entstanden sein.

Im Zuge der bisherigen Subkornanalysen wurden für 10 Proben mit je mindestens 240 bis maximal 694 gemessenen Subkörnern Paläodifferentialspannungen ermittelt. Die Subkörner sind in ihrer Größe und Form sehr variabel. Die Durchmesser (der Kreisäquivalente zu den Subkornflächen) schwanken im Bereich zwischen <10 und 800 µm.

Je nach Probe gibt es einzelne Körner, die bis über 1 mm groß sind. In der Regel ergibt sich aber eine Häufung im Bereich von 10 bis 190 μm . Die Subkörner beschreiben, entgegen den Beobachtungen bei künstlich deformierten oder synthetischen Salzproben (SCHLÉDER & URAI 2005; ZULAUF et al. 2010), sehr irreguläre Formen. So finden sich neben quadratischen und polygonalen Körnern auch deutlich gestreckte Formen (Abb. 50). Die Subkorn Grenzen treten mit unterschiedlicher Intensität auf und sind teilweise nur sehr schwach zu erkennen. Eine kristallographisch bedingte Vorzugseinregelung ist nur im Ansatz zu erkennen. Die charakteristischen Schachbrettmuster (ZULAUF et al. 2010) sind in den Proben nur schemenhaft vorhanden.

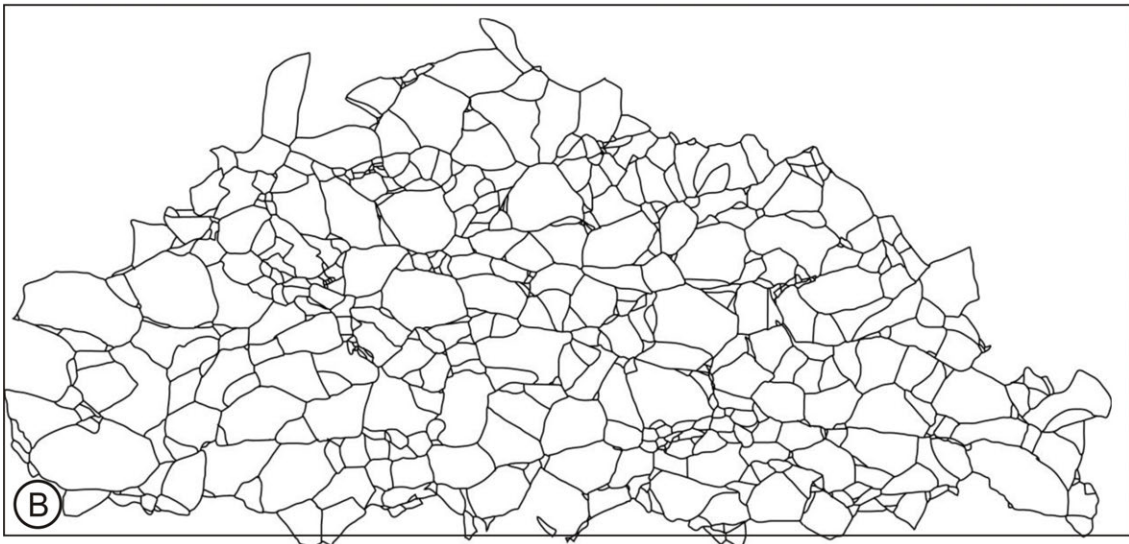
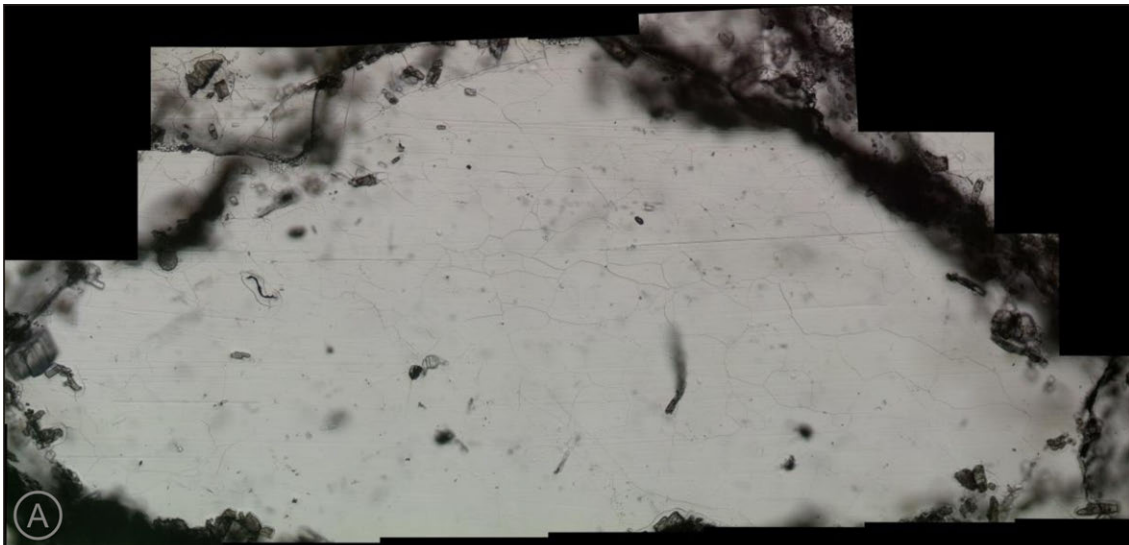


Abb. 50A: Geätztes Steinsalz Korn der Probe 655.009s mit Subkörnern. Parallele Nicols im Durchlicht. Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 50B: Extrahierte Subkorn Grenzen. Formen und Größen der einzelnen Subkörner sind uneinheitlich. Eine kristallographisch bedingte Vorzugsorientierung fehlt. BB = 1 cm, Photo: N. Thiemeyer.

Neun von zehn Proben zeigen ein Verteilungsmaximum der Subkorngrößen im Intervall zwischen 10 und 70 μm (Abb. 51). Ein gemeinsamer Trend besteht darin, dass mit zunehmender Subkorngröße die Anzahl der Subkörner abnimmt, bis sich ab einer Korngröße von etwa 800 μm nur noch einzelne Ausreißer wiederfinden. Die Verteilungen können unter Betrachtung dieses Trends als negativ exponentiell bezeichnet werden.

Die mit Formel 14 (siehe Kap. 6.1.3) berechneten Paläodifferentialspannungen sind gering, bewegen sich aber in einem für natürlich deformiertes Steinsalz zu erwartendem Wertebereich (URAI & SPIERS 2007). Sie liegen bei den 10 analysierten Proben zwischen 0,94 und 1,76 MPa, zeigen demnach untereinander keine signifikanten Abweichungen. Die nach Formel 6.2 berechneten Strainraten liegen im Bereich von $2,8\text{E-}11$ bis $2,4\text{E-}10$ (Tab. 5). Die hier für die Subkornbildung angenommene Deformationstemperatur wird mit 150 °C im abgeschätzten Bereich maximaler Versenkungstiefe angesiedelt.

Tab. 5: Paläopiezometrische Daten von zehn Proben. Die Paläodifferentialspannungen sind unter Verwendung von Formel 14 (siehe Kap. 6.1.3) mit Hilfe der Subkorn Durchmesser berechnet. Die Strainrate wird durch die Paläodifferentialspannung bei einer gewählten Temperatur von $T = 150\text{ °C}$ ermittelt (Formel 14)

Probe	Anzahl der Subkörner	Mittlerer Subkorn-durchmesser [μm]	Paläodifferentialspannung σ' [MPa]	Strainrate bei $T = 150\text{ °C}$ [s^{-1}]
655.009	545	182	1.16	$5.7\text{E-}11$
655.009s	694	180	1.17	$5.9\text{E-}11$
658.013_2	694	180	1.17	$5.9\text{E-}11$
658.013_2s	344	113	1.76	$2.4\text{E-}10$
659.015_1	327	201	1.06	$4.2\text{E-}11$
659.015_1s	260	225	0.96	$3.0\text{E-}11$
659.017	423	181	1.16	$5.7\text{E-}11$
659.017s	627	231	0.94	$2.8\text{E-}11$
661.006	403	123	1.62	$1.8\text{E-}10$
661.006s	657	167	1.25	$7.4\text{E-}11$

Die jeweils analysierten Schliffpaare stimmen in drei von fünf Fällen sehr gut überein (Abb. 52). Probe 658.013_2s und 661.006 sind Ausreißer hin zu höheren Differentialspannungen, wobei diese immer noch als relativ gering zu bezeichnen sind. Ein Zusammenhang zwischen der Menge an KW und den Paläodifferentialspannungen ist z. Zt. nicht zu erkennen. Die bis zum gegenwärtigen Zeitpunkt analysierte Probenanzahl ist noch zu gering, um sinnvolle statistische Auswertungen zuzulassen.

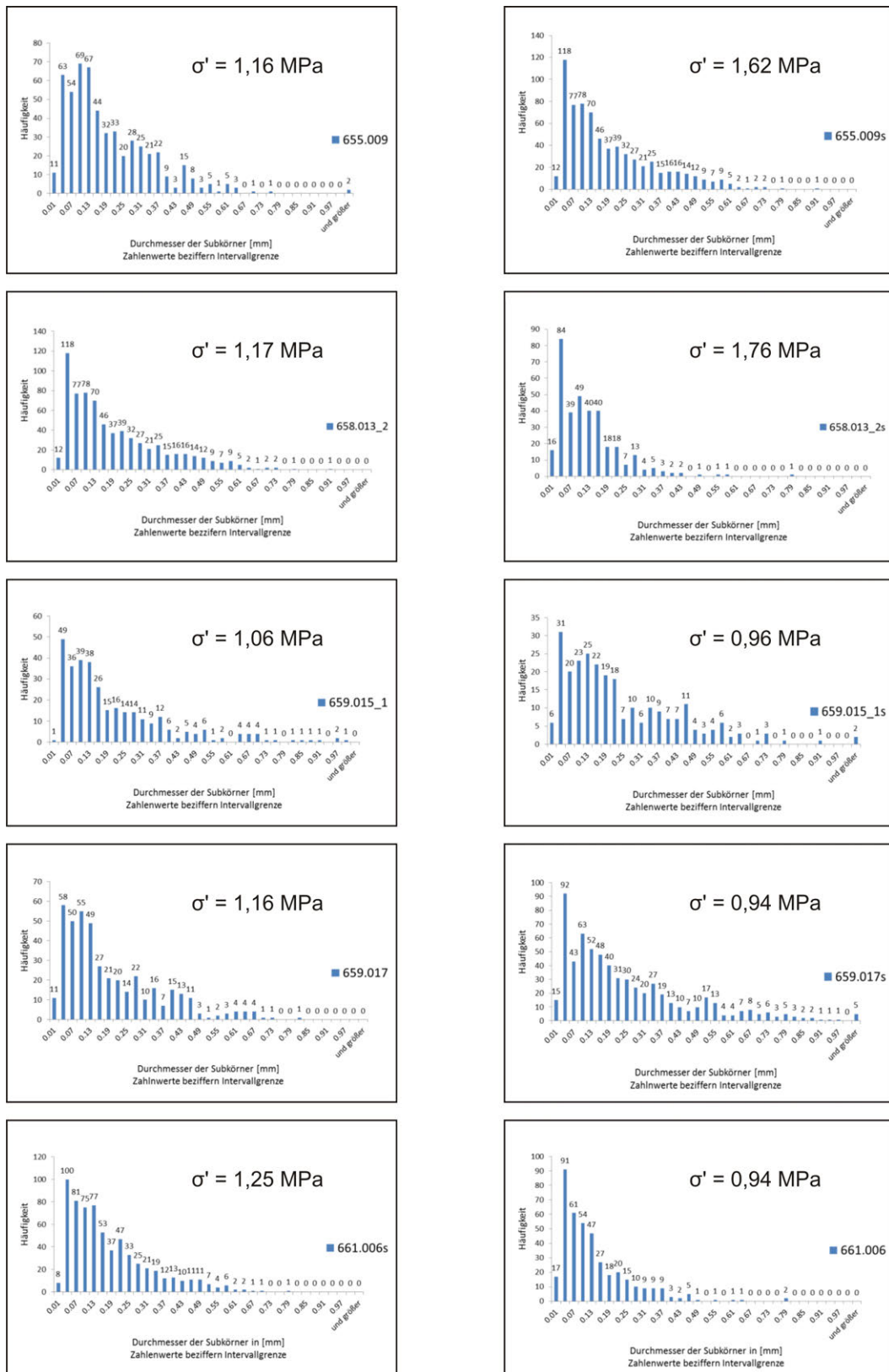


Abb. 51: Übersicht der Subkorngrößenverteilung und der Paläodifferentialspannung. Die Verteilungsmuster der Subkorngrößen verlaufen negativ exponentiell. Die Paläodifferentialspannungen liegen zwischen 0,94 und 1,76 MPa. Photo: N. Thiemeyer.

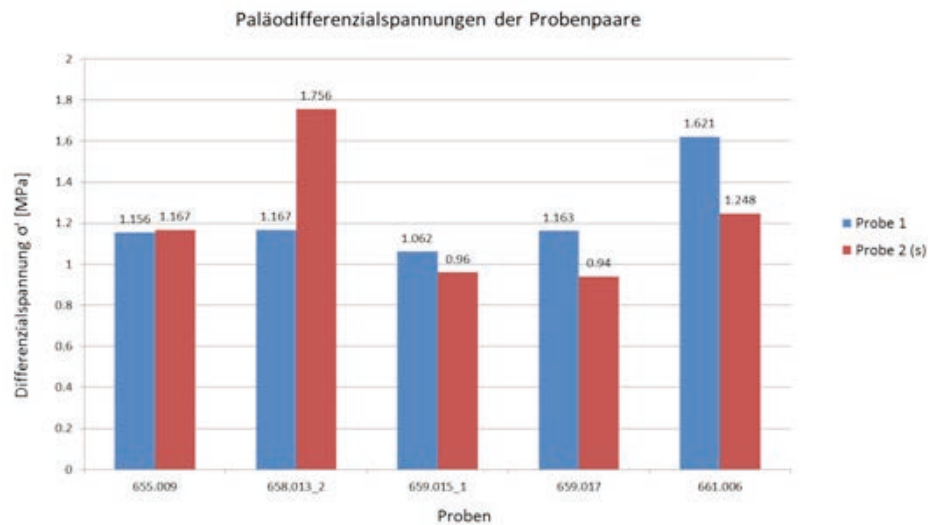


Abb. 52: Die ermittelten Paläodifferenzialspannungen der Probenpaare stimmen in drei von fünf Fällen sehr gut überein und bezeugen einheitlich niedrige Differenzialspannungen. Abb.: N. Thiemeyer.

Die paläopiezometrischen Analysen, basierend auf der Größe der Halit-Subkörner, zeigen bisher keine eindeutige Korrelation zur Verteilung der KW. Allerdings sind diese Proben im Hinblick auf Kornformen und deren Einregelungsgrad (siehe POPP et al. 2002) noch nicht abschließend untersucht worden. Ein ggf. existierender Zusammenhang zwischen der KW-Verteilung und den Paläospannungen bzw. der strukturgeologischen Position der KW-Einschlüsse im Internbau des Salzstocks wird weiterhin in Betracht gezogen und im AP-Abschlussbericht detailliert bewertet.

6.2.6 Erste Ergebnisse der computertomographischen Untersuchungen

Die Fluidphasen der bisher untersuchten Knäuelsalz-Proben erscheinen in den CT-Aufnahmen als schwarze Partien. Fluid-Filme sind nur lokal sehr begrenzt ausgebildet und zeichnen sich relativ deutlich auf Korngrenzen, aber auch als Zwickelfüllungen ab (Abb. 53). Bei bestmöglicher Auflösung sind selbst tropfenförmige Fluidphasen entlang von Korngrenzen zu erkennen. Werden die schwarzen Fluidpartien manuell aus dem Datensatz extrahiert, kann das dreidimensionale Verteilungsmuster dargestellt und über die Voxelzahl der Volumenanteil der Fluidphasen in Bezug zum Gesamtvolumen, errechnet werden. Abb. 54 zeigt ein extrahiertes Fluidmuster, das eine Quantifizierung der Fluidphasen zulässt. Bei Vernachlässigung der Fluideinschlüsse unterhalb der Detektionsschwelle der Messung, die sich u. a. aus der Probengröße und den Messparametern ergibt, lässt sich für dieses Beispiel ein Fluid-Volumenanteil von 0,2 % ermitteln. Die Arbeiten werden intensiv fortgesetzt.

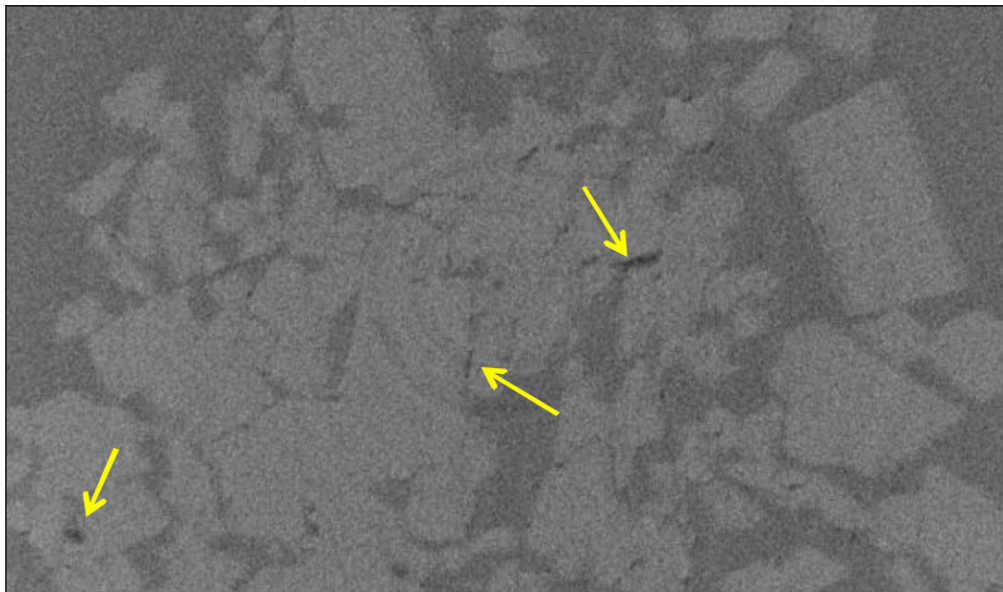


Abb. 53: CT-Aufnahme von Probe 655.016_2. Schwarze Fluidpartien (gelbe Pfeile) dekorieren Korngrenzen oder füllen Zwickel aus. Die hellen Mosaik sind Anhydritkristalle. Ringartige Strukturen im Zentrum stellen Artefakte dar, die bei der Messung durch die Rotation der Probe und detektorbedingte Pixelfehler entstehen. BB = 1,2 mm. Photo: N. Thiemeyer.

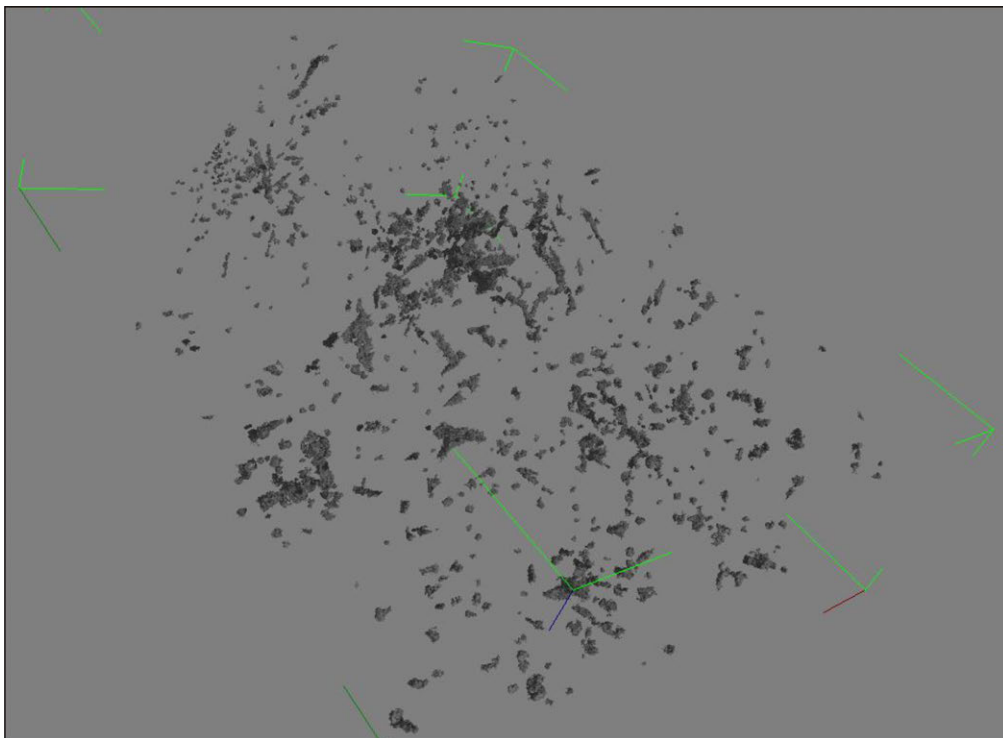


Abb. 54: CT-Aufnahme von Probe 655.016_2. Extrahierte Fluidphasen können anhand der Voxelzahlen in ihrem Gesamtanteil eines definierten Volumens berechnet werden. $\text{Volumen} = 0,5 \cdot 0,5 \cdot 0,1 \text{ mm}^3$. Bei allen dargestellten Fluidphasen handelt es sich um die Gesamtheit an Fluid. Hier kann (noch) nicht zwischen wässrigen Lösungen und KW unterschieden werden. Die ermittelten 0,2 Vol.-% sind bei Vernachlässigung der Fluideinschlüsse unterhalb der Detektionsschwelle als Obergrenze für den KW-Gehalt in der untersuchten Probe anzusehen, wovon der wässrige Lösungsanteil abzuziehen ist. Photo: N. Thiemeyer.

7 Gehalte, Zusammensetzung und Genese der Kohlenwasserstoffe im Staßfurt-Hauptsalz

7.1 *Überblick über die im Jahr 2011 untersuchten Gesteinsproben aus dem Querschlag 1 West*

Für die Untersuchung der Gehalte und der räumlichen Verteilung von gasförmigen, niedrig siedenden und höher siedenden KW im Erkundungsbergwerk Gorleben wurden bislang 110 Salzproben im Zeitraum zwischen der 11. bis 20. Kalenderwoche 2011 im Querschlag 1 West genommen und in den Laboren der BGR untersucht. Dafür wurden über das Hauptsalz repräsentativ verteilte 6 m lange, vollständig gekernte Bohrungen gestoßen (siehe Kap. 2 und 4). Aus dem letzten Kernmarsch jeder Bohrung wurden für die Analysen der KW fünf Proben im gleichen Abstand entnommen. In Abb. 55 ist die Lage der Bohrungen im Riss der 840 m-Sohle dargestellt.

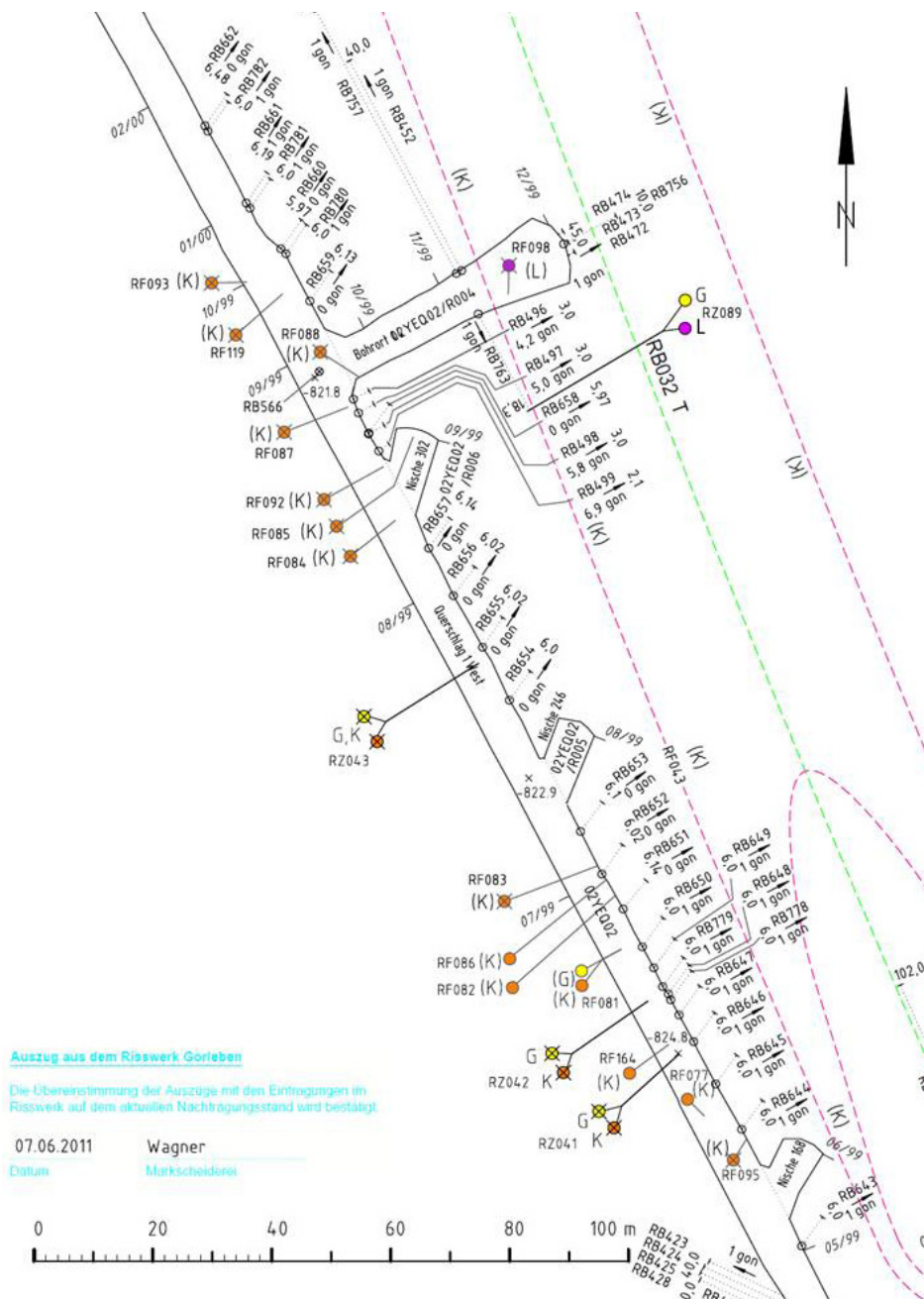


Abb. 55: Lage der Bohransatzpunkte und des Bohrverlaufes der beprobten Kurzkernbohrungen RB643 – RB659 sowie RB778-RB782 im Sohlenriss der 840 m-Sohle (Querschlag 1 West).

Zusätzlich zur Probenbezeichnung der DBE wurden an der BGR laboreigene Nummern des Laborinformations- und Management-Systems (LIMS) vergeben. In Tab. 6 sind die für die Zuordnung relevanten Probenbezeichnungen dargestellt. Aufgrund von Undichtigkeiten (U) der Probencontainer konnten an wenigen Proben keine gasförmigen (C_1 - C_6) KW bestimmt werden. Wegen analytischer Probleme (A) während einzelner Messungen konnten an einzelnen Proben keine niedrig siedenden (C_7 - C_{10}) bzw. höher siedenden KW (C_{11} - C_{40}) bestimmt werden.

Tab. 6: Bezeichnungen der untersuchten Proben aus dem Querschlag 1 West.
 (U – Undichtigkeiten der Probencontainer; A – analytische Probleme)

Limsnummer	Probenbezeichnung des Einsenders	Kurzbohrung Subprobe	Position		Datum der Probenahme	Einwaage Salz [g]	C1-C6	C7-C10	C11-C40
1102526	02YEQ02RB658.008	Gorleben RB658_E	4,63	m	16.03.2011	203,6		A	
1102527	02YEQ02RB656.001	Gorleben RB656_A	5,86	m	17.03.2011	171,2			
1102528	02YEQ02RB656.004	Gorleben RB656_D	4,96	m	17.03.2011	209,6			
1102529	02YEQ02RB656.003	Gorleben RB656_C	5,26	m	17.03.2011	172,5			
1102530	02YEQ02RB656.005	Gorleben RB656_E	4,66	m	17.03.2011	192,7			
1102531	02YEQ02RB657.001	Gorleben RB657_A	5,86	m	18.03.2011	187,6	U		
1102532	02YEQ02RB657.002	Gorleben RB657_B	5,56	m	18.03.2011	199,9			
1102533	02YEQ02RB657.003	Gorleben RB657_C	5,26	m	18.03.2011	208,3			
1102534	02YEQ02RB657.004	Gorleben RB657_D	4,96	m	18.03.2011	194,6			
1102535	02YEQ02RB657.005	Gorleben RB657_E	4,66	m	18.03.2011	201,3			
1102536	02YEQ02RB658.001	Gorleben RB658_A	5,88	m	16.03.2011	184,4			
1102537	02YEQ02RB658.003	Gorleben RB658_B	5,58	m	16.03.2011	179,6			
1102538	02YEQ02RB658.004	Gorleben RB658_C	5,27	m	16.03.2011	177,4			
1102539	02YEQ02RB658.005	Gorleben RB658_D	4,97	m	16.03.2011	211,6			
1102540	02YEQ02RB659.002	Gorleben RB659_A	5,86	m	15.03.2011	195,4			
1102541	02YEQ02RB659.004	Gorleben RB659_B	5,56	m	15.03.2011	211,7			
1102542	02YEQ02RB659.005	Gorleben RB659_C	5,26	m	15.03.2011	188,3			
1102543	02YEQ02RB659.006	Gorleben RB659_D	4,96	m	15.03.2011	206,9			
1102544	02YEQ02RB659.008	Gorleben RB659_E	4,66	m	15.03.2011	188,0			
1102562	02YEQ02RB656.002	Gorleben RB656_B	5,56	m	17.03.2011	187,3			
1102565	02YEQ02RB655.001	Gorleben RB655_A	5,86	m	21.03.2011	185,0			
1102566	02YEQ02RB655.002	Gorleben RB655_B	5,56	m	21.03.2011	214,3			
1102567	02YEQ02RB655.015	Gorleben RB655_C	5,26	m	21.03.2011	184,8			
1102568	02YEQ02RB655.006	Gorleben RB655_D	4,96	m	21.03.2011	191,5			
1102569	02YEQ02RB655.007	Gorleben RB655_E	4,66	m	21.03.2011	198,9			
1102575	02YEQ02RB651.003	Gorleben RB651_A	5,86	m	25.03.2011	200,5			
1102576	02YEQ02RB651.004	Gorleben RB651_B	5,56	m	25.03.2011	183,8			
1102577	02YEQ02RB651.005	Gorleben RB651_C	5,26	m	25.03.2011	195,3			
1102578	02YEQ02RB651.006	Gorleben RB651_D	4,96	m	25.03.2011	195,5			
1102579	02YEQ02RB651.007	Gorleben RB651_E	4,65	m	25.03.2011	199,1			
1102584	02YEQ02RB652.002	Gorleben RB652_A	5,86	m	24.03.2011	183,8			
1102585	02YEQ02RB652.003	Gorleben RB652_B	5,56	m	24.03.2011	202,9	U		
1102586	02YEQ02RB652.005	Gorleben RB652_C	5,26	m	24.03.2011	179,5			
1102587	02YEQ02RB652.006	Gorleben RB652_D	4,98	m	24.03.2011	172,8			
1102588	02YEQ02RB652.007	Gorleben RB652_E	4,66	m	24.03.2011	188,8			
1102592	02YEQ02RB653.001	Gorleben RB653_A	5,86	m	23.03.2011	188,0			
1102593	02YEQ02RB653.003	Gorleben RB653_B	5,56	m	23.03.2011	197,9			
1102594	02YEQ02RB653.004	Gorleben RB653_C	5,26	m	23.03.2011	210,3			
1102595	02YEQ02RB653.005	Gorleben RB653_D	4,96	m	23.03.2011	175,8			
1102596	02YEQ02RB653.006	Gorleben RB653_E	4,66	m	23.03.2011	186,6			
1102599	02YEQ02RB654.001	Gorleben RB654_A	5,86	m	22.03.2011	213,9			
1102600	02YEQ02RB654.002	Gorleben RB654_B	5,56	m	22.03.2011	173,0			
1102601	02YEQ02RB654.004	Gorleben RB654_C	5,26	m	22.03.2011	178,0			
1102602	02YEQ02RB654.005	Gorleben RB654_D	4,96	m	22.03.2011	223,4			
1102603	02YEQ02RB654.006	Gorleben RB654_E	4,66	m	22.03.2011	188,0			
1102643	02YEQ02RB643.006	Gorleben RB643_A	5,86	m	02.05.2011	204,3			
1102644	02YEQ02RB643.004	Gorleben RB643_B	5,56	m	02.05.2011	205,7			
1102645	02YEQ02RB643.003	Gorleben RB643_C	5,26	m	02.05.2011	198,9			

Fortsetzung Tab. 6:

Limsnummer	Probenbezeichnung des Einsenders	Kurzbohrung Subprobe	Position		Datum der Probenahme	Einwaage Salz [g]	C1-C6	C7-C10	C11-C40
1102646	02YEQ02RB643.002	Gorleben RB643_D	4,96	m	02.05.2011	212,6			
1102647	02YEQ02RB643.001	Gorleben RB643_E	4,66	m	02.05.2011	205,2			
1102650	02YEQ02RB644.007	Gorleben RB644_A	5,86	m	03.05.2011	204,4			
1102651	02YEQ02RB644.006	Gorleben RB644_B	5,56	m	03.05.2011	207,0			
1102652	02YEQ02RB644.004	Gorleben RB644_C	5,27	m	03.05.2011	222,2			
1102653	02YEQ02RB644.003	Gorleben RB644_D	4,97	m	03.05.2011	182,0			
1102654	02YEQ02RB644.002	Gorleben RB644_E	4,67	m	03.05.2011	194,7			
1102659	02YEQ02RB645.001	Gorleben RB645_A	5,86	m	04.05.2011	202,8			
1102660	02YEQ02RB645.003	Gorleben RB645_B	5,56	m	04.05.2011	209,1			
1102661	02YEQ02RB645.004	Gorleben RB645_C	5,26	m	04.05.2011	205,1			
1102662	02YEQ02RB645.005	Gorleben RB645_D	4,96	m	04.05.2011	196,0			
1102663	02YEQ02RB645.006	Gorleben RB645_E	4,66	m	04.05.2011	204,3			
1102666	02YEQ02RB648.002	Gorleben RB648_A	5,86	m	05.05.2011	208,4			
1102667	02YEQ02RB648.004	Gorleben RB648_B	5,56	m	05.05.2011	213,6			
1102668	02YEQ02RB648.005	Gorleben RB648_C	5,26	m	05.05.2011	191,2			
1102669	02YEQ02RB648.006	Gorleben RB648_D	4,96	m	05.05.2011	211,1			
1102670	02YEQ02RB648.007	Gorleben RB648_E	4,66	m	05.05.2011	206,4			
1102678	02YEQ02RB646.001	Gorleben RB646_A	5,86	m	06.05.2011	200,5			
1102679	02YEQ02RB646.003	Gorleben RB646_B	5,56	m	06.05.2011	210,1			
1102680	02YEQ02RB646.004	Gorleben RB646_C	5,26	m	06.05.2011	201,7			A
1102681	02YEQ02RB646.005	Gorleben RB646_D	4,96	m	06.05.2011	205,0			
1102682	02YEQ02RB646.006	Gorleben RB646_E	4,66	m	06.05.2011	207,9			
1102685	02YEQ02RB647.001	Gorleben RB647_A	5,86	m	09.05.2011	210,0			
1102686	02YEQ02RB647.003	Gorleben RB647_B	5,56	m	09.05.2011	210,3			
1102687	02YEQ02RB647.004	Gorleben RB647_C	5,25	m	09.05.2011	214,0			
1102688	02YEQ02RB647.005	Gorleben RB647_D	4,96	m	09.05.2011	199,6			
1102689	02YEQ02RB647.006	Gorleben RB647_E	4,66	m	09.05.2011	213,6			
1102692	02YEQ02RB649.006	Gorleben RB649_A	5,86	m	11.05.2011	213,8			
1102693	02YEQ02RB649.008	Gorleben RB649_B	5,56	m	11.05.2011	189,2			
1102694	02YEQ02RB649.009	Gorleben RB649_C	5,26	m	11.05.2011	207,5			
1102695	02YEQ02RB649.010	Gorleben RB649_D	4,96	m	11.05.2011	197,7			
1102696	02YEQ02RB649.011	Gorleben RB649_E	4,66	m	11.05.2011	210,9			
1102699	02YEQ02RB650.001	Gorleben RB650_A	5,86	m	12.05.2011	209,5			
1102700	02YEQ02RB650.003	Gorleben RB650_B	5,60	m	12.05.2011	204,0			
1102701	02YEQ02RB650.004	Gorleben RB650_C	5,26	m	12.05.2011	210,3			
1102702	02YEQ02RB650.005	Gorleben RB650_D	4,96	m	12.05.2011	208,2			
1102703	02YEQ02RB650.006	Gorleben RB650_E	4,66	m	12.05.2011	212,6			
1102708	02YEQ02RB779.001	Gorleben RB779_A	5,86	m	12.05.2011	209,1			
1102709	02YEQ02RB779.003	Gorleben RB779_B	5,56	m	12.05.2011	197,4			
1102710	02YEQ02RB779.004	Gorleben RB779_C	5,26	m	12.05.2011	205,8			
1102711	02YEQ02RB779.005	Gorleben RB779_D	4,96	m	12.05.2011	205,7			
1102712	02YEQ02RB779.006	Gorleben RB779_E	4,66	m	12.05.2011	197,8			
1102715	02YEQ02RB778.003	Gorleben RB778_A	5,80	m	13.05.2011	215,3			
1102716	02YEQ02RB778.004	Gorleben RB778_B	5,56	m	13.05.2011	197,6			
1102717	02YEQ02RB778.005	Gorleben RB778_C	5,26	m	13.05.2011	207,6			
1102718	02YEQ02RB778.006	Gorleben RB778_D	4,96	m	13.05.2011	196,5			
1102719	02YEQ02RB778.007	Gorleben RB778_E	4,66	m	13.05.2011	187,4			
1102735	02YEQ02RB780.001	Gorleben RB780_A	5,86	m	16.05.2011	213,4			
1102736	02YEQ02RB780.003	Gorleben RB780_B	5,56	m	16.05.2011	190,8			
1102737	02YEQ02RB780.004	Gorleben RB780_C	5,26	m	16.05.2011	200,8			
1102738	02YEQ02RB780.005	Gorleben RB780_D	4,96	m	16.05.2011	202,9			
1102739	02YEQ02RB780.006	Gorleben RB780_E	4,66	m	16.05.2011	204,7			
1102742	02YEQ02RB781.001	Gorleben RB781_A	5,86	m	17.05.2011	205,6		A	
1102743	02YEQ02RB781.003	Gorleben RB781_B	5,56	m	17.05.2011	215,9			
1102744	02YEQ02RB781.004	Gorleben RB781_C	5,26	m	17.05.2011	206,8			
1102745	02YEQ02RB781.005	Gorleben RB781_D	4,96	m	17.05.2011	200,6			
1102746	02YEQ02RB781.006	Gorleben RB781_E	4,66	m	17.05.2011	206,5			
1102749	02YEQ02RB782.001	Gorleben RB782_A	5,86	m	19.05.2011	192,5			
1102750	02YEQ02RB782.003	Gorleben RB782_B	5,56	m	19.05.2011	204,1			
1102751	02YEQ02RB782.004	Gorleben RB782_C	5,25	m	19.05.2011	220,4			
1102752	02YEQ02RB782.005	Gorleben RB782_D	4,96	m	19.05.2011	203,7			
1102753	02YEQ02RB782.006	Gorleben RB782_E	4,66	m	19.05.2011	213,2			

7.2 Gehalte der Kohlenwasserstoffe C_1 - C_{40} im Hauptsalz im Querschlag 1 West

Im Querschlag 1 West wurden 18 Probennahme-Kurzbohrungen in einem Abstand von ca. 10 m geplant. Die gleichmäßigen Abstände konnten teilweise durch die baulichen Gegebenheiten unter Tage, z. B. das Bohrort 1.4 sowie die Nischen 302, 246 und 168, nicht exakt eingehalten werden. Die insgesamt 90 Einzelproben aus diesen 18 Probennahme-Kurzbohrungen werden nachfolgend als „Statistikproben“ bezeichnet.

Es wurden weitere vier Bohrungen (RB649, RB779, RB778, RB647) im Rahmen einer Nachverdichtung um eine KW-Austrittsstelle bei der Kurzbohrung RB648 in Abständen von jeweils ca. 1 und ca. 5 m von dieser durchgeführt. Diese Bohrungen und die zugehörigen Proben werden in den folgenden Abbildungen als „Nachverdichtung“ dargestellt. Zur Verdeutlichung der räumlichen Anordnung der Bohrungen des Datensatzes Statistikproben und der Bohrungen zur Nachverdichtung sind in Abb. 56 alle Bohrungslokationen entlang einer Linie der Bohrendpunkte ausgehend von Kurzbohrung RB782 Richtung Südosten dargestellt. Dunkelgrau hinterlegt sind die Bereiche im Querschlag 1 West, in denen z2HS2 ansteht, hellgrau hinterlegt sind die Bereiche, in denen z2HS1 ansteht.

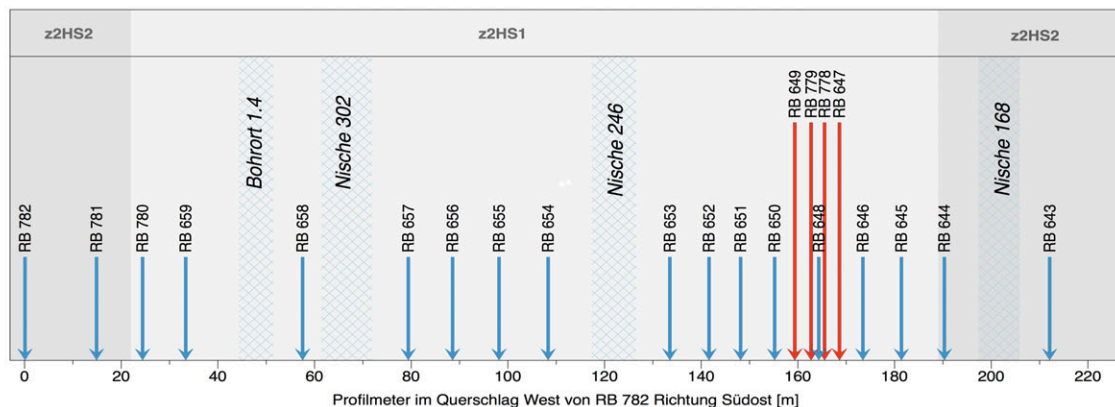


Abb. 56: Darstellung der Kurzkern-Probennahmebohrungen im Querschlag 1 West entlang einer Linie der Bohrendpunkte von RB782 ausgehend Richtung Südosten. Blaue Pfeile deuten die Bohrungsansatzpunkte des Statistikproben-Datensatzes an, rote die des Datensatzes Nachverdichtung.

Die ermittelten Gehalte der Summe an KW von C_1 bis C_{40} im Gestein [angegeben in mg/kg Salzgestein] variieren stark (siehe Anhang 3.1 und 3.2) und sind in Abb. 57 graphisch dargestellt. Für die 90 Proben aus dem Statistik-Probensatz betragen die KW-Gehalte 0,02 bis 47,8 mg/kg – um einen Medianwert von 0,37 mg/kg. Für den Probensatz der 20 Proben aus den vier zusätzlichen Bohrungen in direkter Nähe zur bereits dokumentierten KW-Austrittsstelle im Querschlag 1 West (vgl. BORNEMANN et al. 2001) liegen die Gehalte zwischen 0,11 und 443 mg/kg – um einen Medianwert von 0,31 mg/kg. Die gezielt in der bzw. in der Nähe der KW-Austrittsstelle durchgeführten Bohrungen ergaben wenige Proben mit wesentlich höheren Gehalten als im Statistikproben-Datensatz (Abb. 57).

Die Mehrzahl der Nachverdichtungsproben weist KW-Gehalte nahe dem Medianwert des Statistikproben-Datensatzes auf. Daher unterscheiden sich die Medianwerte beider Datensätze nur gering. Eine weitergehende statistische Betrachtung der Gehalte an KW im Hinblick auf Tests der Populationen auf Homogenität, Mittelwerte usw. erfolgt in Zusammenschau mit den im Querschlag 1 Ost zu erhebenden Daten im Abschlussbericht.

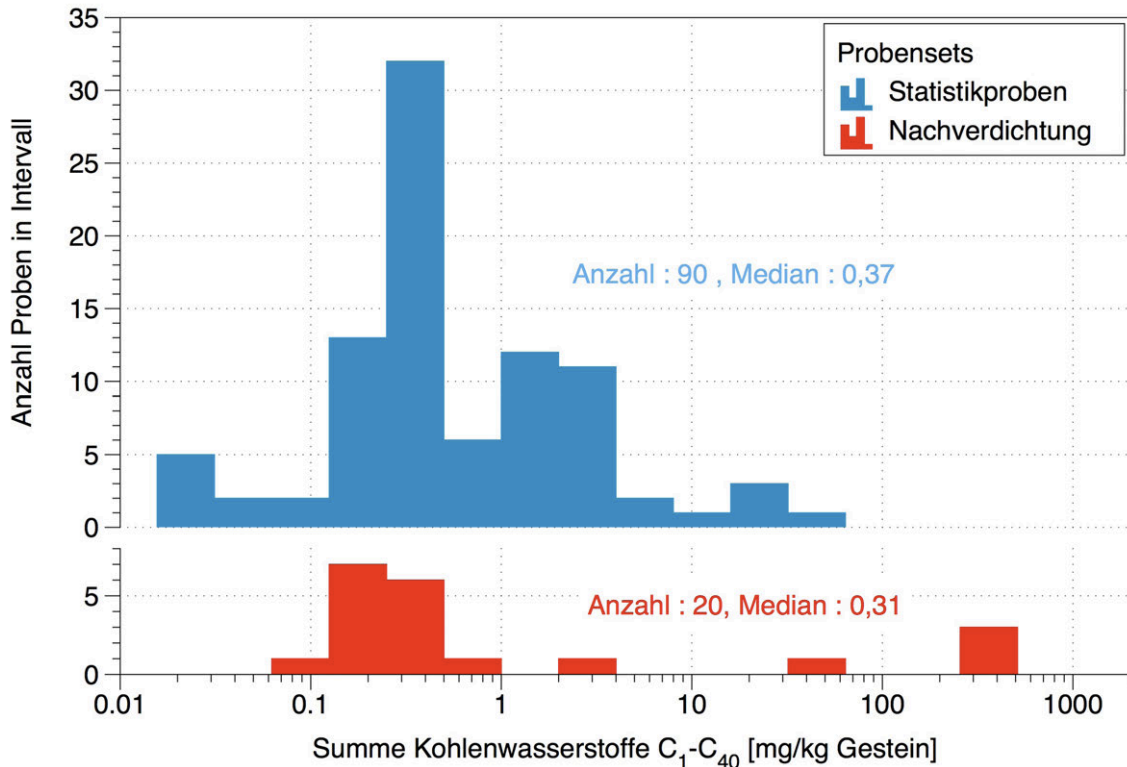


Abb. 57: Häufigkeit der ermittelten Gehalte an KW von Salzgesteinsproben aus dem Querschlag 1 West. Dargestellt sind die beiden Probenansätze Statistikproben und Nachverdichtung.

Die KW-Gehalte der Statistikproben zeigen im Hinblick auf die jeweiligen Beiträge der Komponenten verschiedener Siedepunktbereiche charakteristische Verteilungen (Abb. 58). So können die gasförmigen und leicht flüchtigen KW (als Summen C_1 - C_6 sowie C_7 - C_{10}) Gehalte von bis zu 5 mg/kg Gestein erklären, deutlich wird aber, dass alle Gehalte von mehr als 8 mg/kg an KW im Gestein durch Beiträge aus der höher siedenden Fraktion C_{11} - C_{40} hervorgerufen werden. In Bezug auf die Gesamtsumme der im Salzgestein angetroffenen KW spricht dies für eine herausgehobene Bedeutung der Zufuhr von Öl in das Salzgestein. Die Bestimmungsgrenze von 0,8 mg/kg Salzgestein für die Mehrheit der KW C_{11} - C_{40} bedingt das weitgehende Fehlen von kleineren Werten in der Häufigkeitsverteilung dieses Parameters.

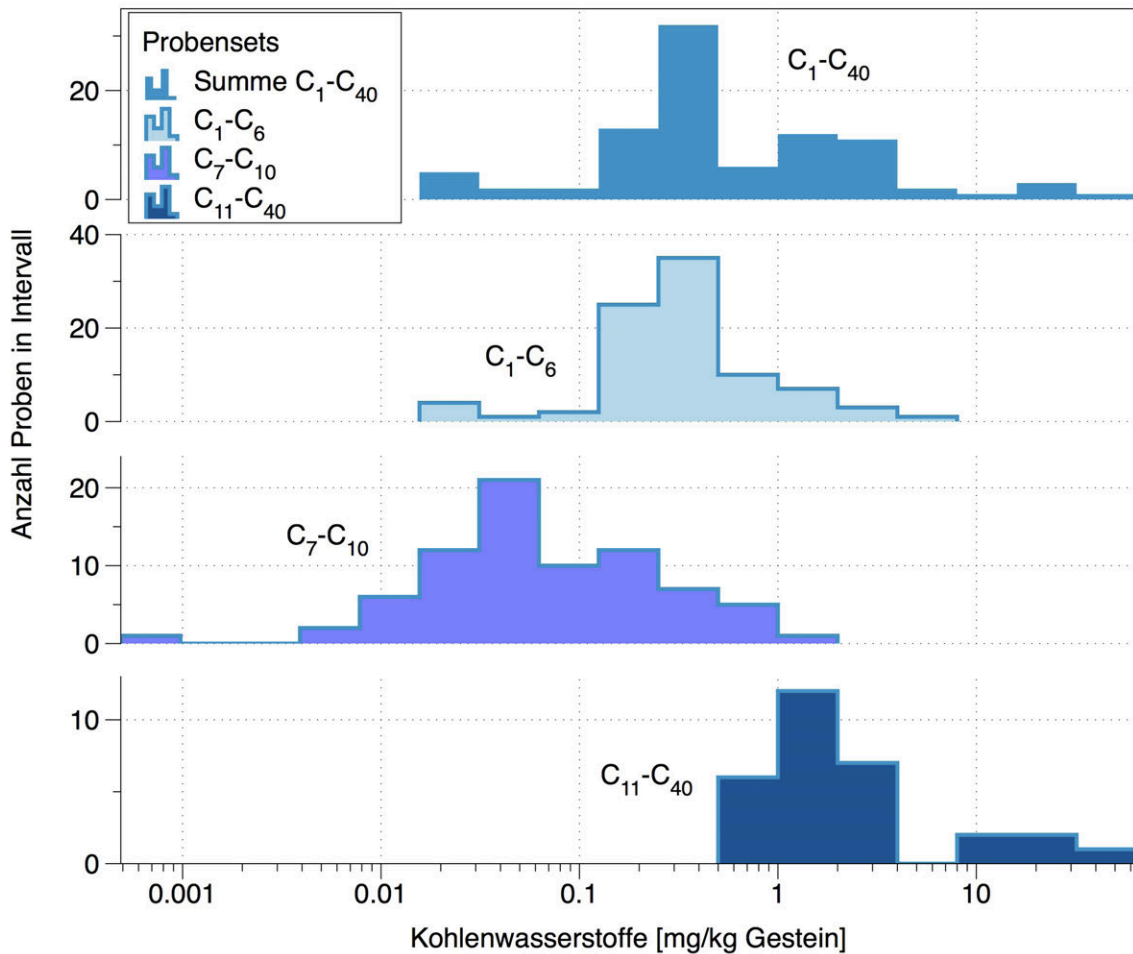


Abb. 58: Häufigkeit der ermittelten Gehalte an KW an Gesteinproben aus dem Querschlag 1 West im Vergleich zu den verschiedenen Siedebereichsfraktionen C₁-C₆, C₇-C₁₀ und C₁₁-C₄₀. Dargestellt sind nur die Daten der Statistikproben.

Im Vergleich der Häufigkeitsverteilungen der ermittelten Gehalte an gasförmigen KW C₁-C₅ zwischen den beiden neu erzeugten Datensätzen (zu Vergleichszwecken wurden die C₁-C₅-Gehalte speziell berechnet) und den von GERLING et al. (2002) an Proben aus dem Querschlag 1 West erhobenen Daten fällt auf, dass die Häufigkeitsverteilung in dem letztgenannten Datensatz durch insgesamt geringere Gehalte gekennzeichnet ist (Abb. 59). Der Medianwert der Proben aus dem Datensatz Statistikproben liegt bei 0,28 mg/kg, im Datensatz Verdichtungsproben bei 0,25 mg/kg und im Datensatz von GERLING et al. (2002) bei 0,07 mg/kg.

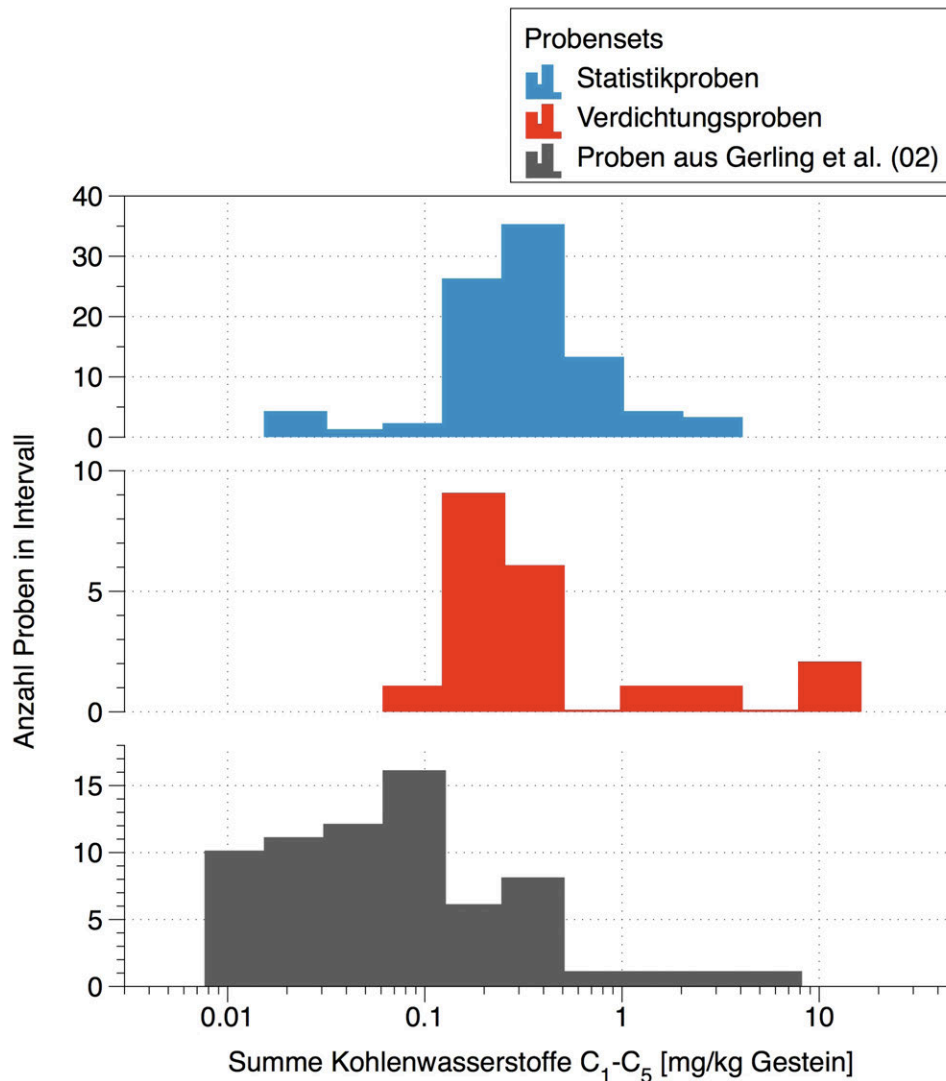


Abb. 59: Häufigkeit der ermittelten Gehalte an gasförmigen KW C₁-C₅ von Salzgesteinsproben aus dem Querschlag West. Dargestellt sind die beiden Probensätze Statistikproben (blau) und Nachverdichtung (rot) im Vergleich zu Daten aus GERLING et al. (2002) (grau).

Die erhöhten Gehalte in den neuen Datensätzen könnten auf drei verschiedene Ursachen zurückzuführen sein:

- Von GERLING et al. (2002) werden nur die gesteinsgebundenen Gase quantifiziert. Teile der Gase gehen während der Lagerung der Probe bis zur eigentlichen Messung bereits in nennenswerten Mengen in den Gasraum über und wurden daher nicht als gesteinsgebunden erfasst.
- Im Datensatz von GERLING et al. (2002) sind anteilig mehr Proben aus dem z2HS2 vertreten, was eventuell eine Erniedrigung des Medianwertes für diesen Datensatz bewirkt.

- Die erhöhten Gehalte in den neuen Datensätzen sind ein Resultat der verbesserten Probenahme- und Handhabungstechnik, die einen Verlust von Gasen deutlich reduziert.

7.3 Räumliche Verteilung der Kohlenwasserstoff-Gehalte C_1 - C_{40} im Bereich des Querschlag 1 West

In Abb. 60 sind für jede Bohrung aus den Datensätzen Statistikproben und Nachverdichtung die Gehalte an KW C_1 - C_{40} für die Einzelproben durch Punkte sowie für den jeweiligen Kern durch einen Whisker-Plot dargestellt. Auffällig ist, dass neben der in der KW-Austrittsstelle liegenden Bohrung RB648 auch in weiteren Bohrungen (z. B. RB658, RB655) KW-Gehalte in gleicher Größenordnung auftreten. Es ist kein systematisches Muster der KW-Gehalte im Gestein in Zusammenhang mit dem strukturgeologischen Bau (Satteln im z2HS1) zu erkennen. Die große räumliche Variabilität über den gesamten Zentralbereich des Querschlag 1 West spiegelt sich auch in den vier Bohrungen der Nachverdichtung wider. Während die Proben aus der Bohrung RB778 ca. 1 m nordwestlich von der Bohrung RB648 die mit Abstand höchsten Gehalte an KW aufwiesen, zeigten die Proben aus der Bohrung RB779 ca. 1 m südöstlich sehr geringe Gehalte, ebenso die Proben der beiden ca. 5 m entfernten Bohrungen RB647 und RB649.

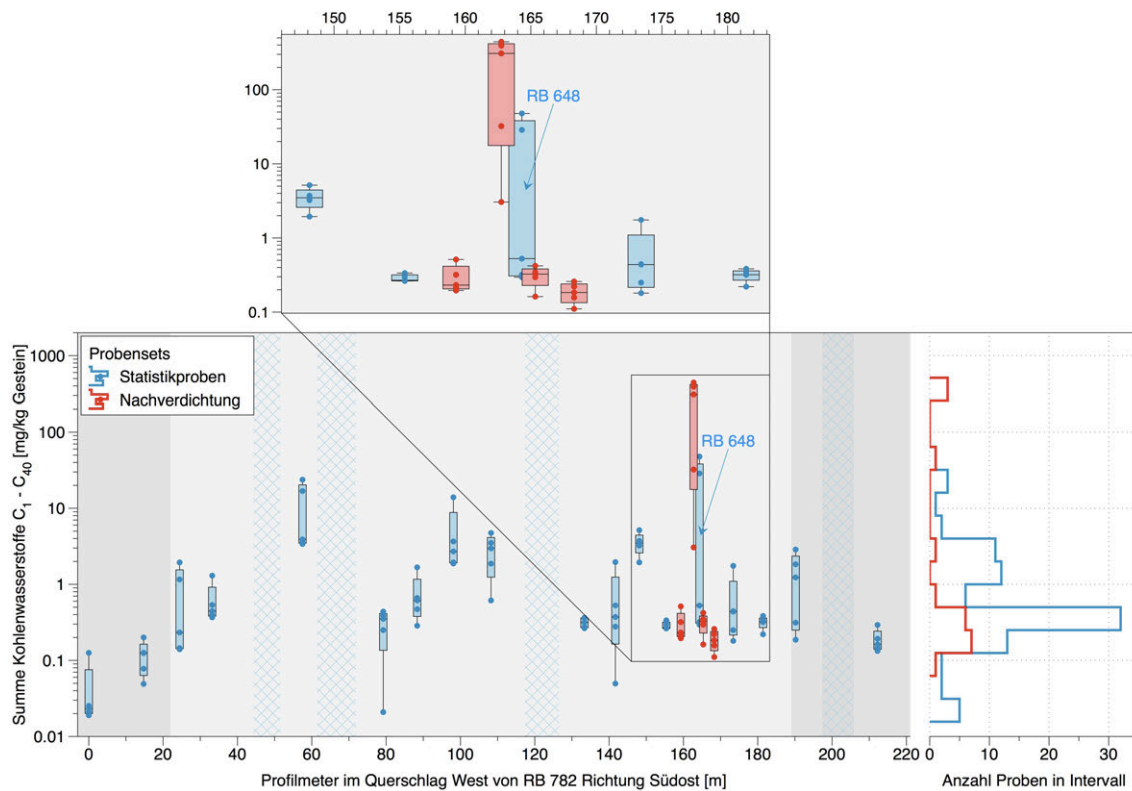


Abb. 60: Darstellung der KW-Gehalte C_1 - C_{40} im Gestein aus Proben der Datensätze Statistikproben (blau) und Nachverdichtung (rot) im Querschlag 1 West (Whisker-Plots, Einzelproben und Häufigkeitsverteilung).

Neben der hohen räumlichen Variabilität der Kohlenwasserstoffgehalte zwischen einzelnen Bohrungen ist auch die Variabilität innerhalb einer Bohrung - genauer noch, innerhalb des beprobten letzten Kernmarsches von 1,5 m - teils erheblich. In Abb. 61 sind farbkodiert die Gehalte an KW für jede Einzelprobe aus den Datensätzen Statistikproben (Quadrat) und Nachverdichtung (Kreis) mit Position im jeweiligen Bohrkern dargestellt. Die Variationsbreite innerhalb eines Kernes auf wenigen Dezimetern beträgt häufig eine bis zwei Größenordnungen. Es ist kein systematischer Trend zu geringeren Gehalten zum Kopf des Kernmarsches bei 4,5 m zu erkennen. Dies bestätigt, dass die Zeit zum Erbohren des gesamten Kernmarsches von ca. 90 min nicht zu einem unterschiedlichen Verlust von KW in dem zuerst erbohrten Teilbereich (bei 4,5 m) gegenüber dem zuletzt erbohrten Kernbereich (bei 6 m) bis zur Beprobung führte.

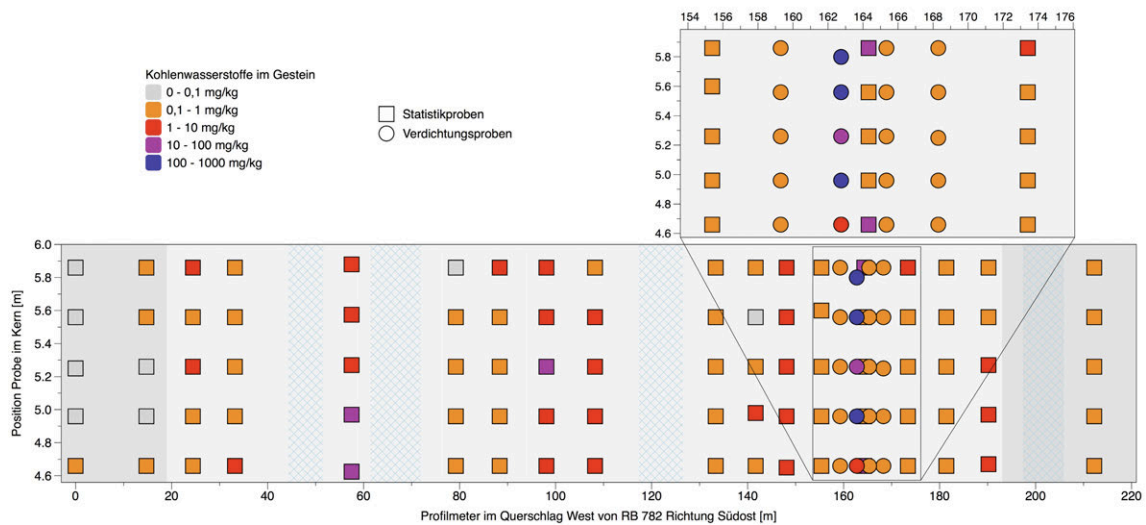


Abb. 61: Darstellung der C_1 - C_{40} -KW-Gehalte in den einzelnen Kernen der Probensätze Statistikkernen (Quadrate) und Nachverdichtung (Kreise) entlang der letzten Kernmärsche von 4,5 bis 6 m.

7.4 Genetische, isotopengeochemische Charakterisierung der Kohlenwasserstoffe

Neben den $\delta^{13}C$ -Isotopenwerten für Methan, Ethan und Propan ist die molekulare Zusammensetzung der gasförmigen KW ein diagnostischer Parameter zur Geneseansprache. Häufig findet hier das Verhältnis $C_1/(C_2+C_3)$ Verwendung.

Mikrobielles Gas ist stark angereichert an Methan (daher $C_1/(C_2+C_3) \gg 100$) und dieses Methan wiederum ist angereichert an ^{12}C (daher $\delta^{13}C < -50\text{‰}$). Thermische Gase sind abgereichert an ^{12}C und enthalten erhebliche Anteile an höher molekularen Komponenten (also erniedrigte $C_1/(C_2+C_3)$ -Verhältnisse), wenn das Muttergestein marinen Ursprunges ist. Wenn die Reifung des Muttergesteines aufgrund thermischer Einwirkung weit fortgeschritten ist, entstehen sogenannte hochreife Gase, die wiederum an Methan angereichert sein können, also hohe $C_1/(C_2+C_3)$ -Verhältnisse aufweisen. Diese lassen sich jedoch einfach aufgrund der mit der thermischen Reifung verbundenen schweren $\delta^{13}C$ -Werte des Methans von biogenem Gas unterscheiden.

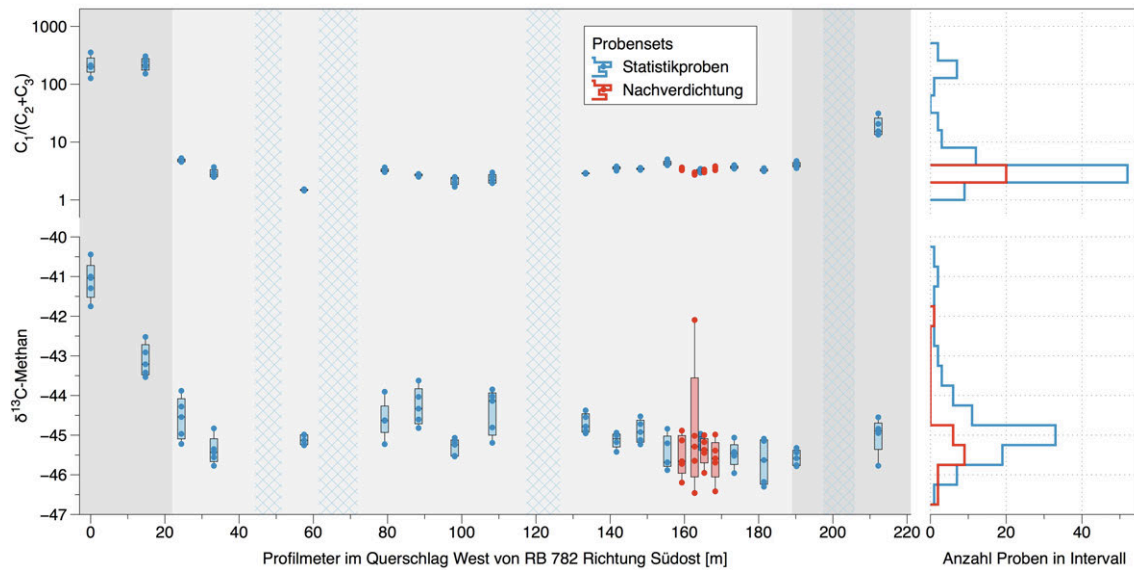


Abb. 62: Molekulare Zusammensetzung der Gase ausgedrückt als Verhältnis $C_1/(C_2+C_3)$ sowie die Kohlenstoff-Isotopenzusammensetzung von Methan aller untersuchten Proben.

Eine Darstellung der molekularen Zusammensetzungen $C_1/(C_2+C_3)$ in den einzelnen Bohrungen in Abb. 62 zeigt signifikante Unterschiede. Die Gase aus dem z2HS2 (RB643, RB781 und RB782) sind gegenüber allen Proben aus dem z2HS1 deutlich angereichert an Methan. Es ist jedoch aufgrund der Kohlenstoff-Isotopenzusammensetzung auszuschließen, dass es sich dabei um biogenes Methan handelt. In dem diagnostischen Bernard-Diagramm (Verhältnis $C_1/(C_2+C_3)$ gegen $\delta^{13}C$ -Wert Methan) liegen auch diese Proben innerhalb des Bereiches für thermisch generiertes Gas aus einem marinen Muttergestein (Abb. 63).

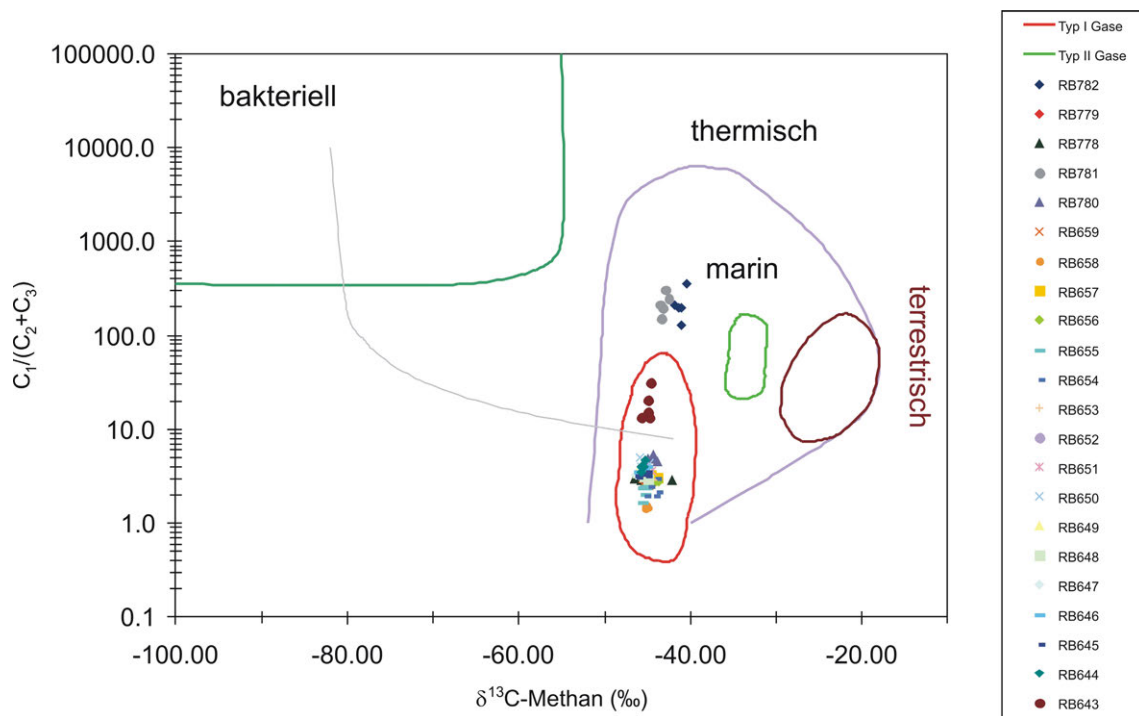


Abb. 63: Daten der untersuchten Hauptsalz-Proben aus den Kurzbohrungen mit Einzelwerten im Bernard-Diagramm einschließlich einer hypothetischen Mischungslinie zwischen einem thermischen und bakteriellen Gas. (Typ I Gase, Typ II Gase und Felder-Abgrenzung - siehe GERLING et al. 2002).

Alle Proben aus dem z2HS1 fallen in einen eng begrenzten Bereich mit $\delta^{13}\text{C}$ -Werten für Methan von $-45,1 \pm 0,3\text{‰}$ und einem $\text{C}_1/(\text{C}_2+\text{C}_3)$ -Verhältnis von $3,2 \pm 0,8$ und liegen innerhalb des von GERLING et al. (2002) als Typ I Gase definierten Feldes (Abb. 63). Deutlich abweichend von diesen Proben weisen die 5 Einzelproben aus der RB643 (z2HS2) ein $\text{C}_1/(\text{C}_2+\text{C}_3)$ -Verhältnis von etwa 20, bei aber ähnlichen $\delta^{13}\text{C}$ -Werten des Methans auf, liegen daher ebenfalls noch im Bereich des Gastyps 1. Ein signifikanter Unterschied ergibt sich für die Proben aus der RB781 und RB782 (beide z2HS2), die noch methanreicher sind ($\text{C}_1/(\text{C}_2+\text{C}_3)$ -Verhältnis > 100) und zusätzlich einen signifikant schwereren $\delta^{13}\text{C}$ -Wert für Methan von $-42,1 \pm 1,3\text{‰}$ besitzen (Abb. 63). Auffällig ist, dass im Vergleich zu den Ergebnissen aus dem Querschlag 1 West in den früheren Untersuchungen (GERLING et al. 2002) keine Proben vorhanden sind, die als Übergang zum Gastyp 2 angesehen werden könnten (Abb. 64).

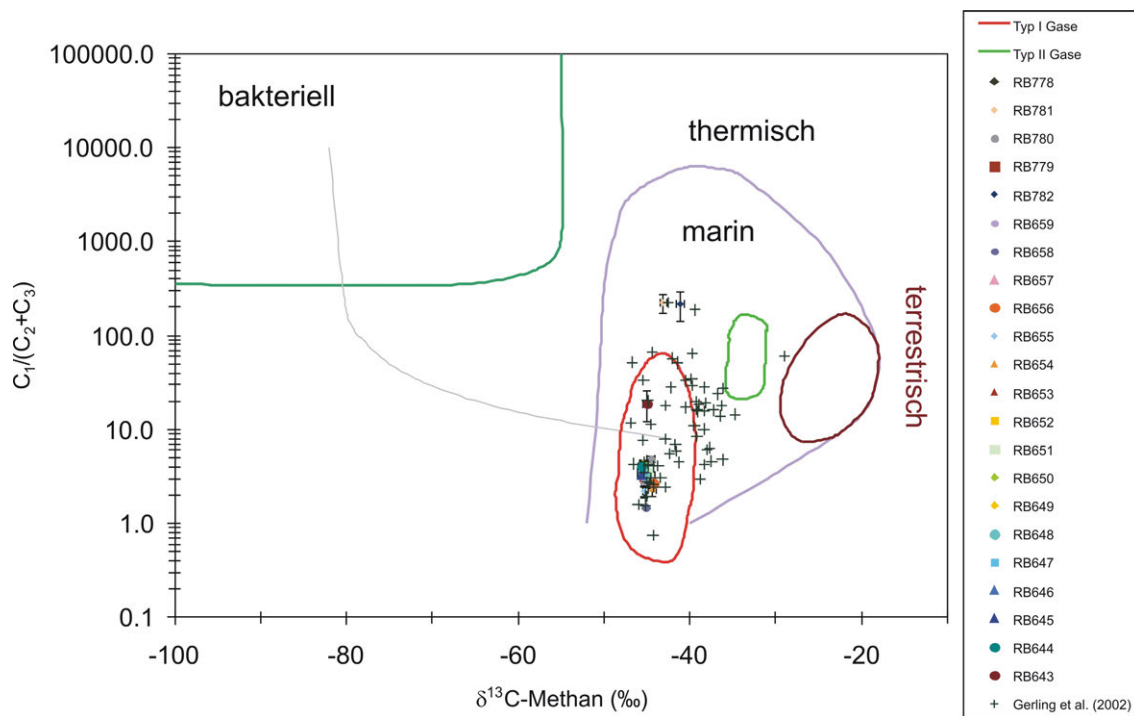


Abb. 64: Daten der untersuchten Kurzbohrungen (Mittelwerte mit Fehlerbalken) und der Vergleichsdaten aus dem Querschlag 1 West aus GERLING et al. (2002). (Typ I Gase, Typ II Gase und Felder-Abgrenzung - siehe GERLING et al. 2002).

Zur genetischen Unterscheidung und Charakterisierung von gasförmigen KW werden (sofern vorhanden) auch die $\delta^{13}\text{C}$ -Werte von Ethan und Propan herangezogen. Aus den entsprechenden Diagrammen kann neben dem Typ des Muttergesteins auch der Reifegrad des möglichen Muttergesteins abgelesen werden. Die meisten der 2011 nach dem neuen Probennahme-Verfahren gewonnenen Proben liegen in beiden Darstellungen in dem Feld des Gastypes 1 (Abb. 65). Die Proben der RB781 und RB782 wiesen so geringe Ethan- und Propankonzentrationen auf, dass eine Isotopenbestimmung dieser Komponenten nicht möglich war.

In der Darstellung der Kohlenstoff-Isotopenzusammensetzungen für Methan und Ethan (Abb. 65) wird deutlich, dass die Proben aus der RB780 bei nahezu identischen $\delta^{13}\text{C}$ -Werten des Methans deutlich schwerere $\delta^{13}\text{C}$ -Werte des Ethans ($\sim -26,5\text{‰}$) aufweisen. Vergleichbare Proben wurden auch von GERLING et al. (2002) beschrieben, eine genetische Interpretation ist auch zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht möglich. Die Proben der RB644 weisen im Verhältnis zu den übrigen Proben leichtere Kohlenstoff-Isotopenwerte für Ethan aus, liegen aber noch innerhalb des Gastypes 1 (Abb. 65). Auffällig ist, dass wie schon beim Bernard-Plot in der neuen Probenserie aus dem Jahr 2011 keine Mischgase zum Gastyp 2 auftreten (Abb. 65).

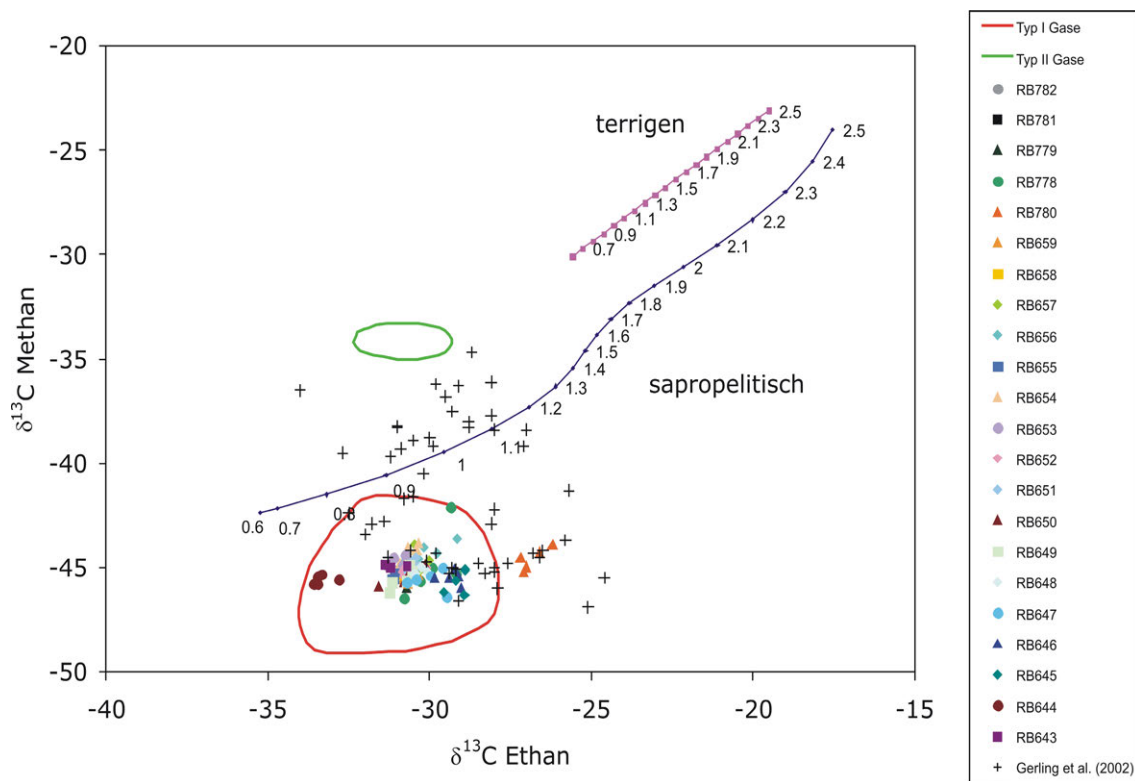


Abb. 65: Methan- und Ethan- $\delta^{13}\text{C}$ -Werte der untersuchten Proben und der Vergleichsdaten aus dem Querschlag 1 West aus GERLING et al. (2002). $\delta^{13}\text{C}$ -Ausgangswerte für die Berechnung der Reifelinien -23‰ für terrigenes Muttergestein und -26‰ für die organische Ausgangssubstanz im Staßfurtkarbonat (analog GERLING et al. 2002) (Typ I Gase und Typ II Gase - siehe GERLING et al. 2002).

Im Gegensatz zu früheren Untersuchungen der salzgebundenen Gase konnte bei nahezu allen Proben die Kohlenstoff-Isotopenzusammensetzung von Propan bestimmt werden. Aus der entsprechenden Darstellung $\delta^{13}\text{C}$ Ethan gegen $\delta^{13}\text{C}$ Propan ist ersichtlich (Abb. 66), dass die Mehrzahl der Proben in einen eng umgrenzten Bereich (Reife 0,9 – 1,1% R_o) fällt. Drei Probenserien bzw. Bohrungen weichen davon jedoch signifikant ab. Die bereits vorher erwähnten Probennahmebohrungen RB644 und RB780 weisen deutlich leichtere bzw. schwerere $\delta^{13}\text{C}$ -Werte des Propans auf (Abb. 66). Die Werte der Proben aus der Kurzbohrung RB659 liegen zwischen denjenigen der Bohrung RB644 und denjenigen des Hauptanteils der salzgebundenen Gase. Die Isotopenwerte der RB644 und RB780 sowie die daraus abgeleiteten unterschiedlichen Maturitäten des marinen Muttergesteines - ein niedrigreifes ($R_o \sim 0,7\%$) für RB644 und ein hochreifes ($R_o \sim 1,1-1,3\%$) für RB780 - würden in der klassischen Interpretation von Erdgasen (Kohlenwasserstoff-Exploration) unterschiedliche Muttergesteine implizieren, die sich v. a. aufgrund anders gearteter thermischer Entwicklung unterscheiden. Zur Klärung der Ursachen für diese Befunde sind weiterführende Arbeiten angelaufen.

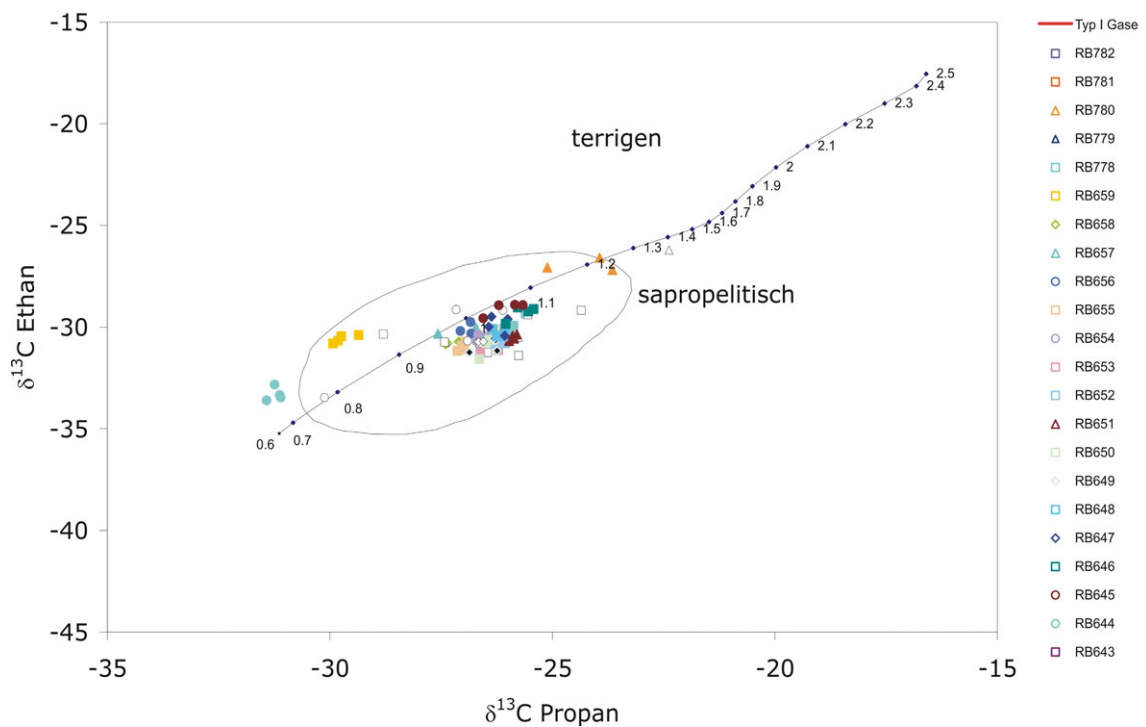


Abb. 66: Kohlenstoff-Isotopenwerte von Ethan und Propan der untersuchten Proben aus dem Querschlag 1 West und eine angenommene sapropelitishe Reifelinie. (Typ I Gase - siehe GERLING et al. 2002).

Die meisten Moleküle aus dem Bereich der gasförmigen und niedrig siedenden KW entstehen durch thermisch induzierte Zerfallsprozesse („Cracking“) während der Versenkung und Aufheizung des organischen Materials. Daher enthalten sie wenige molekulare Quellensignaturen. Im Gegensatz dazu können höher molekulare, höher siedende KW noch ein deutliches Quellensignal aufweisen. Problematisch ist, dass die höher siedenden KW C₁₀-C₄₀ in vielen Proben nur in sehr geringen Mengen vorhanden sind. Trotzdem sind auch im Muster der KW-Verteilung klar erkennbare Unterschiede erhalten, wie sie exemplarisch in Abb. 67 dargestellt sind.

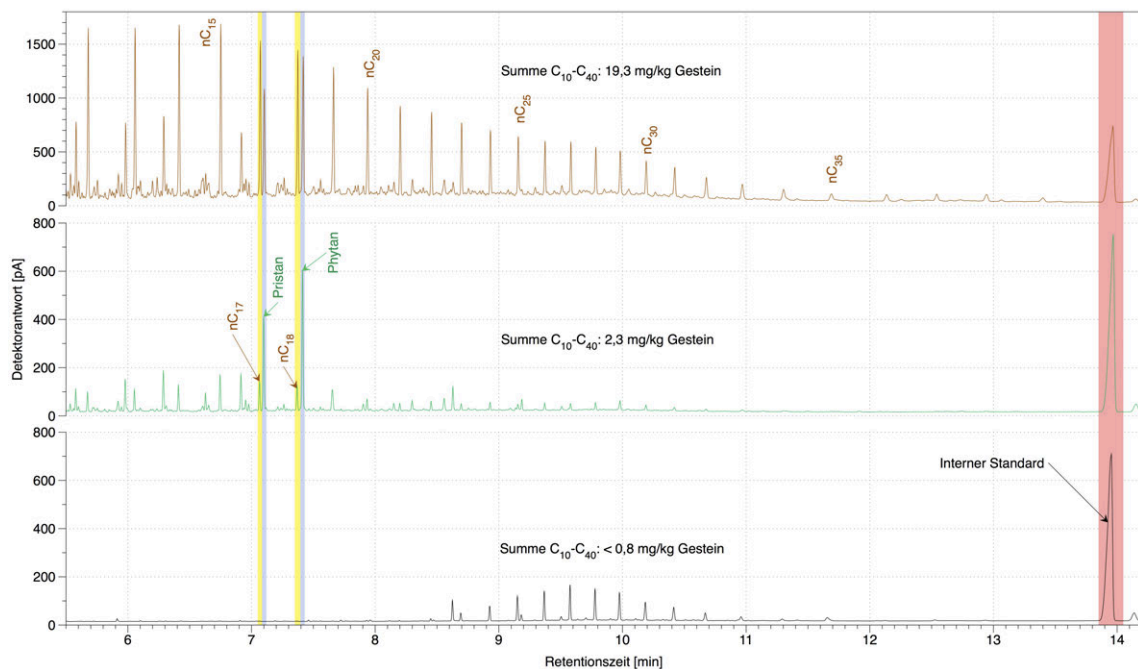


Abb. 67: Darstellung von drei Beispielchromatogrammen der höher siedenden KW-Verbindungen. Dargestellt ist eine Probe (braun, hohe Gehalte) mit dominierenden n-Alkanen bis über nC_{35} hinaus, eine Probe (grün, mittlere Gehalte) mit dominierenden verzweigten KW – den Isoprenoiden Pristan und Phytan, und eine Probe (schwarz, sehr geringe Gehalte unter Bestimmungsgrenze) mit einem ungewöhnlichen Muster von n-Alkanen im mittleren Kettenlängenbereich.

Als Endglieder werden momentan betrachtet:

- ein sehr n-Alkan-reiches Gemisch mit Homologen bis über Pentatriacosan (nC_{35}),
- ein Gemisch, das von den stark verzweigten, isoprenoidalen KW Pristan und Phytan dominiert wird sowie
- ein Muster von n-Alkanen, die nur im Bereich nC_{24} bis nC_{33} vorkommen.

Die vorläufige Interpretation der ersten beiden Muster ist, dass das n-Alkan-reiche Gemisch ein einmigriertes Öl darstellt. Das isoprenoid-dominierte Gemisch kann eventuell aus einem aus dem Hauptsalz selbst stammenden organischen Material abgeleitet werden - oder stellt ein durch Migration stark verändertes bzw. fraktioniertes Restöl dar. Beide Vermutungen werden derzeit in experimentellen Ansätzen im Labor überprüft. Das dritte, in äußerst geringen Konzentrationen nachgewiesene Muster mit n-Alkanen in einem engen Siedepunktbereich von nC_{24} bis nC_{33} kann bislang keiner eigenen Quelle zugeordnet werden, eventuell muss eine Kontamination in Betracht gezogen werden. Auch diese Hypothese wird durch verbindungs-spezifische Isotopenanalysen weiter untersucht.

8 Packerbohrungen zur In-situ-Quantifizierung der Kohlenwasserstoff-Vorkommen

8.1 Zielsetzung der Druckaufbaumessungen in den Kohlenwasserstoff-Packerbohrungen

Unter Berücksichtigung der Befunde zur KW-Führung der geologischen KW-Kurzbohrungen (siehe Kap. 5) werden im Querschlag 1 West und Querschlag 1 Ost 20 KW-Packerbohrungen (jeweils 10 Bohrungen pro Querschlag) mit einer Länge von je 6 m (Durchmesser 46 mm) gestoßen und gekernt. Die 10 im Querschlag 1 West geplanten Bohrungen wurden 2011 bereits gestoßen und instrumentiert, die Bohrungen im Querschlag 1 Ost werden 2012 erstellt und instrumentiert.

Ziel der KW-Packerbohrungen ist die Analyse der Isoliertheit bzw. Interkonnektivität der erbohrten KW-Vorkommen, die Untersuchung von möglichen kleinräumigen KW-Migrationswegen im Hauptsalz (z2HS1, z2HS2 und ggf. z2HS3) und die Größenabschätzung der KW-Vorkommen sowie die Ermittlung der KW-Zutrittsraten. Aufgrund dieser Zielstellung wurden folgende Aspekte bei der Planung und Ausführung der Messungen berücksichtigt:

- Langzeitüberwachung,
- kontinuierliche Messung (im Druckbereich bis ca. 10 bar) mit hochauflösenden Messapparaturen,
- Installation der Messintervalle in den Bohrungen außerhalb der Auflockerungszone der Strecken,
- getrennte Probennahme von gasförmigen und flüssigen KW.

Durch die Langzeitüberwachung sollen die Druckentwicklung und das Gesamtvolumen eines durch die KW-Packerbohrung aufgeschlossenen Vorkommens erfasst und quantifiziert werden. Hierzu werden Bohrungen mit einer Länge von 6 m gestoßen. Das Messintervall in den Bohrungen ist durch ein mechanisches Einfachpackersystem in einer Bohrungstiefe von ca. 3 m abgedichtet. Zutretende Gase oder Kondensate werden somit im Messintervall von ca. 3 m bis ca. 6 m Bohrungstiefe erfasst. Damit ist unter Berücksichtigung der geplanten Bohrungsorientierungen sichergestellt, dass die Messintervalle den Gebirgsbereich außerhalb der Auflockerungszone der Strecken bzw. Querschläge und somit nahezu unveränderte Vorkommen erfassen. Der durch die Gas- und Kondensatzutritte in den abgepackerten Bohrungen verursachte Druckaufbau wird durch ex-geschützte Messanlagen erfasst. Eine regelmäßige Beprobung der im Messintervall erfassten Gase und Kondensate dient zur Quantifizierung der Zutrittsraten

und -mengen sowie zur chemischen Analyse der Zusammensetzung der zutretenden Gase und Kondensate. Hochauflösende Messapparaturen ermöglichen eine hohe Genauigkeit der Messdaten, damit eine präzise Aussage über die zutretenden Volumina der Gase bzw. Kondensate sowie insbesondere über die Druckentwicklung in benachbarten Bohrungen bei den Entlastungen während der Probennahmen getroffen werden kann.

8.2 Festlegung der Testlokationen im Querschlag 1 West und Instrumentierung der Bohrungen

Grundlagen für die Festlegung der Testlokationen im Querschlag 1 West sind die UV-Kartierungen entlang der Strecke, die vor dem Moratorium durchgeführt wurden (AMELUNG & SCHUBERT 2000), die Ergebnisse der kurzen KW-Erkundungsbohrungen (siehe Kap. 5) und Beobachtungen unter UV-Licht bei späteren untertägigen Befahrungen. Zwei Packerbohrungen wurden zur Begleitung der Gasdruckaufbaumessungen in der Vorbohrung RB763 im Bohrort 1.4 (02YEQ02/R004) in der sogenannten UV-Nische (Nische 302) angeordnet.

Die UV-Kartierung (geologische KW-Auffälligkeitsklassifizierung, nach AMELUNG & SCHUBERT 2000) erfolgte anhand von UV-Intensitäten. Die unter UV- und gewöhnlichem Kunstlicht (optisch) auffälligen Bereiche sind als KW-imprägnierte Gebirgsbereiche zu betrachten. Die Mehrzahl KW-auffälliger Bereiche ist nur durch UV-Strahlung zu erkennen, für die eine weitergehende Klassifizierung in Abhängigkeit von der UV-Intensität erfolgte (vgl. Kap. 5). Zur Charakterisierung dieser KW-imprägnierten Gebirgsbereiche hinsichtlich der Zusammensetzung und der Gehalte der Gase und Kondensate wurden die Imprägnationsbereiche unterschiedlicher Intensitäten jeweils durch eine bestimmte Anzahl an KW-Packerbohrungen berücksichtigt. Besondere Berücksichtigung bei der Festlegung der Bohrungslokationen fanden Bereiche mit unter UV-Licht deutlich erkennbaren KW-Imprägnationen.

Zur Identifizierung potentieller Verbindungen bzw. Migrationswege zwischen einzelnen KW-Vorkommen sowie zum Nachweis der räumlichen Begrenzung dieser Vorkommen wurden Packerbohrungen zum Teil paarweise mit einem Abstand von wenigen Metern angeordnet. Ein Indiz für einen vorhandenen hydraulischen Zusammenhang zwischen zwei, in den Bohrungen aufgeschlossenen KW-Vorkommen ist dann gegeben, wenn die Druckentlastung in einer Bohrung zu Druckänderungen in der benachbarten Bohrung führt.

Im Querschlag 1 West ist ein Querschnitt mit über das gesamte Streckenprofil sichtbaren KW-Zutritten vorhanden. In diesem speziellen Bereich (RF081) wurden vier Bohrungen (RB685 bis RB688) fächerförmig um die Strecke verteilt angeordnet. Der Abstand der Bohrungen zueinander beträgt rund 4 m. In Abb. 68 ist die Anordnung der Bohrungen (inkl. deren Orientierung) sowie der KW-führende Bereich mit seiner Projektion ins Gebirge (gelb) schematisch dargestellt (PAUL et al. 2011). Ziele der Messungen in diesem Bereich sind die Größenabschätzung der in den einzelnen Bohrungen erbohrten KW-Vorkommen und damit die Bestimmung der räumlichen Ausdehnung des Imprägnationsbereiches um die Strecke sowie die Identifikation von potentiellen Verbindungen zwischen den einzelnen Vorkommen. Die Bohrung RB686 ist in der Firste mit einem Ansteigen von 50 gon nach Nord-Nordwesten und streckenparallel (368,7 gon) angeordnet. Die Bohrung RB687 wurde parallel zur RB686 und ebenfalls mit 50 gon nach Norden ansteigend gebohrt. Am östlichen Stoß wurde die Bohrung RB688 mit einer Richtung von 396,5 gon und einem Ansteigen von 22 gon nach Norden angeordnet. Am westlichen Stoß wurde die RB685 mit einer Orientierung von 318,7 gon und einem Ansteigen von 22 gon nach Norden gebohrt.

Wenige Meter südlich von diesem Querschnitt befindet sich ein weiterer Imprägnationsbereich am westlichen Stoß des Querschlages 1 West mit der Bezeichnung RF077. In diesem Bereich wurden die Packerbohrungen RB689 (mit einer Orientierung von 318,7 gon und einem Ansteigen von 2,2 gon in Richtung Nordwesten) und RB691 (mit einer Orientierung von 218,7 gon und einem Ansteigen von 4,9 gon in Richtung Südwesten) gestoßen und instrumentiert. Die Anordnung der Bohrungen erfolgte nach der Vorgabe, dass sich beide Bohrungen im Bereich der Packer kreuzen. Der kleinste Abstand zwischen den Bohrungen beträgt ungefähr 1 m. Die Anordnung der beiden Packerbohrungen ist in Abb. 68 dargestellt. Ziele der Messungen in diesem Bereich sind die Größenabschätzung der KW-Vorkommen und damit die Bestimmung der Ausbreitung des Imprägnationsbereiches um die Strecke sowie die Identifikation von potentiellen Migrationswegen.

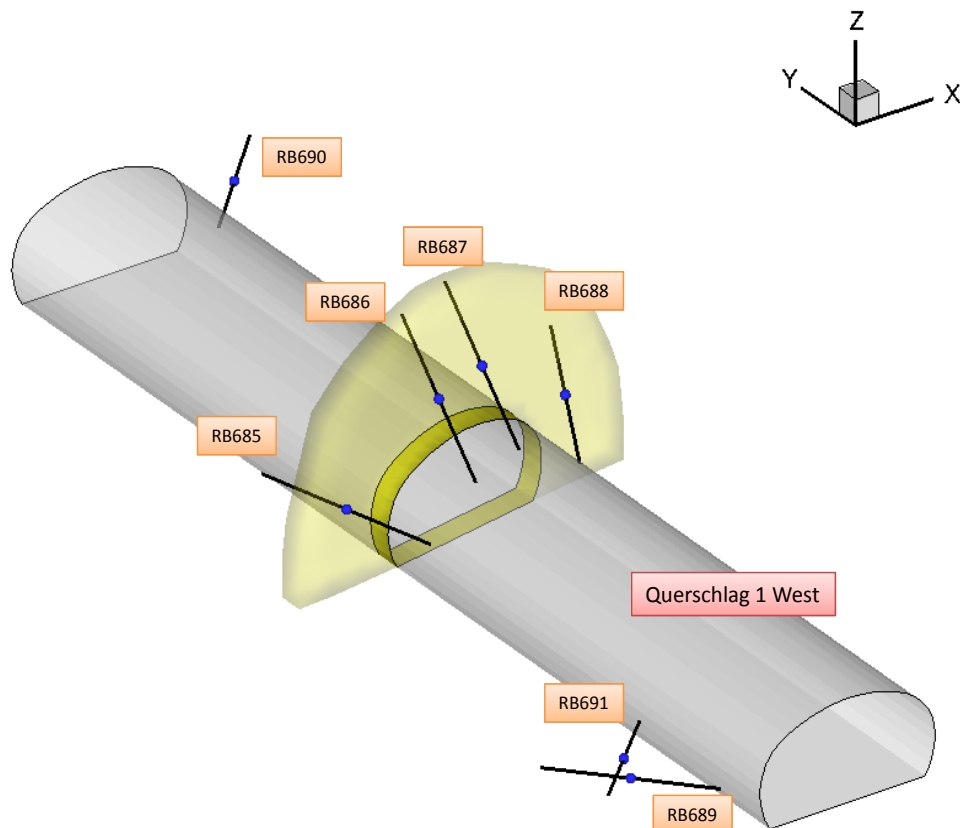


Abb. 68: Schematische Darstellung des Querschlags 1 West mit den Orientierungen der KW-Packerbohrungen im Bereich der Zutrittsstellen RF081, RF077 und RF086 (PAUL et al. 2011).

Nördlich des Messquerschnittes mit den Bohrungen RB685 bis RB688 wurde die Bohrung RB690 in unmittelbarer Nähe zur Feuchtstelle RF086 am östlichen Stoß des Querschlags 1 West mit einer Orientierung von 18,7 gon und einem Ansteigen von 2,2 gon gestoßen (vgl. Abb. 68).

In der Ortsbrust der sog. „UV-Nische“ (Nische 302) wurden zwei Bohrungen (RB683 und RB684) in unter gewöhnlichem Kunstlicht sichtbaren KW-Imprägnationsbereichen instrumentiert. Mit diesen Bohrungen soll neben der Größen- und Mengenabschätzung des Imprägnationsbereiches auch der Nachweis erfolgen, dass kein Migrationsweg zwischen den Bohrungen und zur gasführenden Bohrung RB763 (Vorbohrung für Prüfkörperbohrung aus Bohrt 1.4 nach Süden) besteht. Daher wurde bei der Anordnung der Bohrungen darauf geachtet, dass einerseits die Distanz zur Bohrung RB763 möglichst gering ist und andererseits ein möglichst großer Gebirgsbereich erfasst wird. Sowohl die Bohrung RB683 als auch die RB684 sind mit einem Winkel von rund 80 gon zur Bohrung RB763 angeordnet. Der Bohransatzpunkt der Bohrung RB683 befindet sich am Übergang von Ortsbrust zur Firste, das Ansteigen beträgt 50 gon. Die Bohrung RB684 wurde in der Ecke

zwischen Ortsbrust und südlichem Stoß mit einem Ansteigen von 2,2 gon gestoßen. Die Anordnung der Bohrungen RB683 und RB684 ist in Abb. 69 skizziert.

Nördlich des Bohrortes 1.4 wurde in der Firste des Querschlags 1 West die Bohrung RB692 erstellt. Der Ansatzpunkt befindet sich wenige Meter südlich der Feuchtstelle RF119. Die Anordnung der Packerbohrung erfolgte streckenparallel mit einem Ansteigen von 50 gon in Richtung NNW (368,7 gon). In Abb. 69 ist die Anordnung der Packerbohrung RB692 dargestellt.

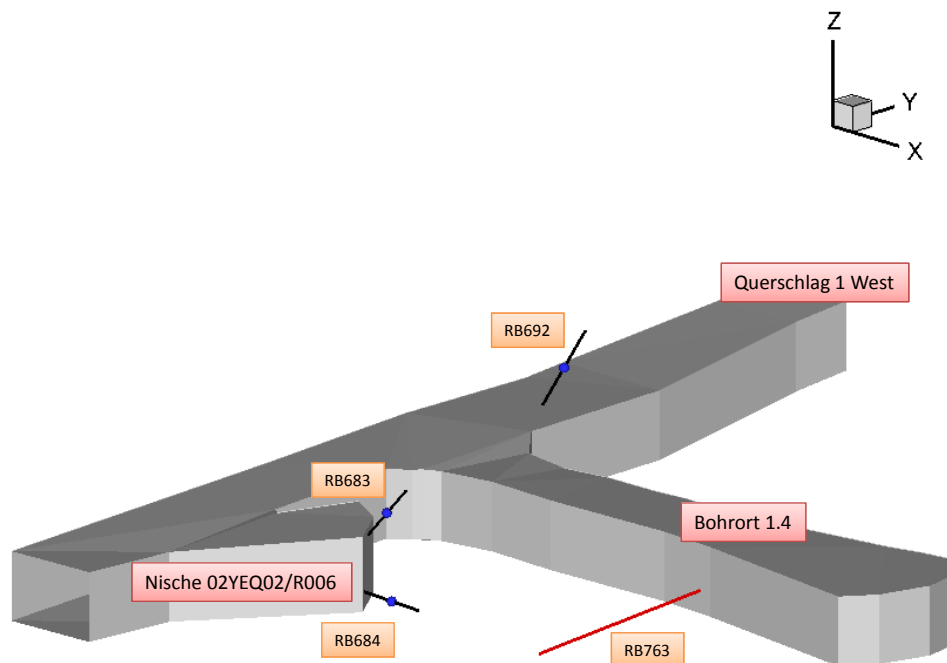


Abb. 69: Schematische Darstellung des Querschlages 1 West und Bohrortes 1.4 mit den Orientierungen der KW-Packerbohrungen und der Vorbohrung RB763 (PAUL et al. 2011).

8.3 Testausrüstung und Dokumentation der Messdaten

Das in 2011 von der Fa. Glözl, Gesellschaft für Baumesstechnik mbH in Rheinstetten im Auftrag der BGR zum Einsatz in den Packerbohrungen gefertigte Messsystem setzt sich aus folgenden Komponenten zusammen:

- mechanisches Einfachpackersystem,
- PTFE (Polytetrafluorethylen)-Dummy,
- Messgestell inkl. explosionsgeschützter Sensoren (Abb. 70),

- explosionsgeschütztes Datenerfassungssystem MCC sowie
- Hydraulikleitungen aus V4A-Edelstahl und eigensicheren Messkabeln.

Als Dichtungselement wird ein mechanischer Packer des Typs CMP42/150/3000 (Durchmesser/Abdichtlänge/Gesamtlänge in mm) der Fa. Comdrill Bohrausrüstungen GmbH Untereisesheim verwendet. Das Packergummi besteht aus NBR (Nitrile Butadiene Rubber) und ist damit resistent gegenüber KW (PAUL et al. 2011).

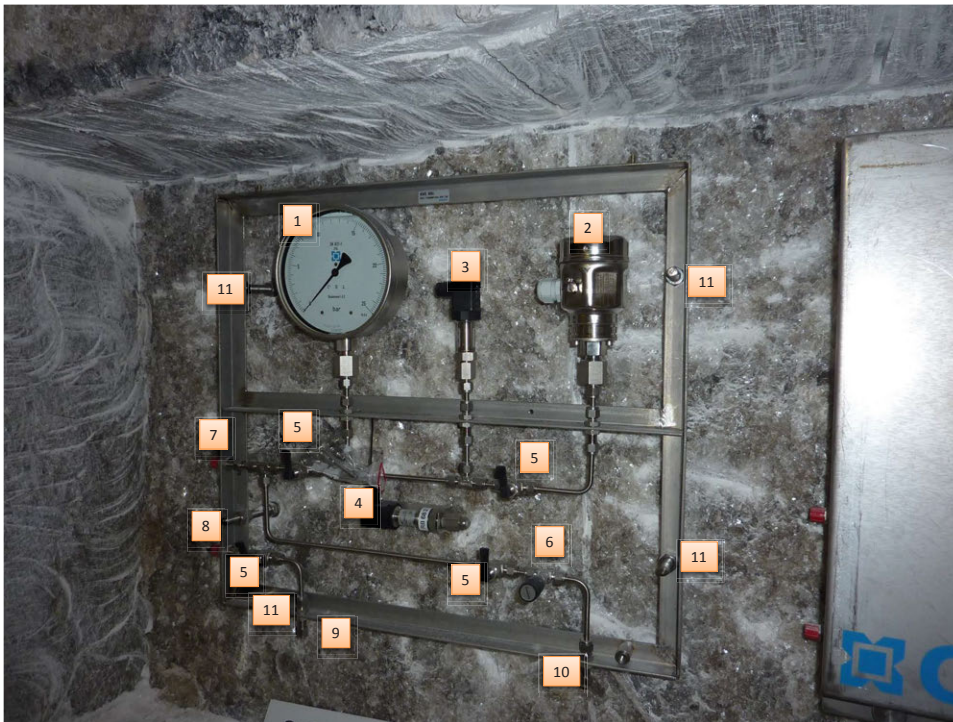


Abb. 70: KW-Messgestell mit Sensoren (PAUL et al., 2011).

- | | | |
|-----------------------|--|--------------------------------|
| 1- Manometer | 2- Differenzdrucktransmitter (0,1 bar) | 3- Drucktransmitter (20 bar) |
| 4- Luftdrucksensor | 5- Kippebelventile | 6- Nadelventil |
| 7- Gaszuleitung | 8- Zuleitung für flüssige KW | 9- Entnahmestelle flüssiger KW |
| 10- Gasentnahmestelle | 11- Halterungen für Messgestell | |

In 2011 wurden 10 Packerbohrungen im Querschlag 1 West erstellt und entsprechend instrumentiert (Abb. 70). Mit Hilfe des ex-geschützten Datenerfassungssystems MCC sind die Drücke in den Messbereichen der jeweiligen Packerbohrung und die Differenzdrücke der Messintervalle zur Umgebung sowie der Luftdruck an zwei Lokationen im Querschlag 1 West kontinuierlich aufgezeichnet worden. Die Daten wurden von DBE-Personal von der MCC ausgelesen und auf einem Passwort geschützten WebDAV-Server abgelegt, so dass die BGR direkt auf die Daten zugreifen konnte und eine schnelle Auswertung für die Festlegung des weiteren Vorgehens zu jeder Zeit sichergestellt war.

Das ex-geschützte Datenerfassungssystem der Firma GLÖTZL ermöglicht eine hochauflösende Aufzeichnung des Druckes. Aufgrund der erwarteten schnellen Druckänderun-

gen unmittelbar nach Erstellung der Bohrungen wurde die Messfrequenz generell auf 30 Sekunden eingestellt, so dass eine sehr präzise Aufnahme der Druckänderung für die Bewertung und Interpretation der KW-Vorkommen zur Verfügung steht.

Die von der MCC bis zum 18.11.2011 registrierten Daten aus allen Bohrungen sind im Zwischenbericht "Geotechnische Instrumentierung und Messungen der BGR" (PAUL et al. 2011) dokumentiert. Eine Auflistung der Messdaten der Differenzdrucktransmitter ist an dieser Stelle nicht erforderlich, da die Auflösung der Absolutdrucktransmitter hinreichend genau ist und für die Auswertung herangezogen wurde. Alle Messsensoren und Packersysteme arbeiten seit der Inbetriebnahme fehlerfrei.

Charakteristisch für die zeitliche Entwicklung der Mehrzahl der gemessenen Drücke ist ein sägezahnförmiger Verlauf. Ursache für diesen Verlauf ist der vom Bergamt auf 10 bar limitierte Intervalldruck, so dass beim Erreichen dieses Druckwertes in einigen Bohrungen (RB683, RB685, RB686, RB687, RB688 und RB689) das Ventil in der Gasleitung wegen des anfänglich starken KW-Zutritts mehrmals geöffnet werden musste. Bei den Bohrungen RB687 und RB692 musste der Packer nachgespannt werden, da es hier zu einem unerwarteten leichten Druckabfall kam bzw. kein Druckaufbau erfolgte.

Durch separate Leitungen erfolgten durch die DBE Probennahmen auf Gas und flüssiges Kondensat für weitergehende chemische Analysen im BGR-Labor. Die Probennahmen wurden getrennt für jede Messstelle in Excel-Tabellen dokumentiert. Wichtige Informationen, wie Datum/Uhrzeit, Bearbeiter, Drücke vor und nach dem Entlasten des Messintervalls, Menge und Bezeichnung der Proben sind lückenlos protokolliert. Das Format der Excel-Tabelle wurde zwischen BGR und DBE abgestimmt, so dass die Protokolldaten ohne weitere Überarbeitung in die Auswertung mit einem BGR-Makro einfließen konnten. In PAUL et al. (2011) sind die Protokolle zur Probennahme in den Bohrungen RB683, RB685, RB686, RB687, RB688 und RB689 dokumentiert.

8.4 Auswerteverfahren und Gasvolumenbestimmung

Zur Abschätzung der Gasvolumina aus den in den Messintervallen gemessenen Drücken wurde die Massenbilanztheorie angewandt. Die zuströmende Gasmischung aus dem Gebirge wird als ideales Gas angenommen, für das folgende Zustandsgleichung gilt:

$$m = \frac{P \cdot V}{R_s \cdot T} = \frac{P \cdot V}{(R/M) \cdot T} \quad (15)$$

mit: P = Intervalldruck [Pa]
V = Intervallvolumen [m³]

- R_s = spezifische Gaskonstante [J/(kg·K)]
- R = universelle Gaskonstante 8,314472 [J/(mol·K)]
- M = molare Masse [kg/mol]
- T = absolute Temperatur [K]

Betrachtet werden hier die Gasmenge in den abgepackerten Messintervallen unter den aktuellen Druckbedingungen sowie die Volumina der ausströmenden Gase bei der Probennahme. Unter isothermalen Bedingungen kann der Massenstrom wie folgt berechnet werden:

$$\dot{m} = \frac{\partial m}{\partial t} = \frac{V}{R_s \cdot T} \cdot \frac{\partial P}{\partial t} \quad (16)$$

Die spezifische Gaskonstante ist abhängig von der Art und Zusammensetzung des Gases und wird aus der Anzahl der Atome und deren molaren Massen berechnet. Die chemischen Laboruntersuchungen an den Gasproben aus den Packerbohrungen ergaben eine Zusammensetzung von 40 % Methan, 40 % Stickstoff und 20 % anderen Gasen (Kohlendioxid, Propan und Sauerstoff, pers. Mitteilung Schlömer, BGR). Für die Auswertung der Messdaten wurde daher ein sogenannter Syntheseparametersatz (Tab. 7) für die Gasmischung eingeführt.

Tab. 7: Syntheseparameter für die Gasmischung

	Dichte [kg/m ³] bei 0°C und 1,0132 bar *0	dynamische Viskosität [μ Pa·s] Bei 1,0132 bar *0	spezifische Gaskonstante [J/kg K] *1
Methan (CH ₄)	0,72	11,2·10 ⁻⁶	518,279
Stickstoff (N ₂)	1,25	19,2·10 ⁻⁶	296,797
Propan (C ₃ H ₈)	2,01	8,3·10 ⁻⁶	44,095
Kohlenstoffdioxid (CO ₂)	1,98	15·10 ⁻⁶	
Sauerstoff (O ₂)	1,43		
Synthese	1,14926667 *2	1,449·10⁻⁵	363,84
$\rho_{syn} =$	1,04583267 *3		

*0: Daten aus GIECK (1984)

*1: Berechnet aus universellen Gaskonstante R und Zahl der Atome aus der Summenformel

*2: Berechnet anteilig nach der Gaszusammensetzung

*3: Temperaturkorrektur für 27 °C (gemessene Streckentemperatur)

Das Gesamtvolumen V summiert sich aus den Volumina des Messintervalls (abgepackertes Bohrungsvolumen abzüglich Dummy-Volumen), der Gasleitung und der Flüssigkeitsleitung. Je nach Abstand der Bohrung zur Messapparatur sowie der Einbautiefe des Packers kann das Intervallvolumen von 1,4 bis 2 Liter variieren.

Bei der Auswertung wird das Volumen zunächst als konstant angenommen. Für den Fall, dass ein Zutritt von flüssigem Kondensat aus dem Gebirge zu beobachten war und damit zu einer Volumenverringerng für das Gas geführt hat, erfolgt anschließend eine Korrektur des Gesamtvolumens. Für die Verringerung des Gesamtvolumens wird eine lineare Kondensatzunahme zwischen den Probennahmen der Kondensatproben angenommen. Daher sind die Volumina der Kondensatproben für die Berechnung der Gasmenge maßgebend.

Ist der Massenstrom bekannt, kann das Gasvolumen zu einem bestimmten Zeitpunkt unter Normbedingung wie folgt berechnet werden:

$$V_t = \dot{m} \cdot (t - t_1) / \rho_{syn} \quad (17)$$

t_1 bezeichnet den Zeitpunkt, an dem der Druck zuletzt registriert wurde.

Die kumulative Gasmenge wird dann wie folgt berechnet:

$$V_{gas} = \sum_{t=0}^{t_m} V_t \quad (18)$$

Der Algorithmus wurde als Makroprogramm in Excel implementiert. Dies ermöglicht eine automatische Berechnung des kumulativen Gasvolumens bei Vorhandensein der gemessenen Druckwerte.

In 6 von den insgesamt 10 KW-Packerbohrungen im Querschlag 1 West wurde ein signifikanter Druckaufbau gemessen. Mit dem beschriebenen Auswerteverfahren wurden der Massenstrom (Gleichung 2) sowie die kumulative Gasmenge (Gleichung 4) berechnet und eine sehr gute Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Gasmengen erzielt (Abb. 71 bis 76). Die gemessenen Gasmengen sind den Probennahmen-Protokollen entnommen.

Aufgrund des schnellen und starken Druckaufbaus in der Anfangsphase mussten die Bohrungen RB685, RB688 und RB689 aus Sicherheitsgründen während der ersten Wochenenden offen gelassen werden. Insgesamt sind fünf Wochenenden unter freien Fließbedingungen in der Bohrung RB685 und jeweils sechs Wochenenden in den Bohrungen RB688 und RB689 dokumentiert. Aus den registrierten Drücken vor und nach

den Wochenenden wurden die gemittelten Fließraten bestimmt, anhand derer die über die Wochenenden ausgetretenen Gasmengen abgeschätzt wurden. Diese abgeschätzten Gasmengen wurden zur kumulativen Gesamtmenge (sowohl der berechneten als auch der gemessenen) addiert. Die berechnete Fließrate wurde mit der nach jedem Wochenende gemessenen Fließrate unter freien Fließbedingungen verglichen. Bis auf wenige Werte (rot markierte Felder), bei denen unklar ist, ob die Fließraten tatsächlich unter freien Bedingungen erfasst wurden, stimmen die berechneten Fließraten mit den gemessenen Fließraten gut überein (Tab. 8).

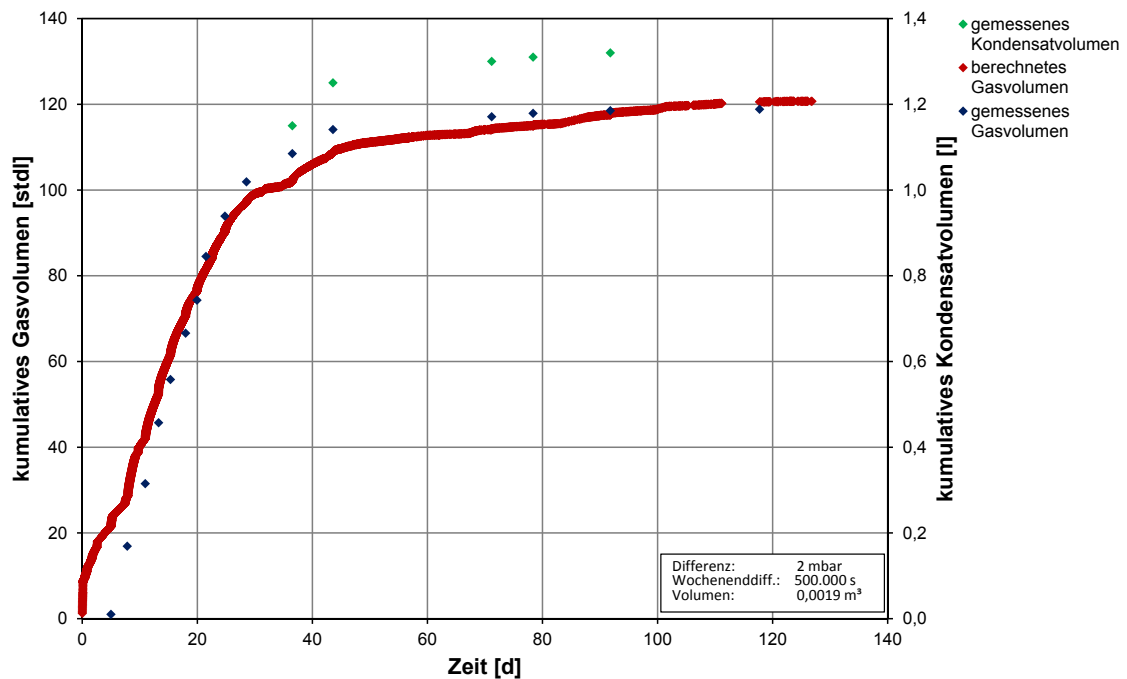


Abb. 71: Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB683 unter Normbedingungen.

Tab. 8: Berechnete und gemessene Fließraten in den Bohrungen RB685, RB688 und RB689 vor und nach den Wochenenden (Erläuterungen siehe Text)

	Datum	gemessen [ml/min]	berechnet [ml/min]	Datum	gemessen [ml/min]	berechnet [ml/min]
RB685	06.08.2011 01:50	-	89.71	08.08.2011 06:37	-	4.95
	20.08.2011 01:13	-	61.67	22.08.2011 07:30	7.8	6.49
	27.08.2011 01:05	-	9.35	29.08.2011 06:25	7.8	7.98
	03.09.2011 00:45	21.1 (p=7 bar?)	2.75	05.09.2011 06:40	0.6	1.55
	09.09.2011 21:30	20 (p=3.3 bar?)	6.28	12.09.2011 06:00	0	1.14
RB688	06.08.2011 01:36	-	269.1	08.08.2011 06:27	-	42.62
	13.08.2011 00:28	-	98.37	15.08.2011 07:27	-	18.59
	20.08.2011 00:57	-	112.31	22.08.2011 07:50	22.6	18.18
	27.08.2011 00:50	100	96.86	29.08.2011 06:35	14	10.27
	03.09.2011 01:00	54.5	77.84	05.09.2011 06:30	6	7.49
	09.09.2011 21:20	103.4	37.84	12.09.2011 06:15	1	6.05
RB689	13.08.2011 00:39	-	60.19	14.08.2011 07:32	-	8.7
	20.08.2011 01:26	-	98.87	22.08.2011 07:30	9	8.53
	27.08.2011 01:12	-	47.07	29.08.2011 06:15	5.8	4.74
	03.09.2011 00:30	31.6	41.3	05.09.2011 06:20	6.8	6.1
	09.09.2011 21:00	30.8	25.32	12.09.2011 06:15	1.5	6.1

In Tab. 9 sind beispielhaft die Gesamtmengen an Gas aus der Bohrung RB688 für die Wochenenden, die messtechnisch nicht erfasst aber berechnet wurden, zusammengefasst. Die 493 Liter Gas, die innerhalb von 52 Stunden am ersten Wochenende austraten, entsprechen einer Fließrate von 9,4 l/h. Die gemessene Fließrate unter niedrigen Druckbedingungen (< 1 bar) vor dem Wochenende beträgt ca. 10,1 l/h. Am zweiten Wochenende sind 193 Liter Gas für 54,9 Stunden berechnet worden. Dies entspricht einer Fließrate von 3,5 l/h, und ist mit der gemessenen Fließrate von 3,85 l/h unter niedrigen Druckbedingungen vor dem Wochenende vergleichbar. Daher ist die Auswertung hinsichtlich der Verlustmenge plausibel.

Tab. 9: Gasmengen der Bohrung RB688, die bei Offenhaltung der Bohrung nicht erfasst wurden

	RB688	Status	Gas_cum (L_std)
1. Wochenende	06.08.-08.08.	offen	493,46
2. Wochenende	13.08.-15.08	offen	192,64
3. Wochenende	20.08.-22.08.	offen	215,48
4. Wochenende	27.08.-29.08.	offen	173,77
5. Wochenende	03.09.-05.09	offen	136,91
6. Wochenende	09.09.-12.09.	offen	77,02

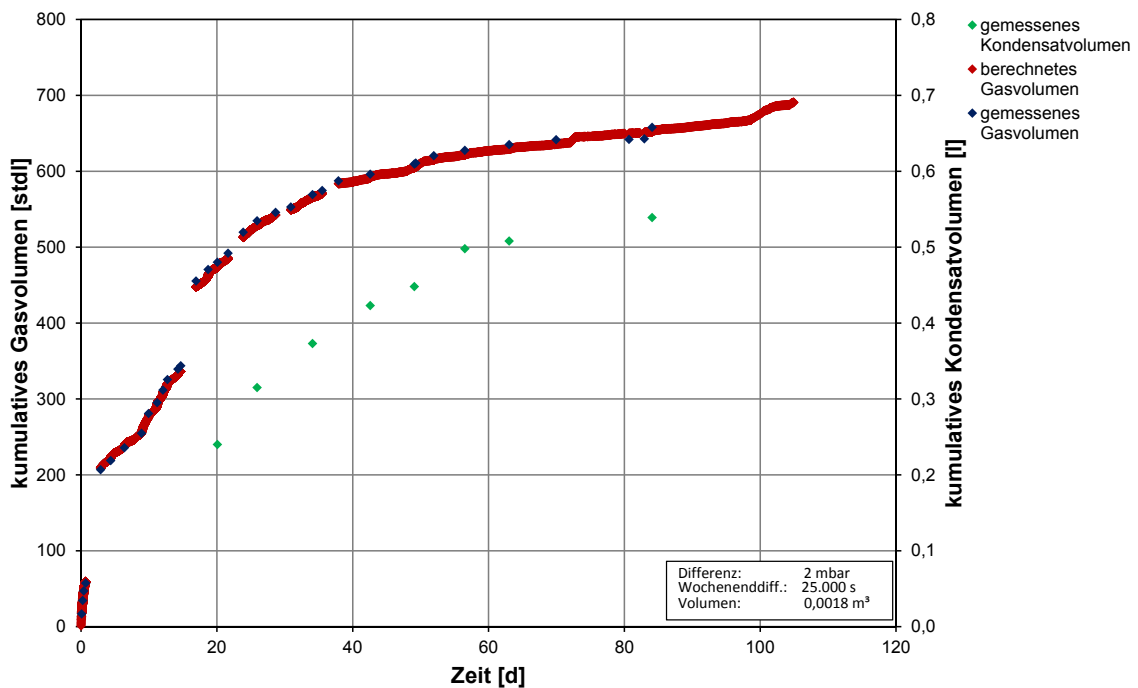


Abb. 72: Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB685 unter Normbedingungen.

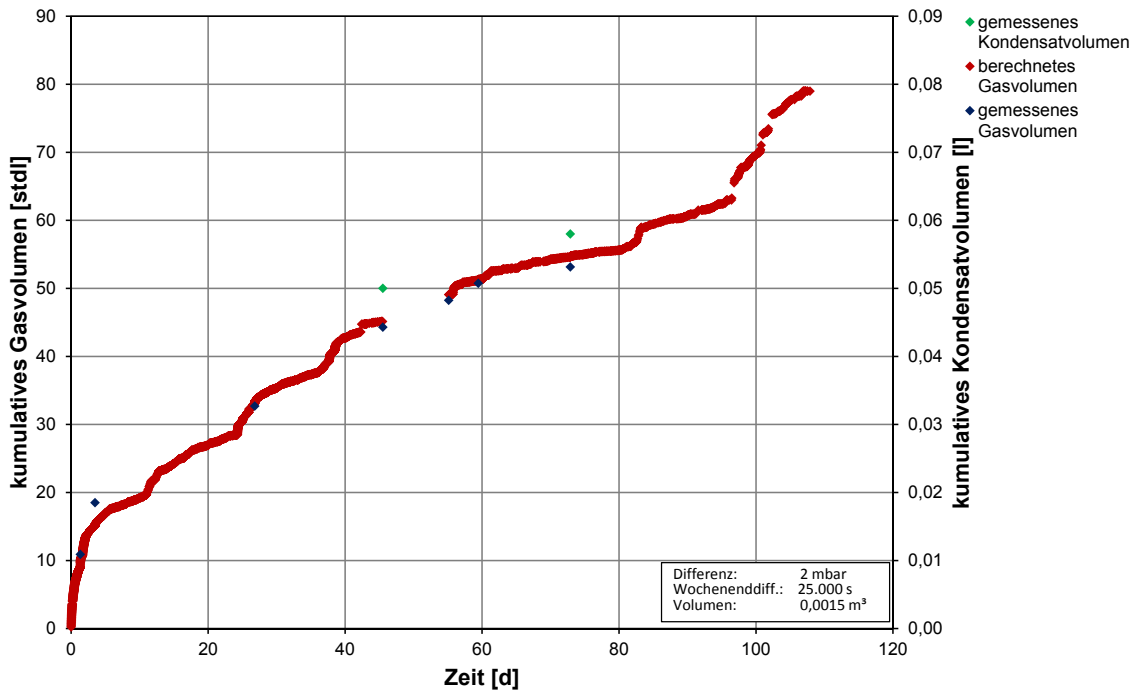


Abb. 73: Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB686 unter Normbedingungen.

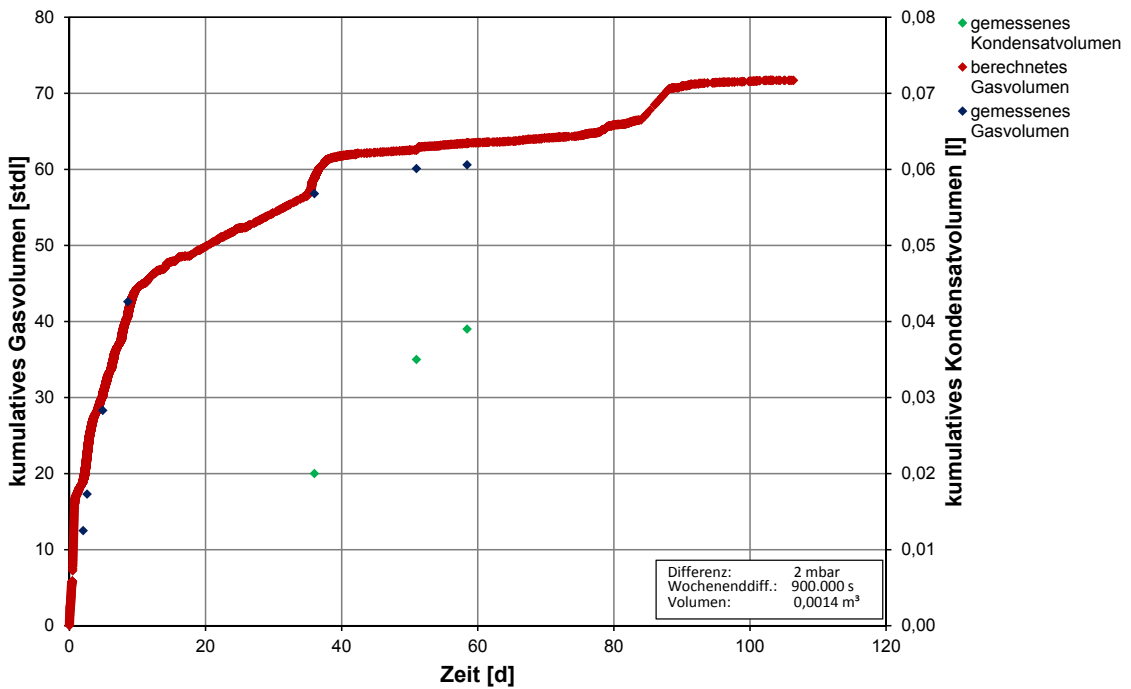


Abb. 74: Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB687 unter Normbedingungen.

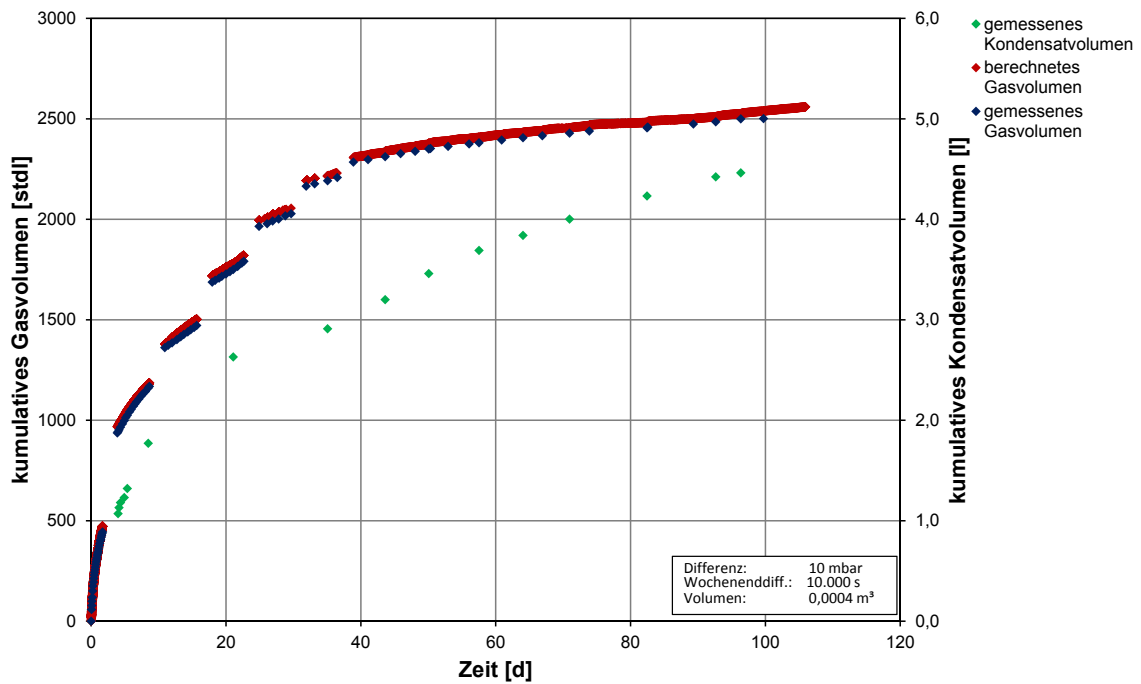


Abb. 75: Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB688 unter Normbedingungen.

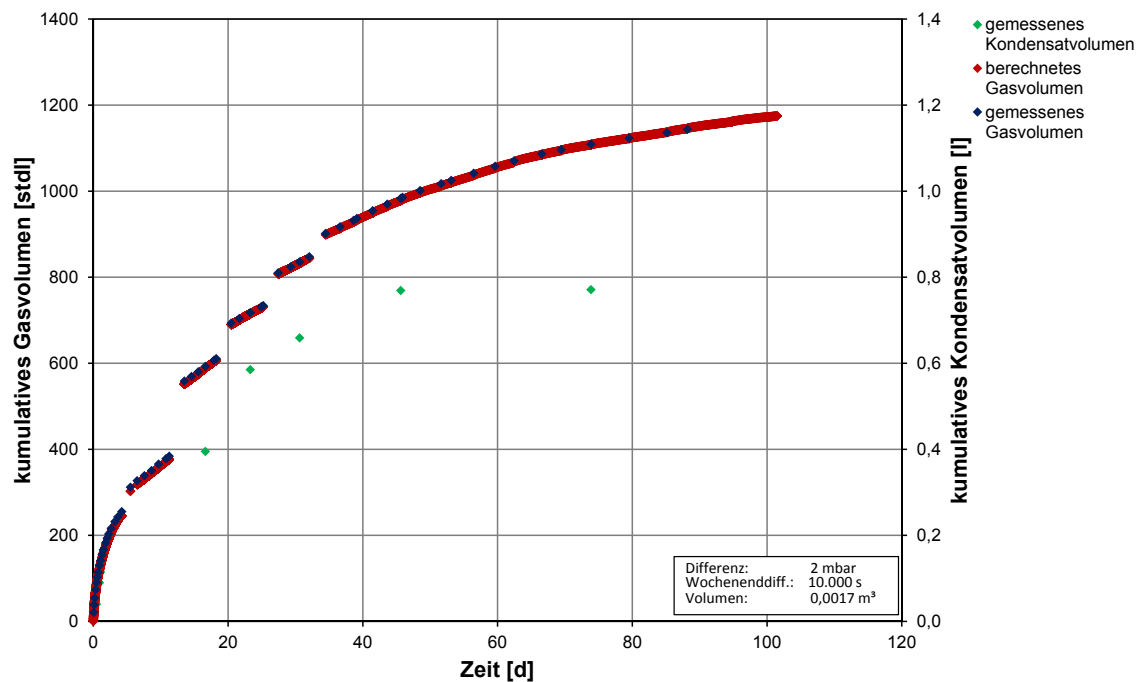


Abb. 76: Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB689 unter Normbedingungen.

Besonders auffällig ist die Druckentwicklung in der Bohrung RB688 (Abb. 75). Nach Erstellung der Bohrung am 04.08.2011 wurde der zu installierende Packer planmäßig gesetzt. Innerhalb von 1,5 Stunden stieg der Druck auf 21,55 bar an. Anschließend musste die Bohrung fast stündlich geöffnet werden, um die Bohrung zu entlasten. In

den ersten beiden Tagen strömten nahezu 500 Liter Gas (Standardbedingungen) zu. Dieses Volumen entspricht in etwa einem Fünftel des in der Bohrung innerhalb des Berichtszeitraumes ausgetretenen Gesamtvolumens. Für die maximale Massenfließrate in den ersten 15 Minuten nach Erstellung der Bohrung wurde ein Wert von 0,69 g/min berechnet. Die zeitliche Entwicklung der berechneten Massenfließrate und des gemessenen Intervalldruckes ist in Abb. 78 dargestellt. Hinweise auf einen größeren Hohlraum, in dem die Kohlenwasserstoffe ursprünglich gespeichert wurden, sind anhand der geologischen Bohrkerndokumentation nicht zu erkennen. Als Speicherraum kann nur der auffällig poröse Bereich mit Porendurchmessern von bis zu 7 mm in einer Bohrungstiefe von 3,55 bis 3,60 m vermutet werden (Abb. 77). Dieser Bereich wird zwecks Klärung des Speichervolumens einer detaillierten gefügekundlichen Untersuchung unterzogen, inklusive einer computertomographischen Analyse.

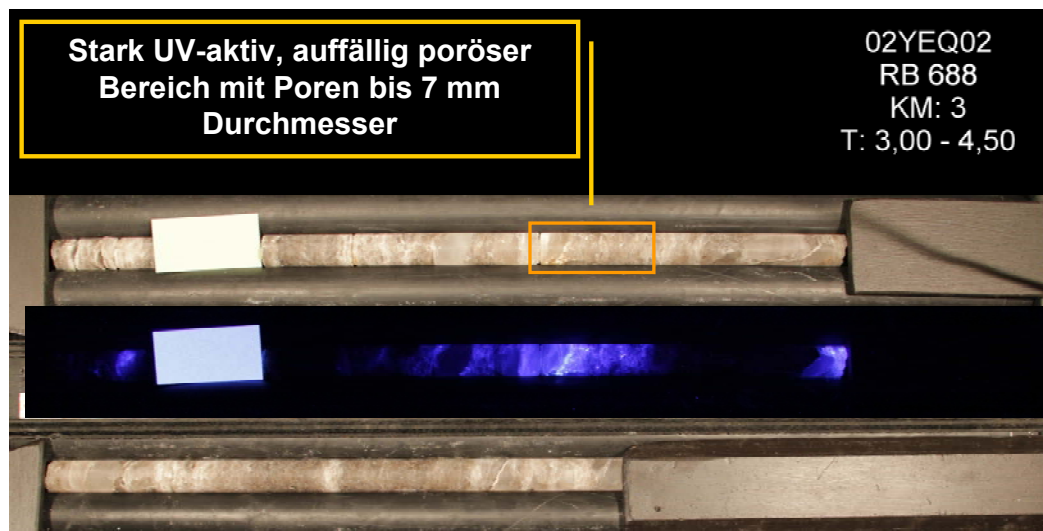


Abb. 77: Verteilung der KW-führenden Bereiche in der Bohrung RB688 unter Tageslicht (oben und unten) und UV-Strahlung (Mitte).

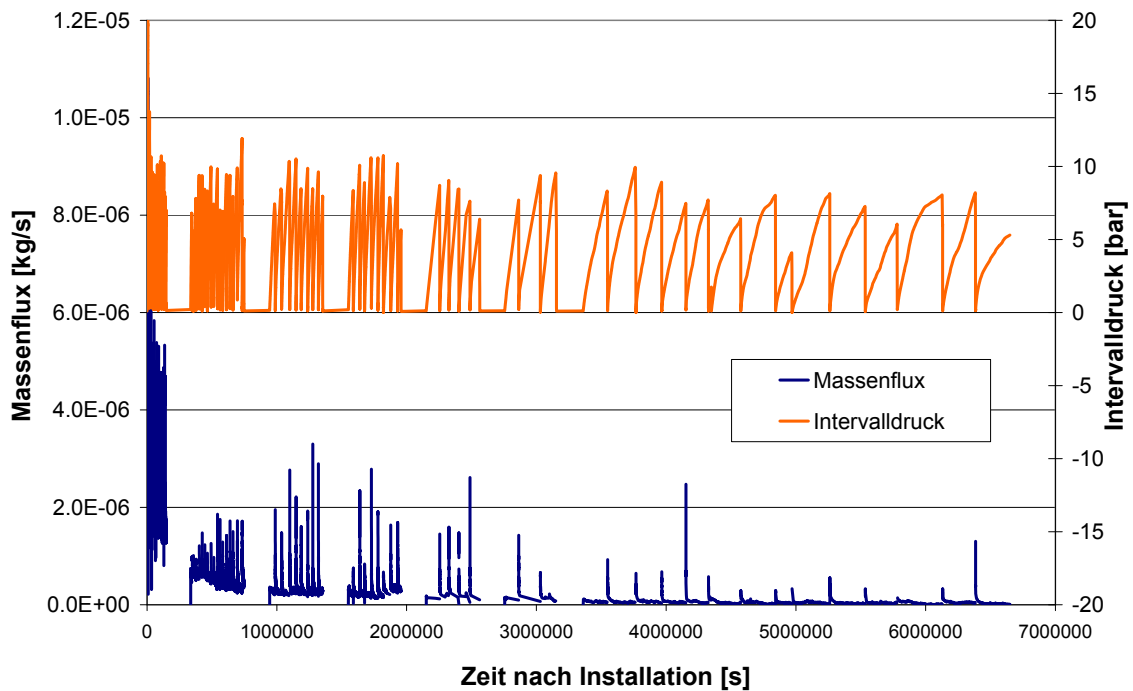


Abb. 78: Zeitlicher Ablauf der berechneten Massenfließrate und des gemessenen Intervalldruckes in der Bohrung RB688.

Die Bohrungen RB684, RB690, RB691 und RB692 weisen keinen wesentlichen Druckaufbau auf (PAUL et al. 2011). In den Bohrungen RB691 und RB692 wurden in den Messbereichen von ca. 3 m bis ca. 6 m Tiefe keine UV-Auffälligkeiten beobachtet. UV-auffällige Bereiche sind nur in den vorderen Bereichen bis 3 m lokalisiert (Anhang 2.1 bis 2.10), die jedoch mit den installierten Packern nicht erfasst werden. Der geringe Druckaufbau in diesen beiden Bohrungen ist daher möglicherweise nicht auf zutretende KW zurückzuführen. Vermutlich sind Bohrlochkonvergenzen als Ursache für diesen geringen Druckaufbau zu betrachten. Für die Packerbohrungen RB684 und RB690 wurden anhand der gemessenen Intervalldrücke die in die Messintervalle zugetretenen Gasmengen abgeschätzt. Ein volumenvermindernder Kondensatanteil wurde nicht berücksichtigt. Nach der Massenbilanztheorie berechnen sich die Gasmengen auf 0,35 Liter in der Bohrung RB684 und 1,8 Liter in der Bohrung RB690.

Die bis zum 18. November 2011 in den einzelnen Bohrungen gemessenen bzw. berechneten kumulativen Volumina für Gas und Kondensat sind Tab. 10 und Tab. 11 zu entnehmen.

Tab. 10: Kumulative Gas- und Kondensatvolumina unter Standardbedingungen aus sechs Bohrungen mit deutlichen Zutritten (bis 18.11.2011)

Bohrung	Erstellungsdatum	Tage bis 18.11.11	Gas_cum (L)	Kondensat_cum (L)
RB683	14.07.2011	126,8	120,7	1,32
RB685	05.08.2011	104,9	690,8	0,539
RB686	02.08.2011	107,9	78,98	0,058
RB687	03.08.2011	106,4	71,7	0,039
RB688	04.08.2011	106	2559,6	4.462
RB689	08.08.2011	101,6	1174,6	0,771
Summe			4936,38	7,189

Tab. 11: Kumulative Gas- und Kondensatvolumina unter Standardbedingungen aus vier Bohrungen ohne nennenswerte bzw. ohne Zutritte (bis 18.11.2011)

Bohrung	Erstellungsdatum	Tage bis 18.11.11	Gas_cum (L)	Kondensat_cum (L)
RB684	15.07.2011	125,8	0,35	0
RB690	29.07.2011	111	1,8	0
RB691	09.08.2011	103	0	0
RB692	20.07.2011	120	0	0
Summe			2,15	0

8.5 Ergebnisse und ihre Bewertung

Aufgrund des noch andauernden Druckaufbaues in einigen Bohrungen sowie der noch nicht vollständig abgeschlossenen Auswertung ist die Bewertung der Ergebnisse als vorläufig zu betrachten.

Generell treten gasförmige und flüssige KW gemeinsam auf. Die gasförmigen KW befinden sich in gelöster Form im flüssigen Kondensat im Porenraum bzw. auf den Korngrenzen. Makroskopisch sind KW-auffällige Bereiche oft in Form von abgeschlossenen bzw. isolierten Vorkommen (Nester) angeordnet. Der Abstand zwischen den einzelnen Nestern variiert. Aufgrund der sehr geringen Permeabilität des Salzes ist eine Mobilisierung des Zweiphasengemisches außerhalb der Auflockerungszone unwahrscheinlich. Deshalb wirkt ein Porendruck nahe des petrostatischen Tiefendrucks in diesen abgeschlossenen KW-Vorkommen außerhalb der Auflockerungszone. Im Querschlag 1 West, der vor über 10

Jahren aufgeföhren wurde, wurde durch Messungen der Bereich erhöhter Permeabilitäten mit einer Reichweite von ca. 2 m ins Gebirge hinein bestimmt (ZARETZKI et al. 2011, siehe auch Kap. 9). In der Auflockerungszone treten in den KW-imprägnierten Bereichen Mikrorisse und eine Vergrößerung des Porenraumes auf, die zu einer Druckentlastung und damit zu einer Freisetzung des Gases aus dem Zweiphasengemisch föhren. Aufgrund der niedrigeren Viskosität im Vergleich zur Flüssigkeit fließt zuerst das freigesetzte Gas infolge des Druckgradienten in die Bohrung oder in die Strecke. Anschließend folgt das flüssige Kondensat oder das Gemisch. Je nach Größe und Porosität des imprägnierten Bereiches kann das Volumen des Vorkommens sehr variabel sein.

Projekt: Unters. Kohlenwasserstoffe

RB687 Druck

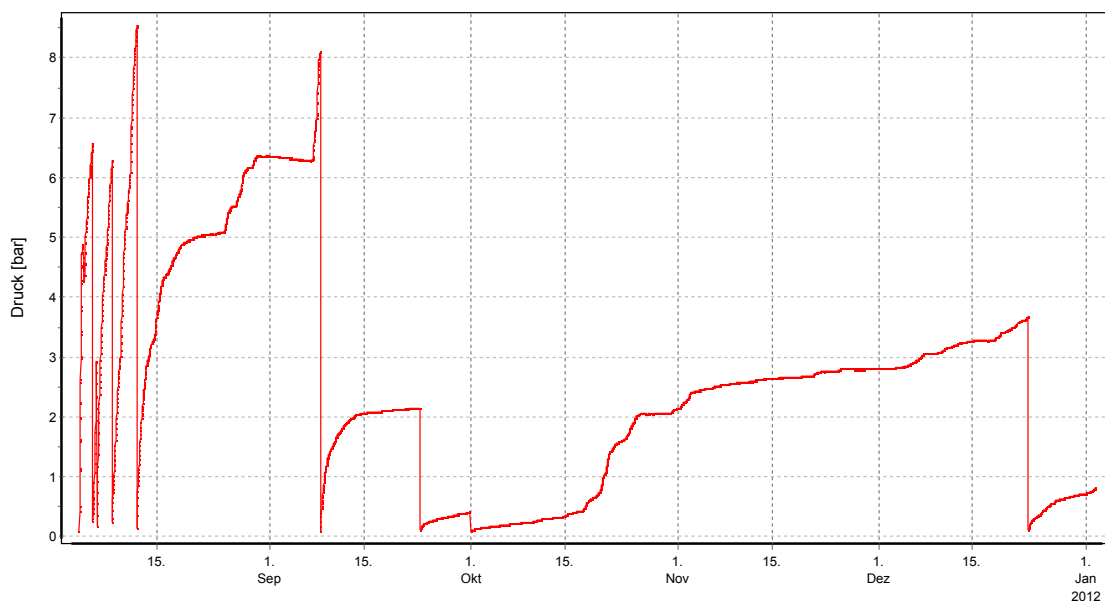


Abb. 79: Gemessener Druckaufbau in der Bohrung RB687 im Jahr 2011.

Durch die initiale (durch die Bohrung induzierte) Freisetzung der KW und das daran gebundene hydraulisch bedingte Nachfließen von KW aus benachbarten Bereichen (die im weiteren Verlauf der In-situ-Messungen genauer dimensioniert werden sollen) tragen diese KW mit zeitlicher Verzögerung zum Druckaufbau in den Packerbohrungen bei. Dies wird exemplarisch anhand der zeitlichen Entwicklung des Intervalldruckes der Packerbohrung RB687 in Abb. 79 abgeleitet. Nach mehrmaligem Druckanstieg und mehrmaliger Druckentlastung erreicht der Intervalldruck am 18. September 2011 einen quasistationären Wert von 2,1 bar. Der Intervalldruck blieb für 5 Tage konstant, bis am 23. September eine (nicht geplante) Druckentlastung erfolgte. Nach einem erneuten kurzen Druckanstieg und einer (wiederum nicht geplanten) Entlastung am 01. Oktober 2011 ist der Intervalldruck anschließend mit wechselnden Druckanstiegsraten bis zum 24. November 2011 auf einen Wert von 2,7 bar angestiegen. Für die nachfolgenden Messungen wird eine weitere Druckzunahme erwartet.

Erfolgt der Gaszutritt aus einem abgeschlossenen Vorkommen, dann ist bei aufeinanderfolgenden Druckaufbauzyklen generell von abnehmenden Werten für die quasi-stationären Intervalldrücke auszugehen. Diese Annahme trifft für die Bohrung RB687 nicht zu. Daher wird vermutet, dass mehrere kleine abgeschlossene KW-Vorkommen im Einflussbereich der Bohrung vorhanden sind. Die Druckentlastung der mit der Bohrung unmittelbar aufgeschlossenen Vorkommen in Kombination mit den weiterhin hohen Gasdrücken in den nicht unmittelbar mit der Bohrung aufgeschlossenen Vorkommen könnte dann zu Spannungsumlagerungen führen, die in einer Mikrorissbildung zwischen den abgeschlossenen Vorkommen resultiert. Dadurch würden lokal sehr begrenzt neue Migrationspfade, d. h. Verbindungen zwischen einzelnen KW-Vorkommen geschaffen, die allerdings in ihrer Reichweite deutlich begrenzt sein müssen, wie die vergleichsweise hohen Drücke in den Vorkommen im Nahbereich der Streckenkontur belegen. Eine belastbare Aussage zu dieser Vermutung ist derzeit allerdings noch nicht möglich und erfordert weitere Untersuchungen sowie die Fortführung der Langzeitmessungen.

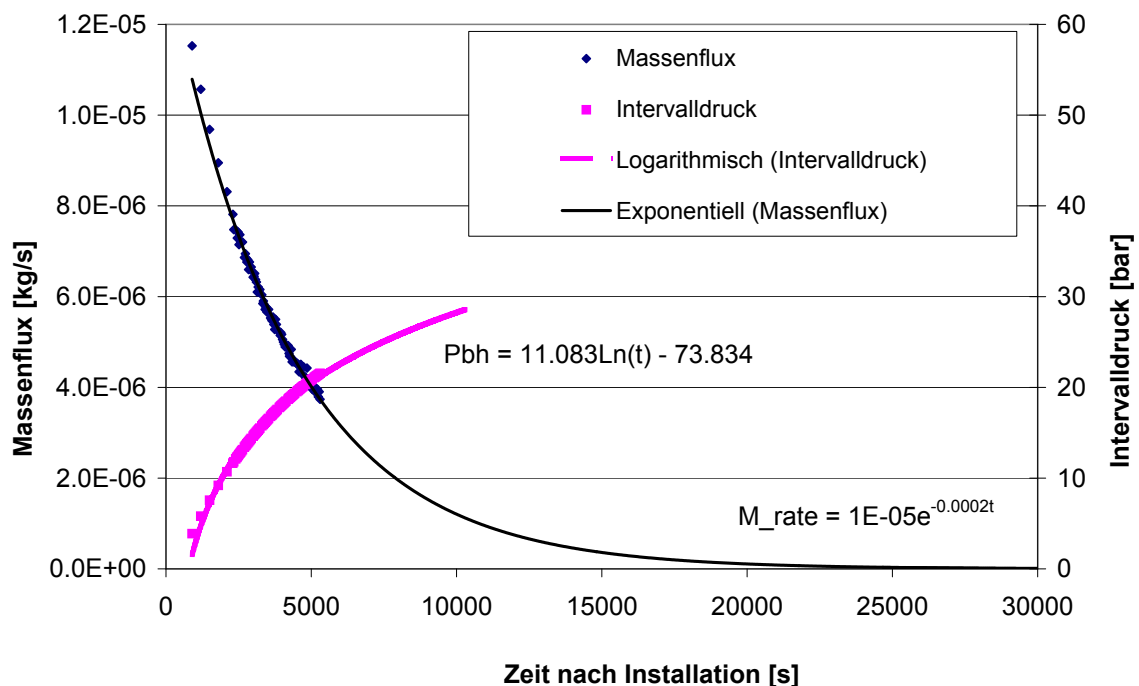


Abb. 80: Extrapolation des Druckes in der Anfangsphase in der Bohrung RB688.

In der Bohrung RB763, die ca. 20 m vom Querschlag 1 West entfernt ist, wurde ein Gasdruck von maximal 91 bar gemessen. Eine analytische, mit großen Ungewissheiten versehene Extrapolation der gemessenen Druckentwicklung nach Erstellung der Bohrung RB688 liefert einen geschätzten, den Befunden zu den gemessenen Durchlässigkeiten (Abb. 81) widersprechenden Anfangsdruck von ca. 40 bar in einer Bohrlochtiefe von ca. 3 bis 6 m vom Stoß (vgl. Abb. 80). Unter Berücksichtigung der Orientierung der RB688 entspricht dies einem Abstand von rund 1 m bis 2,5 m bis zum Stoß. Diese Werte

liegen deutlich unter dem theoretischen Wert des Porendruckes auf der 840 m-Sohle im unverritzten Gebirge von rund 180 bar. Dabei ist jedoch zu beachten, dass durch jeden Fluidaustritt aus dem Gebirge eine Druckabsenkung verursacht wird. Außerdem könnte in Streckennähe hinter der Auflockerungszone der Porendruck aufgrund der Kriechverformung des Gebirges infolge der Offenhaltung des Querschlags 1 West abgesenkt sein.

Tab. 12: Zusammenhang zwischen UV-Klassifizierung (siehe Kap. 5) und gemessener Gasmenge in einigen Packerbohrungen (3,0 – 6,0 m) (Querschlag 1 West)

Bohrung	stark UV-aktiv	stark UV-aktiv	Porengröße	schwach UV-aktiv	schwach UV-aktiv	Gas cum
	[m]	(porös) [m]	bis [mm]	[m]	(porös) [m]	[L]
RB683	1,8			0,35		120,7
RB684	0,1					0,35
RB685	1,14	0,61	3-5	0,07		690,8
RB686	1,36	0,2	2-3	0,24		78,98
RB687	0,81	0,34	5-10	0,2	0,05	71,7
RB688	1,12	0,05	7	0,23		2559,6
RB689	0,89	0,32	1	0,16		1174,6
RB690	0,6			0,19		1,8
RB691						0,0
RB692						0,0

Aufgrund der noch nicht abgeschlossenen Druckaufbaumessungen in den meisten KW-führenden Bohrungen kann zur Zeit noch keine Massenbilanzierung für die darin erbohrten KW-Vorkommen durchgeführt werden, d. h. noch keine abschließenden Aussagen über die räumliche Ausdehnung der Vorkommen getroffen werden. Auffällig ist allerdings, dass die Kernbereiche mit sehr starker UV-Fluoreszenz auch die größten Gas- bzw. KW-Zutrittsmengen aufweisen, insbesondere dann, wenn die Gesteine porös ausgebildet sind (Tab. 12). Bislang konnte keine gegenseitige Beeinflussung der Druckzustände in benachbarten Bohrungen beobachtet werden. Interferenzversuche sind für ausgewählte Bohrungen für 2012 geplant.

9 Permeabilitätsmessungen in den Kohlenwasserstoff-Kurzbohrungen

In einigen der geologischen KW-Kurzbohrungen RB643 bis RB662 sind insgesamt 152 Pulstests in unterschiedlichen Abständen zum Bohrlochmund durchgeführt worden. Ziel dieser Untersuchungen ist einerseits die hydraulische Charakterisierung der Auflockerungszone im Nahbereich des Querschlags 1 West. Andererseits werden Bohrungsbereiche mit sichtbaren KW-Imprägnationen hydraulisch charakterisiert und mögliche Veränderungen der hydraulischen Durchlässigkeit mit fortschreitender Zeit erfasst (Auswirkungen der Migration der KW im Bereich der EDZ). Für die Messungen kamen mit der Einfachpacker-Messanlage (EMA-2), den Doppelpacker-Messanlagen (DMA-1 und DMA-2) und der Doppelkolbenpacker-Messanlage (DKMA) vier verschiedene Messanlagen zum Einsatz. Einzelheiten zu den eingesetzten Messanlagen sind in PAUL et al. (2011) beschrieben.

Die Festlegung der Messintervalle erfolgte anhand der UV-Klassifizierung der KW-Vorkommen aus der Bohrkernaufnahme und anhand der Befunde zu Anomalien bei den ultraschallseismischen In-situ-Messungen. Eine Übersicht über die getesteten Bereiche enthält Tab. 13. In dieser sind die mit blauer Farbe markierten Messbereiche schwach bis stark UV-aktiv, in den rot markierten Messbereichen wurden Anomalien durch die Ultraschallmessungen (USM) festgestellt. Unauffällige Bereiche sind farblich nicht hervorgehoben. Kursiv gehaltene Tiefenangaben sind integrale Messungen von der angegebenen Tiefe aus ins Bohrlochtiefe mittels Einfachpackersystem (ZARETZKI et al. 2011).

Die Auswertung der Permeabilitätsmessungen erfolgte mittels eines 3D-numerischen Modells unter Berücksichtigung des Fließfeldes um den Packer. Die Versuchsauswertungen sind detailliert in ZARETZKI et al. (2011) dokumentiert.

Tab. 13: Testintervalle der Bohrlochtests in den Kurzbohrungen im Querschlag 1 West (blau: schwach bis stark UV-aktive Messbereiche, rot: Anomalien bei Ultraschallmessungen, kursiv: integrale Messungen von angegebener Tiefe bis ins Bohrlochtiefteste)

Bohrung	Stratigraphie	Messtiefe [m]																	
		Doppelpackersystem								Doppelkolbenpackersystem und Einfachpackersystem									
RB 643	z2HS2	0,15	0,25	0,35	0,45	0,55	0,65	0,75	0,85	0,95	1,05	1,20	1,35	1,50	1,65	1,85	2,00	2,50-	2,64
RB 644	z2HS1	0,18						0,70			1,05		1,35	1,51		1,88	2,15	3,00-	3,90
RB 645	z2HS1								0,80				1,35				2,15	2,73-	2,80
RB 649	z2HS1								0,85	0,95			1,35					3,00-	4,20-
RB 651	z2HS1	0,15	0,25	0,35	0,45	0,55	0,65	0,75	0,85	0,95			1,35			1,90			4,50-
RB 652	z2HS1	0,16	0,25	0,35	0,45	0,55	0,65	0,75	0,85	0,95	1,10	1,30	1,50	1,70				2,30	2,50-
RB 653	z2HS1	0,15	0,25	0,35	0,45	0,55	0,65	0,70	0,85	0,95	1,10	1,30	1,50	1,70				2,30	2,50-
RB 654	z2HS1					0,55							1,35	1,75			2,10	2,90-	2,95
RB 655	z2HS1							0,75					1,30	1,48	1,65		2,01	3,00-	3,65
RB 657	z2HS1								0,80				1,35						4,20-
RB 658	z2HS1						0,65							1,55					4,50-
RB 659	z2HS1					0,55					1,00	1,20	1,40	1,55		1,90	2,20		4,80-
RB 661	z2HS2	0,15	0,25	0,35	0,45	0,55	0,65	0,75	0,85	0,95		1,20	1,35	1,50	1,65	1,85		2,30	2,50-

Eine ausführlichere Übersicht über die gewonnenen Messergebnisse enthält der Bericht "Geotechnische Bewertung der Erkundungsbereiche" (ZARETZKI et al. 2011). Abb. 81 stellt die mit den Doppelpacker-Messanlagen ermittelten Durchlässigkeiten in den verschiedenen Bohrungstiefen dar. Diesen Ergebnissen zur Folge erstreckt sich ein Bereich mit erhöhten Permeabilitäten von $>10^{-20} \text{ m}^2$ ausschließlich auf die ersten 2,5 m Meter der Bohrungen; in einzelnen Bohrungen ist ihre Reichweite ins Gebirge hinein geringer. Lediglich in der RB655 wurden in zwei stark UV-aktiven Bohrlochabschnitten Permeabilitäten $>10^{-20} \text{ m}^2$ im tieferen Bohrloch ab 2,5 m gemessen (ZARETZKI et al. 2011). Messergebnisse aus den Bohrungen im Streifensalz (RB643 und RB661) sind in Abb. 81 als Kreuz dargestellt. Das Streifensalz (z2HS1) ist insbesondere auf dem ersten halben Bohrmeter dichter als das Knäuelsalz (z2HS2), Permeabilitäten $>10^{-14} \text{ m}^2$ wurden ausschließlich im Knäuelsalz bis in maximale Bohrungstiefen von 0,5 m gemessen. Ab einer Tiefe von ca. 0,6 m wurden im Streifensalz relativ gleichbleibende Durchlässigkeiten verglichen mit jenem im Knäuelsalz im Bereich zwischen $5 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ und $<10^{-19} \text{ m}^2$ gemessen. Ursächlich für die größere Homogenität und die geringfügig kleinere Reichweite des Bereichs erhöhter Permeabilität ist vermutlich die geringere Dilatanzfestigkeit des Streifensalzes gegenüber dem Knäuelsalz.

Richtung und Neigung der Bohrungen sind bei der Tiefenangabe in den gemessenen Bohrlochintervallen nicht berücksichtigt. Die Bohrungen wurden in einem Winkel von ca. 65 gon in Richtung Norden gestoßen. Eine Bohrungstiefe von 6 m entspricht folglich einem senkrechten Abstand zum Stoß von ca. 5,2 m, eine Tiefe von 2,5 m einem Abstand von ca. 2,1 m (maximale Reichweite des Bereichs erhöhter Permeabilität).

Die Mehrzahl der Bohrungen zeigt keine kontinuierliche Abnahme der Permeabilität mit zunehmender Stoßentfernung. Diese Feststellung steht in Übereinstimmung mit den Permeabilitätsmessungen, die vor dem Moratorium in Gorleben im Nahbereich von Grubenräumen durchgeführt wurden (NOWAK & WEBER 2002). Jedoch ist bei einigen Bohrungen eine rasche Abnahme der Durchlässigkeiten auf dem ersten halben Meter Bohrungstiefe festzustellen sowie relativ gleichbleibende Permeabilitäten zwischen ca. 0,5 m bis maximal 2,0 m Bohrungstiefe.

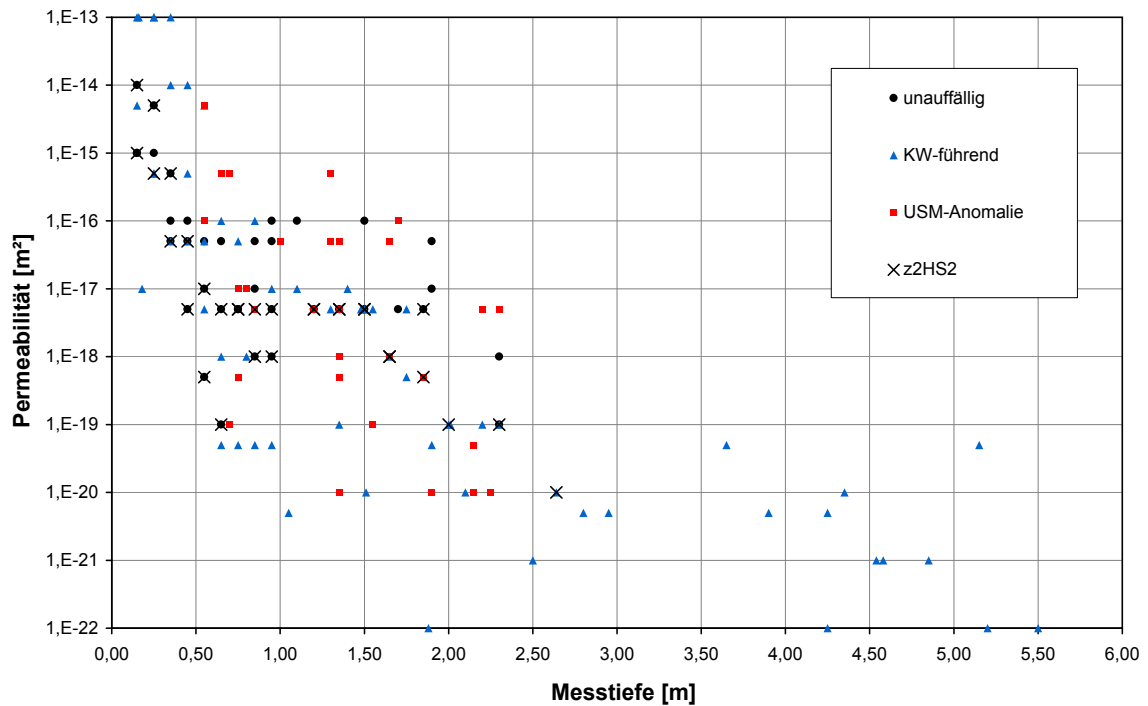


Abb. 81: Durchlässigkeiten in den Kurzbohrungen im Querschlag 1 West über die Bohrungstiefe aufgetragen.

Bereiche, in denen Anomalien bei den Ultraschallmessungen festgestellt wurden, sind häufig durchlässiger als andere. In solchen Bereichen wurden Permeabilitäten mit Werten von bis zu $<5 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$ gemessen. Allerdings wurden auch in 4 Bereichen, für die scheinbare Anomalien durch ultraschallseismische Messungen identifiziert wurden, keine erhöhten Permeabilitäten gemessen. Im Einzelnen handelt es sich dabei um folgende Bohrungsbereiche:

- RB644: bei 1,35 m,
- RB645: bei 2,15 m,
- RB651: bei 1,90 m und
- RB658: bei 2,25 m.

In den UV-aktiven Bereichen sind die gemessenen Durchlässigkeiten in einzelnen Testlokationen herabgesetzt. Für mehrere Bohrungen wird angenommen, dass die gemessenen Druckverläufe und die daraus ermittelten Permeabilitäten von Gaszutritten aus dem Gebirge ins Messintervall beeinflusst sind. Bei den Messungen mit den Doppelpacker-Messanlagen spiegeln sich solche Druckverläufe in Form von konstant verlaufenden bzw. ansteigenden Druckkurven wider. Ein weiteres Indiz ist ein stark schwankender

Druckverlauf. Beispiele hierfür finden sich in der RB644 (1,88 m und 2,15 m Tiefe), in der RB645 (4,25 m Tiefe), in der RB654 (5,20 m Tiefe) und in der RB658 (2,50 m Tiefe).

Eine im Vergleich zur idealtypischen Druckentwicklung zu beobachtende Abflachung der Druckkurven deutet möglicherweise auf geringere Permeabilitäten hin. Eine weitere denkbare Ursache sind Zutritte, die den Druckabbau im Messintervall verlangsamen. Beispiele sind das Messintervall bei 1,75 m Tiefe in der RB643, das Messintervall bei 2,01 m Tiefe in der RB655 oder das Messintervall bei 1,55 m Tiefe in der RB658. Umgekehrt kann ein im Vergleich zum idealtypischen Kurvenverlauf steilerer Kurvenverlauf auf erhöhte Permeabilitäten hindeuten. Häufig tritt dieses Phänomen in Messintervallen im Konturbereich des Querschlagtes nahe des Bohrlochmundes auf. Ein weiteres Beispiel dafür ist in der RB645 bei 1,35 m Tiefe festgestellt worden (ZARETZKI et al. 2011).

Im weiteren Verlauf des AP ist zu klären, ob eine erhöhte Permeabilität im KW-imprägnierten Bereich nach dem vollständigen Austritt der Kondensate vorhanden ist. Daher sind unter anderem Wiederholungsmessungen in den entsprechenden Messintervallen der Bohrungen zu einem späteren Zeitpunkt geplant.

10 Laboruntersuchungen zu den thermo-mechanischen Eigenschaften von Steinsalz mit Kohlenwasserstoff-Imprägnationen

10.1 Einleitung

Zur Beschreibung des thermo-mechanischen und hydraulischen Verhaltens von Steinsalz liegen fundierte Stoffgesetzformulierungen vor, welche die das Gesteinsverhalten determinierenden Materialeigenschaften und Deformationsprozesse miteinander verbinden. Eine allgemeine Übersicht vermittelt der Tagungsband zur sechsten Internationalen Salzkongferenz (WALLNER et al. 2007). Die bei der BGR zur Standortbewertung genutzten TMH-Stoffgesetze, wie sie insbesondere zum Ausweisen von Homogenbereichen erforderlich sind, dokumentieren u. a. die BGR-Berichte von HUNSCHKE et al. (2003) sowie von SCHULZE & PLISCHKE (2010).

Für Gesteinsbereiche mit feindispers verteilten KW-Vorkommen muss ein Stoffgesetz gegebenenfalls angepasst werden. Die Anpassung betrifft die ortsspezifische Quantifizierung der Stoffgesetzparameter; die Erweiterung wird bei zusätzlich zu berücksichtigenden Prozessen erforderlich. Im Vordergrund der im Arbeitspaket zu realisierenden Laboruntersuchungen steht die Frage, wie und in welchem Maße sich der Porendruck von KW-

Imprägnationen auf das Materialverhalten des betroffenen Gesteinsbereichs auswirken kann und wie dessen Einwirkung bei einem Stoffgesetz (den realistischen Annahmen bzw. signifikanten Befunden entsprechend) zu berücksichtigen ist. Die gegebenenfalls anzunehmende pneumatisch-hydraulische Wirkung globularer KW-Einschlüsse wird an dieser Stelle nicht diskutiert.

Das Erfordernis, eine chemische Wechselwirkung zwischen Salzgestein und KW-Einschlüssen zusätzlich einbeziehen zu müssen, wird nicht gesehen. Zu diesem Aspekt liegen schon länger grundlegende Arbeiten vor, beispielsweise von PHARR & ASHBY (1983). Die Laboruntersuchungen sind daher schwerpunktmäßig auf die integrale Wirkung des Porendrucks ausgerichtet, die von fein-dispers verteilten KW-Einschlüssen auf den Spannungszustand ausgeht und gegebenenfalls dann die Wirkung von Dilatanz-Effekten auf das Deformationsverhalten auslösen wird. Nachfolgend wird die methodische Herangehensweise zur Bearbeitung der Fragestellung anhand von Ergebnissen dargestellt, die bereits seit mehreren Jahren bei der BGR vorliegen oder die aus aktuellen Untersuchungen an frischen, in 2011 entnommenen Hauptsalzproben aus dem Salzstock Gorleben stammen.

10.2 Wirkung von Kohlenwasserstoff-Einschlüssen auf Spannung und Verformung

Bei einem Spannungszustand unterhalb der Dilatanzgrenze dominiert das von transkristalliner Versetzungsbewegung getragene Kriechen. Andere Deformationsprozesse, wie beispielsweise das Korngrenzengleiten oder das Diffusionskriechen, bleiben ausgehend von den Untersuchungen der BGR stets von nachrangiger Bedeutung. Kriechgesetze zum Versetzungskriechen beschreiben die nicht-lineare Abhängigkeit der Kriechrate von der Spannung, welche die Versetzungsbewegung treibt (HAMPEL & SCHULZE 2007).

Im Falle eines im Salzgestein vorhandenen Porendrucks (p_{pore}) gilt für die Deviator-Spannung (hier in der Oktaederebenen- bzw. Invarianten-Formulierung):

$$\tau_o = 1/3 \cdot [((\sigma_1 - p_{\text{pore}}) - (\sigma_2 - p_{\text{pore}}))^2 + ((\sigma_2 - p_{\text{pore}}) - (\sigma_3 - p_{\text{pore}}))^2 + ((\sigma_3 - p_{\text{pore}}) - (\sigma_1 - p_{\text{pore}}))^2]^{1/2}$$

und folglich: (19)

$$\tau_o = 1/3 \cdot [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2]^{1/2} = \tau_o(p_{\text{pore}})$$

mit τ_o – Oktaeder-Schubspannung; $\sigma_o = (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)/3$ – Oktaeder-Normal-Spannung; $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ – Hauptnormalspannungen

Das heißt: Der Porendruck bleibt ohne Wirkung auf den Deviator; Gase und Fluide können keine Scherkräfte übertragen.

Zu bedenken ist jedoch, dass jede Art von Einschluss eine Störung im Aufbau des Gefüges verursacht. Intrakristalline Einschlüsse, seien es Gas-Poren oder Teilchen einer zweiten Phase, bilden „Härtlinge“ für die transkristalline Versetzungsbewegung. Im Falle eines Gesteinsbereichs, in dem die Kriech-Duktilität durch KW-Einschlüsse allein schon in diesem Sinne wesentlich beeinflusst ist, muss dieser als eigener Homogenbereich ausgewiesen werden. Verfahrensbeschreibung und Ergebnisse dazu sind in mehreren BGR-Berichten dokumentiert (HUNSCHKE et al. 2003; SCHULZE & PLISCHKE 2010).

Wenn der Spannungszustand im Gebirgsbereich nach Auffahren eines Hohlraums unterhalb der Dilatanzgrenze bleibt, muss für das Kriechen eine über die Homogenbereichsanalyse hinausgehende Berücksichtigung der KW-Einschlüsse (als Gefügestörung im Sinne von „Härtlingen“) also nicht mehr erfolgen. Unterhalb der Dilatanzgrenze bleibt die Verformung von Steinsalz ohne Schädigung und Auflockerung, sofern der Spannungszustand durch Porendruckwirkung nicht in das Dilatanzregime verschoben wird (siehe Kap.10.5). Beschleunigtes Kriechen und (Kriech-) Bruch treten als Folge stationären Kriechens (im dynamischen Gleichgewicht zwischen Deformationsverfestigung und Erholung der Verfestigung) nicht auf.

Der Vollständigkeit halber sei noch auf die Frage eingegangen, ob KW-Einschlüsse eine chemische Wechselwirkung induzieren können oder eine Art „Schmierwirkung“ für das Kriechvermögen liefern. Die KW-Einschlüsse im Salzstock Gorleben enthalten ein breites Spektrum von KW-Verbindungen (siehe Kap. 7), das sich durch die thermo-mechanische Einwirkung im Einlagerungsbereich von HAW-Gebinden in seiner chemischen Zusammensetzung und seinen physikalischen Eigenschaften noch verändern kann (z. B.: Entgasung, Cracken, etc.). Auf der Grundlage von Untersuchungen zur Wirkung von verschiedenen Substanzen, sofern diese sich gegenüber Steinsalz chemisch neutral verhalten, wird die chemisch induzierte Einwirkung auf die Gesteinseigenschaften stets als vernachlässigbar ermittelt. Als gut geeigneter Beleg seien die Untersuchungen und Ergebnisse von PHARR & ASHBY (1983) genannt.

10.3 Dilatanzgrenze

Ein Spannungszustand oberhalb der Dilatanzgrenze löst neben dem volumentreuen Kriechen durch die dominante transkristalline Versetzungsbewegung weitere Deformationsprozesse aus, die mit Auflockerung und Schädigung des Gesteinsgefüges verbunden sind. Die aus der Literatur bekannten Gleichungen zur Dilatanzgrenze sind allein in Abhängigkeit vom Spannungszustand formuliert und enthalten keine explizite Berücksichtigung der Belastungsgeometrie (Lastpfad) - und auch keine anderen Variablen und Parameter (SCHULZE 2007). Eine Darstellung der resultierenden Graphen liefert Abb. 84.

Bei der BGR wurden zwei verschiedene Formulierungen entwickelt (Oktaederebenen-Form):

HUNSCHÉ et al. (2003):
$$\tau_{o,Dil(1)} = 2.61248 \cdot \sigma_o^{0.78093} \quad (20)$$

CRISTESCU & HUNSCHÉ (1998):
$$\tau_{o,Dil(2)} = -1.697E-02 \cdot \sigma_o^2 + 0.8996 \cdot \sigma_o \quad (21)$$

Beide Formulierungen zur Dilatanzgrenze resultieren aus der empirischen Anpassung an experimentelle Daten und decken im Mittel die aus den experimentellen Befunden erhaltene Bandbreite ab, wobei Gleichung (21) die „untere Einhüllende“ repräsentiert (vergl. Abb. 84). In der Regel wird wie in Gleichung (20) und (21) die Schreibweise mit Invarianten verwendet (Oktaederebenen-Form), obwohl der Ermittlung der Dilatanzfestigkeit überwiegend Versuche im Lastpfad „Kompression“ zu Grunde liegen. Streng genommen können diese Dilatanzgrenzen daher nur in dem Spannungsbereich zuverlässig genutzt werden, aus dem die experimentellen Daten stammen. Dieser Vorbehalt wird bei der (extremen) Extrapolation der empirischen Formulierungen in nicht belegte Spannungsbereiche bestätigt. Dann zeigt sich, wie die Kennlinien für die Formulierung (20) und (21) divergieren (Abb. 82).

Detect onset of dilatancy & related effects: results and consequences

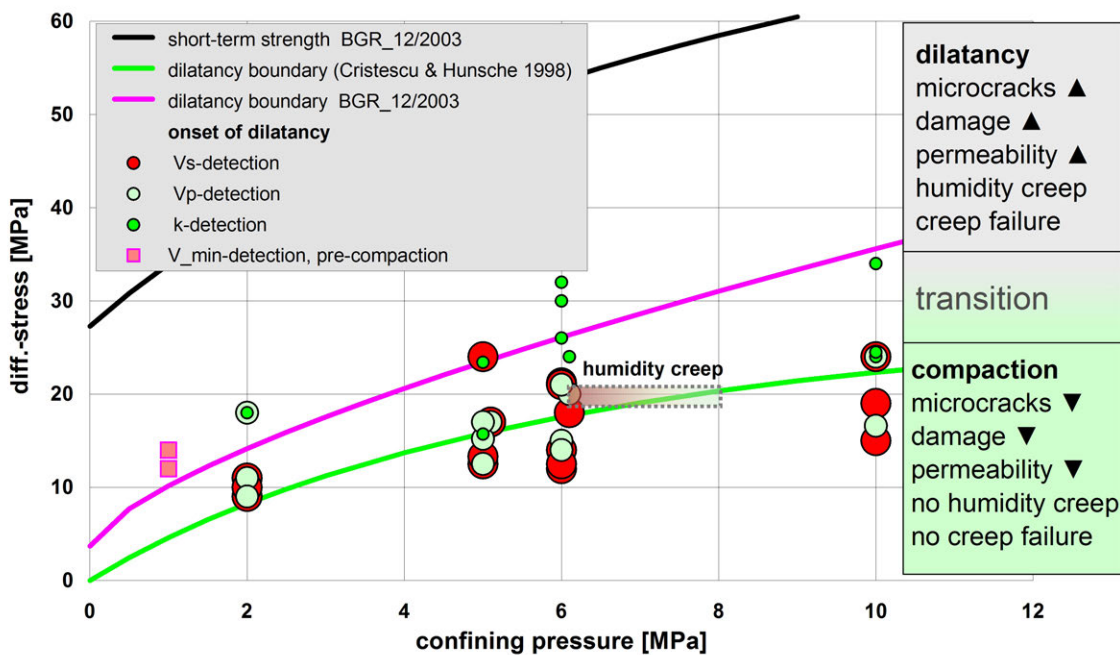


Abb. 82: Kurzzeit-Bruchgrenze und Dilatanzgrenzen (Gl. 20, rot) und (Gl. 21, grün) mit Darstellung der Ergebnisse aus verschiedenen Detektionsverfahren (aus: SCHULZE 2007).

In der Regel kann für eine zu beurteilende Untertage-Situation der relevante Spannungsbereich durch Laborversuche gut abgedeckt werden. Zu überprüfen bleibt jedoch, ob die Übertragbarkeit der aus Kompressionsversuchen ermittelten Dilatanzgrenze ($\sigma_1 > \sigma_2 = \sigma_3$) auf andere Lastgeometrien (z. B. Extension: $\sigma_1 < \sigma_2 = \sigma_3$) zutreffend bleibt. Dieser Hinweis soll nachstehend erläutert werden.

Der für die Dilatanzgrenze gemäß Gleichung (21) nach Transformation auf $\Delta\sigma_{Dil} = f(\sigma_{min})$ resultierende Verlauf für die Lastpfade „Kompression“ und „Extension“ ist aus Abb. 83 abzulesen. Danach setzt im Falle von „Kompression“ ($\sigma_1 > \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_{min}$) bei Absenkung der minimalen Hauptspannung gegen Null (bei Versuchen nach dem Kármán-Prinzip ist das der Manteldruck $p = \sigma_2 = \sigma_3$) eine Dilatanz-Wirkung bereits ab einer von Null verschiedenen Differenz-Spannung ein. Für die Formulierung gemäß Gleichung (20) folgt für den Lastpfad „Kompression“ $\Delta\sigma_{Dil(1)} = f(\sigma_{min}) \approx 3,5$ MPa (deren Kurvenverlauf ist zum Erhalt der Übersichtlichkeit nicht dargestellt).

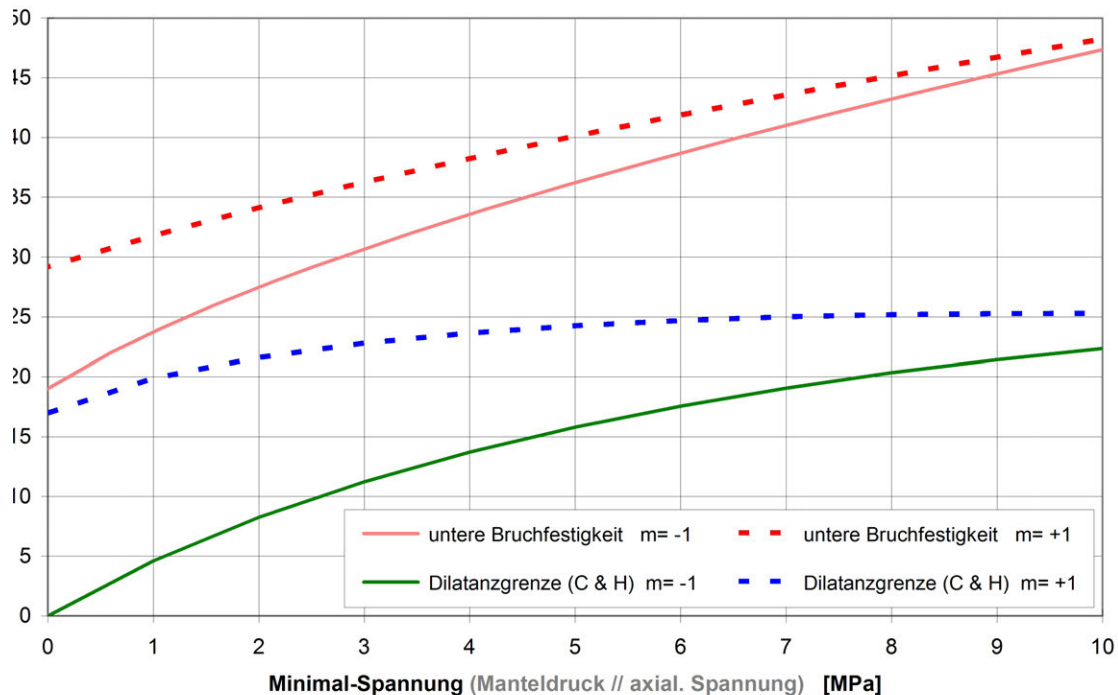


Abb. 83: Vergleich der Bruchfestigkeit und der Dilatanzgrenze (Gl. 21) in der $\Delta\sigma = f(\sigma_{\min})$ -Darstellung für Kompression ($m = -1$) und Extension ($m = +1$).

Dagegen folgt im Falle von „Extension“ ($\sigma_{\min} = \sigma_1 < \sigma_2 = \sigma_3$) bei Absenkung der minimalen Hauptspannung gegen Null (bei Versuchen nach dem Kármán-Prinzip ist das die Axial-Spannung σ_1), dass für Gleichung (21) eine Dilatanz-Wirkung erst ab einer Differenz-Spannung von $\Delta\sigma_{\text{Dil}(2)} = (\sigma_{1,2} - \sigma_{3})_{\text{Dil}(2)} \approx 17 \text{ MPa}$ einsetzt.

Bei der Dilatanzgrenze gemäß Gleichung (20) liefert die Transformation auf dem Lastpfad „Extension“ eine so hohe Dilatanz-Festigkeit, dass diese unter realistischen In-situ-Bedingungen - also auch am Rand eines Hohlraums - nicht erreicht oder gar übertroffen werden könnte. Die Formulierung für die Dilatanzgrenze nach Gleichung (20) ist für diesen Lastpfad also nicht mehr plausibel und muss anhand von Extensionsversuchen erneut überprüft werden.

Im Falle der Extrapolation von Gleichung (20) zu sehr hoher Minimalspannung für den Lastpfad „Kompression“ wird die Festigkeitsgrenze erreicht - allerdings erst für einen Manteldruck bei $\sigma_{\min} > 25 \text{ MPa}$. Dieser Sachverhalt ist auch bei anderen in der Literatur berichteten Formulierungen zur Dilatanzgrenze zu finden. Dies dokumentiert Abb. 84 in der Darstellung der Differenz-Spannung über der kleinsten Hauptspannung (confining pressure), wenn die Dilatanzgrenze beispielsweise als lineare Funktion der kleinsten Hauptspannung (also des Manteldrucks) formuliert wurde. Bei Bedarf für eine Extrapolation über den experimentell gut belegten Datenbereich hinaus können daher nur experimentell belegte und auf Plausibilität überprüfte Formulierungen zuverlässig genutzt werden.

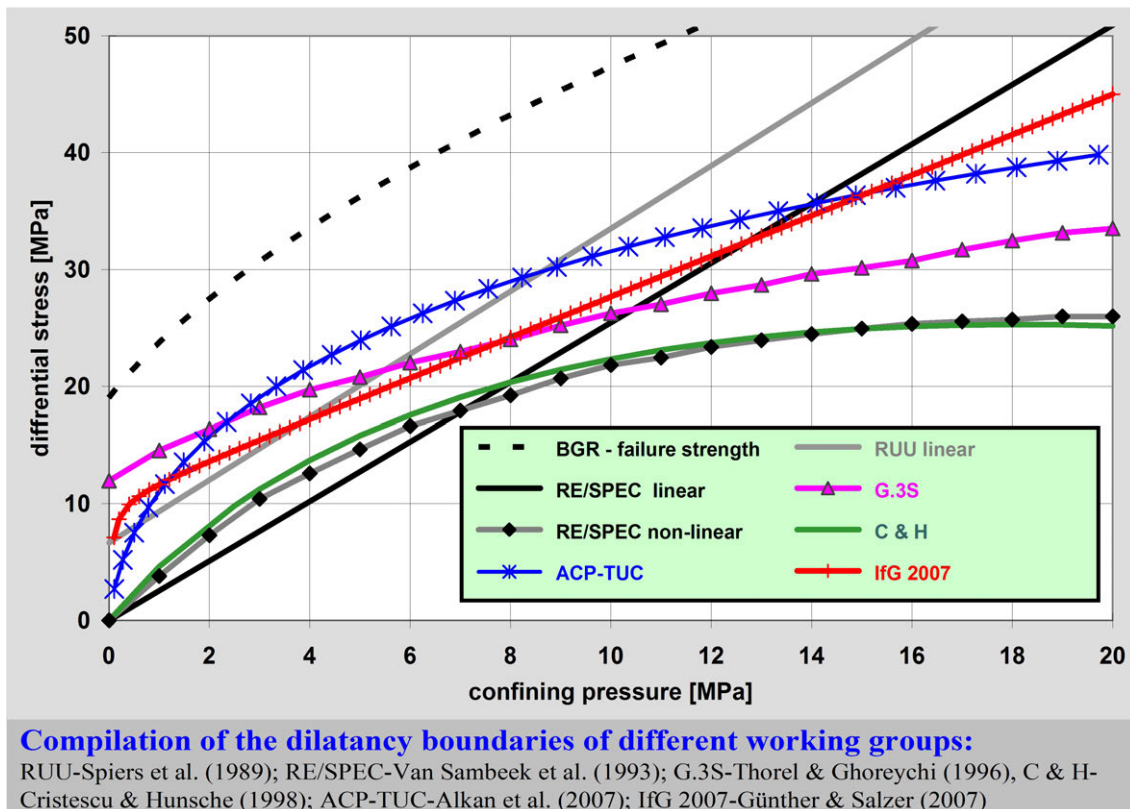


Abb. 84: Zusammenstellung verschiedener Formulierungen für die Dilatanzgrenze zum Lastpfad "Kompression" ($m = -1$) (aus: SCHULZE 2007).

Bei der Formulierung nach Gleichung (21) bleibt die Dilatanzgrenze generell unterhalb der Grenze für die Bruch-Festigkeit. Die Extrapolation zu hoher Minimalspannung führt jedoch zu einer konstant bleibenden Dilatanzgrenze (in ersten Formulierungen sogar zu einer abnehmenden Kurve für das Einsetzen von Dilatanz, CRISTESCU & HUNSCHKE 1998). Hier ist nicht plausibel, dass sich die Spanne zwischen Dilatanzgrenze und Bruch-Festigkeit aufweitet. Deshalb muss berücksichtigt werden, dass die aus experimentellen Befunden empirisch abgeleiteten Dilatanzgrenzen nur in dem durch die Datenlage abgedeckten Spannungsbereich zutreffen und entsprechend begrenzt anwendbar sind.

Mit Blick auf die „Bandbreite“ der in der Literatur enthaltenen Formulierungen (siehe Abb. 84) besteht diesbezüglich ein dringender Bedarf für weitere Untersuchungen. Diese müssen bei sorgfältiger Wahl der Detektionsverfahren die Abhängigkeit von der Belastungsgeometrie und gegebenenfalls vom Typ des Salzgesteins für das Einsetzen von Dilatanz und die Dilatanz-Entwicklung einschließen. Festzuhalten ist, dass bei den beiden Formulierungen der BGR die Dilatanzgrenze gemäß Gleichung (21) „konservativ“ ist; Dilatanz-Effekte setzen dann schon bei vergleichsweise geringerer Effektiv-Spannung ein. Nach Überschreiten der Dilatanzgrenze ist die Dilatanz-Wirkung bei Bezugnahme

auf Gleichung (21) zunächst jedoch notwendiger Weise schwächer als bei Bezugnahme auf Gleichung (20).

Um zu einer verbesserten Datenlage bezüglich der Formulierung für die Dilatanzgrenze und dann auch der Entwicklung von Duktilität, Schädigung sowie Auflockerung des Salzgesteins bei einer Belastung im Dilatanzregime zu kommen, werden im Arbeitspaket „9GE331400000 - Geotechnische Laborarbeiten im Rahmen der Erkundung Gorleben“ entsprechende Untersuchungen durchgeführt. Ziel ist es, für Modellberechnungen und Integritätsbewertungen das Verwenden irrelevant „konservativer“ Dilatanz-Grenzkurven zu vermeiden.

10.4 Dilatanz-Wirkung: Entwicklung von Duktilität, Auflockerung und Schädigung

Bei der BGR wird in Modellberechnungen der Einfluss von Dilatanz-Effekten (d. h. Auflockerung und Schädigung) auf Verformung und Spannungsumlagerung derzeit auf Grundlage der Dilatanzgrenze nach Gleichung (20) berücksichtigt (HUNSCHE et al. 2003). Darauf baut das r_v -Konzept auf, das den Ansatz für die Modellierung der Duktilitätssteigerung und den Schädigungsfortschritt in Abhängigkeit vom Spannungszustand relativ zur Dilatanzgrenze liefert (Gleichung 22).

$$r_v(\tau_o, \sigma_o) \sim f\left\{ \frac{(\tau_o - \tau_{o,Dil})}{(\sigma_o - \tau_{o,Dil})} \right\} \quad (22)$$

Das volumentreue, von transkristalliner Versetzungsbewegung getragene Kriechen von Steinsalz erfährt durch Einwirkung von Dilatanz-Effekten eine Zusatz-Duktilität aus volumetrischer Verformung (Auflockerung) und Entfestigung (Schädigung). Die Funktion $r_v(\tau_o, \sigma_o)$, welche die Dilatanz-Effekte abbildet, ist daher nur im Falle eines Spannungszustands im Dilatanzregime verschieden von 1 (siehe Gleichung 23).

$$\Delta\varepsilon/\Delta t (\text{ges}) = \Delta\varepsilon/\Delta t (\text{creep}) \cdot r_v \quad (23)$$

Wegen Umfang und Komplexität des r_v -Konzepts wird an dieser Stelle auf den Bericht HUNSCHE et al. (2003) verwiesen und bezüglich der Implementation des r_v -Konzepts in das CDM-Stoffgesetz auf HAMPEL & SCHULZE (2007).

Da die Formulierungen für die Dilatanzgrenze gemäß Gleichung (20) und (21) nur in Teilbereichen von möglichen In-situ-Spannungszuständen annähernd gleichwertig sind, soll hier darauf hingewiesen werden, dass auch eine an die „konservative“ Dilatanzgrenze gemäß Gleichung (21) angepasste Formulierung für das r_v -Konzept auf Grundlage der bisher verfügbaren Daten und ergänzender experimenteller Befunde abgeleitet werden soll.

Unabhängig davon kann schon jetzt diskutiert werden, wie bei Vorgabe einer Dilatanzgrenze aus der bestehenden „Bandbreite“ die sich daraus ableitende Dilatanz-Wirkung in den Ergebnissen von Modellberechnungen und Sensitivitätsstudien bemerkbar macht.

Beispielgebende Untersuchungen dokumentiert der Synthesebericht zum BMBF-Verbundprojekt „Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen“ (siehe auch SCHULZE et al. 2007). Allerdings wird der Einfluss eines Porendrucks auf den Spannungszustand, der von KW-Imprägnationen ausgehen könnte, in der Regel nicht modelliert und daher in Modellberechnungen auch nicht ausgewiesen.

10.5 Zum Einfluss von Kohlenwasserstoff-Einschlüssen auf den Spannungszustand

Bezüglich der Porendruckwirkung in Gesteinsbereichen mit KW-Imprägnationen war mit Gleichung (19) festgehalten worden, dass ein Porendruck ohne Wirkung auf den Deviator (Effektiv-Spannung) bleibt. Gase und Fluide können keine Scherkräfte übertragen.

Aus der Definition für die Oktaeder-Normal-Spannung (mittlere Hauptspannung):

$\sigma_o = 1/3 \cdot (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)$ folgt jedoch:

$$\sigma_o(p_{\text{pore}}) = 1/3 \cdot ((\sigma_1 - p_{\text{pore}}) + (\sigma_2 - p_{\text{pore}}) + (\sigma_3 - p_{\text{pore}})) = \sigma_o - p_{\text{pore}} = \sigma_o - \alpha \cdot p_{\text{fluid}} \quad (24)$$

In Abhängigkeit vom hydraulischen Wirkfaktor $\alpha = [0 ; 1]$ verschiebt sich der Spannungszustand in den Dilatanzbereich. Dieser Zusammenhang wurde u. a. bei SCHULZE et al. (2001) eingehend erörtert. Die mögliche Porendruckwirkung wird mit Abb. 85 veranschaulicht. Zur Illustration wurde ein wirksamer Porendruck $p_{\text{pore}} = 3 \text{ MPa}$ vorgegeben: $p_{\text{pore}} = \alpha \cdot p_{\text{fluid}}$.

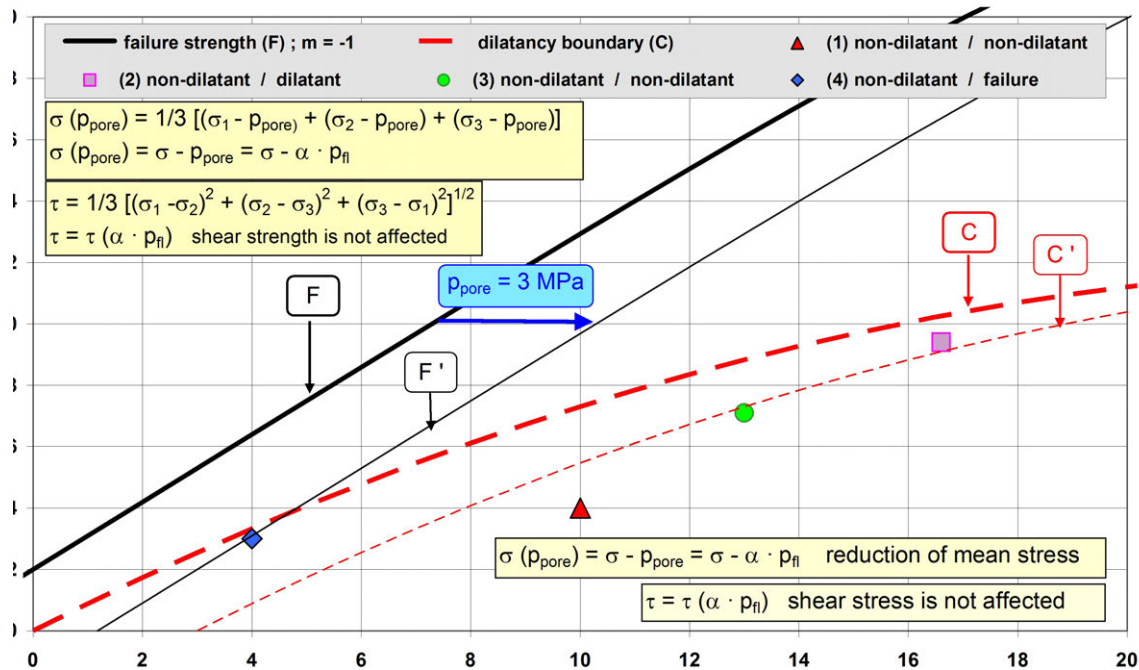


Abb. 85: Verschiebung eines Spannungszustands bei Porendruck-Wirkung relativ zur Kurzzeit-Bruchgrenze und zur Dilatanzgrenze (Gl. 21).

Da davon ausgegangen wird, dass die KW-Einschlüsse gegenüber Steinsalz chemisch neutral bleiben, gelten für eine gegebenenfalls vorhandene Porendruck-Wirkung auf den Spannungszustand mit effektiver „Verschiebung“ der Dilatanzgrenze die Ausführungen zur Dilatanz-Wirkung auf die Entwicklung der Duktilität, Auflockerung und Schädigung (siehe Kap. 10.4).

Die Bestimmung des hydraulischen Wirkfaktors ist durch Kriechversuche möglich, bei denen gemäß Abb. 85, beginnend im nicht-dilatanten Spannungsbereich, die minimale Hauptspannung (beim Lastpfad „Kompression“ also der Manteldruck) unter Konstanzhaltung der Differenz-Spannung abschnittsweise abgesenkt wird. Mit Einsetzen einer Duktilitätssteigerung im Kriechverhalten kann über den Vergleich mit der Dilatanzgrenze von Steinsalz ohne KW-Imprägnation der hydraulische Wirkfaktor aus einer Darstellung gemäß Abb. 85 abgelesen werden. Die Ergebnisse zu diesbezüglichen Untersuchungen werden bei HUNSCHKE et al. (2003) berichtet (vergl. dort Kap. 6.2, Seite 53, und die zugehörige Abb. 6.2.2 für trocken belassenes bzw. zwischenzeitlich befeuchtetes Steinsalz sowie Kap 6.3, Seite 61, und die zugehörige Abb. 6.3.3).

Angemerkt sei, dass der hydraulische Wirkfaktor als skalare Größe betrachtet wird. Für Steinsalz wird davon ausgegangen, dass eine richtungsabhängige Porendruckwirkung trotz einer möglichen Vorzugsregelung (Anisotropie) in der Porenstruktur nicht vorhanden ist. Im Falle von Dilatanz-Wirkung längen sich die Riss-Poren in Richtung der größten Hauptspannung.

Außerdem ist zu berücksichtigen, dass in einem versetzten Grubengebäude in der dilatanten Auflockerungszone (ALZ bzw. EDZ) am zuvor freien Hohlraumrand mit Aufbau eines Versatzwiderstands und entsprechendem Anstieg der minimalen Hauptspannung der Spannungszustand wieder unter die Dilatanzgrenze wandern wird. Ein in der ALZ während der Betriebsphase gegebenenfalls verbliebener Porendruck verliert dann kontinuierlich seine Wirkung auf das Verformungsverhalten und damit auch auf die daraus resultierende Spannungsumlagerung und Konvergenz.

10.6 Temperatur-Einwirkung

Neben der unmittelbaren Veränderung des Spannungszustands durch das Auffahren eines Hohlräume wird nach Einbringen von HAW-Abfall das umgebende Salzgestein aufgeheizt. Mögliche Ursachen für die KW-Wirkung resultieren also sowohl aus mechanisch als auch thermisch induzierten Prozessen. Allerdings ist für eine reale Untertage-Situation davon auszugehen, dass die im Falle von Dilatanz mechanisch induzierten Prozesse abgeklungen sind (auch in den Gesteinsbereichen mit KW-Imprägnationen), bevor sich das Gestein merklich aufheizt. Demzufolge soll hier die thermische Einwirkung als eigenständiger, weil nachlaufender Prozess betrachtet werden, also unter der Randbedingung, dass der Kontakt zwischen anstehendem Gebirge und Wärmequellen durch Konvergenz hergestellt wurde, wobei die Effektiv-Spannung und damit die Dilatanz-Wirkung bereits gegen Null gehen.

Bezüglich der thermo-mechanischen Wirkung ist ferner davon auszugehen, dass auch in den Bereichen mit KW-Imprägnationen der Porenanteil im Salzgestein gering ist. Mit Anstieg der Temperatur wird sich der relative Volumenbruchteil der Poren im Salzgestein während der thermischen Ausdehnung im Hinblick auf die Wirkung von „Härtlingen“ im Gefüge nicht ändern.

Im Falle von Methan muss mit einem Verhalten für ein Ideales Gas gerechnet werden. Im Falle von höheren oder langkettigen KW bleibt, bei Ausschluss von Phasenumwandlungen (flüssig zu gasförmig bei Temperaturerhöhung), die thermisch bedingte Expansion geringer. Eine überschlägige Rechnung für ein Ideales Gas liefert bei einem Temperaturanstieg von $\Delta T = 50 \text{ K}$ einen Druckanstieg im rigiden Porenraum von ca. 15 %. Dagegen bleibt die absolute thermische Ausdehnung des Porenraums im Speichergestein vernachlässigbar gering, sie kann den thermisch induzierten Druckanstieg im Gas nicht ausgleichen. Sobald der Gasdruck in den Bereich der kleinsten Hauptspannung ansteigt, wird das Gas in dem vernetzten Porensystem der gegebenenfalls noch nicht rekompaktierten EDZ abströmen oder über Normaldruckwirkung die minimale Hauptspannung bis zum im rekompaktierten

Salzgestein wieder annähernd isotropen Teufendruck anheben und dann diffus verteilte Wegsamkeiten im Korngefüge schaffen (LUX 2006; SCHULZE 2002, Kap. 4).

10.7 Transport-Eigenschaften

Erst mit dem Auffahren des Untertagebauwerks entsteht ein Spannungszustand, der im Nahbereich der Hohlräume eine Dilatanz-Wirkung verursacht und bei dem in den Bereichen mit KW-Einschlüssen ein damit verbundener Porendruck auf die Gebirgseigenschaften zusätzlich einwirken und diese verändern kann.

Da während einer Dilatanz-Wirkung kontinuierlich neue Wegsamkeiten entstehen, hat dies in der sich entsprechend ausbildenden EDZ eine von „Null“ verschiedene Permeabilität zur Folge (SCHULZE 2007). Hier ist zu prüfen, ob die KW-Einschlüsse auch bei den Transporteigenschaften von neutraler Wirkung bleiben oder ob sie wie eine benetzende Lösung in einem Zwei-Phasen-System „Fluid-Gas“ mit Aufbau eines kapillaren Sperrdrucks wirken und die Durchströmbarkeit reduzieren. Nur wenn gilt, dass ein KW-Fluid, KW-Gas oder ein KW-Fluid-Gas-Gemisch als ein Ein-Phasen-System behandelt werden darf, lassen sich – unter Annahme von Darcy-Fluss und entsprechend berücksichtigter Viskosität – die bisher als zutreffend nachgewiesenen Permeabilität-Porosität-Beziehungen anwenden. Dieser Vorbehalt sei besonders betont, da KW-Einschlüsse und Einschlüsse mit Salzlösungen gemeinsam auftreten können.

Untersuchungen zur Entwicklung von Porosität und Permeabilität in Steinsalzbereichen, die der Dilatanz-Entwicklung unterliegen und zusätzlich KW-Einschlüsse enthalten, sollen in Verbindung mit den in Kap. 10.4 genannten Arbeiten im Rahmen des Arbeitspaketes „9GE331400000 - Geotechnische Laborarbeiten im Rahmen der Erkundung Gorleben“ geleistet werden.

10.8 Bisherige Laboruntersuchungen und deren Ergebnisse

Erste experimentelle Untersuchungen zum Einfluss von KW-Einschlüssen auf die felsmechanischen Eigenschaften der Salzproben, insbesondere zur Dilatanz-Wirkung von KW-Vorkommen im Hauptsalz des Salzstocks Gorleben, erfolgten kurz vor Beginn des Erkundungsmoratoriums und konnten nach September 2000 u. a. wegen des Fehlens von diesbezüglich geeignetem Probenmaterial nicht fortgesetzt werden.

Nach Wiederaufnahme der Arbeiten zur Standorterkundung im EB1 im November 2010 sind spezielle Bohrungen zur Gewinnung von Kernmaterial mit KW-Einschlüssen gestoßen worden (siehe Kap. 4). Geeignetes Probenmaterial für gesteinsmechanische Untersuchungen (fluoreszierende Proben aus dem Hauptsalz mit einem Kerndurchmesser von 100 mm) liegt aus der Bohrung RB793 vor (vergl. Tab. 14). Davon wurden bisher zwei Prüfkörper (11079 und 11080) zur Untersuchung der thermisch induzierten Längenänderung bei allseitiger und konstanter Einspannung genutzt.

10.8.1 Dilatanz-Wirkung der Kohlenwasserstoffe auf das Kriechverhalten von z2-Hauptsalz

Zur Detektion und Analyse der Porendruck-Wirkung aus KW-Einschlüssen werden Kriechversuche unter Belastungszuständen im Bereich der Dilatanzgrenze durchgeführt. Die nachfolgend kurz berichteten Beispiele und Befunde aus früheren Untersuchungen der BGR belegen, dass die methodische Herangehensweise zum Nachweis gegebenenfalls vorzeitig einsetzender und verstärkter Dilatanz-Wirkung im Falle einer KW-Porendruck-Wirkung und zur Abschätzung des hydraulischen Wirkfaktors (Biot-Faktor) (Kap. 10.4) geeignet ist.

Tab. 14: Prüfkörper aus der Bohrung GoEB1RB793 und deren Verwendung

Kernbezeichnung	Bemerkung	Tiefe [m]	File	Dichte [g/cm ³]	Probenbeschreibung
GoEB1RB793/003/02		2.32	11075	2.194	Steinsalz (z2HS1), mittelgrau undurchscheinend, fein- bis mittel- gelegentlich grobkristallin, vereinzelt Halitklasten, vereinzelt Anhydritknauern und -linienreste z. T. flockig, Einfallen 45°, Probe größtflächig von Kohlenwasserstoffen durchsetzt
GoEB1RB793/003/04		2.83	11076	2.186	Steinsalz (z2HS1), mittelgrau fast undurchscheinend, fein- bis gelegentlich mittel- grobkristallin, vereinzelt verstellte Halitklasten, unregelmäßig verteilte Anhydritknauern und -flockenbündel sowie anhydritische Säume an Klasten, ohne erkennbares Einfallen; eine verwürgte mit Kohlenwasserstoffen durchtränkte Zone z.T. zerrissen
GoEB1RB793/003/05		3.28	11077	2.184	Steinsalz (z2HS1), mittelgrau, fein- bis partienweise mittel- gelegentlich grobkristallin, vereinzelt Halitklasten, Anhydritflockenstreifen, Einfallen 35°, Probe häufig vertikal mit Kohlenwasserstoffen durchtränkt
GoEB1RB793/004/03		4.53	11078	2.185	Steinsalz (z2HS1), mittelgrau, fein- partienweise mittel- gelegentlich grobkristallin, vereinzelt Halitklasten, Anhydritflockenstreifen und vereinzelt Knauern, Einfallen 35°, Probe ganz mit Kohlenwasserstoffen durchtränkt
GoEB1RB793/004/06	für therm. Dehnung genutzt	4.88	11079	2.205	Steinsalz (z2HS1) mittelgrau fast undurchscheinend, fein- mittel- vereinzelt grobkristallin, vereinzelt Halitklasten, unregelmäßig verteilte Anhydritlinienreste z. T. flockig, ohne erkennbares Einfallen; Probe stark mit Kohlenwasserstoffen durchsetzt
GoEB1RB793/005/02	für therm. Dehnung genutzt; Wasser-Austritt	5.26	11080	2.216	Steinsalz (z2HS1), mittelgrau fast undurchscheinend, fein- bis mittel- vereinzelt grobkristallin, vereinzelt Halitklasten, unregelmäßig verteilte Anhydritlinienreste z. T. flockig, ohne erkennbares Einfallen, Probe stark mit Kohlenwasserstoffen durchsetzt
GoEB1RB793/005/03		5.61	11081	2.190	Steinsalz (z2HS1), mittelgrau fast undurchscheinend, fein- bis mittel- vereinzelt grobkristallin, vereinzelt Halitklasten, unregelmäßig verteilte Anhydritlinienreste z. T. flockig, Einfallen 30°, Probe stark mit Kohlenwasserstoffen durchsetzt
Aus den Bohrkern-Abschnitten wurden Prüfkörper mit Standard-Abmessungen hergestellt: Do = 100 mm; Lo = 250 mm					

Für die Herstellung von Prüfkörpern wurde Material genutzt, das nach Ausweis der Ergebnisse aus den untertägigen Erkundungsarbeiten KW-Einschlüsse enthält. Die Herkunft dieser Proben und die an den Prüfkörpern ermittelten Eigenschaften sind in der LIMS-Datenbank des Arbeitsbereiches dokumentiert. Einen Auszug liefert Tab. 15.

Anzumerken ist, dass die Auswahl von Bohrkern-Rohlingen nach Augenschein und Geruch nach KW, d. h. ohne begleitende gefügekundliche Arbeiten bzw. detaillierte Kenntnis zum Anteil an KW-Einschlüssen erfolgte. Aus wenigen Einzel-Untersuchungen an Dünn-/Dickschliffen konnten Informationen zum Gefügebild gewonnen werden (POPP et al. 2002) allerdings erst anschließend. Durch das Erkundungsmoratorium und die Einstellung, aller für die Laborexperimente erforderlichen Arbeitspakete durch das Bundesamt für Strahlenschutz konnte eine eingehende Untersuchung zum Gehalt von KW-Einschlüssen und eine darauf basierende Interpretation der experimentellen Daten nicht vorgenommen werden. Ebenso war es nicht möglich, erneut eine Beprobung für den Gewinn von Prüfkörpern, die unter Berücksichtigung derartiger Daten zielgerichteter gewesen wäre, durchzuführen. Trotz dieser offensichtlich durch den Erkundungsstopp verursachten Mängel soll an dieser Stelle über die Ergebnisse dieser früheren Untersuchungen berichtet werden.

Mit den Prüfkörpern wurden sowohl uniaxiale als auch triaxiale Kriechversuche durchgeführt. Das gemäß dem Verfahren zur Homogenbereichskartierung ermittelte Kriechvermögen (Kriechklassen; vergl. SCHULZE & PLISCHKE 2010) für die uniaxialen Versuche ist in Tab. 15 zusammengefasst. Die Ergebnisse bestätigen, dass auch hier das Kriechvermögen primär mit der stratigraphischen Stellung des Materials korreliert. Steinsalz aus dem Liegenden (z2HS1) ist generell duktiler als das stratigraphisch Jüngere. Im Hauptsalz nimmt das Kriechvermögen bis zu den Hangendpartien (z2HS3) systematisch ab. Diese Zusammenhänge wurden schon im Abschlussbericht zum AP 9G213811 (HUNSCHE et al. 2003) diskutiert (siehe dort Abb. 4.3.5).

Tab. 15: Kernmaterial und Prüfkörper aus dem Bereich des z2HS, die ausgehend von makroskopischen Befunden KW-Einschlüsse enthalten können (Dichte in g/cm³)

Kernbezeichnung	FileNr	Stratig	Herkunft	Kristall	N'Gemenge	Tiefe [m]	Dichte	Do [mm]	Lo [mm]	Stand	BGRa
GoEB1_840m/Q1W(9)	99181	z2HS1	Q1W(9)	f,m,1g	A3,9	0	2.200	69.70	97.48	H2	
GoEB1RB119/049/086/01	01001	z2HS1	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)	f,m	A5	251.04	2.178	52.02	104.09	KA	6
GoEB1RB119/049/086/02	01002	z2HS1	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)	f	A3/4/5	253.47	2.212	59.02	118.00	KA	6
GoEB1RB119/051/089/01	01004	z2HS2	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)	f	A6	261.42	2.176	59.02	118.14	KA	6
GoEB1RB119/051/089/02	01005	z2HS2	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)	f,2m	A6	261.92	2.198	59.03	118.03	KA	6
GoEB1RB119/097/173/01	01007	z2HS3	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)	g,x,3m	A3/9	512.36	2.176	58.01	116.06	KA	4
GoEB1RB119/097/173/02	01008	z2HS3	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)	g,x,3m	A3/9	512.49	2.188	58.01	116.09	KA	5
GoEB1RB119/105/181/01	00181	z2HS3	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)	m,2g,2f	1A5/3	536.59	2.174	57.98	117.95	KA	4
GoEB1RB119/106/182/01	99180	z2HS3	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)			540.32	0.000	52.03	104.01	KA	6
GoEB1RB119/114/190/01	00183	z2HS3	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)	g,2m	A9	562.70	2.176	58.09	117.98	KA	7
GoEB1RB119/115/191/02	00187	z2HS3	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)	g,3m	A6	566.20	2.166	57.03	116.01	KA	4
GoEB1RB119/120/196/01	00189	z2HS3	Bohrtort 3, parallel Q1-Ost, westl. Anl. 3(38)	f	A5	582.41	2.176	58.08	117.96	KA	4
GoEB1RB120/126/186/01	99134	z2HS3	Bohrtort 3, Vorbohrung Q1-Ost, Anl. 3(39)	g,3m	A3/5	549.01	2.166	51.95	130.10	N7	5
GoEB1RB120/126/186/03	99136	z2HS3	Bohrtort 3, Vorbohrung Q1-Ost, Anl. 3(39)	m,g,3x	A3	549.27	2.168	51.91	129.94	N7	5
GoEB1RB120/134/194/02	99138	z2HS3	Bohrtort 3, Vorbohrung Q1-Ost, Anl. 3(39)	m,g,3x	A3	574.66	2.159	51.89	130.03	N7	4
GoEB1RB120/134/194/03	99139	z2HS3	Bohrtort 3, Vorbohrung Q1-Ost, Anl. 3(39)	m,g,3x	A3	574.79	2.161	51.89	127.98	N7	4
GoEB1RB120/135/195/02	99141	z2HS3	Bohrtort 3, Vorbohrung Q1-Ost, Anl. 3(39)	m,3f	A3/5	576.88	2.166	51.90	130.04	N7	4
GoEB1RB210/007/007/02	98218	z2HS	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f,2g,1x	A3	8.55	2.204	96.00	220.05	KA	6
GoEB1RB210/010/010/01	98220	z2HS	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f,m,2g	A3	11.71	2.182	99.00	220.00	KA	5
GoEB1RB210/010/010/02	98221	z2HS	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f,m,2g	A3	11.94	2.195	79.95	160.01	LE	5
GoEB1RB210/015/015/01	98226	z2HS2	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f,m	A3	17.92	2.197	79.95	160.03	LE	6
GoEB1RB210/015/015/02	98227	z2HS2	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f,m	A3	18.09	2.195	79.97	159.85	LE	6
GoEB1RB210/019/019/02	98229	z2HS2	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f,m	A3	24.04	2.173	40.01	100.09	LE	5
GoEB1RB210/019/019/03	98230	z2HS2	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f,m,2g	A3	24.14	2.189	79.99	160.01	LE	4
GoEB1RB210/022/022/01	98231	z2HS2	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f	A3	27.25	2.176	98.00	220.03	KA	3
GoEB1RB210/022/022/04	98232	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f,1x	A3	27.76	2.183	98.00	240.03	N4	4
GoEB1RB210/024/024/01	98233	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f,m,2g	A3	29.55	2.184	96.00	239.99	N4	3
GoEB1RB210/024/024/04	98234	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	m,1,2g	A3	29.86	2.180	94.99	237.52	N4	3
GoEB1RB210/024/024/06	98236	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	m,1,2g	A3	30.70	2.184	79.94	160.07	LE	2
GoEB1RB210/025/025/05	98238	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	m	A3	31.49	2.186	98.03	220.03	KA	3
GoEB1RB210/025/025/06	98239	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	m	A3	31.54	2.183	69.99	140.06	KA	3
GoEB1RB210/027/027/01	98243	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	f,m,2g	A3	34.05	2.210	39.96	100.04	LE	1
GoEB1RB210/027/027/04	98302	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	m,g	-	34.24	2.187	40.02	99.97	LE	3
GoEB1RB210/028/028/01	98244	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	m,2g	A3	35.55	2.185	93.98	235.01	N4	2
GoEB1RB210/028/028/02	98245	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	m,2g		35.80	2.184	93.00	232.48	N4	2
GoEB1RB210/028/028/03	98246	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	m	A3	36.04	2.186	93.94	220.00	KA	4
GoEB1RB210/029/029/02	98248	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	m	A3	37.30	2.189	79.92	160.00	LE	4
GoEB1RB210/029/029/03	98249	z2HS3	Bohrtort 3, Q1-Ost, Anl. 3(47) - westl.	m	A3	37.72	2.192	95.97	220.02	KA	1

Kernbezeichnung	FileNr	Stratig	Herkunft	Kristall	N'Gemenge	Tiefe [m]	Dichte	Do [mm]	Lo [mm]	Stand	BGRa
GoEB1RB213/003/003/02	99162	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	g,1x	3xA3	3.57	2.200	100.03	219.95	KA	5
GoEB1RB213/003/003/03	99163	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	g,1x	3xA3	3.89	2.177	99.96	219.95	KA	5
GoEB1RB213/003/003/04	99164	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	m,g,3f	2xA3	4.20	2.194	79.90	160.03	LE	5
GoEB1RB213/003/003/05	99165	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	m,g,3f,1x	4xA3	4.36	2.203	79.95	159.98	LE	5
GoEB1RB213/011/011/01	99166	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	g,m	1xA6	16.15	2.177	80.01	160.03	LE	5
GoEB1RB213/011/011/02	99167	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	g,m	1xA3	16.31	2.177	80.00	159.96	LE	5
GoEB1RB213/013/013/01	99168	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	g,m,3x	1xA3A9	18.34	2.192	69.94	139.97	KA	6
GoEB1RB213/013/013/02	99169	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	m,g,3f,1x	2xA3	18.48	2.189	99.96	219.99	KA	4
GoEB1RB213/013/013/04	99171	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	g,m	1xA3	19.35	2.191	79.95	159.97	LE	5
GoEB1RB213/013/013/05	99172	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	g,m	1xA3	19.51	2.217	39.93	100.05	LE	6
GoEB1RB213/022/022/01	99175	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	g,2m,3x	2xA3	30.80	2.189	99.95	219.96	KA	5
GoEB1RB213/024/024/01	99176	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	g,3m,3x	A4/3	33.62	2.216	99.96	219.98	KA	4
GoEB1RB213/024/024/05	99178	z2HS2	02YEQ01/RB213, Bohrrort 3.2, Q1-Ost	m,g,3f	A4/3	34.36	2.226	80.01	160.02	LE	5
GoEB1RB341/006/006/01	99011	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4/5	5.04	2.188	79.98	160.00	LE	6
GoEB1RB341/006/006/02	99012	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,2m,1g	A4/5	5.20	2.190	99.97	219.95	KA	5
GoEB1RB341/006/006/03	99013	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,2m,1g	A4/5	5.42	2.198	99.97	249.91	N3	6
GoEB1RB341/006/006/06	99091	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	m,1g,3f	A3	5.96	2.204	99.90	249.96	H1	6
GoEB1RB341/010/010/03	99092	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	m,1g,3f	A3	11.08	2.195	99.90	249.96	H1	6
GoEB1RB341/011/011/01	99014	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,2m,1g	A4/5	12.67	2.210	99.97	249.98	N3	6
GoEB1RB341/011/011/02	99015	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	m,f,g	A4	13.10	2.168	99.97	208.97	KA	6
GoEB1RB341/011/011/03	99016	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	m,f,g	A4	13.35	2.175	80.00	160.01	LE	5
GoEB1RB341/013/013/02	99093	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	m,x,3f	A3	16.15	2.210	99.99	250.00	H1	6
GoEB1RB341/017/017/01	99018	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4	21.74	2.209	99.96	249.99	N3	6
GoEB1RB341/017/017/02	99019	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4	21.99	2.184	99.96	249.98	N3	6
GoEB1RB341/017/017/03	99020	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4	22.38	2.198	99.97	220.00	KA	7
GoEB1RB341/017/017/04	99021	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4	22.60	2.197	80.00	159.98	LE	6
GoEB1RB341/023/023/01	99022	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4/5	30.02	2.187	98.98	217.64	KA	8
GoEB1RB341/023/023/02	99023	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4	30.24	2.179	79.98	159.94	LE	6
GoEB1RB341/024/024/04	99025	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4/5	32.00	2.195	99.96	249.97	N3	8
GoEB1RB341/024/024/05	99026	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4/5	32.50	2.206	39.94	99.96	LE	6
GoEB1RB341/024/024/06	99027	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4/5	32.60	2.199	99.99	209.97	KA	8
GoEB1RB342/014/014/01	99008	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,1g	A4/5	16.55	2.203	69.98	139.94	KA	7
GoEB1RB342/014/014/02	99009	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,2g	A4	16.69	2.194	99.97	219.97	KA	8
GoEB1RB342/014/014/03	99010	z2HS1	Bohrrort 3.1, Q1-Ost wie RB208, Ani. 3(45)_?	f,m,1g	A4/5	16.91	2.198	79.99	159.97	LE	8

Fortsetzung Tab. 15:

FileNr	Probenbeschreibung
99181	Steinsalz, mittelgrau, schwach durchscheinend, fein- mittel- vereinzelt grobkrist., unregelmäßig vert. Anhydritknauel bzw. vereinzelt Anhydritleisten an groben Kristallen, ohne Einfallen
01001	Steinsalz, schmutziggrau, fein- mittelkristallin, zentriert unregelmäßig verteilte Anhydritflocken, ohne erkennbares Einfallen
01002	Steinsalz, schmutziggrau, feinkristallin, massive Anhydritlinienreste, knauern und -flocken, unregelmäßig verteilt, ohne erkennbares Einfallen
01004	Steinsalz, milchigtrüb, feinkristallin, eine Zone mit einer Anhydritflockenwolke, Einfallen 35°
01005	Steinsalz, hellgrau fast undurchscheinend, fein- gelegentlich mittelkristallin, diffus wolkig von Anhydritflocken durchsetzt, ohne erkennbares Einfallen
01007	Steinsalz, gläsern - schmutziggrau, grob- Überkorn - partiellweise mittelkristallin, Anhydritlinienreste z. T. auch Säume, Einfallen 35°
01008	Steinsalz, gläsern - schmutziggrau, grob- Überkorn - partiellweise mittelkristallin, Anhydritlinienreste z. T. auch Säume, Einfallen 20°
00181	Steinsalz, milchigtrüb, mittel- gelegentlich grob-, feinkristallin, vereinzelt Anhydritflocken und -linienreste, Einfallen 30°
99180	
00183	Steinsalz, milchigtrüb, grob-, gelegentlich mittelkristallin, auf Korngrenzen Anhydritflockensäume, Einfallen 30°
00187	Steinsalz, milchigtrüb, grob- partiellweise mittelkristallin, zwei wolkig diffuse anhydritisch verunreinigte Zonen, ohne erkennbares Einfallen
00189	Steinsalz, milchigtrüb - bräunlich, feinkristallin, unregelmäßig im Schichtentfallen verteilte Anhydritflocken, Einfallen 25°
99134	Steinsalz, milchigtrüb - graugläsern, grob- partiellweise mittelkristallin, zerrissene Anhydritschrundreste und vereinzelt Anhydritflocken, Einfallen ca. 35°
99136	Steinsalz, milchigtrüb - graugläsern, mittel- grobkristallin, lagenweise Anhydritflocken, Halitaugen in oberer Probenhälfte, Einfallen ca. 45°
99138	Steinsalz, milchigtrüb - gläsern, mittel- grobkristallin, mehrere Halitaugen bis 4 cm Durchmesser, zwei Anhydritflockenlinien, Einfallen ca. 45°
99139	Steinsalz, milchigtrüb - gläsern, mittel- grobkristallin, mehrere Halitaugen bis 4 cm Durchmesser, zwei schwache Anhydritflockenschrundreste, Einfallen ca. 25°
99141	Steinsalz, milchigtrüb - gläsern, mittel- partiellweise fein- grobkristallin, zonenweise Anhydritflocken und Flockenlinien, Einfallen ca. 35°
98218	Steinsalz, grau, fein- gelegentlich grobkristallin, am oberen Ende ein Überkorn, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98220	Steinsalz, grau, fein- mittel- gelegentlich grobkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98221	Steinsalz, grau, fein- mittel- gelegentlich grobkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98226	Steinsalz, grau, fein- mittelkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98227	Steinsalz, grau, fein- mittelkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98229	Steinsalz, hellgrau, fein- mittelkristallin, an Probenenden Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98230	Steinsalz, grau, fein- mittel- gelegentlich grobkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98231	Steinsalz, hellgrau, feinkristallin, einzelne Streifen mit Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98232	Steinsalz, hellgrau, feinkristallin, ein Überkorn einzelne Streifen mit Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98233	Steinsalz, grau, fein- mittel- gelegentlich grobkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98234	Steinsalz, grau, mittel- fein- gelegentlich grobkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98236	Steinsalz, grau, mittel- fein- gelegentlich grobkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98238	Steinsalz, grau, mittelkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98239	Steinsalz, grau, mittelkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98243	Steinsalz, grau, fein- mittel- gelegentlich grobkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98302	Steinsalz, hellgrau, mittel- grobkristallin
98244	Steinsalz, grau, mittelkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98245	Steinsalz, grau, mittel- gelegentlich grobkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98246	Steinsalz, grau, mittelkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung
98248	Steinsalz, grau, mittelkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, an oberer Mantelfläche Kristallausbrüche, Kristalleinregelung
98249	Steinsalz, grau, mittelkristallin, auf Bändern Anhydritflocken und -flatschen, Kristalleinregelung

Fortsetzung Tab. 15:

FileNr	Probenbeschreibung
99162	Steinsalz, mittelgrau - gläsern, grobkristallin - vereinzelt Überkorn, 3 mit Anhydritflocken und Linienresten verunreinigte Zonen, Einfallen 30°
99163	Steinsalz, gläsern - mittelgrau, grobkristallin - vereinzelt Überkorn, 3 mit Anhydritflocken und Linienresten verunreinigte Zonen, Einfallen 25°
99164	Steinsalz, schmutziggrau - gläsern, mitte- grob- partienweise feinkristallin, vereinzelt Überkorn, 2 mit Anhydritflocken und Linienresten verunreinigte Zonen, Einfallen 25°
99165	Steinsalz, schmutziggrau - gläsern, mitte- grob- partienweise feinkristallin, vereinzelt Überkorn, 4 mit Anhydritflocken und Linienresten verunreinigte Zonen, Einfallen 25°
99166	Steinsalz, milchiggraugläsern, grob- mittelkristallin, in Probenmitte eine schwach diffuse schwadige anhydritisch verunreinigte Zone, Einfallen nicht eindeutig
99167	Steinsalz, milchiggraugläsern, grob- mittelkristallin, eine zerrissene z. T. verfaltete Anhydritschnur, Einfallen 25°
99168	Steinsalz, gläsern - schmutziggläsern, grob- mittelkristallin, partienw. Überkorn, in Probenmitte eine zerrissen-verfaltete Anhydritschnur, z. T. Anhydritbesteige auf Kongruenzen, Einfallen 15°
99169	Steinsalz, schmutziggraugläsern, mittel- grob- partienweise feinkristallin - vereinzelt Überkorn, bei Zonen mit Anhydritflocken und Anhydritlinienresten, Einfallen 0°
99171	Steinsalz, schmutziggraugläsern, grob- mittelkristallin, eine mit Anhydritflocken und Anhydritlinienresten schmutzte Zone, Einfallen 25°
99172	Steinsalz, schmutziggraugläsern, grob- mittelkristallin, eine mit Anhydritflocken und Anhydritlinienresten schmutzte Zone, Einfallen 25°
99175	Steinsalz, schmutziggraugläsern, grob- gelegentlich mittelkristallin - partienweise Überkorn, 2 mit Anhydritflocken und Anhydritlinienresten schmutzte Zonen, ohne erkennbares Einfallen
99176	Steinsalz, schmutziggrau vereinzelt gläsern, grob- partienweise mittelkristallin - Überkorn, Probe von massiven Anhydritkristallen und Linienresten durchsetzt, Einfallen ca. 20°
99178	Steinsalz, hell- mittelgrau undurchscheinend, mittel- grob- partienw. feinkristallin, Probe stark von massivem Anhydrit + anhydrit. Linienresten durchsetzt, ohne erkennbares Einfallen
99011	Steinsalz, grau, fein- mittel- vereinzelt grobkristallin, mit regellos verteilten anhydrit. Flocken und Knäueln z. T. intern geschichtet, vereinzelt Halitaugen bis 6 cm Durchmesser, ohne Einfallen
99012	Steinsalz, grau - hellgrau, fein- gelegentlich mittelkristallin, vereinzelt Überkorn 4 cm Durchmesser, mit regellos verteilten anhydrit. Knäueln z. T. intern geschichtet und Flocken, ohne Einfallen
99013	Steinsalz, grau - hellgrau, fein- gelegentlich mittel- vereinzelt grobkristallin, mit regellos verteilten anhydritischen Knäueln z. T. intern geschichtet und Flocken, ohne erkennbares Einfallen
99091	Steinsalz, hellgrau fast undurchscheinend, mittel- vereinzelt grob- partienw. feinkrist., mit regellos verteilten Anhydritlinienresten, z. T. intern geschichtet + verknäult, ohne erkennb. Einfallen
99092	Steinsalz, hellgrau fast undurchscheinend, mittel- vereinzelt grob- partienw. feinkrist., mit regellos verteilten Anhydritlinienresten, z. T. intern geschichtet + verknäult, ohne erkennb. Einfallen
99014	Steinsalz, grau-hellgr., fein- gelegentl. mittel- vereinz. grobk., vereinz. Halitaugen bis 4 cm Durchm., mit regell. verteilt. anhydrit. Knäueln z. T. intern geschicht. + Flocken, ohne erkennb. Einfallen
99015	Steinsalz, grauweiß, mittel- fein- grobkristallin, mit unregelmäßig verteilten anhydritischen Knäueln, Einfallen 40°
99016	Steinsalz, grauweiß, mittel- fein- grobkristallin, mit unregelmäßig verteilten anhydritischen Knäueln, ohne erkennbares Einfallen
99093	Steinsalz, hellgrau fast undurchscheinend, mittelkrist. - klastisch, partienw. feinkristallin, unregelmäßig verteilt Anhydritlinienreste z. T. mit Internschicht. + verknäult, ohne erkennb. Einfallen
99018	Steinsalz, grau, fein- mittel- gelegentl. grobkrist., durchsetzt von mehreren Halitaugen bis 5 cm Durchm., unregelmäßig verteilte anhydrit. Knäuel z. T. mit Internschichtung, ohne Einfallen
99019	Steinsalz, grau, fein- mittel- gelegentl. grobkrist., durchsetzt von mehreren Halitaugen bis 5 cm Durchm., unregelmäßig verteilte anhydrit. Knäuel z. T. mit Internschichtung, ohne Einfallen
99020	Steinsalz, grau, fein- mittel- gelegentl. grobkrist., durchsetzt von mehreren Halitaugen bis 5 cm Durchm., unregelmäßig verteilte anhydrit. Brocken+Knäuel z. T. Internschichtung, ohne Einfallen
99021	Steinsalz, grau, fein- mittel- gelegentl. grobkrist., durchsetzt von mehreren Halitaugen bis 5 cm Durchm., unregelmäßig verteilte anhydrit. Knäuel z. T. mit Internschichtung, ohne Einfallen
99022	Steinsalz, hellgrau - grau, fein- mittel- gelegentl. grobkristallin, ein Halitauge mit 10 cm Durchmesser, unregelmäßig verteilte anhydritische Brocken + Flocken, ohne erkennbares Einfallen
99023	Steinsalz, schmutziggläsern, fein- mittel- gelegentlich grobkristallin, durchsetzt von Halitaugen, bis 5 cm Durchmesser, unregelmäßig verteilte anhydritische Brocken + Flocken, ohne erkennbares Einfallen
99025	Steinsalz, grau, fein- mittel- vereinzelt grobkristallin, , unregelmäßig verteilte anhydritische Flocken und Knäuel z. T. mit Internschichtung, ohne erkennbares Einfallen
99026	Steinsalz, hellgrau, fein- mittel- vereinzelt grobkristallin, , unregelmäßig verteilte anhydritische Flocken und Knäuel z. T. mit Internschichtung, ohne erkennbares Einfallen
99027	Steinsalz, grau, fein- mittel- vereinzelt grobkristallin, , unregelmäßig verteilte anhydritische Flocken und Knäuel z. T. mit Internschichtung, ohne erkennbares Einfallen
99008	Steinsalz, grau, fein- mittel- vereinzelt grobkristallin, mit regellos verteilten anhydritischen Brocken, Flocken und Knäueln z. T. intern geschichtet, ohne erkennbares Einfallen
99009	Steinsalz, grau, fein- mittel- vereinzelt grobkristallin, mit regellos verteilten anhydritischen Flocken und Knäueln z. T. intern geschichtet, ohne erkennbares Einfallen
99010	Steinsalz, grau, fein- mittel- vereinzelt grobkristallin, mit regellos verteilten anhydritischen Flocken und Knäueln z. T. intern geschichtet, ohne erkennbares Einfallen

Für das Knäuelsalz (z2HS1) wird im Mittel gefunden: BGRa_Klasse: 6. Bis zum Kristallbrockensalz (z2HS3) folgt: BGRa_Klasse: 3. Bezüglich des (stationären) Langzeitkriechens ist das Verhältnis der Kriechraten demzufolge: $2^6 : 2^3 = 8 : 1$ (auf Grundlage von „BGRa“ für die Ermittlung des Kriechvermögens in standardisierten Uniaxial-Kriechversuchen). Gefügebereiche, die nach Ausweis der Standorterkundung KW-Einschlüsse enthalten, machen sich beim generellen Trend im von der stratigraphischen Stellung abhängigen Kriechvermögen nicht bemerkbar.

Die Ergebnisse aus den Triaxial-Versuchen werden nachfolgend eingehender betrachtet. Hier geht es um die Frage, ob sich aus dem Kriechverhalten bei Wechsel der Belastung vom nicht-dilatanten Belastungszustand in das Dilatanzregime und auch wieder zurück - eine signifikante Einwirkung möglicherweise vorhandener KW-Einschlüsse anhand einer systematischen Verschiebung der als Bezug gewählten „unteren“ Dilatanzgrenze gemäß Gleichung (21) ablesen lässt.

Die Zusammenstellung der Ergebnisse zu den Kriechklassen aus Triaxial-Versuchen liefert Tab. 16. Im Gegensatz zu den einfachen Uniaxial-Versuchen, die im Standardfall zur Ermittlung des bereichsweise gegebenenfalls unterschiedlichen Kriechvermögens und der diesbezüglichen Kartierung von Homogenbereichen dienen, wird bei Triaxial-Versuchen das Stoffgesetz „BGRb“ zur Klassifizierung des Kriechvermögens genutzt. Das Verwenden von zwei verschiedenen Referenz-Stoffgesetzen wird im Abschlussbericht zum AP 9G213811 (HUNSCHE et al. 2003) und bei SCHULZE & PLISCHKE (2010) begründet. Auch nach Ausweis der Ergebnisse aus den Triaxial-Versuchen wird bestätigt, dass i. d. R. das Knäuelsalz (z2HS1) im Mittel duktiler ist als das Streifensalz (z2HS2) und dass das Kristallbrockensalz (z2HS3) das vergleichsweise geringste Kriechvermögen aufweist.

In den Abb. 86 bis Abb. 93 sind die Kriechkurven der Triaxial-Versuche mit z2HS-Steinsalzprüfkörpern aus Tab. 15 im Detail dokumentiert. In Tab. 15 und den genannten Abbildungen ist gekennzeichnet, ob der Spannungszustand im Dilatanzregime liegt oder ob er unterhalb der Dilatanzgrenze bleibt. Nur die Versuchsabschnitte ohne Dilatanz-Einwirkung dürfen für die Ermittlung des Kriechvermögens zum stationären Kriechen genutzt werden. In den Abbildungen zu den Versuchen 98224; 98237; 00071; 00072; 00073 ist bei der konstant gehaltenen Differenz-Spannung von $\Delta\sigma = 20$ MPa der Mantel-
druck p abschnittsweise so verändert worden, dass auch von Dilatanz beeinflusstes Kriechen wirksam wird. Die Spannungszustände, bei denen von Dilatanz-Effekten zusätzlich getragenes Kriechen einsetzt, bestätigen die Dilatanzgrenze gemäß Gl. (21) nach CRISTESCU & HUNSCHE (1998). Dieser Befund wird in Abb. 94 illustriert. Damit wird auch bei den Triaxial-Versuchen, bei denen gegebenenfalls vorhandene KW-Einschlüsse nicht so einfach entweichen können wie bei den Uniaxial-Versuchen, keine KW-Wirkung auf das Kriechen und die Lage der Dilatanzgrenze im Spannungsraum detektiert. Mit dem

in Abb. 94 dargestellten Ergebnis soll gezeigt werden, dass im Falle verfügbarer Lösung (hier wurde während einer Versuchsunterbrechung am ca. 220-ten Versuchstag ca. 1 cm³ gesättigte NaCl-Lösung zugesetzt) das Kriechvermögen mit Einsetzen von Dilatanz erheblich ansteigt. Ursache ist hier allerdings nicht der Einfluss eines Porendrucks sondern der Feuchteinfluss auf durch Dilatanz-Wirkung entstandenen inneren Oberflächen. Dabei bleibt die Lage der Dilatanzgrenze im Spannungsraum unbetroffen.

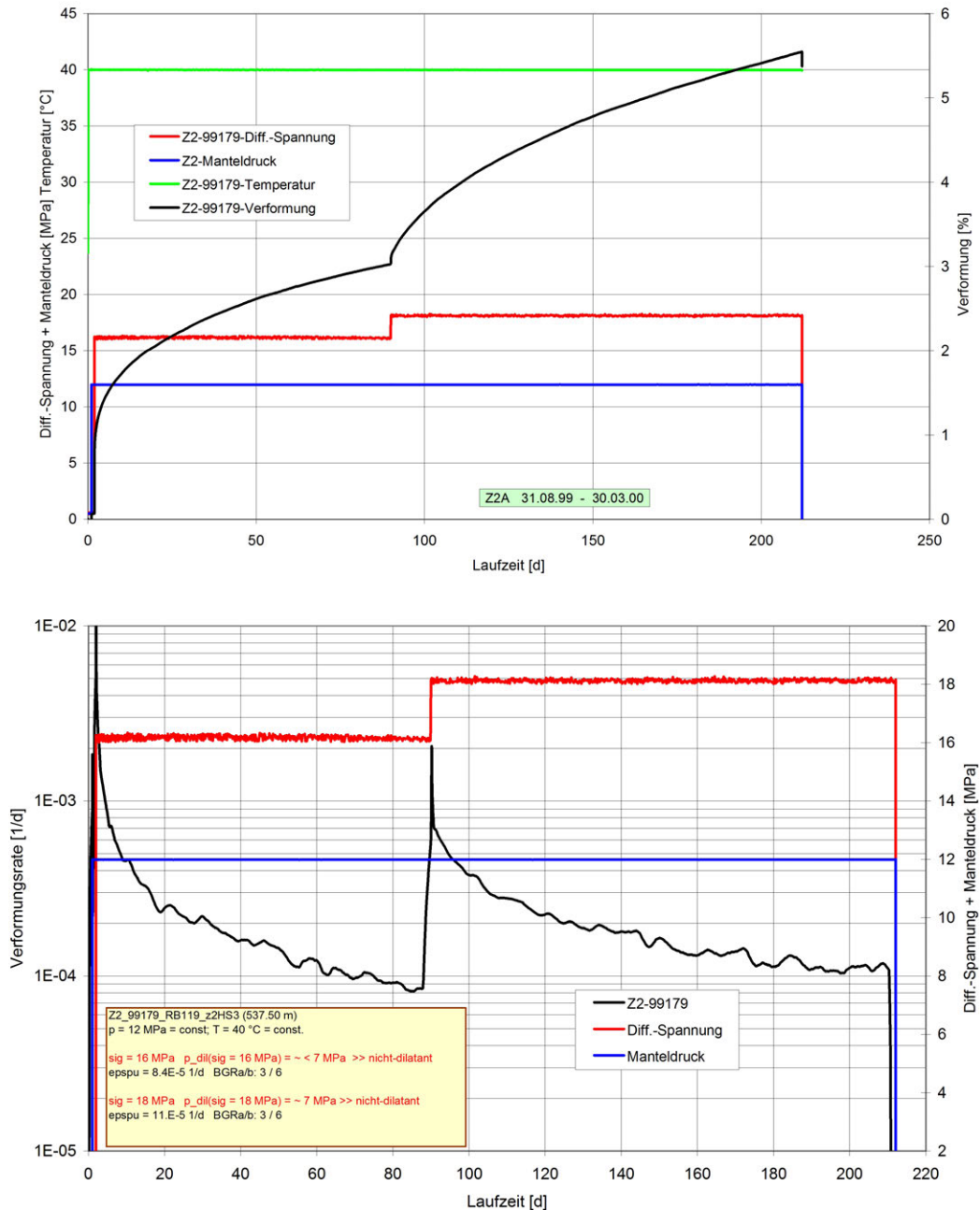


Abb. 86: Triaxial-Kriechversuch (99179) an z2HS3-Steinsalz aus der Bohrung RB119.

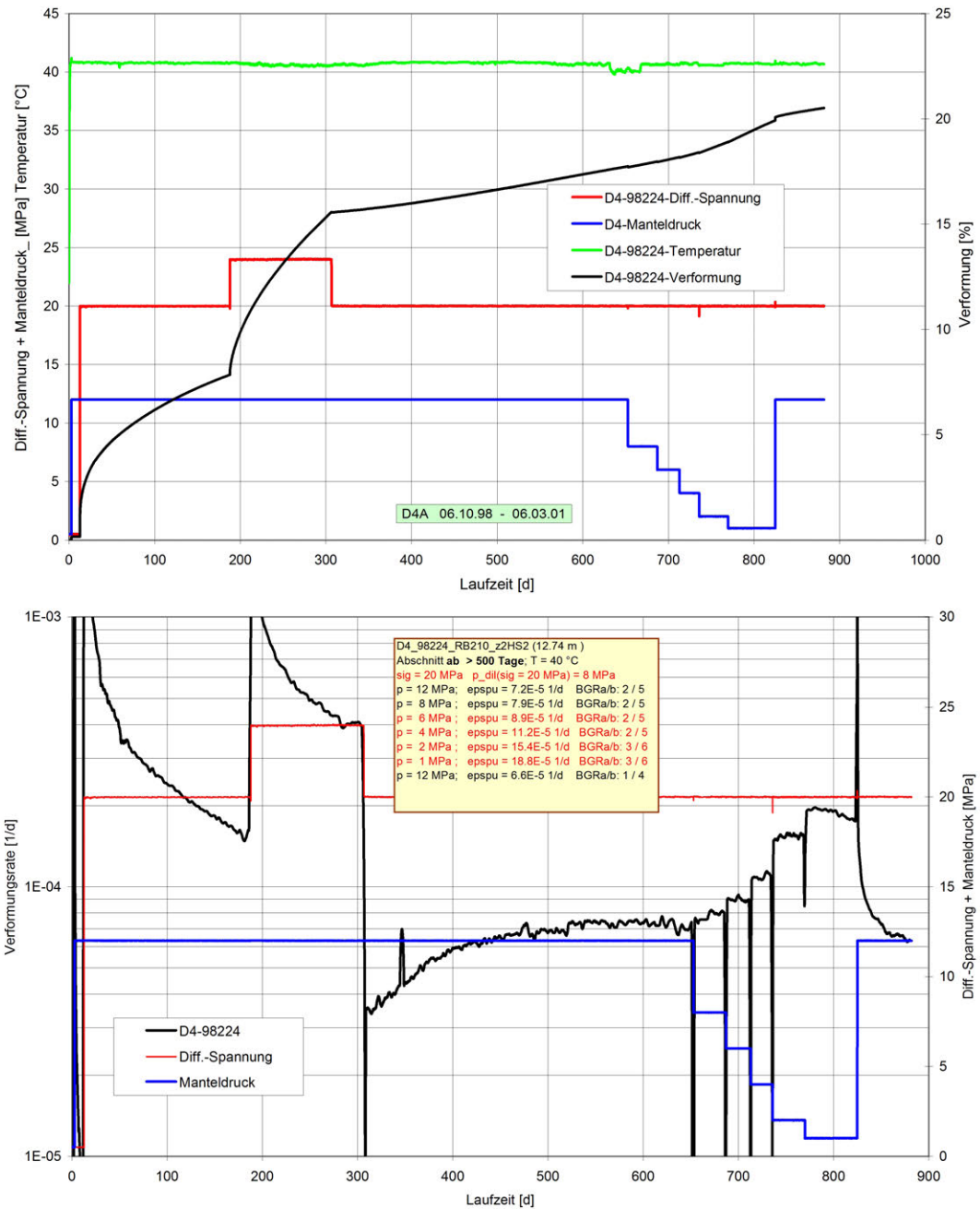


Abb. 87: Triaxial-Kriechversuch (98224) an z2HS2-Steinsalz aus der Bohrung RB210 (12.74 m).

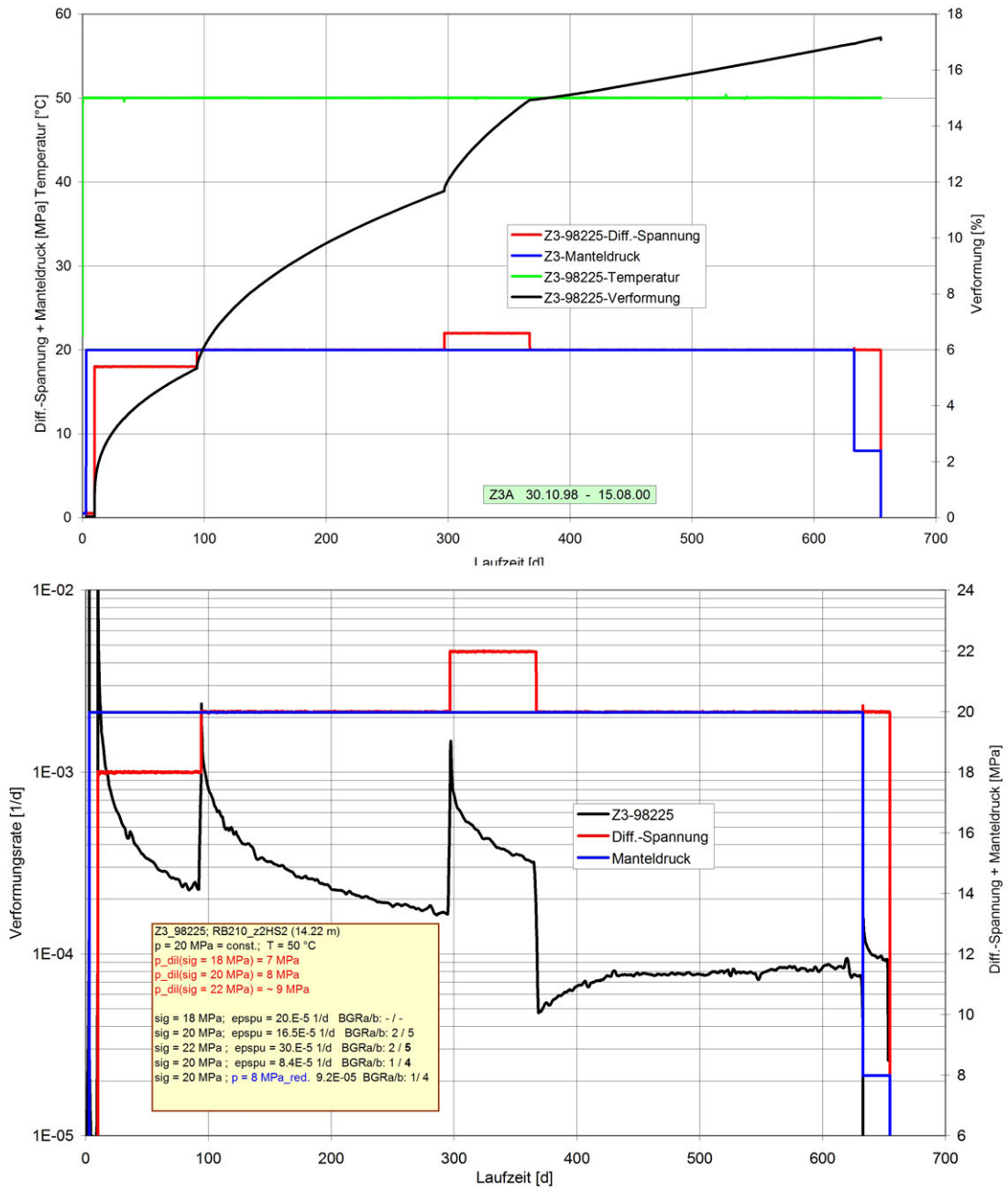


Abb. 88: Triaxial-Kriechversuch (98225) an z2HS2-Steinsalz aus der Bohrung RB210 (14.22 m).

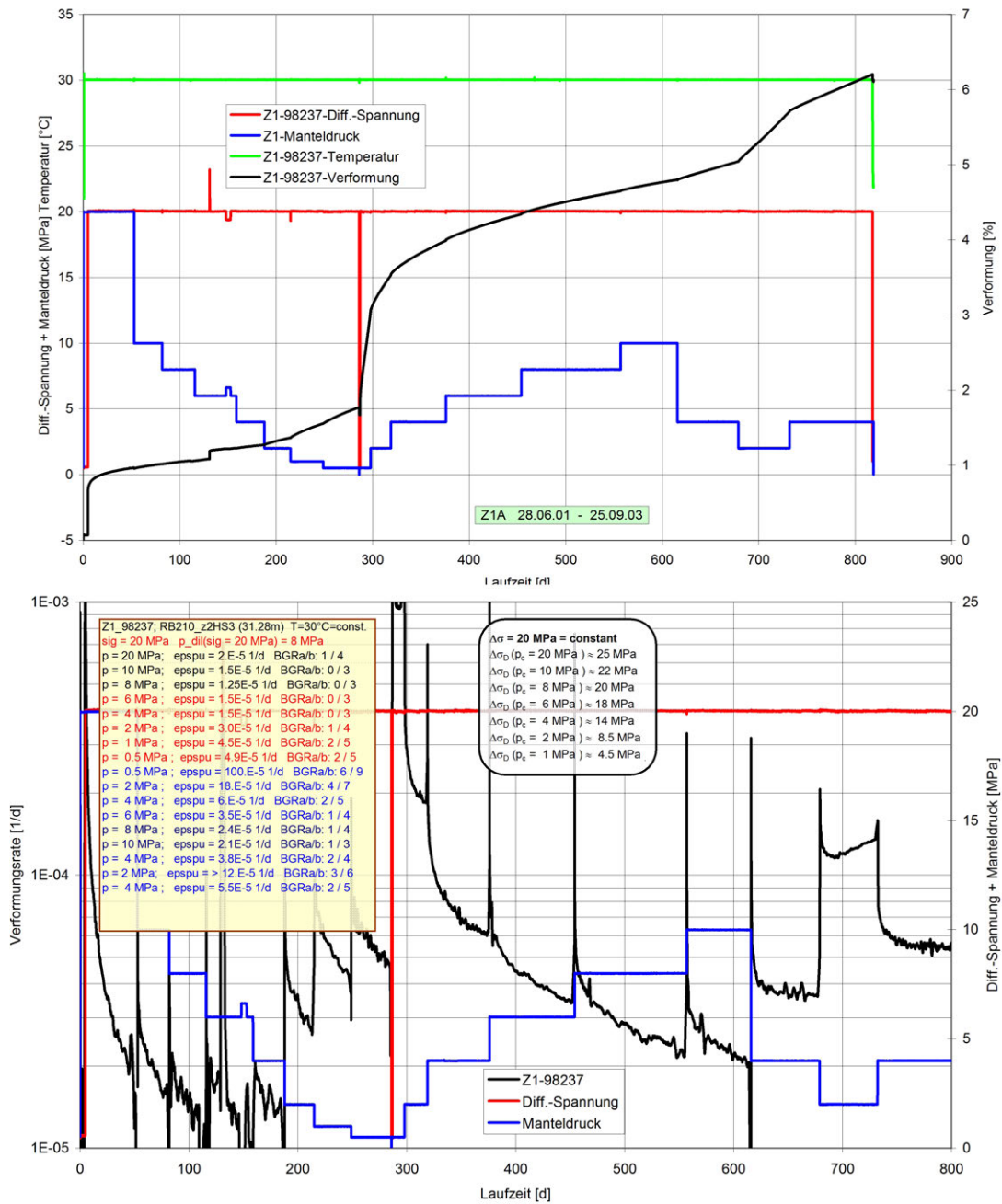


Abb. 89: Triaxial-Kriechversuch (98237) an z2HS3-Steinsalz aus der Bohrung RB210 (31.28 m).

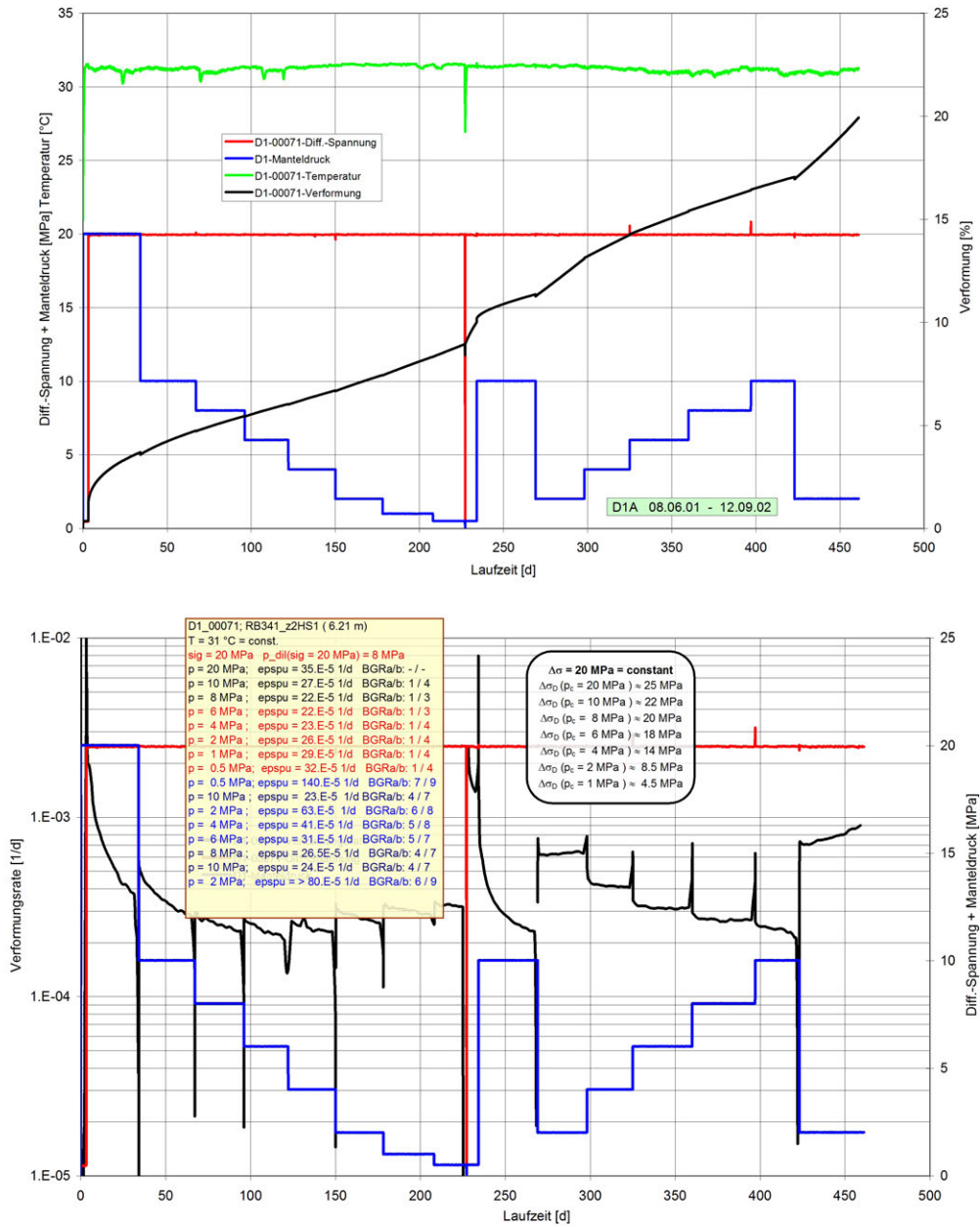


Abb. 90: Triaxial-Kriechversuch (00071) an z2HS1-Steinsalz aus der Bohrung RB341 (6.21 m); Zugabe von NaCl-Lösung (< 1 cm³) am 230-ten Versuchstag.

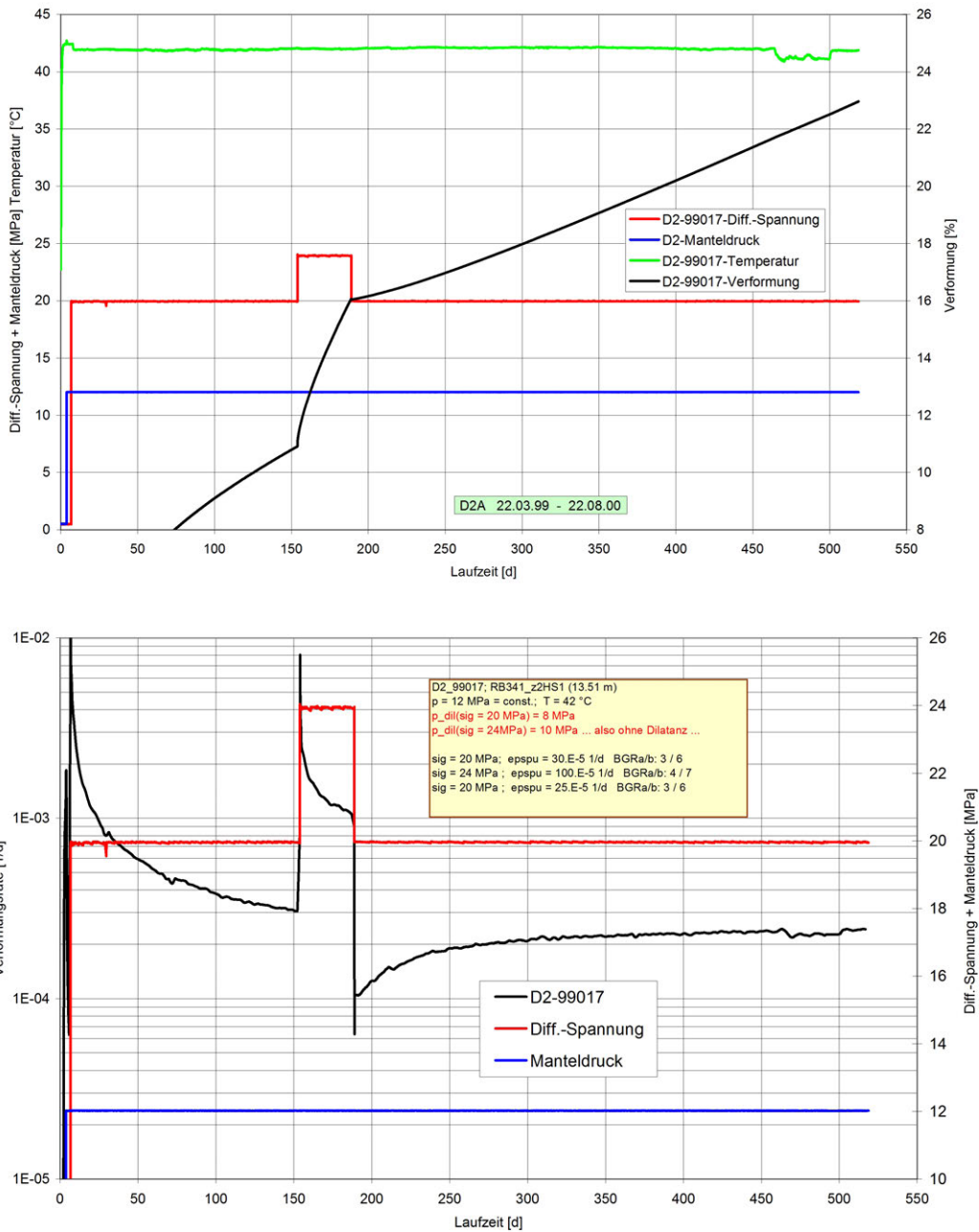


Abb. 91: Triaxial-Kriechversuch (99017) an z2HS1-Steinsalz aus der Bohrung RB341 (13.51 m).

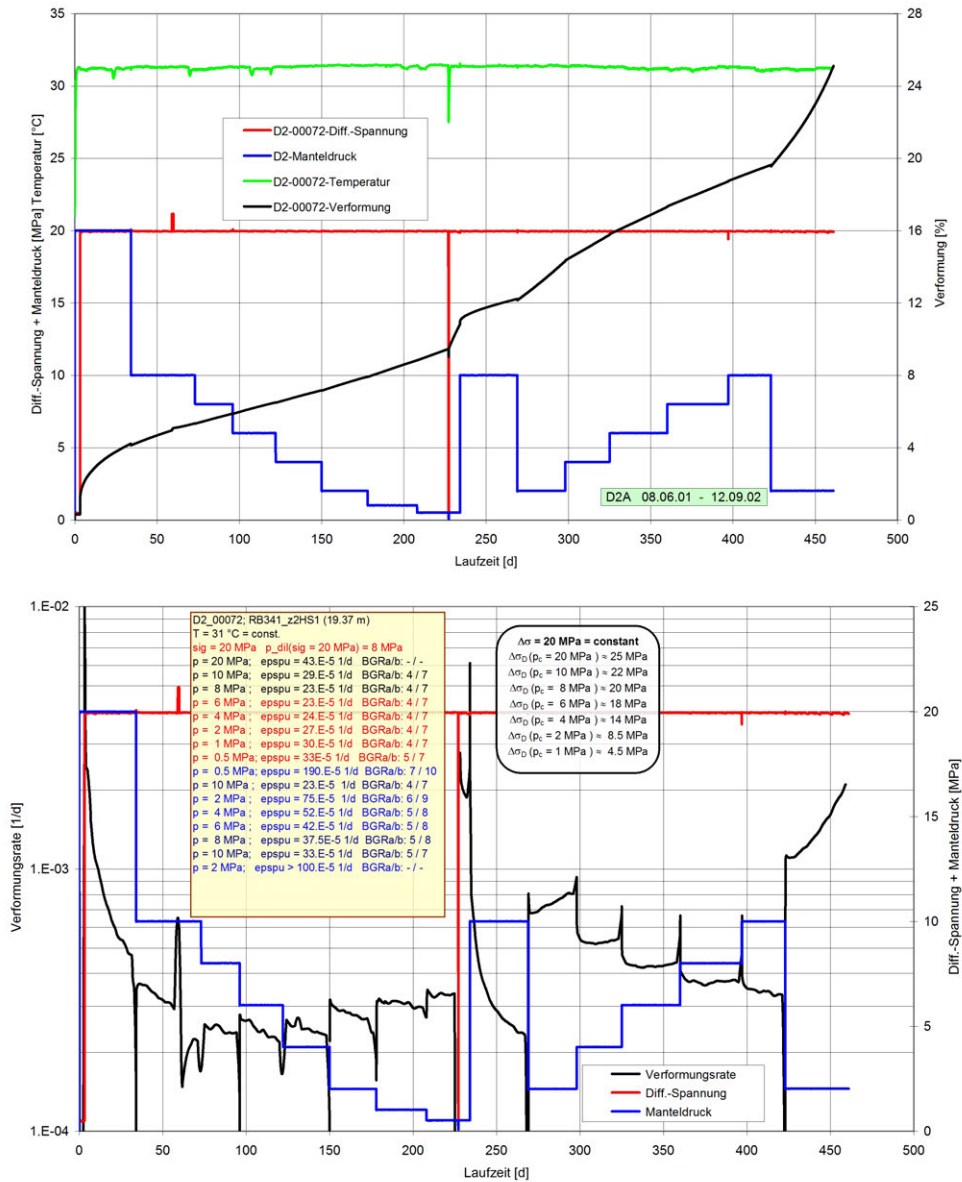


Abb. 92: Triaxial-Kriechversuch (00072) an z2HS1-Steinsalz aus der Bohrung RB341 (19.37 m); Zugabe von NaCl-Lösung (< 1 cm³) am 230-ten Versuchstag.

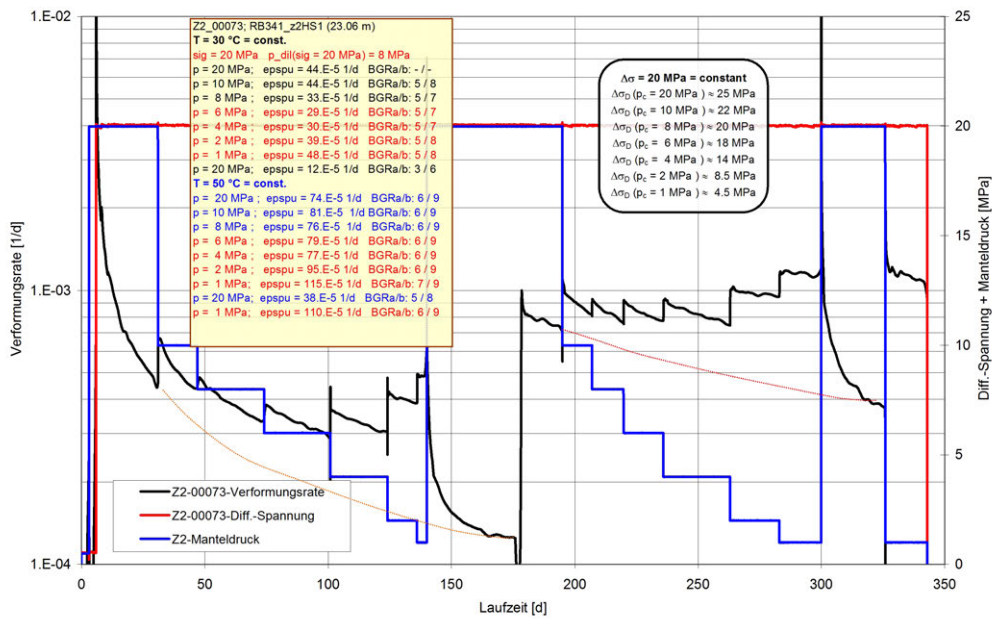
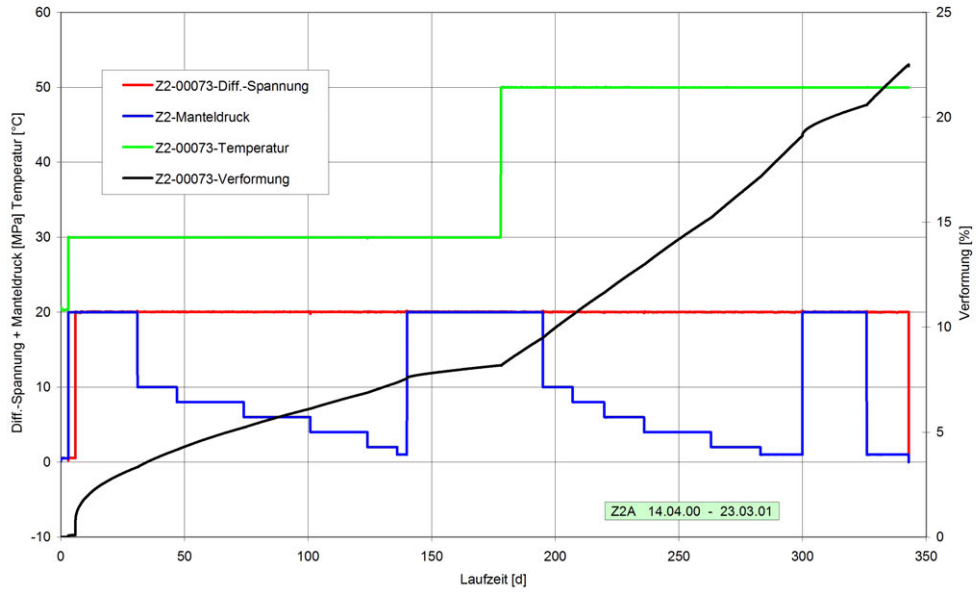


Abb. 93: Triaxial-Kriechversuch (00073) an z2HS1-Steinsalz aus der Bohrung RB341 (23.06 m) mit Temperatur-Wechsel (30 °C > 50 °C).

Tab. 16: Ergebnisse aus triaxialen Kriechversuchen zur Ermittlung des Kriechvermögens und des Einsetzens von Dilatanz von Steinsalz (z2HS) aus den Bohrungen GoEB1RB119 - Bohrort 3 , Querschlag 1 Ost; GoEB1RB210 - Bohrort 3, Querschlag 1 Ost und GoEB1RB341 - Bohrort 3.1, Querschlag 1 Ost

Kernbezeichnung	File	Teufe [m]	Stratigraphie	$\Delta\sigma$ [MPa]	p [MPa]	T [°C]	Stand	Bemerkung	BGRb
RB119	99179	537.50	z2HS3	16	12	40	1_Z2	nicht_dilatant	6
				18	12	40		nicht_dilatant	6
RB210	98224	12.74	z2HS2	20	12	40	2_D4	in_stationär	-
				24	12	40		in_stationär	-
				20	12	40		nicht_dilatant	5
				20	8	40		nicht_dilatant	5
				20	6	40		dilatant	5
				20	4	40		dilatant	5
				20	2	40		dilatant	6
				20	1	40		dilatant	6
				20	12	40		nicht_dilatant	4
RB210	98225	14.22	z2HS2	18	20	50	3_Z3	in_stationär	
				20	20	50		nicht_dilatant	5
				22	20	50		nicht_dilatant	5
				20	20	50		nicht_dilatant	4
				20	8	50		nicht_dilatant	4
RB210	98237	31.28	z2HS3	20	20	30	4_Z1	in_stationär	4
				20	10	30		nicht_dilatant	3
				20	8	30		nicht_dilatant	3
				20	6	30		dilatant	3
				20	4	30		dilatant	3
				20	2	30		dilatant	4
				20	1	30		dilatant	5
				20	0.5	30		dilatant	5
				20	0.5	30		Laugenzugabe	9
				20	2	30		dilatant	7
				20	4	30		dilatant	5
				20	6	30		dilatant	4
				20	8	30		nicht_dilatant	4
				20	10	30		nicht_dilatant	3
20	4	30		dilatant	4				
20	2	30		dilatant	6				
20	4	30		dilatant	5				

Fortsetzung Tab. 16:

Kernbezeichnung	File	Teufe [m]	Stratigraphie	$\Delta\sigma$ [MPa]	p [MPa]	T [°C]	Stand	Bemerkung	BGRb
RB341	00071	6.21	z2HS1	20	20	31	5_D1	in_stationär	-
				20	10	31		nicht_dilatant	4
				20	8	31		nicht_dilatant	3
				20	6	31		dilatant	3
				20	4	31		dilatant	4
				20	2	31		dilatant	4
				20	1	31		dilatant	4
				20	0.5	31		dilatant	4
				20	0.5	31		Laugenzugabe	9
				20	10	31		nicht_dilatant	7
				20	2	31		dilatant	8
				20	4	31		dilatant	8
				20	6	31		dilatant	7
				20	8	31		nicht_dilatant	7
				20	10	31		nicht_dilatant	7
20	2	31		dilatant	9				
RB341	99017	13.51	z2HS1	20	12	42	6_D2	nicht_dilatant	6
				24	12	42		nicht_dilatant	7
				20	12	42		nicht_dilatant	6
RB341	00072	19.37	z2HS1	20	20	31	7_D2	in_stationär	-
				20	10	31		nicht_dilatant	7
				20	8	31		nicht_dilatant	7
				20	6	31		dilatant	7
				20	4	31		dilatant	7
				20	2	31		dilatant	7
				20	1	31		dilatant	7
				20	0.5	31		dilatant	7
				20	0.5	31		Laugenzugabe	10
				20	10	31		nicht_dilatant	7
				20	2	31		dilatant	9
				20	4	31		dilatant	8
				20	6	31		dilatant	8
				20	8	31		nicht_dilatant	8
				20	10	31		nicht_dilatant	7
RB341	00073	23.06	z2HS1	20	20	30	8_Z2	nicht_stationär	-
				20	10	30		nicht_dilatant	8
				20	8	30		nicht_dilatant	7
				20	6	30		dilatant	7
				20	4	30		dilatant	7
				20	2	30		dilatant	8
				20	1	30		dilatant	8
				20	20	30		nicht_dilatant	6
				20	20	50		nicht_dilatant	9
				20	10	50		nicht_dilatant	9
				20	8	50		nicht_dilatant	9
				20	6	50		dilatant	9
				20	4	50		dilatant	9
				20	2	50		dilatant	9
				20	1	50		dilatant	9

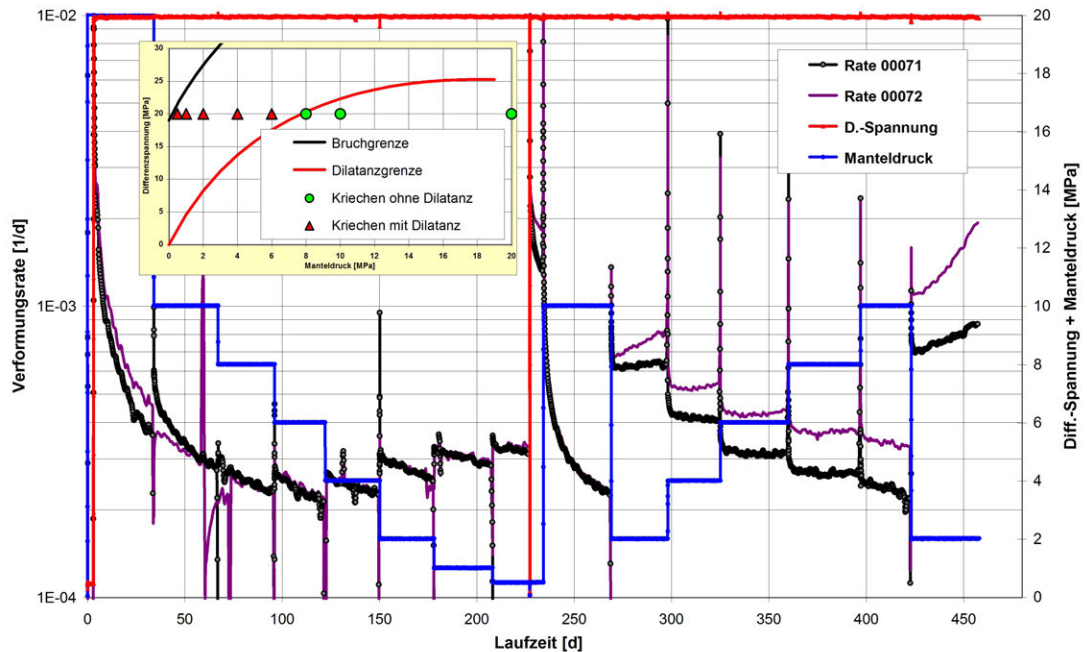


Abb. 94: Triaxial-Kriechversuche aus Abb. 90 und Abb. 92; mit und ohne Dilatanz-Wirkung, Zugabe von NaCl-Lösung am 230-ten Tag.

10.8.2 Untersuchungen zum thermisch induzierten Ausdehnungsverhalten

Begonnen wurden die Untersuchungen hierzu mit dem Prüfkörper 99181 (vergl. Tab. 15), der aus dem Bohrkern mit der Bezeichnung GoEB1_840m/Q1W(9) stammt. Der Prüfkörper hatte einen Durchmesser von $D_0 \approx 70$ mm und eine Länge von $L_0 \approx 97.48$ mm. Die Dichte-Bestimmung aus Vermessen und Wiegen ergab $\rho \approx 2.2$ g/cm³. Der Prüfkörper zeigt die für das Hauptsalz (z2HS1) charakteristischen Merkmale. Leider ist unklar, ob bei dem Ausgangsmaterial für den Prüfkörper GoEB1_840m/Q1W(9) KW-Einschlüsse in nennenswerter Menge vorhanden waren. Durch das Erkundungsmoratorium konnten keine Untersuchungen zu den gefügekundlichen Eigenschaften, zum KW-Gehalt, zum Poren-Raum und zu eventuellen Wegsamkeiten an diesem Material mehr erfolgen.

Der Prüfkörper 99181 wurde in einem Kriechversuch uniaxial bei $\sigma_1 = 1.8$ MPa belastet, wobei nach ca. wöchentlichen bis ca. 14-tägigen Prüfabschnitten die Temperatur (zu Beginn $T = 80$ °C) in Stufen von ca. 10 °C bis auf 180 °C erhöht wurde. Nach Erreichen dieser Temperatur-Stufe wurde die Spannung auf $\sigma_1 = 2.8$ MPa erhöht. Das Kriechverhalten folgt der wegen Temperatur-Erhöhung steigenden Duktilität - und zwar in Übereinstimmung mit dem Kriechgesetz BGRb, das für das Kriechen von trockenem Steinsalz bei erhöhter Temperatur als Referenz genutzt wird.

Die bei Temperatur-Erhöhung unmittelbar folgende thermische Ausdehnung des Prüfkörpers bestätigt stets den für Steinsalz repräsentativen linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von $\alpha \approx 40.0E-06$ 1/K. Signifikante Abweichungen von diesen Befunden, die bei Schädigung des Gefüges durch Druckaufbau in den KW-Einschlüssen oder durch deren Freisetzung zu erwarten wären, wurden weder beim Kriechen noch bei der thermischen Expansion registriert. Allerdings ist bei diesen Befunden darauf hinzuweisen, dass wegen der uniaxialen Einspannung die Möglichkeit des Abdampfens von Einschlüssen bestand und damit die zuvor gegebenenfalls vorhandenen KW-Einschlüsse ohne Zusatz-Wirkung auf das „Normal-Verhalten“ beim Kriechen von z2HS1-Steinsalz und in der thermischen Ausdehnung geblieben sind. Eine belastbare Prüfung der KW-Auswirkung auf die thermische Ausdehnung kann nur bei triaxialer Einspannung ohne unmittelbare Dilatanzwirkung, Auflockerung und Öffnung von (Korngrenzen-) Wegsamkeiten zuverlässig erfolgen. Entsprechende Untersuchungen sind nach Aufhebung des Erkundungsmoratoriums an Kernmaterial aus der Bohrung GoEB1RB793 an den Prüfkörpern 11079 und 11080 begonnen worden (vergl. Tab. 14).

Zur Untersuchung der thermisch induzierten Längenänderung eines Prüfkörpers wird dieser in eine Triaxial-Druckzelle eingebaut. Zum Einsatz kommen stets zylindrische Prüfkörper (Kármán-Prinzip). Durch die allseitige Einspannung mit $p_{iso} = 20$ MPa wird sichergestellt, dass die Wirkung von Artefakten – wie ein Nachwirken auf die Längenänderung aus dem Ausgleich der Oberflächenrauigkeit und Setzung von Maschinen-Komponenten – ausgeschlossen wird.

Die Wegmessung erfolgt mittels drei Induktiv-Wegaufnehmern, die direkt am oberen und unteren Druckstempel angebracht sind. Der Versuch, die Volumenänderung über die Position des Druckstempels im Druckübersetzer für die Konstanthaltung des Manteldrucks zu messen, führt für diesen Zweck zu nicht genügend geeigneten Ergebnissen. Für die Fragestellung steht also nur die Messung der axialen Längenänderung zur Verfügung.

Sofern die thermisch induzierte Längenänderung $\Delta L(\Delta T)$ eines Materialkörpers der Länge L_o mit dem linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten α beschrieben werden kann, gilt:

$$\Delta L(\Delta T) = L_o(T1) \cdot \alpha \cdot (T1 - T2) = L_o \cdot \alpha \cdot \Delta T \quad (25)$$

Da in den Messwerten die Beiträge aus der Temperaturempfindlichkeit des gesamten Systems (Mess-Strecken und Mess-Aufbau) mit $L_{sys} \cdot \alpha_{sys}$ und des Prüfkörpers mit $L_{o,p} \cdot \alpha_p$ enthalten sind, gilt:

$$\Delta L_{ges}(\Delta T) = L_{o,ges} \cdot \alpha_{ges} \cdot \Delta T = L_{sys} \cdot \alpha_{sys} \cdot \Delta T + L_{o,p} \cdot \alpha_p \cdot \Delta T \quad (26)$$

Zur Berücksichtigung des Systembeitrags ist diese zu ermitteln und zu subtrahieren:

$$L_{\text{sys}} \cdot \alpha_{\text{sys}} = (\Delta L_{\text{ges}}(\Delta T) - L_{\text{o,p}} \cdot \alpha_{\text{p}} \cdot \Delta T) / \Delta T = L_{\text{o,ges}} \cdot \alpha_{\text{ges}} - L_{\text{o,p}} \cdot \alpha_{\text{p}} \quad (27)$$

Zur Ermittlung der Systemempfindlichkeit $L_{\text{sys}} \cdot \alpha_{\text{sys}}$ sind Messungen an Referenz-Prüfkörpern mit bekanntem thermischen Ausdehnungskoeffizienten α_{p} durchgeführt worden - und zwar mit einem Prüfkörper aus Aluminium ($L_{\text{o}} = 250 \text{ mm}$; $\alpha_{\text{p}} = \alpha_{\text{Alu}} = 2.3\text{E-}05 \text{ 1/K}$) und einem aus dem reinen z2SP-Asse-Speisesalz ($L_{\text{o}} = 250 \text{ mm}$; $\alpha_{\text{p}} = \alpha_{\text{Salz}} = 4.0\text{E-}05 \text{ 1/K}$).

Das Ergebnis für die Referenz mit Asse-Speisesalz (08039) zeigt Abb. 95.

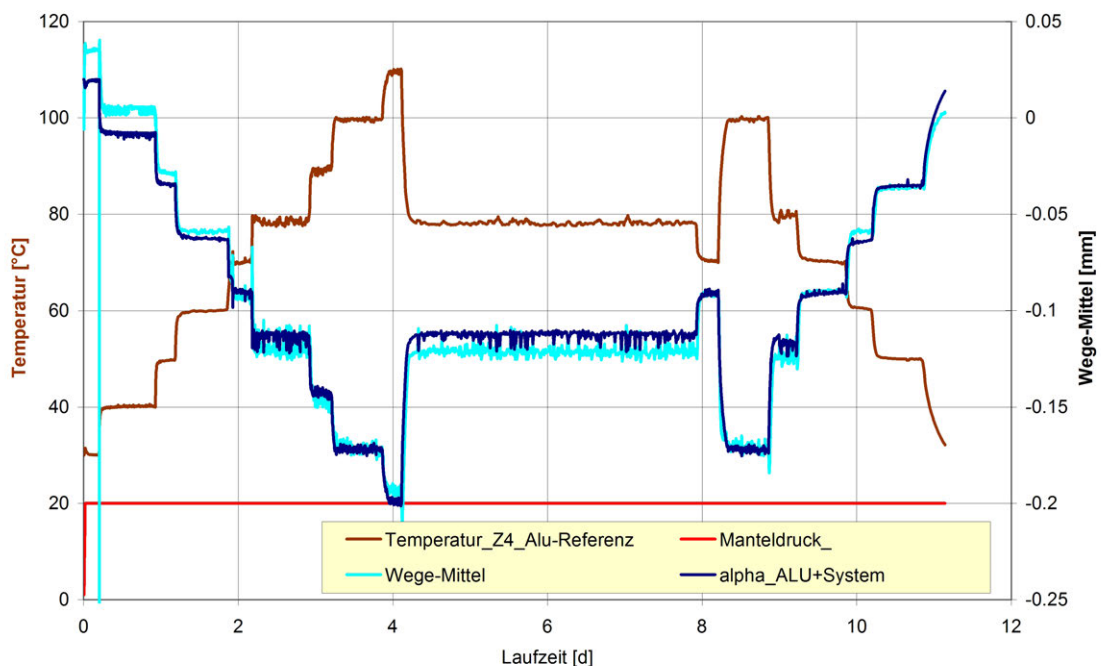


Abb. 95: Messung der thermisch induzierten Längenänderung bei isostatischer Einspannung ($p_{\text{iso}} = 20 \text{ MPa}$) an einem Aluminium-Prüfkörper als Referenz zum Kalibrieren der Mess-Strecke. Der Graph „alpha_ALU+System“ folgt aus der ermittelten Temperaturempfindlichkeit von Prüfkörper und Mess-System.

Aus den Messpunkten, die während einer Temperatur-Haltstufe aufgezeichnet wurden (Abb. 96), ist der in guter Näherung lineare, thermische Systemkennwert ableitbar und auf dieser Grundlage der thermische Ausdehnungskoeffizient anderer Prüfkörper. Die Messwerte, welche im Übergangsbereich während eines Temperaturwechsels aufgezeichnet werden, sind mit einem Datenfilter eliminiert worden und unberücksichtigt geblieben.

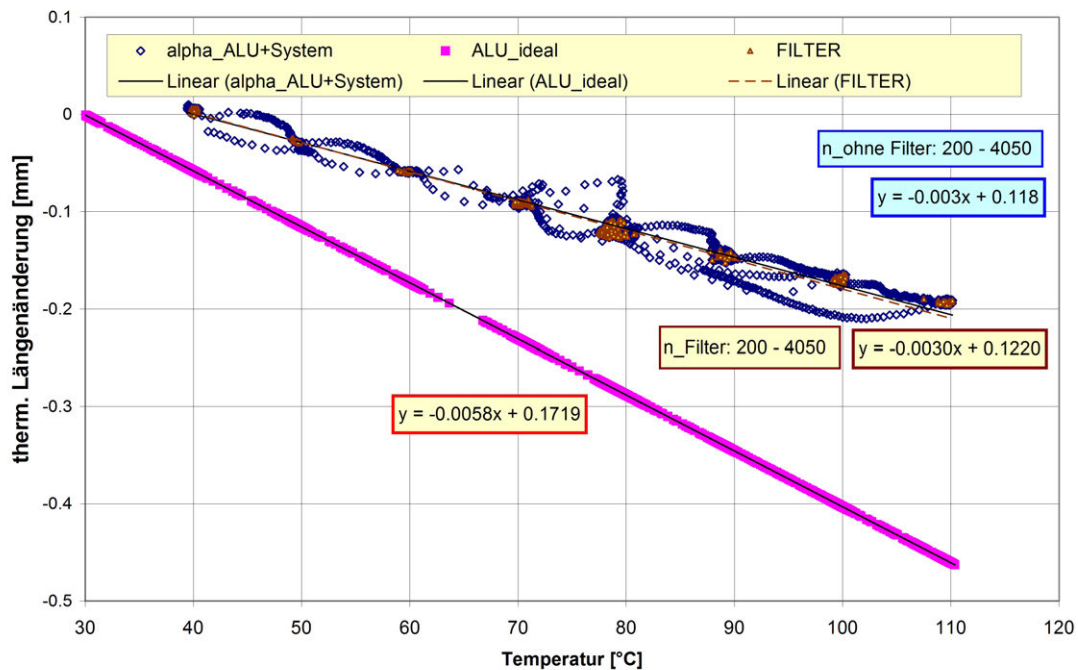


Abb. 96: Lineare Anpassung zur Ermittlung der T-Empfindlichkeit an die Ideal-Kurve für Aluminium und an die Messwerte für das Gesamt-System. Durch den Daten-Filter werden nur die Messwerte innerhalb einer Phase mit konstanter Temperatur berücksichtigt.

Beim Messaufbau für Kriech- und Festigkeitsversuche im Lastpfad „Kompression“ erhalten die Wege und die Verformung bei Stauchung ein positives Vorzeichen. Da dieser Messaufbau auch hier verwendet wird, folgt im Falle der thermisch induzierten Ausdehnung ein negatives Vorzeichen für Weg und Verformung. Aus den Messungen mit dem Referenz-Prüfkörper aus Aluminium (Abb. 95 und Abb. 96) folgt gemäß Gleichung (7) die Steigung (Temperaturempfindlichkeit des gesamten Aufbaus)

$$L_{o,ges} \cdot \alpha_{ges} = - 0.0030 \text{ mm/K} \text{ und mit } L_{o,Alu} \cdot \alpha_{Alu} = - 0.00575 \text{ mm/K} \text{ gemäß Gleichung (27)}$$

und für das System:

$$L_{sys} \cdot \alpha_{sys} = - 0.0030 \text{ mm/K} + 0.0058 \text{ mm/K} = + 0.0028 \text{ mm/K}.$$

Aus den Messungen mit dem Steinsalz-Prüfkörper (Asse, z2SP; 08039; Abb. 97 und Abb. 98) folgt gemäß Gleichung (25) die Steigung

$$L_{o,ges} \cdot \alpha_{ges} = - 0.0071 \text{ mm/K} \text{ und mit } L_{o,Salz} \cdot \alpha_{Salz} = - 0.01 \text{ mm/K} \text{ gemäß Gleichung (27) für das System:}$$

$$L_{sys} \cdot \alpha_{sys} = - 0.0071 \text{ mm/K} + 0.01 \text{ mm/K} = + 0.0029 \text{ mm/K}.$$

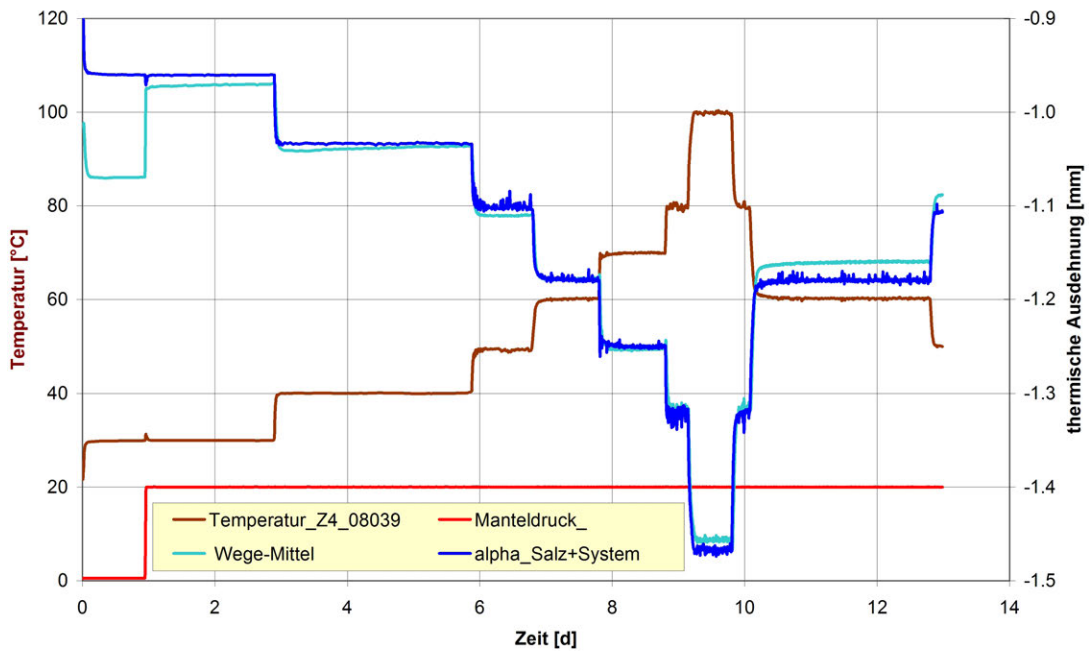


Abb. 97: Messung der thermisch induzierten Längenänderung bei isostatischer Einspannung ($p_{iso} = 20 \text{ MPa}$) am Steinsalz-Prüfkörper Asse-Speisesalz, z2SP; File: 08039 als Referenz zum Kalibrieren der Mess-Strecke. Der Graph „alpha_Salz+System“ folgt aus der ermittelten Temperaturempfindlichkeit von Prüfkörper und Mess-System.

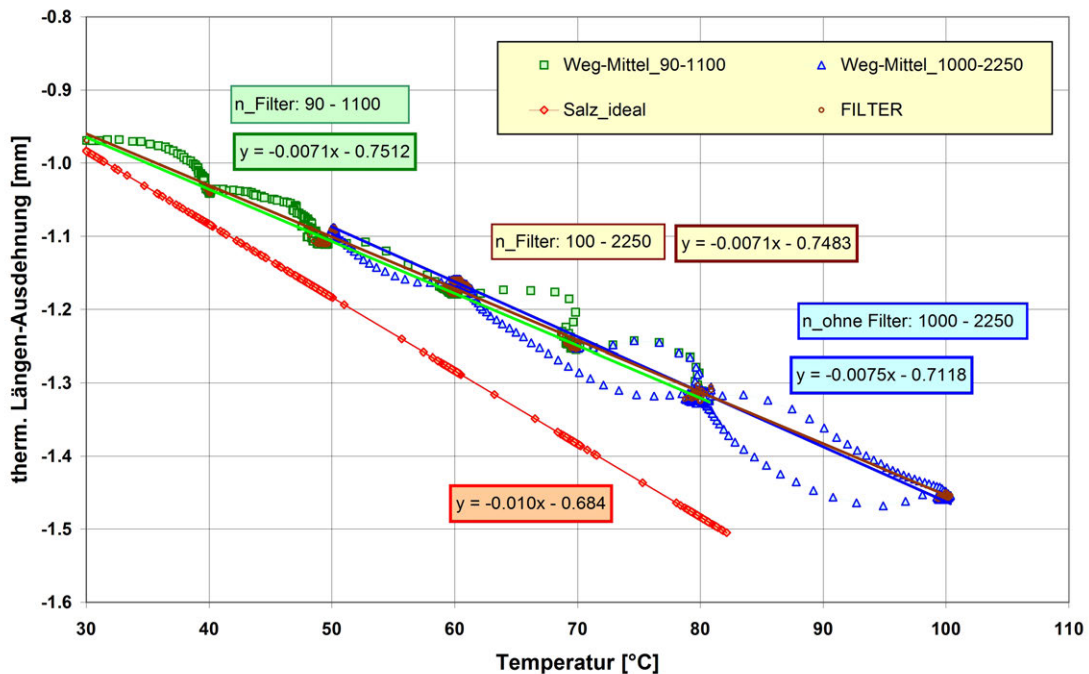


Abb. 98: Lineare Anpassung zur Ermittlung der T-Empfindlichkeit an die Ideal-Kurve für den Steinsalz-Prüfkörper (08039) aus Asse-Speisesalz und an die Messwerte für das Gesamt-System. Durch den Daten-Filter werden nur die Messwerte innerhalb einer Phase mit konstanter Temperatur berücksichtigt. Die lineare Anpassung trifft für alle Phasen im Temperatur-Programm zu.

Nach dieser Kalibrierung sind die Versuche an den Prüfkörpern 11079 und 11080 aus der Bohrung GoEB1RB793 mit der auf den Wert $L_{\text{sys}} \cdot \alpha_{\text{sys}} = 0.0029 \text{ mm/K}$ gesetzten Temperaturempfindlichkeit des Systems durchgeführt worden. Für den direkten Vergleich der Steigungen $L_{\text{o,ges}} \cdot \alpha_{\text{ges}}$ mit den Messungen an den Referenz-Prüfkörpern hatten die Prüfkörper ebenfalls die Ausgangslänge von $L_0 = 250 \text{ mm}$. Sowohl beim Versuch 11079 als auch 11080 zeigt sich ein Materialverhalten, das von dem des Asse-Speisesalzes eindeutig abweicht. In Abb. 99 und Abb. 100 ist das Verhalten des Prüfkörpers 11079 dargestellt. Zu Beginn wird als Steigung $L_{\text{o,ges}} \cdot \alpha_{\text{ges}} = 0.0031 \text{ mm/K}$ ermittelt. Erst nach Wiederholung des thermischen Belastungszyklus steigt der Wert bis auf $L_{\text{o,ges}} \cdot \alpha_{\text{ges}} = 0.0065 \text{ mm/K}$ an. Aus Abb. 101 und Abb. 102 folgt für den Prüfkörper 11080, dass zu Beginn die Steigung $L_{\text{o,ges}} \cdot \alpha_{\text{ges}} = 0.0046 \text{ mm/K}$ beträgt und erst wieder nach Wiederholung des thermischen Belastungszyklus bis auf $L_{\text{o,ges}} \cdot \alpha_{\text{ges}} = 0.0065 \text{ mm/K}$ ansteigt. Der für das Asse-Speisesalz ermittelte Wert von $L_{\text{o,ges}} \cdot \alpha_{\text{ges}} = 0.0071 \text{ mm/K}$ wird nicht erreicht.

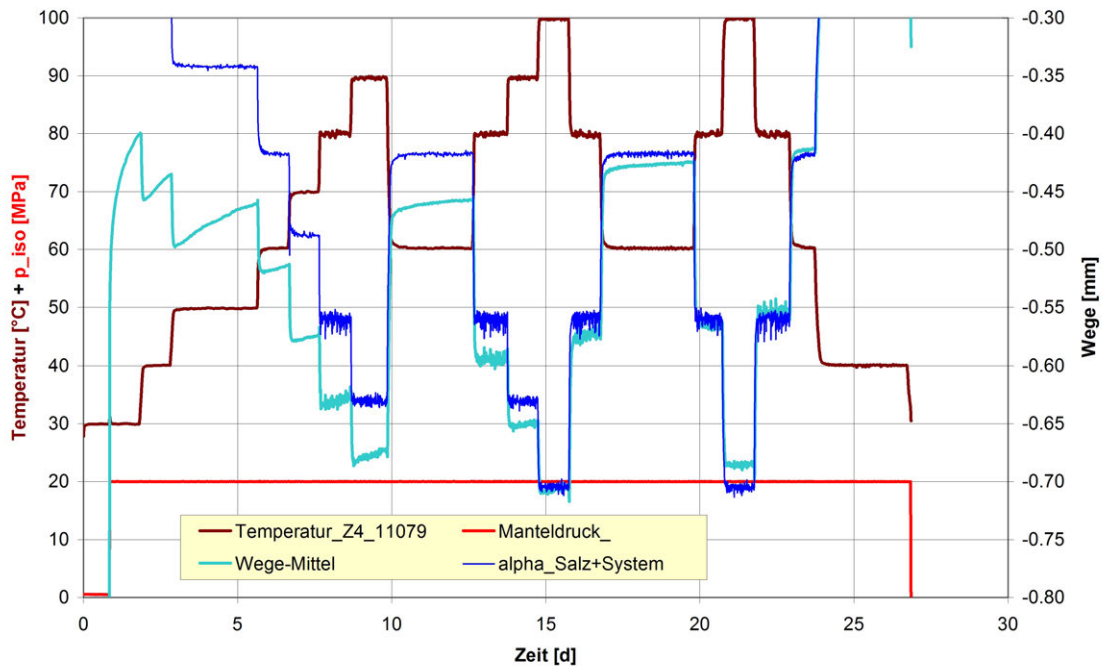


Abb. 99: Messung der thermisch induzierten Längenänderung bei isostatischer Einspannung ($p_{\text{iso}} = 20 \text{ MPa}$) am Steinsalz-Prüfkörper GoEB1RB793/004/06, z2HS1; File: 11079. Der Graph „alpha_Salz+System“ folgt aus der Temperaturempfindlichkeit von Prüfkörper und Mess-System.

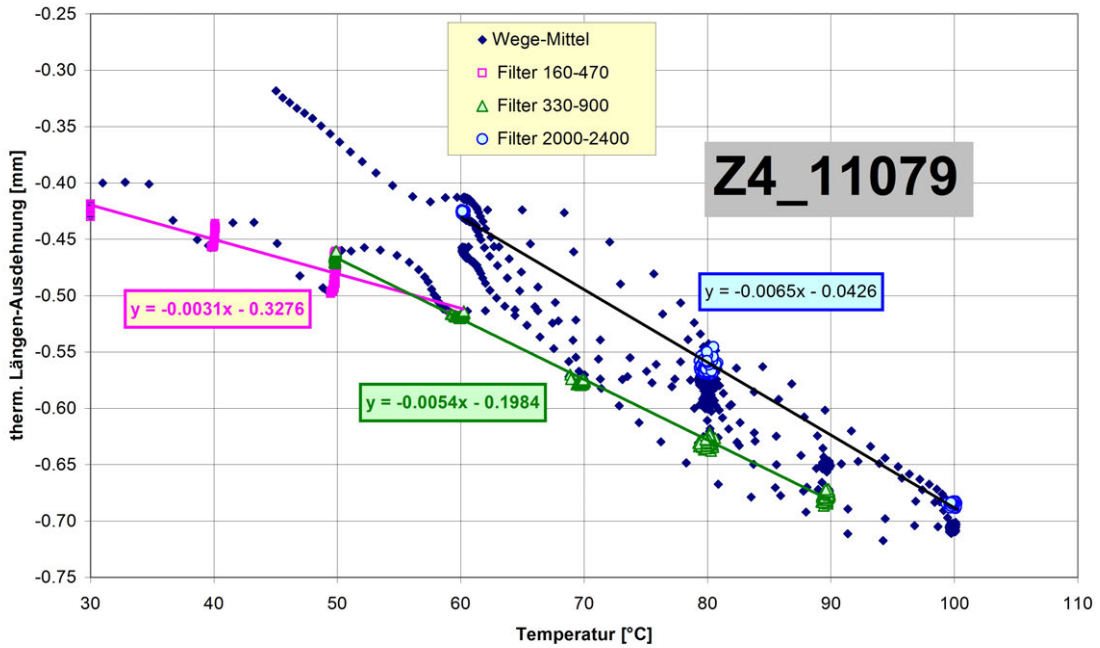


Abb. 100: Lineare Anpassung zur Ermittlung der T-Empfindlichkeit für den Steinsalz-Prüfkörper (11079) und an die Messwerte für das Gesamt-System. Durch den Daten-Filter werden nur die Messwerte innerhalb einer Phase mit konstanter Temperatur berücksichtigt. Die lineare Anpassung erreicht asymptotisch erst im dritten Zyklus des Temperatur-Programms den stabilen Endwert.

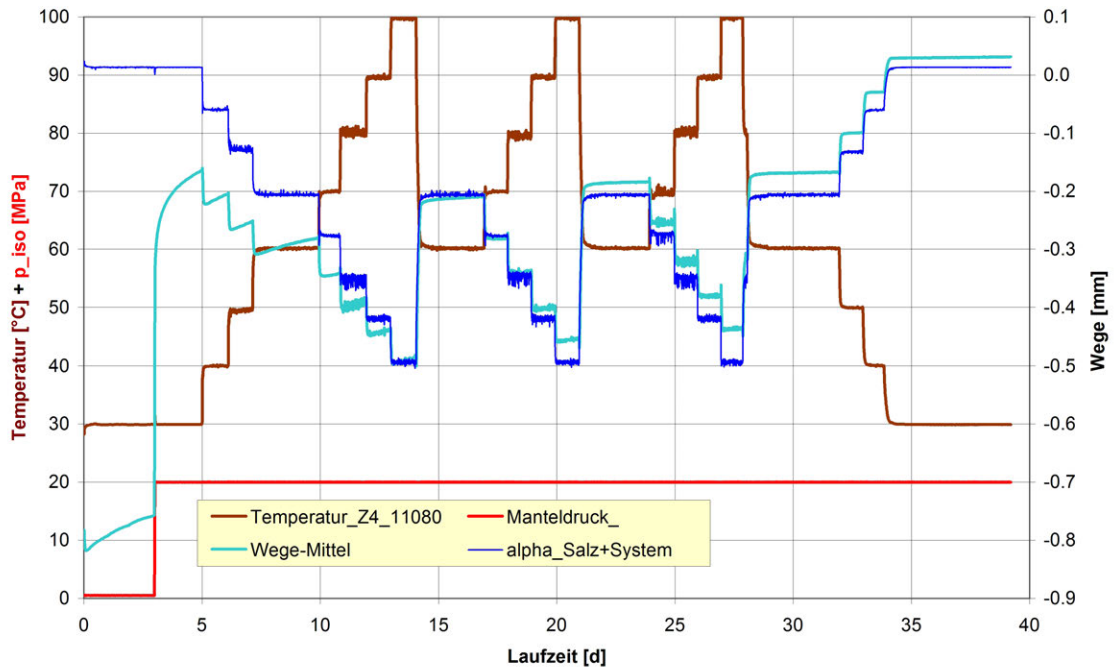


Abb. 101: Messung der thermisch induzierten Längenänderung bei isostatischer Einspannung ($p_{iso} = 20 \text{ MPa}$) am Steinsalz-Prüfkörper GoEB1RB793/005/02, z2HS1; File: 11080. Der Graph „alpha_Salz+System“ folgt aus der Temperaturempfindlichkeit von Prüfkörper und Mess-System.

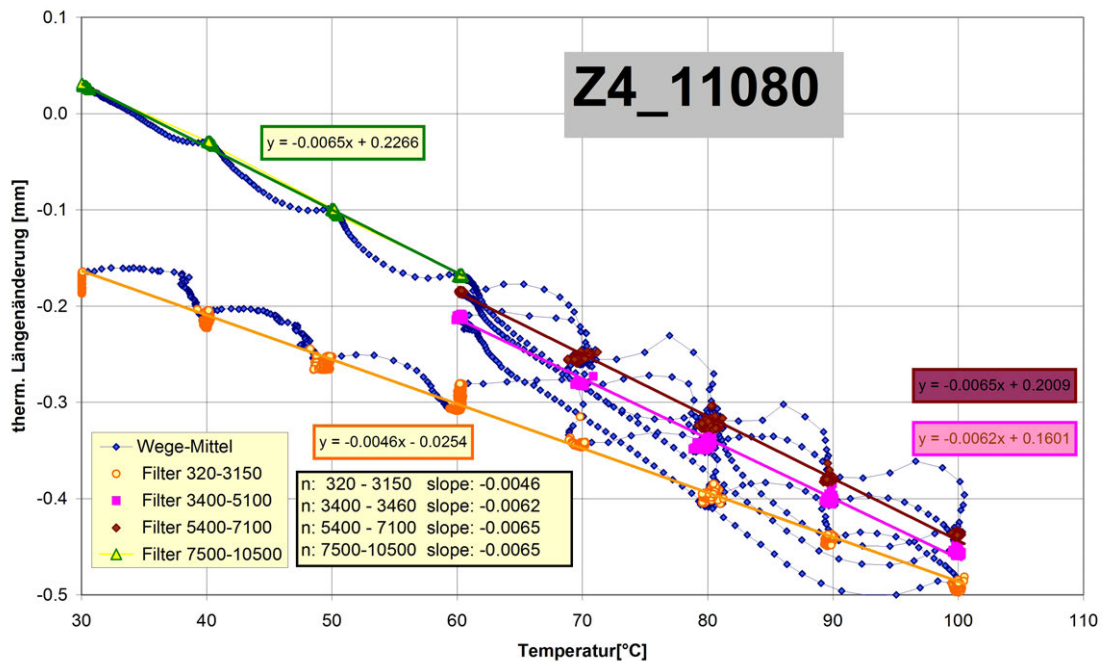


Abb. 102: Lineare Anpassung zur Ermittlung der T-Empfindlichkeit für den Steinsalz-Prüfkörper (11080) und an die Messwerte für das Gesamt-System. Durch den Daten-Filter werden nur die Messwerte innerhalb einer Phase mit konstanter Temperatur berücksichtigt. Die lineare Anpassung erreicht asymptotisch erst im dritten Zyklus des Temperatur-Programms den stabilen Endwert.

Die geringere Temperaturempfindlichkeit bei der thermisch induzierten Längenänderung wird wegen der isostatischen Einspannung mit $p_{iso} = 20 \text{ MPa}$ nicht auf eine primär vorhandene Auflockerung des Prüfkörpers zurückgeführt. Die Dichtebestimmung aus Vermessen und Wiegen hatte vergleichsweise hohe Werte von $\rho_o(11079) = 2.205 \text{ g/cm}^3$ und $\rho_o(11080) = 2.216 \text{ g/cm}^3$ ergeben. Nach Versuchsende wurden die nur geringfügig höheren Werte von $\rho_{\infty}(11079) = 2.206 \text{ g/cm}^3$ und $\rho_{\infty}(11080) = 2.221 \text{ g/cm}^3$ ermittelt. Nach dem Ausbau des Prüfkörpers 11080 wurde auf der Innenseite des Gummimantels, der während des Versuchs zum Schutz gegen das Öl in der Druckzelle dient, ein dünner Film wässriger Lösung gefunden. Bei der chemischen Analyse des Fluidfilms konnten keine KW-Verbindungen nachgewiesen werden (pers. Mitteilung Scheeder, BGR). Zusätzliche gefügekundliche Untersuchungen an diesem Material sind angelaufen.

10.9 Zusammenfassung

Generell besteht das Prozessverständnis zur quantitativen Bewertung der Relevanz bzw. Signifikanz der mechanisch und thermisch induzierten Einwirkungen von KW-Einschlüssen auf die Gebirgseigenschaften. Die darauf aufbauenden Formulierungen von Stoffgesetzen sind im Prinzip vorhanden und für Modellberechnungen verfügbar. Allerdings müssen

die vorliegenden Daten durch komplexe Untersuchungen an frischem Probenmaterial verbessert werden, um die Parameter in den Stoffgesetzformulierungen und hier insbesondere den hydraulischen Wirkfaktor (Biot-Faktor) quantifizieren zu können. Die experimentellen Voraussetzungen zur sachgerechten Umsetzung der methodischen Herangehensweise und für die Verbesserung der Datengrundlage sind vorhanden. Das für die Untersuchungen erforderliche Bohrkernmaterial wird im Zuge der Weitererkundung Gorleben z. Zt. entnommen. Die komplementären Gefügeuntersuchungen insbesondere auch im Hinblick auf das Vorkommen von KW-Einschlüssen in Verbindung mit Einschlüssen von wässrigen Lösungen sind in der BGR inzwischen angelaufen.

11 Experimente zur Analyse des Verhaltens der Kohlenwasserstoffe im Salzgestein bei Aufheizung

11.1 Problemstellung

Bei einer Einlagerung von wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen in den Salzstock Gorleben käme es zu einer Aufheizung des Salzgesteins. In Abhängigkeit von der Zwischenlagerungszeit und der Zusammensetzung der Abfälle sowie vom Endlagerkonzept, muss mit einer anfänglichen Temperatur von bis zu 200 °C im unmittelbaren Umfeld der Einlagerungsgebäude gerechnet werden. Durch die erhöhten Temperaturen können Migrationsprozesse von Fluiden und KW im Steinsalz initiiert bzw. die Geschwindigkeit von Migrationsprozessen erhöht werden, wodurch auch etwaige Freisetzungen von KW in die bergmännischen Auffahrungen beeinflusst werden können.

Weiterhin können bei erhöhten Temperaturen chemische Reaktionen zwischen KW und Bestandteilen der Salzgesteine ablaufen. Eine mögliche Reaktion ist die thermochemische Sulfatreduktion (TSR, siehe z.B. BILDSTEIN et al. 2001). Bei der TSR handelt es sich um eine Redox-Reaktion bei der CaSO_4 (z. B. in Form von Anhydrit) als Oxidationsmittel für die KW dient. Als Produkte entstehen dabei H_2S , H_2O und auch CaCO_3 . Die Brutto-Reaktionsgleichung der thermochemischen Sulfatreduktion ist in Gl. (28) dargestellt (BILDSTEIN et al. 2001, WORDEN & SMALLEY 1996, CROSS et al. 2004):



Es handelt sich um ein komplexes, mehrstufiges Redoxsystem, in dem auch andere Produkte sowie unterschiedliche Nebenprodukte gebildet werden können (siehe z. B. GOLDSTEIN & AIZENSHTAT 1994, WORDEN et al. 1996). Nach Ansicht verschiedener Autoren reicht eine Temperatur von 200 °C bereits aus, um die thermochemische Sulfatreduktion

zu induzieren (MACHEL 2001, CROSS et al. 2004). In den deutschen Erdgasfeldern wird bereits bei Temperaturen größer 130 °C ein Abbau von Methan und die Bildung von H₂S beobachtet (MITTAG-BRENDEL 2000).

Neben der thermochemischen Sulfatreduktion kann es außerdem zu Crackreaktionen kommen, bei denen langkettige KW zu KW mit kürzerer Kettenlänge gespalten werden. In Gl. (29) ist dies beispielhaft für Octan mit Butan und Buten als Produkte dargestellt:



Der Crackprozess liefert dabei aus 1 Mol Octan jeweils 1 Mol Butan und 1 Mol Buten. Das Cracken von KW geht folglich mit einer Volumenzunahme einher, welche bei einem begrenzten Platzangebot zu einer Druckzunahme führt. Ein Endprodukt des Crackens von KW ist Methan (CH₄). Die Einlagerungstemperatur von ca. 200 °C liegt deutlich unterhalb des Temperaturintervalls, welches für das thermische Cracken von KW benötigt wird (450 °C bis 800 °C). Bei langandauernder Temperatureinwirkung können allerdings signifikante Stoffumsätze auch bei geringeren Temperaturen nicht ausgeschlossen werden. Möglicherweise katalysieren auch Beimengungen im Steinsalz die Crackprozesse. Da aufgrund der zu erwartenden Korrosion der Einlagerungsbehälter langfristig Wasserstoff gebildet werden könnte, ist auch das Auftreten von Hydrocracking nicht auszuschließen.

Das Salzgestein des Salzstocks Gorleben enthält verschiedene gasförmige Verbindungen, unter anderem Sauerstoff (PROHL 1998), welcher möglicherweise zu einer Partial- bzw. Totaloxidation von KW führen kann. Eine weitere Sauerstoffquelle stellt das Grubengebäude mit seinen Auffahrungen und der Bewetterung dar. Gleichung (30) zeigt beispielhaft die Totaloxidation von Propan:



Auch die Totaloxidation kann mit einer Volumen- bzw. Druckzunahme einhergehen. Neben der Totaloxidation kann auch die Partialoxidation von KW ablaufen, welche beispielsweise zur Bildung von Aldehyden, Ketonen, Alkoholen und Carbonsäuren führen kann.

Im Rahmen des AP sind umfangreiche Aufheizexperimente im Hochdruckreaktor und Analysen mittels Heitzisch-Mikroskop angelaufen.

11.2 Experimentelle Ansätze für die Aufheizexperimente

Zur Klärung der in Kap. 11.1 skizzierten Fragestellungen werden unterschiedliche experimentelle Vorgehensweisen beitragen. Dies sind einerseits das Aufheizen von 1000g schweren Prüfkörpern, die aus den KW-Kurzbohrungen entnommen wurden (siehe Kap. 4 und 5), andererseits auch Experimente an modellhaften Reaktionssystemen, für die synthetische, chemisch reine Salze wie z. B. NaCl, CaSO₄, MgCl₂ und Na₂SO₄ verwendet werden. Reine KW wie z. B. Octan dienen als Modell-KW. Durch die Experimente können ablaufende, chemische Reaktionen deutlich besser identifiziert werden als es an dem komplexen KW-Gemisch, wie es im Steinsalz des Salzstockes Gorleben vorkommt, möglich wäre. Neben den chemisch reinen Salzen werden für die Untersuchungen an Modellsystemen auch pulverisierte Proben aus dem Hauptsalz des Salzstocks Gorleben als Referenz verwendet.

11.2.1 Aufheizversuche an Hauptsalz-Prüfkörpern

Für die Aufheizversuche an Hauptsalz-Prüfkörpern steht ein im Rahmen des AP von der BGR angeschaffter Hochdruckreaktor der Firma Parr (Parr 4681) zur Verfügung (Abb. 103). Dieser ermöglicht es, Aufheizexperimente unter Gebirgsdruckbedingungen durchzuführen. Ein möglicher Aufbau des geplanten Messarbeitsplatzes ist in Abb. 104 dargestellt.



Abb. 103: Hochdruckreaktor für Aufheizversuche an Hauptsalz-Prüfkörpern aus dem Salzstock Gorleben.

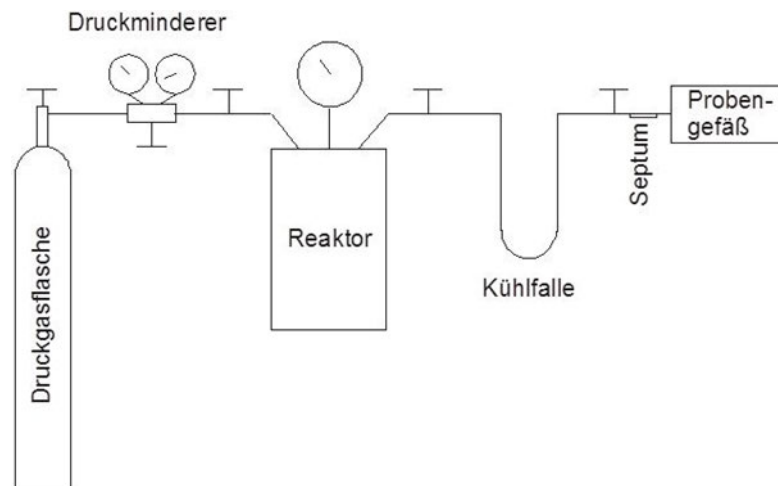


Abb. 104: Möglicher Aufbau des Messarbeitsplatzes für die Aufheizversuche an den Hauptsalz-Prüfkörpern.

Ziel der Arbeiten ist es, Temperatur induzierte Reaktionsprozesse von im Salz eingeschlossenen KW zu untersuchen und die temperaturabhängige Freisetzung von KW bzw. von Reaktionsprodukten zu bestimmen. Hierfür werden Prüfkörper über verschieden lange Zeiträume bei unterschiedlichen Temperaturen aufgeheizt und die dabei freigesetzten Verbindungen analysiert. Vor Beginn der Aufheizversuche werden aus dem unmittelbaren Umfeld dieser Kernabschnitte entnommene Probenkörper sowie nach Abschluß der Experimente die aufgeheizten Proben gefügekundlich und mikrostrukturell untersucht. Die Aufheizversuche können sowohl in einer Inertgasatmosphäre, (beispielsweise Helium) wie auch in einer Luftatmosphäre erfolgen. Die Einflussfaktoren, die während der Versuche verändert werden, sind Druck, Temperatur und Reaktionszeit. Das zu untersuchende Temperaturintervall wurde auf ca. 313 K (Gebirgstemperatur) bis ca. 573 K festgelegt und liegt somit partiell oberhalb der maximal angenommenen Einlagerungstemperatur von 473 K. Da die Reaktionszeiten im Experiment auf einen Zeitraum von wenigen Wochen begrenzt sind, werden in ausgewählten Versuchen zur Annäherung an die realen Verhältnisse höhere Temperaturen im Experiment veranschlagt. Das in den Versuchen verwendete Druckintervall umfasst den Druckbereich zwischen dem Normal- und dem Gebirgsdruck.

Nach den Aufheizversuchen werden die Prüfkörper in einzelne Abschnitte zersägt und an diesen die Zusammensetzung und der Gehalt der KW ermittelt. Zusätzlich ist geplant, in einige der Prüfkörper kleine Bohrungen einzubringen und diese mit einem Modell-KW (z. B. Octan) zu befüllen. Nach dem Aufheizen einer dementsprechend präparierten Probe ist die KW-Verteilung im Prüfkörper zu analysieren und kann möglicherweise dazu verwendet werden, die ablaufenden Migrationsprozesse besser zu verstehen. Ergänzend zu diesen Versuchen können auch flüssige KW aus dem Salzstock Gorleben in die Prüfkörperbohrungen eingebracht werden.

11.2.2 Aufheiz-Experimente an Modellsystemen in Goldkapseln

Für die Aufheiz-Experimente an Modellsystemen mit Goldkapseln werden chemisch reine Salze wie NaCl, Na₂SO₄, MgSO₄ und MgCl₂ eingesetzt. Als Modell-KW wird u. a. Octan verwendet. Ergänzend können gemahlene Steinsalzproben oder flüssige KW aus Gorleben an Stelle eines Modell-KW verwendet werden.

Die zu variierenden Einflussfaktoren sind Reaktionstemperatur, Druck, Reaktionsdauer und Wassergehalt. Auch die BET-Oberfläche (spezifische Oberfläche) ist eine wichtige Einflussgröße, die systematisch zu untersuchen ist. Hierfür wird die BET-Oberfläche von Salzproben durch Aufmahlen mittels Kugelmühle bei unterschiedlicher Mahldauer verändert. Auch ist geplant die Gasatmosphäre in den Goldkapseln zu variieren. Die Analyse erfolgt durch einen mit Flammenionisationsdetektor ausgerüsteten Headspace-GC. Die Goldkapseln werden mit Salzproben und den Reaktanden befüllt und anschließend in einer Luftatmosphäre oder einer Glovebox mit Stickstoffatmosphäre mittels Zange verschlossen und verschweißt. Ein Probenhalter mit entsprechend verschweißten Goldkapseln ist in Abb. 105 dargestellt.



Abb. 105: Halter für Proben für die geplanten Modellreaktionen in verschweißten Goldkapseln.

Die eigentlichen Reaktionen finden in einem Hochdruckreaktor der Firma PARR (Parr 4767) statt. Nach der Reaktion werden die Goldkapseln äußerlich gereinigt und in ein Headspace-Vial überführt, geöffnet und die Gasphase im Vial gaschromatographisch untersucht. Für ausgewählte Proben werden auch die höher siedenden KW nach Flüssigextraktion gaschromatographisch untersucht.

11.2.3 Aufheizversuche an Dickschliffen

Über Aufheizversuche an ausgewählten Proben soll der Einfluss steigender Temperaturen auf die Fluidverteilung und -migration im Knäuelsalz untersucht werden. Hierzu werden vorformatierte Salzklötzchen auf 200 °C, 300 °C und 350 °C erhitzt und im Anschluss aus diesen Schliffe angefertigt. Die Dickschliffpräparation erfolgt ebenso von nicht aufgeheizten Äquivalenten. Das Aufheizen der "200 °C-Proben" erfolgt bislang in einem Wärmeofen, der nach Beendigung der Heizphase ausgeschaltet wird. Die Haltezeiten bei Maximaltemperatur werden bei den auf 300 °C und 350 °C aufzuheizenden Proben auf 6 Stunden festgelegt, bei den auf 200 °C aufzuheizenden Proben auf 16 bis 19 Stunden.

Für die hohen Temperaturen (300 °C und 350 °C) wird die Salzdeformationsanlage des Instituts für Geowissenschaften der Universität Frankfurt/M. verwendet, an der computergesteuerte Heiz- und Kühlraten (20 °C/h) festgelegt werden können, welche einen schonenderen Aufheiz- und Abkühlvorgang der Salzproben ermöglichen (Abb. 106). Die Zieltemperaturen sind teils höher angelegt als die bei Einlagerung radioaktiven Abfalls zu erwartende Temperaturerhöhung im Salzstock Gorleben (maximal 200 °C, WEBER et al. 2011), um Veränderungen in den Proben deutlicher erkennen zu können. Der Einfluss erhöhter Temperaturen auf die Fluideinschlüsse wird ergänzend auch unter Verwendung eines Heiz-Kühl-Tisches untersucht.

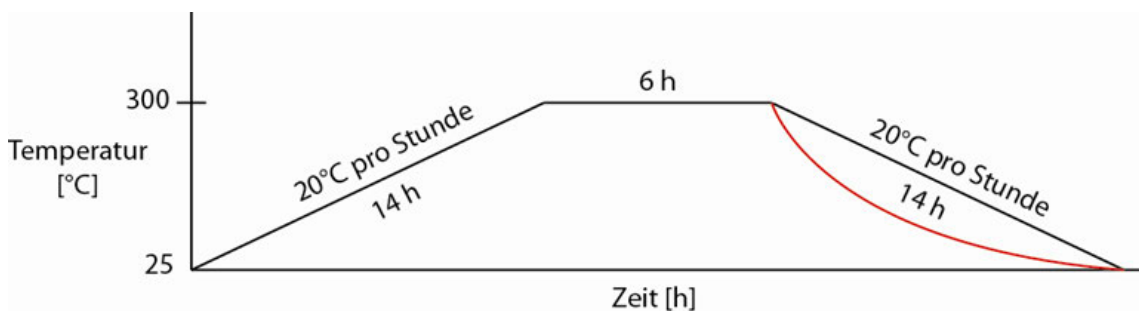


Abb. 106: Temperaturprofil einer auf 300 °C aufgeheizten Probe. Computergesteuerte Aufheiz- und Abkühlraten schonen die Salzproben im Hinblick auf Rissbildung durch thermisch bedingte Ausdehnung, bzw. Kontraktion. Die rote Linie beschreibt einen natürlichen, nicht kontrollierten Abkühlverlauf, wie er bei den auf 200 °C aufgeheizten Proben bedingt durch das Abschalten des Wärmeofens entsteht.

11.3 Erste Ergebnisse der Aufheizversuche unter Normaldruck

Aufheizversuche sind bis zum gegenwärtigen Zeitpunkt lediglich unter Normaldruck am Institut für Geowissenschaften der Universität Frankfurt/M. an drei Kernabschnitten durchgeführt worden (Probenkörper: 652.010_2, 655.016_2 und 653.007). Die aus den Probenkörpern gewonnenen 15 Teilproben wurden auf 200 °C, 300 °C und 350 °C erhitzt.

Hierbei wurden Haltezeiten der maximalen Temperatur T_{\max} zwischen 6 und 19 Stunden eingerichtet (Tab. 17).

Tab. 17: Aufheizversuche von 15 Proben. Der Gradient beschreibt die Aufheiz- und Abkühlrate

Probe	T_{\max} [°C]	Haltezeit T_{\max} [°C]	Gradient [°C/h]	Gesamtdauer [h]
655.016_2a	200	16	200	18
655.016_aa	200	16	200	18
653.007a	200	16	200	18
653.007aa	200	16	200	18
652.010_2a	200	16	200	18
652.010_2aa	200	16	200	18
655.016_2d	200	19	200	20
653.007d	200	19	200	20
652.010_2d	200	19	200	20
655.016_2_350	350	6	20	38
653.007_350	350	6	20	38
652.010_2_350	350	6	20	38
655.016_2_300	300	6	20	34
653.007_300	300	6	20	34
652.010_2_300	300	6	20	34

Die "200 °C-Proben" zeigen keine auffälligen Unterschiede zu den nicht aufgeheizten Proben. Die vorher teilweise imprägnierten Klötzchen wurden durch das Aufheizen gelblich bis bräunlich verfärbt, da das Einbettungsharz keine hohen Temperaturen verträgt. Dabei können besonders poröse Bereiche identifiziert werden, die bei der Imprägnierung mit dem mobilisierten Harz ausgefüllt werden und im Dünnschliff als braune Schleier zu erkennen sind. Vorzugsweise im Bereich von Präparationsrissen und Anhydritnestern existieren Bereiche erhöhter Porosität.

Die "300 °C-Proben" zeigen im Wesentlichen die gleichen Merkmale wie die "350 °C-Proben". Beide Probenreihen zeichnen sich durch eine Verdunkelung der Anhydriteinschlüsse aus, die durch eine Umverteilung und eventuelle Phasenänderung der Fluide bedingt sein könnte. Dies zeigt sich durch ein undeutliches Verschmieren der Fluidphasen. Hierdurch sind weniger sauber voneinander getrennte Tropfen zu erkennen, sondern oftmals schlierenförmige Fluidverteilungen (Abb. 107a). Weiterhin ist zu beobachten, dass die

Anzahl der Fluidtropfen auf Anhydriteinschlüssen im Zuge einer temperaturinduzierten Tropfenvergrößerung abnehmen kann (Abb. 107c). So kommt es vor, dass an kleinen Anhydriteinkristallen nur ein einziger Tropfen anhaftet (Abb. 107a, rechts oben). Ob eine thermisch bedingte Phasenänderung der Kohlenwasserstoffe (z. B. durch Crackprozesse) bei der Schwärzung eine Rolle spielt, kann zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht eindeutig geklärt werden. Anhand der Dickschliffanalysen ist zu vermuten, dass eine zunehmende Rissbildung im Salz bei deutlichem Temperatureinfluss auftritt. Diese ist vermutlich auf die (unnatürlich schnelle) Abkühlphase der warmen Salzproben zurückzuführen, welche sich durch Knackgeräusche im Probenmaterial bemerkbar macht.

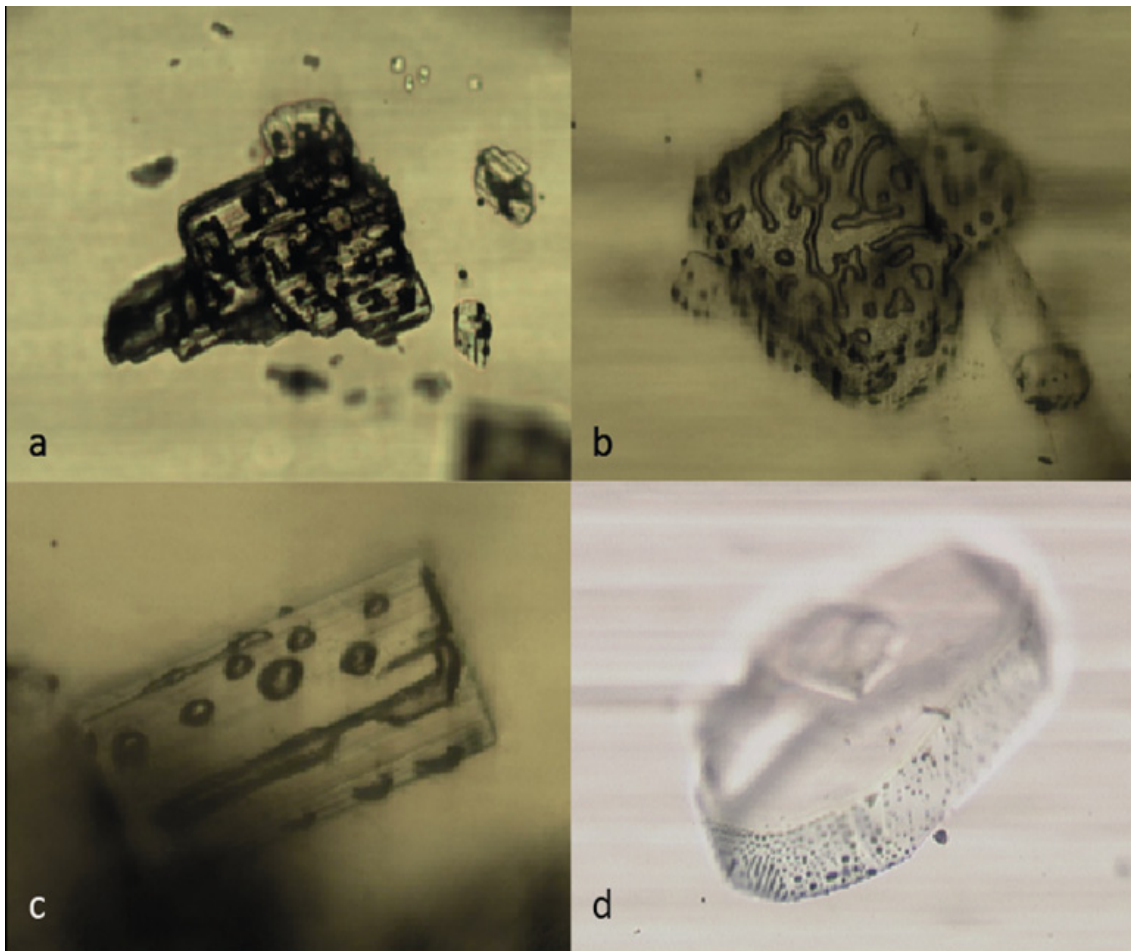


Abb. 107A: Fluidverteilungen auf intrakristallinen Anhydriteinschlüssen in getemperten Salzproben. Fluidphasen schwärzen die Oberflächen des Kristalls nach der Aufheizung (RB653.007_350). Bildbreite 500 µm. Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 107B: Durch Aufheizung der Proben können Fluidphasen durch eine Umverteilung variabler auftreten (RB652.010_2_350). Bildbreite 400 µm. Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 107C: Die Temperaturerhöhungen sorgen für „wachsende“ Fluidtropfen. Ihre Anzahl nimmt dadurch ab, bis teilweise nur noch einzelne Tropfen übrigbleiben (sehr kleine Einschlüsse bei a) rechts oben). Bildbreite 180 µm. Photo: N. Thiemeyer.

Abb. 107D: Nicht aufgeheizte Probe zum Vergleich. Die Fluidphasen sind in ihrer Tropfenform einheitlich und zahlreicher (RB661.006s). Bildbreite 500 µm. a) bis d) unter parallelen Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.

Der Einfluss der Temperatur auf die Fluidphasen an Halit/Halit-Korngrenzen ist bis jetzt nicht eindeutig festzustellen. Dass Fluidphasen durch eine Temperaturerhöhung mobilisiert werden, zeigt sich durch ein ungeordnetes Bild von Flüssigkeitseinschlüssen entlang von Korngrenzen. Da es sich jedoch nicht um ein abgeschottetes Fluidvolumen wie bei den Anhydriteinschlüssen in der Salzmatrix (i. e. S. geschlossenes System) handelt, sondern eher um ein „Fluidnetzwerk“, kann das Ausmaß der beobachteten Mobilisierung der Fluidphasen noch nicht weiter präzisiert werden. Zudem können ehemals intakte Korngrenzen durch das starke Erhitzen der Probe aufreißen und somit größere Fluidvolumina führen.

Eine vermutete Mikrorissbildung durch eine temperaturinduzierte Druck-/Volumenzunahme der KW-Gase, wie von SCHOENHERR et al. (2007a, b) für Gesteine aus tief versenkten Salzstrukturen im Oman mit deutlich höheren KW-Gehalten als in Gorleben beschrieben, oder durch sich ausdehnende Anhydritkristalle innerhalb der Salzmatrix (Dekrepitierung, siehe ZULAUF et al., 2010) konnte bisher bei keiner der Proben beobachtet werden.

Die bisher durchgeführten Aufheizversuche zeigen, dass durch eine Temperaturerhöhung eine Fluidmigration (inklusive KW) nur im Bereich von Korngrenzen und Rissen induziert werden kann. Intrakristallin gebundene Fluide bleiben durch ihre isolierte Position ortsfest.

12 Zusammenfassung

Im Rahmen dieses ersten Zwischenberichtes zum Arbeitspaket 9GE 332300000 - „Untersuchungen von Kohlenwasserstoffen im Erkundungsbergwerk Gorleben“ werden die im Zeitraum März 2011 bis Mitte Dezember 2011 erzielten Untersuchungsergebnisse zur Kohlenwasserstoff-Führung des Staßfurt-Hauptsalzes im Bereich des Querschlages 1 West im Salzstock Gorleben dargestellt. Neben der Ermittlung der Gehalte und räumlichen Verteilung der KW durch speziell dafür im EB1 gestoßene Erkundungs- und Probennahmebohrungen bilden gefügekundlich-mikrostrukturelle und organochemische Analysen sowie geomechanische Laborexperimente, Aufheizversuche und geophysikalisch-geotechnische In-situ-Messungen die Schwerpunkte der im AP zu realisierenden Arbeiten.

Zur Erforschung der Verteilung der KW im Mikrogefüge der Salzgesteine und zur Klärung der KW-Speichermechanismen wird ein breites Spektrum von Untersuchungsmethoden eingesetzt, wie z. B. mikrostrukturelle Analysen von Dünn- und Dickschliffen, Raman-Spektroskopie, Computertomographie, EBSD-Messungen, Paläopiezometrie mittels Subkornanalysen und die Fluoreszenzmikroskopie. Zwecks Klärung der Auswirkungen von

durch eine Abfalleinlagerung hervorgerufenen Aufheizprozessen auf die mechanischen Eigenschaften des Steinsalzes und die Barrierenintegrität werden triaxiale Kriechversuche, Aufheizversuche in einem speziellen Hochdruckgenerator und Heiz-Kühltisch-Messungen durchgeführt.

Licht- und fluoreszenzmikroskopische Untersuchungen an den Hauptsalzproben belegen, dass die KW überwiegend an die Korngrenzen von Steinsalz- und Anhydritkristallen in rekristallisierten Knäuelsalzbereichen sowie untergeordnet in Kapillaren von Anhydritkristallen oder in sekundären, auf den Bohrprozess und/oder die Probenpräparation zurückzuführenden Rissen gebunden sind. Nur sehr vereinzelt werden gering dimensionierte KW-Einschlüsse im Streifensalz (z2HS2) und im Kristallbrockensalz (z2HS3) festgestellt, im Kristallbrockensalz bisher ausschließlich in einem wenige Zentimeter mächtigen, stark boudinierten Anhydritband.

An gleichmäßig über den Querschlag 1 West verteilten Hauptsalzproben wurden die Gehalte und die molekulare Zusammensetzung der im Salzgestein vorkommenden KW bestimmt. Dazu wurden neue Methoden zur verbesserten Beprobung und Analyse von KW in Kernproben aus eigens dafür gestoßenen 6 m langen Probennahme-Kurzbohrungen entwickelt. Die Gehalte an KW variieren zwischen den Bohrungen und innerhalb der Bohrungen stark und reichen von 0,02 bis 443 mg/kg Salzgestein. Die angetroffenen höchsten Gehalte an KW sind auf migrierte flüssige KW zurückzuführen.

Die KW-führenden Gesteine sind durch intensive Rekristallisationen der Mikrogefüge und das vereinzelte Vorkommen von Karbonat- und Eisensulfidmineralen charakterisiert. Mikrostrukturelle Untersuchungen erbrachten bisher keine Belege für die Bindung größerer KW-Einschlüsse an Bereiche, die durch erhöhte Differentialspannungen (bestimmt mittels Subkornanalyse) gekennzeichnet sind. Die KW sind sehr ungleichmäßig und nester- bzw. schlierenartig v. a. über das Knäuelsalz (z2HS1) verteilt. Zur Klärung der Größe der KW-Vorkommen und der KW-Speichermechanismen im Salzgestein sind u. a. umfangreiche In-situ-Messungen in speziell dafür eingerichteten Packerbohrungen sowie computertomographische Untersuchungen von Kernproben zur Erfassung des fluidgefüllten Porenraumes begonnen worden.

Vor dem Hintergrund der bisher durchgeführten Arbeiten erfolgt eine vorläufige Interpretation der Beobachtungen und Daten zur Herkunft der KW. Die in früheren Arbeiten der BGR getroffenen Aussagen zur Genese der KW im Salzstock Gorleben werden bestätigt. Ausgehend von der räumlichen Anordnung bzw. Position der KW im Mikrogefüge der Salzgesteine und basierend auf den Ergebnissen der organo- und isotopengeochemischen KW-Analysen handelt es sich bei den nachgewiesenen KW überwiegend nicht um einen primären Bestandteil des Hauptsalzes. Die KW stellen nachträglich und vermutlich entlang

von Scher- und Bewegungsbahnen bzw. temporär offenen Rissen in das halitische Salzgestein eingedrungene gasförmige und flüssige KW-Gemische dar. Durch die an den Aufstieg des z2HS, in der Frühphase der Halokinese, gebundene Deformation migrierten die aus den liegenden Partien der Zechstein-Formation (Zechstein-Kalk der Staßfurt-Folge) mobilisierten KW in das Hauptsalz, insbesondere in den liegenden Teil, d. h. in das Knäuelsalz. Die durch thermokatalytische Prozesse aus den organischen Bestandteilen des Zechsteinkarbonats gebildeten gasförmigen und flüssigen KW stiegen entlang von Scherzonen bzw. Bewegungsbahnen in das Hauptsalz auf, wo sie zusammen mit den primären Restlösungen an die Korngrenzen der Halitkristalle und z. T. in die anhydritreicheren Partien verdrängt bzw. in den Kluftspeichern der Anhydritlagen gespeichert wurden. Die Mobilisation der KW, induziert durch deviatorische Spannungen bzw. Deformationsprozesse, erfolgte vermutlich immer zusammen mit salinärer Restlösung entlang von Korngrenzen sowie temporär offenen Rissen durch das Salzgestein.

Die mitgeteilten Untersuchungsergebnisse repräsentieren einen Zwischenstand der Arbeiten, die bis Ende 2013 fortgeführt werden.

BUNDESANSTALT FÜR GEOWISSENSCHAFTEN UND ROHSTOFFE HANNOVER

Im Auftrag



(Dr. V. Bräuer)

- Direktor und Professor -
Abteilungsleiter B3
Projektleiter Endlagerung



(Dr. V. Steinbach)

- Direktor und Professor -
Abteilungsleiter B1



(G. Enste)

- Direktor und Professor -
Fachbereichsleiter B3.1



(Dr. J. Hammer)

- Geologischer Oberrat -
Arbeitsbereichsleiter B3.1.1



(Dr. C. Ostertag-Henning)

- Wissenschaftlicher Rat -

Literaturverzeichnis

- AMELUNG, P. & SCHUBERT, J. (2000): Dokumentation der Kondensatvorkommen im Hauptsalz der Staßfurt-Folge (Arbeitspaket 9G4413000). DBE, Peine, 30 S., 1 Anlage.
- BERNARD, B. B., BROOKS, J. M. & SACKETT, W. M. (1976): Natural gas seepage in the Gulf of Mexico. *Earth and Planet. Sci. Lett.* 31, 45-54.
- BERNER, U. & FABER, E. (1996): Empirical carbon isotope/maturity relationships for gases from algal kerogens and terrigenous organic matter, based on dry, open-system pyrolysis. *Org. Geochem.* 10/11, 947-955.
- BfS (2002): Verzeichnis der Vorkommen salinärer Lösungen im Erkundungsbergwerk Gorleben sowie in einigen Bereichen des Salzstocks Gorleben (Lösungsverzeichnis Gorleben). 1. Fortschreibung: Datenerfassung bis 30.09.2000. Bundesamt für Strahlenschutz, Salzgitter, 1183 S., 47 Abb., 16 Tab., 4 Anl.
- BfS (2009): Endlagerprojekt Gorleben. Konzept für die Wiederaufnahme des Endlagerprojektes Gorleben nach Ablauf des Moratoriums. Bundesamt für Strahlenschutz, Salzgitter, Stand: 09.07.2009, 134 S.
- BILDSTEIN, O., WORDEN, R. H. & BROSE, E. (2001): Assessment of anhydrite dissolution as the rate-limiting step during thermochemical sulfate reduction. *Chemical Geology* 176, 173-189.
- BORNEMANN, O., BÄUERLE, G., BEHLAU, J. & MINGERZAHN, G. (2001): Geologische Bearbeitung der Erkundungssohle (Geologie, Mineralogie, Geochemie). 1. Geologischer Ergebnisbericht EB1. BGR-Bericht, Hannover, Tagebuch-Nr. 10214/01, 111 S.
- BORNEMANN, O., BEHLAU, J., FISCHBECK, R., HAMMER, J., JARITZ, W., KELLER, S., MINGERZAHN, G. & SCHRAMM, M. (2008): Standortbeschreibung Gorleben, Teil 3: Ergebnisse der über- und untertägigen Erkundung des Salinars. *Geologisches Jahrbuch C73*, 211 S.
- CARTER, N. L., HORSEMAN, S. T., RUSSELL, J. E. & HANDIN, J. (1993): Rheology of rocksalt. *J. Struct. Geol.* 15, 1257-1271.
- CRAIG, S. H. (1957): Isotopic Standards for carbon and oxygen and correction factors for mass-spectrometric analysis of carbon dioxide. *Geochimica Cosmochim. Acta* 12, 139-142.

-
- CRISTESCU, N. & HUNSCH, U. (1998): Time effects in rock mechanics. Series: Materials, modelling and computation. John Wiley & Sons, Chichester (UK), 342 pp.
- CROSS, M. M., MANNING, D. A. C., BOTTRELL, S. H. & WORDEN R. H. (2004): Thermochemical sulphate reduction (TSR): experimental determination of reaction kinetics and implications of the observed reaction rates for petroleum reservoirs. *Organic Geochemistry* 35, 393-404.
- DUMKE, I., FABER, E. & POGGENBURG, J. (1989): Determination of Stable Carbon and Hydrogen Isotopes of Light Hydrocarbons. *Analytical Chemistry* 61/19, 2149-2154.
- FABER, E., GERLING, P. & BORNEMANN, O. (1996): Gasproben aus den Schächten Gorleben 1 und 2 sowie EB1. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover, Zwischenbericht, 7 S.
- FERRARO, J. R. & NAKAMOTO, K. (1994): *Introductory Raman Spectroscopy*. San Diego (Academic Press.), 370 pp.
- FISCHER, M. (2000): Gefügekundliche Untersuchung von Steinsalz im Hinblick auf die Verteilung und Bindungsform von Kohlenwasserstoffen und die Bestimmung des Volumenanteils der Kohlenwasserstoff-Einschlüsse. Dipl.-Arb., Institut für Geowiss. Uni Kiel, 59 S.
- FÖRSTER, T. (1982): *Fluoreszenz organischer Verbindungen*. Göttingen.
- FRANSSON, R.C.M.W. (1993): Rheology of synthetic rock salt with emphasis on the influence of deformation history and geometry on the flow behavior. PhD thesis, Rijksuniversiteit Utrecht.
- FREYER, H. D. (1978): Degradation Products of Organic Matter in Evaporites containing trapped Atmospheric Gases. *Chemical Geology* 23, 293-307.
- GERLING, P., BEER, W. & BORNEMANN, O. (1991): Gasförmige Kohlenwasserstoffe in Evaporiten des deutschen Zechsteins. *Kali und Steinsalz* 10, 376-383.
- GERLING, P. & FABER, E. (2001): Dokumentation der chemischen Analysen von gasförmigen und flüssigen Kohlenwasserstoffen. BGR-Bericht, Hannover, Tagebuch-Nr. 10717/01, 20 S.
- GERLING, P., FABER, E. & WEHNER, H. (2002): Interpretation der chemischen Analysen von gasförmigen und flüssigen Kohlenwasserstoffen. BGR-Bericht, Hannover, Tagebuch-Nr. 12243/02, 82 S.

- GERLING, P., WHITICAR, M. J. & FABER E. (1988): Extreme Isotope Fractionation of Hydrocarbon Gases in Permian Salt. *Organic Geochemistry* 13, 335-341.
- GERLING, P., PISKE, J., RASCH, H.-J. & WEHNER, H. (1996): Paläogeographie, Organofazies und Genese von Kohlenwasserstoffen im Staßfurt-Karbonat Ostdeutschlands - (2) Genese von Erdölen und Erdölbegleitgasen. *Erdöl Erdgas Kohle* 112 (4), 152-156.
- GIECK, K. (1984). Technische Formelsammlung. 28. deutsche Auflage, Gieck Verlag, Heilbronn.
- GOLDSTEIN, T. P. & AIZENSHTAT, Z. (1994): Thermochemical sulfate reduction, a review. *Journal of thermal analysis* 42, 241-290.
- GRISHINA, S., PIRONON, J., MAZUROV, M., GORYAINOV, S., PUSTILIKOV, A., FON-DER-FLAAS, G. & GUERCI, A. (1998): Organic inclusions in salt. Part 3. Oil and gas inclusions in Cambrian evaporite deposit from East Siberia. A contribution to the understanding of nitrogen generation in evaporates. *Organic Geochemistry* 28, 297-310.
- GROPP, W.E. (1919): Gasvorkommen in den Kalibergwerken in den Jahren 1907 bis 1917. *Kali* 13, 33-42.
- GRÜBLER, G. (1984): Gasvorkommen in den Schachtvorbohrungen Go 5001 und Go 5002. BMFT-Publikation Entsorgung 3: Bericht von einer Informationsveranstaltung des Bundes vor dem Schachtabteufen, Salzstock Gorleben, Bonn, 165-181, 6 Abb.
- HAGEMANN, R., NIEF, G. & ROTH, E. (1970): Absolute Isotopic Scale for Deuterium Analysis of Natural Waters, Absolute D/H Ratio for SMOW. *Tellus* 22, 712-715.
- HAMMER, J., HESSER, J., MINGERZAHN, G., BEHLAU, J. & SCHUSTER, K. (2012): Projekt Weitererkundung Gorleben. Planung der Erkundungsarbeiten im EB1. Zwischenbericht 2011. Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover.
- HAMPEL, A. & SCHULZE, O. (2007): The Composite Dilatancy Model: A constitutive model for the mechanical behaviour of rock salt. In: M. WALLNER, K.-H. LUX, W. MINKLEY & H.R. HARDY, Jr. (eds.): *The Mechanical Behaviour of Salt. Understanding of THMC Processes in Salt*. Hannover 2007, Taylor & Francis, London, . 99-107.
- HEMPEL, D. (1974): Neuere Erkenntnisse über das Auftreten natürlicher brennbarer Gase in Kaligruben der DDR. *Neue Bergbautechnik* 4, 592-596.

-
- HERRMANN, A. G. (1987): Gase in marinen Evaporiten. Technische Universität Clausthal-Zellerfeld, 137 S., 2 Abb., 3 Tab.
- HERRMANN, A.G. & KNIPPING, B. (1993a): Waste Disposal and Evaporites – Contributions to Long-Term Safety. Lecture Notes in Earth Sciences, Berlin (Springer-Verlag) 45, 193 pp.
- HERRMANN, A. G. & KNIPPING, B. (1993b): Fluide Komponenten als Teile des Stoffbestandes der Evaporite im Salzstock Gorleben – Vorkommen, Herkunft, Entstehung und Wechselwirkung mit den Salzgesteinen. TU Clausthal, Inst. Min. u. Mineral. Rohstoffe, Clausthal-Zellerfeld, 140 S.
- HOWARD, P. H. & MEYLAN, W. M. (1997): Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals. New York.
- HUNSCH, U., SCHULZE, O., WALTER, F. & PLISCHKE, I. (2003): Thermomechanisches Verhalten von Salzgestein. BGR-Abschlussbericht zum Arbeitspaket 9G213811.
- HUNT, J. M. (1996): Petroleum Geochemistry and Geology. New York.
- JARITZ, W. (1969): Epirogenese in NW-Deutschland im höheren Jura und in der Unterkreide, Geol. Jb., Hannover A10: 1-77, 3 Abb., 1 Tab., 2 Taf.
- JOCKWER, N. (1997): Natürliche Gase im Salzgestein Freisetzung und Verbleib. In: Erzeugung und Verbleib von Gasen in einem Endlager für radioaktive Abfälle, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH.
- KNABE, H.-J. (1989): Zur analytischen Bestimmung und geochemischen Verteilung der gesteinsgebundenen Gase im Salinar. Zeitschrift geologische Wissenschaften 17, 353-368.
- LUX, K.-H. (2006): Zum langfristigen Tragverhalten von verschlossenen solegefüllten Salzkavernen – ein neuer Ansatz zu physikalischer Modellierung und numerischer Simulation. Erdöl Erdgas Kohle, Urban-Verlag, Hamburg 122(11), 420-428.
- MACHEL, H. G. (2001): Bacterial and thermochemical sulphate reduction in diagenetic settings – old and new insights. Sedimentary Geology 140, 143-175.
- MACHEL, H. G., KROUSE, R. H. & SASSEN, R. (1995): Products and distinguishing criteria of bacterial and thermochemical sulfate reduction. Applied Geochemistry 10, 373-389.

-
- MASTERTON, W. L. & LEE, T. P. (1970): Salting coefficients from scaled particle theory. *J. Phys. Chem.* 74, 1776-1782.
- MEES, F., SWENNEN, R., VAN GEET, M. & JACOBS, P. (2003): Applications of X-ray Computed Tomography in the Geosciences. Geological Society, London, Special Publications, 215, 1-6.
- MEYLAN, W. M. & HOWARD, P. H. (1995): Atom/fragment contribution method for estimating octanol–water partition coefficients. *Journal of Pharmaceutical Sciences* 84, 83-92.
- MITTAG-BRENDEL, E. (2000): Schwefelwasserstoff-Genese in den Zechstein-Erdgaslagerstätten NW-Deutschlands. Dissertation, Univ. Hannover, 83 S., 33. Abb., 11 Tab.
- MORRISON, T. J. & BILLET, F. (1952): The salting-out of non-electrolytes. Part II. The effect of variation in non-electrolyte. *J. Chem. Soc.*, 3819-3822.
- MÜLLER, P. & HEYMEL, W. (1956): Verfahren zur Bestimmung der Gaskonzentration der Gassalze des Südharz- und des Werrakalibergbaues. *Bergbautechnik* 6, 313-319.
- NI, N. & YALKOWSKI, S. H. (2003): Prediction of Setschenow constants. *International Journal of Pharmaceutics*, 254, 167-172.
- NOWAK, T. & WEBER, J. R. (2002): Hydraulische Charakterisierung der Salzbarriere Gorleben. BGR, Hannover, Abschlussbericht (Arbeitspaket 9G4151110000). 122 S., 57 Abb., 16 Tab.
- PAPE, T. (1993): Beobachtungen zum Gefüge des Kristallbrockensalzes (z2HS3) in Bohrkernen aus dem Salzstock Gorleben. Dipl.-Arb., Universität Hannover, 73 S.
- PAUL, B., HESSER, J., KUNZ, H., FLENTJE, R., NOWOTNY, D. & SANCHEZ-HERRERO, S. (2011): Geotechnische Instrumentierung und Messungen der BGR. Zwischenbericht 2011, (Arbeitspaket 9GE331100000). BGR, Hannover, in Vorbereitung.
- PHARR, G.M. & ASHBY, M. F. (1983): On creep enhanced by a liquid phase. *Acta metall.* 31, 129-138.
- PIRONON, J., PAGEL, M., LÉVÊQUE, M.-H. & MOGÉ, M. (1995a): Organic Inclusions in Salt. Part 1: Solid and Liquid Organic Matter, Carbon Dioxide and Nitrogen Species in Fluid Inclusions from the Bresse Basin (France). *Organic Geochemistry* 23, 391-402.

-
- PIRONON, J., PAGEL, M., WALGENWITZ F. & BARRÈS O. (1995b): Organic Inclusions in Salt. Part 2: Oil, Gas and Ammonium in Inclusions from the Garbon Margin. *Organic Geochemistry* 23, 739-750.
- POPP, T., FISCHER, M. & KERN, H. (2002): Gefügekundliche Untersuchungen zur Verteilung von Kohlenwasserstoffen (KW) in Steinsalz. *Meyniana* 54, 131-154.
- POTTER, J., SIEMANN, M. G. & TSYPUKOV, M. (2004): Large-scale Isotope Fractionation in Evaporites and the Generation of extremely ¹³C-enriched Methane. *Geology* 32, 533-536.
- PROHL, H. (1998): Raman-spektroskopische Untersuchungen zur Zusammensetzung gasförmiger Einschlüsse in Gesteinen des Salzstocks Gorleben. Dissertation, Technische Universität Clausthal.
- SCHLÉDER, Z. & URAI, J.L. (2005): Microstructural evolution of deformation-modified primary halite from the middle triassic Röt Formation at Hengelo, The Netherlands. *Int. J. Earth Sci.* 94, 941-955.
- SCHOELL, M. (1980): The hydrogen and carbon isotopic composition of methane from natural gases of various origins. *Geochimica Cosmochim. Acta* 44, 649-661.
- SCHOELL, M. (1984): Wasserstoff- und Kohlenstoffisotope in organischen Substanzen, Erdölen und Erdgasen. *Geol. Jb.* D67, 3-161.
- SCHÖN, H. (2005): *Handbuch der reinsten Gase*. Springer Verlag, 436 S.
- SCHOENHERR, J., LITKE, R., URAI, J.L., KUKLA, P.A. & RAWAHI, Z. (2007a): Polyphase thermal evolution in the Infra-Cambrian Ara Group (South Oman Salt Basin) as deduced by maturity of solid reservoir bitumen. *Organic Geochemistry* 38, 1293-1318.
- SCHOENHERR, J., URAI, J. L., KUKLA, P. A., LITKE, R., SCHLÉDER, Z., LARROQUE J.-M., NEWALL, M. J., AL-ABRY, N., AL-SIYABI, H. A. & RAWAHI, Z. (2007b): Limits of the Sealing Capacity of Rock Salt: A Case Study of the Infra Cambrian Ara Salt from the South Oman Salt Basin. *AAPG Bulletin* 91, 1541-1557.
- SCHRADER, R., ACKERMANN, G. & GRUND, H. (1960): Entwicklung von Methoden zur Bestimmung des Gasgehalts in Salzen. *Bergakademie* 12, 543 – 551.
- SCHULZE, O. & PLISCHKE, I. (2010): Homogenbereichskartierung zum Kriechen von Steinsalz - Verfahren und Ergebnisse. BGR-Bericht zum Arbeitspaket 9M2811001100.

- SCHULZE, O., HEEMAN, U., ZETSCHKE, F., HAMPEL, A., PUDEWILLS, A., GÜNTHER, R.-M., MINKLEY, W., SALZER, K., HOU, Z., WOLTERS, R., ROKAHR, R. & ZAPF, D. (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project. I. Modeling of deformation processes and benchmark calculations. In: K.-H. LUX, W. MINKLEY, M. WALLNER, & H.R. HARDY, JR. (eds.), Basic and Applied Salt Mechanics; Proc. of the Sixth Conf. on the Mech. Behavior of Salt. Hannover 2007. Lisse: Francis & Taylor (Balkema), 77-88.
- SCHULZE, O. (2007): Investigations on damage and healing of rock salt.- In: M. WALLNER, K.-H. LUX, W. MINKLEY & H.R. HARDY, JR. (eds.): The Mechanical Behavior of Salt. Understanding of THMC Processes in Salt. Hannover 2007, London: Taylor & Francis, 33-43.
- SCHULZE, O. (2002): Auswirkung der Gasentwicklung auf die Integrität geringdurchlässiger Barrieregesteine. BGR-Fachbericht zum Arbeitspaket 9Y32130300000.
- SCHULZE, O., POPP, T. & KERN, H. (2001): Development of damage and permeability in deforming rock salt. Engineering Geology 61, 163 - 180. Elsevier, Amsterdam. (Special Issue on Geosciences and Nuclear Waste Disposal. Eds.: Ch. Talbot & M. Langer).
- SIEMANN, M. G. (2007): Herkunft und Migration mineralgebundener Gase der Zechstein 2 Schichten in Zielitz. Kali und Steinsalz 3/2007, 26-41.
- TISSOT, B. P. & WELTE, D. H. (1984): Petroleum formation and occurrence. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 699 pp.
- TWISS, R.J. & MOORES, E.M. (1992): Structural Geology. W.H. Freeman & Co, New York, 532 pp.
- URAI, J.L. & SPIERS, C.J. (2007): The effect of grain boundary water on deformation mechanisms and the rheology of rocksalt during long-term deformation. In: WALLNER, M., LUX, K.-H., MINKLEY, W., HARDY JR., H.R. (eds.): The Mechanical Behavior of Salt – Understanding of THMC Processes in Salt. Taylor & Francis Group, London, 149-158.
- URAI, J.L., SPIERS, C.J., PEACH, C.J., FRANSSSEN, R.C.M.W. & LIEZENBERG, J.L. (1987): Deformation mechanisms operating in naturally deformed halite rocks as deduced from microstructural investigations. Geol. Mijnbouw 66, 165-176.
- US EPA (2011): Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.10. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.

- WALLNER, M., LUX, K.-H., MINKLEY, W. & HARDY JR., H. R. (2007): The Mechanical Behavior of Salt. Understanding of THMC Processes in Salt (Saltmech 6). Hannover, May 2007. Francis & Taylor (London). ISBN 13: 978-0-415-44398-2.
- WEBER, J. R., HAMMER, J. & SCHULZE, O. (2011): Projekt Gorleben. Empfehlungen der BGR zur Berücksichtigung der Kohlenwasserstoff-Vorkommen im Hauptsalz des Salzstockes Gorleben im Rahmen einer vorläufigen Sicherheitsanalyse. Bericht, Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover, 28 S.
- WORDEN R. H. & SMALLEY P.C. (1996): H₂S-producing reactions in deep carbonate gas reservoirs: Khuff formation, Abu Dhabi. Chemical Geology 133, 157-171
- WORDEN R.H., SMALLEY, P.C. & OXTOBY, N.H. (1996): The effects of thermochemical sulphate reduction upon formation water salinity and oxygen isotopes in carbonate gas reservoirs. Chemical Geology 176, 173-189.
- ZARETZKI, B., SHAO, H., PAUL, B. & HESSER, J. (2011): Geotechnische Bewertung der Erkundungsbereiche, Zwischenbericht 2011, (Arbeitspaket 9GE431100000). BGR, Hannover, in Vorbereitung.
- ZULAUF, G., ZULAUF, J., BORNEMANN, O., BRENKER, F. E., HÖFER, H. E., PEINL, M. & WOODLAND, A. B. (2010): Experimental deformation of a single-layer anhydrite in halite matrix under bulk constriction. Part 2: Deformation mechanisms and the role of fluids. J. Struct. Geol. 32, 264-277.

Abkürzungsverzeichnis

ALZ (EDZ)	-	Auflockerungszone
BB	-	Bildbreite
BET	-	spezifische Oberfläche (Adsorptionsvermögen von Stoffen)
BfS	-	Bundesamt für Strahlenschutz, Salzgitter
BGR	-	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover
BMU	-	Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit
CT	-	Computertomographie
DBE	-	Deutsche Gesellschaft zum Bau und Betrieb von Endlagern, für Abfallstoffe mbH, Peine
EB1	-	Erkundungsbereich 1
EBSD	-	Electron backscatter diffraction
EDZ (ALZ)	-	Auflockerungszone
EMR	-	Elektromagnetische Reflexion (Radar-Messungen)
FID	-	Flammenionisationsdetektor
Fast-RGA	-	fast refinery gas analyzer
F+E	-	Forschung und Entwicklung
GC	-	Gaschromatograph
GC-MKW	-	Gaschromatograph für Mineralöl-KW
HS-GC-	-	Headspace-Gaschromatograph
IC	-	Ionenchromatograph
ICP-OES	-	Optische Emissionsspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma
KW	-	Kohlenwasserstoffe
LIMS	-	Laborinformations- und Managementsystem
MS	-	Massenspektrometer
ppb	-	parts per billion (10^{-7} Prozent)
ppm	-	parts per million (10^{-4} Prozent)
Q1W	-	Querschlag 1 West
Q1E	-	Querschlag 1 Ost
SEV	-	Sekundärelektronenvervielfacher
u. GOK	-	unter Geländeoberkante
XRD	-	Röntgendiffraktometrie
z2HS	-	Hauptsalz, Staßfurt-Folge
z2HS1	-	Knäuelsalz, Hauptsalz, Staßfurt-Folge
z2HS2	-	Streifensalz, Hauptsalz, Staßfurt-Folge
z2HS3	-	Kristallbrockensalz, Hauptsalz, Staßfurt-Folge
z3	-	Leine-Folge
z3BK/BD	-	Bank-/Bändersalz, Leine Folge
z3BS	-	Basissalz, Leine Folge
z3HA	-	Hauptanhydrit, Leine Folge
z3LS	-	Liniensalz, Leine Folge
z3OS	-	Orangesalz, Leine Folge
z3OSM	-	Gorleben-Bank, Mittleres Orangesalz, Leine Folge

Tabellenverzeichnis	Seite
Tab. 1: Schmelz- und Siedepunkte ausgewählter KW unter Normalbedingungen (1,013 bar und 298,15 K)	16
Tab. 2: Fluoreszenzfarben ausgewählter aromatischer KW	17
Tab. 3: Henry-Koeffizienten und Sechenov-Konstanten der untersuchten KW C ₁ -C ₆ . log K _{ow} berechnet mit KOWWIN v1.68 (US EPA 2011)	34
Tab. 4: Auflistung der in die Summe KW C ₁ -C ₄₀ eingehenden Verbindungen bzw. Elutionsbereiche	39
Tab. 5: Paläopiezometrische Daten von zehn Proben. Die Paläodifferentialspannungen sind unter Verwendung von Formel 14 (siehe Kap. 6.1.3) mit Hilfe der Subkorndurchmesser berechnet. Die Strainrate wird durch die Paläodifferentialspannung bei einer gewählten Temperatur von T = 150 °C ermittelt (Formel 14)	80
Tab. 6: Bezeichnungen der untersuchten Proben aus dem Querschlag 1 West. (U – Undichtigkeiten der Probencontainer; A – analytische Probleme)	86
Tab. 7: Syntheseparameter für die Gasmischung	108
Tab. 8: Berechnete und gemessene Fließraten in den Bohrungen RB685, RB688 und RB689 vor und nach den Wochenenden (Erläuterungen siehe Text)	110
Tab. 9: Gasmengen der Bohrung RB688, die bei Offenhaltung der Bohrung nicht erfasst wurden	111
Tab. 10: Kumulative Gas- und Kondensatvolumina unter Standardbedingungen aus sechs Bohrungen mit deutlichen Zutritten (bis 18.11.2011)	116
Tab. 11: Kumulative Gas- und Kondensatvolumina unter Standardbedingungen aus vier Bohrungen ohne nennenswerte bzw. ohne Zutritte (bis 18.11.2011)	116
Tab. 12: Zusammenhang zwischen UV-Klassifizierung (siehe Kap. 5) und gemessener Gasmenge in einigen Packerbohrungen (3,0 – 6,0 m) (Querschlag 1 West)	119
Tab. 13: Testintervalle der Bohrlochtests in den Kurzbohrungen im Querschlag 1 West (blau: schwach bis stark UV-aktive Messbereiche, rot: Anomalien bei Ultraschallmessungen, kursiv: integrale Messungen von angegebener Tiefe bis ins Bohrloch tiefste)	121
Tab. 14: Prüfkörper aus der Bohrung GoEB1RB793 und deren Verwendung	137
Tab. 15: Kernmaterial und Prüfkörper aus dem Bereich des z2HS, die ausgehend von makroskopischen Befunden KW-Einschlüsse enthalten können	139

Tab. 16:	Ergebnisse aus triaxialen Kriechversuchen zur Ermittlung des Kriechvermögens und des Einsetzens von Dilatanz von Steinsalz (z2HS) aus den Bohrungen GoEB1RB119 - Bohrort 3 , Querschlag 1 Ost; GoEB1RB210 - Bohrort 3, Querschlag 1 Ost und GoEB1RB341 - Bohrort 3.1, Querschlag 1 Ost	152
Tab. 17:	Aufheizversuche von 15 Proben. Der Gradient beschreibt die Aufheiz- und Abkühlrate	168

Abbildungsverzeichnis	Seite
Abb. 1: Strukturformeln von Methan (a), Ethan (b), Propan (c), Ethen (d) und Benzol (e).	15
Abb. 2: Ausschnitt aus dem Phasendiagramm von n-Pentan (Daten aus der NIST Standard Reference Database 69: NIST Chemistry WebBook).	16
Abb. 3: Fließschema und Methodenübersicht der aktuellen KW-Untersuchungen der BGR.	27
Abb. 4: Als „optisch unauffällig“ eingestufte Probenkörper RB653-008 (Teufe 5,70 m bis 5,86 m) im Kunstlicht (links) und unter UV-Licht ohne sichtbare Fluoreszenz (rechts).	41
Abb. 5: Als „optisch auffällig“ eingestufte Probenkörper RB648-022 (Teufe 3,00 m bis 3,33 m) im Kunstlicht. Im Liegenden der Probe (rechts) ist eine ca. 1 cm x 2 cm x 1 cm große und mit gelblichem Salzstaub belegte Pore zu erkennen.	41
Abb. 6: Als „optisch auffällig“ eingestufte Probenkörper RB650-019 (Teufe 0,36 m bis 0,48 m) im Kunstlicht. Das Kernsegment zeigt eine auffällig gelbliche Eigenfarbe. Da es sich um eine Probe für Aufheizversuche handelt, musste die Probe im verschlossenen Probengefäß dokumentiert werden.	41
Abb. 7: Als „schwach UV-aktiv“ eingestufte Probenkörper RB654-013 (Teufe 0,68 m bis 0,84 m) unter UV-Licht (254 nm). Der als „schwach UV-aktiv“ eingestufte Probenkörper weist bei 254 nm nur eine schwach glimmende, fahl bläulich-weiße Fluoreszenz auf.	42
Abb. 8: Als „stark UV-aktiv“ eingestufte Probenkörper RB649-003 (Teufe 0,31 m bis 0,48 m) unter UV-Licht (254 nm). Die Probe weist einen auffälligen „Diesel“-Geruch auf und zeigt bei 254 nm eine ausgeprägte, fahl bläulich-weiße Fluoreszenz entlang der Korngrenzen und der eingeschalteten Anhydritlagen.	42
Abb. 9: Als „stark UV-aktiv (porös)“ eingestufte Probenkörper RB648-022 (Teufe 3,00 m bis 3,33 m) unter UV-Licht (254 nm). Der Kern weist bei 254 nm eine bereits im Kunstlicht auffällige Pore (siehe Abb. 5) und intensive fahl bläulich-weiße Fluoreszenz auf.	42
Abb. 10: Kombinationsaufnahme „Auflicht und UV-Licht“ (Probenkörper RB659-012 bei Teufe 1,70 m bis 1,82 m). Durch die Kombination von Kunstlicht- und UV-Aufnahme werden die bei UV-Licht eintretenden Halo-Effekte (Abb. 12) reduziert und die Bildinformationen der Auflichtaufnahme durch die UV-Informationen ergänzt.	44

- Abb. 11: Kombinationsaufnahme „Durchlicht und UV-Licht“ (Probenkörper RB659-012 bei Teufe 1,70 m bis 1,82 m). Durch die Kombination von UV- und Durchlichtaufnahme werden Halo-Effekte (Abb. 12) reduziert und die Bildinformationen der Durchlichtaufnahme durch die UV-Informationen ergänzt. 44
- Abb. 12: Beispiel für den in allen Proben beobachteten Halo-Effekt (Probenkörper RB659-012 bei Teufe 1,70 m bis 1,82 m) in einer Kombinationsaufnahme „Kunstlicht und UV-Licht“ (A) bzw. unter UV-Licht bei 254 nm (B; Kernsegment geschnitten). Die an die UV-aktiven Bereiche (i. d. R. Korngrenzen) angrenzenden Halitkristalle werden durch das bei UV-Anregung emittierte Fluoreszenzlicht blau beleuchtet. 44
- Abb. 13: Kombinationsaufnahme „Durchlicht und UV-Licht“ (Probenkörper RB649-003 bei Teufe 0,41 m bis 0,47 m) mit angezeichnetem Dünnschliff „KW27“. Die UV-aktiven Bereiche konzentrieren sich überwiegend auf den Korngrenzen der Halitkristalle, teilweise auch auf Anhydritknäule; die Halitkristalle selbst sind frei von Einschlüssen. 45
- Abb. 14: Intrakristalline, würfelförmige und bei 254 nm UV-aktive Fluideinschlüsse (rot umrandet) in einem Probenkörper der Vorbohrung RB773 (Probe RB773-005 bei einer Teufe von 1,50 m bis 1,56 m; Blick auf den Kernquerschnitt bei 1,50 m). 46
- Abb. 15: Stark UV-aktives Anhydritknäuel umgeben von UV-inaktiver Halitmatrix (Probenkörper RB659-011 bei Teufe 1,63 m bis 1,67 m; Liegendes: Bildunterkante). 46
- Abb. 16: UV-inaktives Anhydritknäuel umgeben von einer stark UV-aktiven Halitmatrix (Probenkörper RB652-008 bei Teufe 2,23 m bis 2,61 m). 46
- Abb. 17: Verbreitung der UV-aktiven Bereiche (stark fluoreszierend – Magenta, schwach fluoreszierend – dunkelblau) in den KW-Kurzbohrungen im Zentralteil des Querschlages 1 West. 47
- Abb. 18: Kombinationsaufnahme „Durchlicht und UV-Licht“ aus dem Streifensalz (Probenkörper RB773-00; Teufe 0,70 m bis 0,94 m). Die lagenartig ausgebildeten, UV-aktiven Bereiche befinden sich innerhalb des Kernsegmentes ausschließlich an den Korngrenzen klarer, rekristallisierter Halitkristalle. 48
- Abb. 19: Kombinationsaufnahme „Kunstlicht und UV-Licht“ aus den Stoß-Aufnahmen im Bohrort 1.2 (Quelle: DBE). Die UV-aktiven KW sind der Schichtung folgend lagig in dünnmächtigen Anhydritschichten oder anhydritreichen Halitschichten des z2HS2 angeordnet, die beim Salzaufstieg verfaltet wurden. Bereichsweise treten die KW in Folge der Auflockerung des Gebirges durch die Bohrortsauffahrung aus und verteilen sich infolge großflächig als Kondensatflecken und

	-fahren am Stoß, wodurch ein scheinbar großflächiges Vorkommen suggeriert wird (Größe der Feuchtstelle RF 187 im unteren Bildteil etwa 1 m ²).	48
Abb. 20:	Invers proportionale Beziehung der Subkorngröße in Halit zur Differentialspannung (aus: SCHLÉDER & URAI 2005).	50
Abb. 21:	Übersichtsscan eines ca. 6 cm x 4 cm großen Dünnschliffes aus der RB648 bei Teufe 3,03 m bis 3,09 m. Links der Dünnschliff im Hellfeld und rechts mit gekreuzten Polarisatoren. Durch die hohe Auflösung kann der Schliff bis auf Mikroskopniveau vollständig dokumentiert und gegebenenfalls auch nach dessen alterungsbedingter Zerstörung untersucht werden.	54
Abb. 22A:	Fluideinschlüsse an den Korngrenzen der Halitkristalle bzw. auf der Oberfläche von an den Korngrenzen gelegenen Anhydrit (RB658, Teufe 2,91 m bis 2,97 m, Hellfeld).	55
Abb. 22B:	Offene bzw. teilweise verheilte, sekundäre Risse innerhalb eines Haliteinkristalls mit punktuellen, dendritischen und z. T. flächenhaften Fluideinschlüssen aus salinaren Lösungen und schwarzbraunen KW (RB658, Teufe 4,89 m bis 4,94 m, Hellfeld).	55
Abb. 22C:	Sekundäre, durch mechanische Belastung bedingte und mit Fluiden besetzte Risse entlang der Spaltbarkeit des Halitkristalls (RB658, Teufe 4,89 m bis 4,94 m, Hellfeld).	55
Abb. 22D:	Tressenstruktur aus primären, würfelförmigen Fluideinschlüssen innerhalb eines Haliteinkristalls (RB658, Teufe 4,89 m bis 4,94 m, Hellfeld).	55
Abb. 23A:	Erkennbare Foliation im Knäuelsalz, bedingt durch die Kornformanisotropie der Halitkörner (RB658.013_2s). Bildbreite (BB) = 800 µm. Beide Abbildungen mit parallelen Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.	56
Abb. 23B:	Idiomorph ausgebildete Kristallflächen zeigen vermutlich Rekristallisation an (RB757). BB = 500 µm. Beide Abbildungen mit parallelen Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.	56
Abb. 24:	Interkristalline Fluideinschlüsse auf Halit-Korngrenze (RB757). Die hellen Zentren der blasen- und wurmförmigen Flüssigkeitsphasen sind optische Reflexe. Bei Kontakt einzelner Tropfen können örtlich begrenzt Filme ausgebildet werden (Bildmitte oben). BB = 500 µm. Parallele Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.	57
Abb. 25:	Fluide verschiedenster Ausprägung dominieren vor allem die Korngrenzenbereiche (RB757). BB = 1,6 mm. Parallele Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer.	57

- Abb. 26A: Intakte bis alterierte Anhydritkristalle säumen die Korngrenzen der Halitkristalle und sind nur vereinzelt als Fremdkörper in den Halitkristallen eingeschlossen (RB656, Teufe 4,79 m bis 4,85 m, X-Pol). 59
- Abb. 26B: Idiomorpher, randlich alterierter Anhydritkristall mit zahlreichen, vom Kornrand ausgehenden, spaltflächenparallelen Kapillaren (RB452, Teufe 9,32 m bis 9,34 m, X-Pol). 59
- Abb. 26C: Anhydritkristall mit vom Kornrand ausgehenden Kapillaren sowie sichtbar parallel verlaufenden Spaltflächen (RB655, Teufe 5,47 m bis 5,53 m, Hellfeld). 59
- Abb. 26D: Anhydritkristalle mit an der Kornoberfläche anhaftenden KW-Phasen, sowie KW-besetzte Korngrenzen der Halitkristalle (RB648, Teufe 3,03 m bis 3,09 m, Hellfeld). 59
- Abb. 26E: Starke KW-Imprägnierung der Korngrenzen und Kapillare im Anhydrit mit bräunlicher Verfärbung des Schliffes, verstärkt durch die Verteilung der bei der Schliffherstellung freigesetzten KW auf der Schliffoberfläche (RB655, Teufe 5,47 m bis 5,53 m, Hellfeld). 59
- Abb. 26F: Von eingeschlossenen Anhydritkristallen ausgehende, fluidbesetzte und in der Ausdehnung begrenzte Risse im Halit (RB655, Teufe 5,47 m bis 5,53 m, Hellfeld). 59
- Abb. 27A: Gas- und Lösung gefüllte Kapillare mit konvexen Menisken in einem Anhydritkristall (RB648, Teufe 3,03 m bis 3,09 m, Stack-Aufnahme über 6 μm , Hellfeld). 60
- Abb. 27B: Gas- und Lösungsgefüllte Kapillare mit konkaven Menisken und einem am Kapillarfuß befindlichen Rest von Organika innerhalb eines Anhydritkristalls (RB659, Teufe 1,73 m bis 1,79 m, Stack-Aufnahme über 5 μm , Hellfeld). 60
- Abb. 28A: Streifen- und Tropfenmuster von Fluidphasen auf Anhydriteinkristallen in Halitmatrix. Die Fluidphasen sind auf den Grenzflächen zwischen Anhydrit und Halit lokalisiert. A) BB = 1 mm (RB652.010_2). Parallele Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer. 60
- Abb. 28B: BB = 500 μm (RB659.015_1s). Parallele Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer. 60
- Abb. 29: Vermutlich durch Präparation bedingter Riss, der mit Fluiden besetzt ist (RB658.013_2). BB = 1 mm. Parallele Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer. 61
- Abb. 30A: Schar von vermutlich primären Fluideinschlüssen, die aufgrund ihrer Anordnung vermutlich einer gemeinsamen Bildungsphase zuzuordnen sind (RB655.016_2). BB = 2,2 mm. Abbildung mit parallelen Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer. 62

- Abb. 30B: Spur von vermutlich sekundären Fluideinschlüssen, die teilweise Gasphasen beinhalten (RB757). BB = 1 mm. Abbildung mit parallelen Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer. 62
- Abb. 31A: Verwachsung eines idiomorphen Karbonatkristalls mit einem großen Anhydritkristall (RB659, Teufe 1,73 m bis 1,79 m, X-Pol). 63
- Abb. 31B: Idiomorphe Karbonatkristalle mit einem verunreinigten Anwachssaum und aufgewachsenem Anhydrit (RB648, Teufe 3,03 m bis 3,09 m, X-Pol). 63
- Abb. 31C: Bildausschnitt aus einem 6 mm x 2 mm großen, idiomorphen Karbonatkristall mit eingeschlossenen Anhydritkristallen, einem verunreinigten Anwachssaum und randlich aufgewachsenem Anhydrit. Die Löcher im Kristall (schwarz erscheinend) sind mit Halit und kleinen Anhydritkristallen gefüllt (RB648, Teufe 3,03 m bis 3,09 m, X-Pol). 63
- Abb. 31D: Idiomorpher Anhydritkristall mit spaltflächenparallelen Kapillaren neben einem rosettenförmigen Karbonataggregat (RB659, Teufe 2,55 m bis 2,61 m, Hellfeld). 63
- Abb. 32A: Idiomorpher, scharfkantiger Pyritwürfel, umgeben von alteriertem Anhydrit und organischen Phasen (RB648, Teufe 3,78 m bis 3,83 m, Hellfeld). 64
- Abb. 32B: Verzerrter, kantengerundeter Pyritkristall (Würfel bis Pentagondodekaeder), eingeschlossen in einem stark alterierten Anhydrit (RB659, Teufe 4,70 m bis 4,76 m, Hellfeld). 64
- Abb. 32C: Ausgefranztes, gebogenes Aggregat von radialstrahligen Pyrit-/Markasitnadeln in Halitmatrix zusammen mit Anhydrit (RB659, Teufe 1,73 m bis 1,79 m, Hellfeld). 64
- Abb. 32D: Bereits makroskopisch sichtbares, 1,2 mm x 1 mm großes Aggregat aus idiomorphen Pyritkristallen an einer Korngrenze im Halit (RB656, Teufe 4,79 m bis 4,85 m, Hellfeld). 64
- Abb. 32E: Leicht alterierter, idiomorpher Anhydritkristall mit spaltflächenparallel verlaufenden Kapillaren und einem eingeschlossenen, hypidiomorphen Pyritkristall (RB452, Teufe 9,32 m bis 9,34 m, X-Pol). 64
- Abb. 32F: Korrodierter, xeno- bis hypidiomorpher Anhydritkristall mit einem eingeschlossenen, idiomorphen Pyritkristall (RB659, Teufe 4,70 m bis 4,76 m, X-Pol). 64
- Abb. 33A: Länglicher, idiomorpher Coelestinkristall neben einem idiomorphen Karbonatkristall innerhalb eines Anhydritknäuels (RB648, Teufe 3,78 m bis 3,83 m, X-Pol). 66
- Abb. 33B: Idiomorpher Coelestinkristall innerhalb eines Halitkristalls zusammen mit Anhydrit (RB648, Teufe 3,78 m bis 3,83 m, X-Pol). 66

Abb. 33C: Ansammlung mehrerer, idiomorpher und miteinander verwachsener Coelestinkristalle, gewachsen in einem/r Riss/Kluft im Halit (RB658, Teufe 4,89 m bis 4,94 m, Hellfeld).	66
Abb. 33D: Idiomorphe, nadelige und miteinander verwachsene Coelestinkristalle auf Anhydrit in Halitmatrix (RB452, Teufe 9,32 m bis 9,34 m, Hellfeld).	66
Abb. 34: Hämatitschuppe in halitischer Matrix in einem Dünnschliff aus der Bohrung RB658 bei Teufe 4,89 m bis 4,94 m im Hellfeld.	66
Abb. 35: EDX-Plot eines Albitkristalls (in halitischer Matrix) aus der Bohrung RB659 bei Teufe 2,55 m bis 2,61 m.	67
Abb. 36A: KW-Vorkommen auf Korngrenzen. Der im Schliff vorhandene Anhydrit fluoresziert schwach orange (Bildmitte oben). Photo: N. Thiemeyer.	68
Abb. 36B: Äquivalenter Bildausschnitt ohne Fluoreszenz bei parallelen Nicols im Durchlicht (RB659.015_1s). BB = 1,6 mm, Photo: N. Thiemeyer.	68
Abb. 37A: Die KW zeichnen durch ihre Korngrenzengebundenheit den Verlauf der Korngrenzen nach. Intrakristallin gebundene organische Substanz tritt nur untergeordnet auf. Photo: N. Thiemeyer.	68
Abb. 37B: Selbe Darstellung wie in A ohne Fluoreszenz unter parallelen Nicols im Durchlicht (RB659.015_1s). BB = 3,3 mm, Photo: N. Thiemeyer.	68
Abb. 38A: KW können als Ummantelung bei Anhydritkristallen (Bildmitte) die charakteristischen Tropfen- und Streifenmuster ausbilden. Photo: N. Thiemeyer.	69
Abb. 38B: Äquivalenter Ausschnitt wie in A ohne Fluoreszenz bei parallelen Nicols im Durchlicht (RB659.015_1s). BB 1,6 mm, Photo: N. Thiemeyer.	69
Abb. 39A: Anhydritkristalle können durch Anstrahlen, verursacht durch die KW-Korngrenzenfluide, im Fluoreszenzmikroskop in einem gleichmäßigen Grün erscheinen. Photo: N. Thiemeyer.	69
Abb. 39B: Gleicher Bildausschnitt ohne Fluoreszenz bei parallelen Nicols im Durchlicht (RB659.015_1). BB = 800 µm, die dunkle Schattierung entsteht durch Ablöseerscheinungen vom Objektträger und Anlaufen des Salzes. Photo: N. Thiemeyer.	69
Abb. 40A: Geflecht von KW innerhalb eines Anhydritclusters. Durch die große Oberfläche können sich hier größere Mengen von Fluidphasen ansammeln. Photo: N. Thiemeyer.	70
Abb. 40B: Wie A unter parallelen Nicols bei Durchlicht (RB661.006). BB = 700 µm, Photo: N. Thiemeyer.	70
Abb. 41A: Mit KW dekoriertes Riss. (RB659.015_1s). Photo: N. Thiemeyer.	70
Abb. 41B: Wie A ohne Fluoreszenz unter parallelen Nicols bei Durchlicht. BB = 1,6 mm, Photo: N. Thiemeyer.	70
Abb. 42A: Vermutlich ehemals intakte Korngrenze, die im Zuge mechanischer	

	Beanspruchung (bei Probennahme und -präparation) aufgerissen ist (RB658.013_2). Photo: N. Thiemeyer.	71
Abb. 42B:	Bildäquivalent (ebenso zu Abb. 29) unter parallelen Nicols im Durchlicht. BB = 1,37 mm, Photo: N. Thiemeyer.	71
Abb. 43A:	Stark fluoreszierender intrakristalliner Einschluss mit organischem Material (RB659.015_1). Photo: N. Thiemeyer.	71
Abb. 43B:	Wie A unter parallelen Nicols im Durchlicht. BB = 600 µm, Photo: N. Thiemeyer.	71
Abb. 44:	Typisches, dendritisch ausgebildetes Netzwerk aus schwärzlich-bräunlichen (KW) und farblosen (salinare Lösungen) Fluideinschlüssen entlang der Korngrenzen der Halitkristalle (RB647, Teufe 4,10 m bis 4,16 m, Stack-Aufnahme über 400 µm, Hellfeld).	74
Abb. 45:	Dendritisch ausgebildetes Netzwerk und punktuelle, voneinander isolierte Fluideinschlüsse (salinare Lösung + KW) auf der Korngrenzen-Oberfläche eines Halitkristalls. Es dominieren deutlich Einschlüsse salinärer Lösungen. Die schwärzlich-braune Farbe wird durch an den Korngrenzen befindliches Kondensat hervorgerufen. Aufgrund der Beleuchtung und der Stapeltechnik werfen zahlreiche Fluideinschlüsse einen Schatten auf die Kornoberfläche (RB647, Teufe 4,10 m bis 4,16 m, Stack-Aufnahme über 200 µm, Hellfeld).	74
Abb. 46:	Anhydritkristall mit spaltflächenparallelen, KW-gefüllten Kapillaren. An der Oberfläche haften, senkrecht zum Verlauf der Kapillare, KW-Tropfen. Die Fluideinschlüsse im benachbarten Halit enthalten salinare Restlösung bzw. KW. Bei den Streifen im Bildhintergrund handelt es sich um präparationsbedingte Schleifspuren (RB659, Teufe 2,55 m bis 2,61 m, Stack-Aufnahme über 150 µm, Hellfeld).	75
Abb. 47:	Aufnahmen der Korngrenzen der Anhydrit-/Halitkristalle an einer Probe aus der Bohrung RB659 bei einer Teufe von 2,55 m bis 2,61 m im Rasterelektronenmikroskop (ESEM).	76
Abb. 47A:	Anhydritkristalle mit spaltflächenparallelen Kapillaren in Halitmatrix. Die Oberfläche der Matrix zeigt das kapillare Netzwerk an den Korngrenzen der Halitkristalle. An dem zentral gelegenen Anhydritkristall haften noch Reste von KW (schwarz, der KW-Nachweis erfolgte durch die EDX-Analyse).	76
Abb.47B:	Anhydritkristall mit stark vernetzter und von Kapillaröffnungen durchzogener Oberfläche. Auf der Spaltfläche (Bildmitte) wurde eine Kapillare angeschnitten (im REM-Bild sind selbst die Menisken der eingeschlossenen Lösung noch sichtbar).	76
Abb. 48:	Verschiedene, KW-besetzte Risse aus einer Probe der Bohrung RB647 (48A bis C) bei der Teufe 4,10 m bis 4,16 m und RB652 (48D) bei der Teufe 2,43 m bis 2,49 m im Hellfeld.	77

- Abb. 48A: Stack-Aufnahme über 680 μm . Aufgelockerte, KW-besetzte Korngrenze (schwarz bis bräunlich) mit neu entstandenen, offenen Rissen, die durch eindringende KW bräunlich verfärbt sind. Der blaue Schimmer auf der Korngrenze entsteht durch die Berechnung der Stack-Aufnahme durch Bildinterferenzen. 77
- Abb. 48B: Stack-Aufnahme über 350 μm . Sekundäre, KW-besetzte Risse im Halit neben einer benachbarten Anhydritlage. Die Risse entstanden durch die mechanische Beanspruchung während der Schliffpräparation; bei dem bläulichen Schimmer handelt es sich um einen Interferenzeffekt. 77
- Abb. 48C: Stack-Aufnahme über 100 μm . KW-führender Anhydritkristall innerhalb eines Halits. Die umliegenden Risse sind KW-führend und in ihrer Ausdehnung stark begrenzt. Eine aufgerissene Spaltfläche im Anhydrit ist ebenfalls mit bräunlichen KW besetzt. 77
- Abb. 48D: Stack-Aufnahme über 45 μm . Anhydritkristall mit mehreren KW-besetzten Spaltflächen, sowie Kapillaren und oberflächlich anhaftenden KW-Menisken. 77
- Abb. 49: Reliktisch erhaltene, primäre, würfelförmige bis leicht vernetzte Fluideinschlüsse mit einer Gasphase innerhalb eines primären, nicht rekristallisierten Halitkristalls. Die Korngrenzen sind von Anhydrit und schwärzlich-braunen Fluideinschlüssen (KW) gesäumt. In der oberen Bildhälfte befinden sich eine durch KW schwarz verfärbte Korngrenze, sowie ein offener und durch KW bräunlich verfärbter, sekundärer Riss im Halit (RB647, Teufe 4,10 m bis 4,16 m, Stack-Aufnahme über 600 μm , Helffeld). 78
- Abb. 50A: Geätztes Steinsalz Korn der Probe 655.009s mit Subkörnern. Parallele Nicols im Durchlicht. Photo: N. Thiemeyer. 79
- Abb. 50B: Extrahierte Subkorngrenzen. Formen und Größen der einzelnen Subkörner sind uneinheitlich. Eine kristallographisch bedingte Vorzugsorientierung fehlt. BB = 1 cm, Photo: N. Thiemeyer. 79
- Abb. 51: Übersicht der Subkorngrößenverteilung und der Paläodifferentialspannung. Die Verteilungsmuster der Subkorngrößen verlaufen negativ exponentiell. Die Paläodifferentialspannungen liegen zwischen 0,94 und 1,76 MPa. Photo: N. Thiemeyer. 81
- Abb. 52: Die ermittelten Paläodifferentialspannungen der Probenpaare stimmen in drei von fünf Fällen sehr gut überein und bezeugen einheitlich niedrige Differentialspannungen. Abb.: N. Thiemeyer. 82
- Abb. 53: CT-Aufnahme von Probe 655.016_2. Schwarze Fluidpartien (gelbe Pfeile) dekorieren Korngrenzen oder füllen Zwickel aus. Die hellen Mosaik sind Anhydritkristalle. Ringartige Strukturen im Zentrum stellen Artefakte dar, die bei der Messung durch die Rotation der Probe

- und detektorbedingte Pixelfehler entstehen. BB = 1,2 mm. Photo: N. Thiemeyer. 83
- Abb. 54: CT-Aufnahme von Probe 655.016_2. Extrahierte Fluidphasen können anhand der Voxelzahlen in ihrem Gesamtanteil eines definierten Volumens berechnet werden. 83
 Volumen = $0,5 \cdot 0,5 \cdot 0,1 \text{ mm}^3$. Bei allen dargestellten Fluidphasen handelt es sich um die Gesamtheit an Fluid. Hier kann (noch) nicht zwischen wässrigen Lösungen und KW unterschieden werden. Die ermittelten 0,2 Vol.-% sind bei Vernachlässigung der Fluideinschlüsse unterhalb der Detektionsschwelle als Obergrenze für den KW-Gehalt in der untersuchten Probe anzusehen, wovon der wässrige Lösungsanteil abzuziehen ist. Photo: N. Thiemeyer. 83
- Abb. 55: Lage der Bohransatzpunkte und des Bohrverlaufes der beprobten Kurzkernbohrungen RB643 – RB659 sowie RB778-RB782 im Sohlenriss der 840 m-Sohle (Querschlag 1 West). 85
- Abb. 56: Darstellung der Kurzkern-Probennahmebohrungen im Querschlag 1 West entlang einer Linie der Bohrendpunkte von RB782 ausgehend Richtung Südosten. Blaue Pfeile deuten die Bohrungsansatzpunkte des Statistikproben-Datensatzes an, rote die des Datensatzes Nachverdichtung. 88
- Abb. 57: Häufigkeit der ermittelten Gehalte an KW von Salzgesteinsproben aus dem Querschlag 1 West. Dargestellt sind die beiden Probensätze Statistikproben und Nachverdichtung. 89
- Abb. 58: Häufigkeit der ermittelten Gehalte an KW an Gesteinproben aus dem Querschlag 1 West im Vergleich zu den verschiedenen Siedebereichsfraktionen C_1 - C_6 , C_7 - C_{10} und C_{11} - C_{40} . Dargestellt sind nur die Daten der Statistikproben. 90
- Abb. 59: Häufigkeit der ermittelten Gehalte an gasförmigen KW C_1 - C_5 von Salzgesteinsproben aus dem Querschlag West. Dargestellt sind die beiden Probensätze Statistikproben (blau) und Nachverdichtung (rot) im Vergleich zu Daten aus GERLING et al. (2002) (grau). 91
- Abb. 60: Darstellung der KW-Gehalte C_1 - C_{40} im Gestein aus Proben der Probensätze Statistikproben (blau) und Nachverdichtung (rot) im Querschlag 1 West (Whisker-Plots, Einzelproben und Häufigkeitsverteilung). 93
- Abb. 61: Darstellung der C_1 - C_{40} -KW-Gehalte in den einzelnen Kernen der Probensätze Statistikproben (Quadrate) und Nachverdichtung (Kreise) entlang der letzten Kernmärsche von 4,5 bis 6 m. 94
- Abb. 62: Molekulare Zusammensetzung der Gase ausgedrückt als Verhältnis $C_1/(C_2+C_3)$ sowie die Kohlenstoff-Isotopenzusammensetzung von

	Methan aller untersuchten Proben.	95
Abb. 63:	Daten der untersuchten Hauptsalz-Proben aus den Kurzbohrungen mit Einzelwerten im Bernard-Diagramm einschließlich einer hypothetischen Mischungslinie zwischen einem thermischen und bakteriellen Gas. (Typ I Gase, Typ II Gase und Felder-Abgrenzung - siehe GERLING et al. 2002).	96
Abb. 64:	Daten der untersuchten Kurzbohrungen (Mittelwerte mit Fehlerbalken) und der Vergleichsdaten aus dem Querschlag 1 West aus GERLING et al. (2002). (Typ I Gase, Typ II Gase und Felder-Abgrenzung - siehe GERLING et al. 2002).	97
Abb. 65:	Methan- und Ethan- $\delta^{13}\text{C}$ -Werte der untersuchten Proben und der Vergleichsdaten aus dem Querschlag 1 West aus GERLING et al. (2002). $\delta^{13}\text{C}$ -Ausgangswerte für die Berechnung der Reifelinien -23‰ für terrigenes Muttergestein und -26‰ für die organische Ausgangssubstanz im Staßfurtkarbonat (analog GERLING et al., 2002) (Typ I Gase und Typ II Gase - siehe GERLING et al. 2002).	98
Abb. 66:	Kohlenstoff-Isotopenwerte von Ethan und Propan der untersuchten Proben aus dem Querschlag 1 West und eine angenommene sapropelitische Reifelinie. (Typ I Gase - siehe GERLING et al. 2002).	99
Abb. 67:	Darstellung von drei Beispielchromatogrammen der höher siedenden KW-Verbindungen. Dargestellt ist eine Probe (braun, hohe Gehalte) mit dominierenden n-Alkanen bis über nC_{35} hinaus, eine Probe (grün, mittlere Gehalte) mit dominierenden verzweigten KW – den Isoprenoiden Pristan und Phytan, und eine Probe (schwarz, sehr geringe Gehalte unter Bestimmungsgrenze) mit einem ungewöhnlichen Muster von n-Alkanen im mittleren Kettenlängenbereich.	100
Abb. 68:	Schematische Darstellung des Querschlages 1 West mit den Orientierungen der KW-Packerbohrungen im Bereich der Zutrittsstellen RF081, RF077 und RF086 (PAUL et al. 2011).	104
Abb. 69:	Schematische Darstellung des Querschlages 1 West und Bohrortes 1.4 mit den Orientierungen der KW-Packerbohrungen und der Vorbohrung RB763 (PAUL et al. 2011).	105
Abb. 70:	KW-Messgestell mit Sensoren (PAUL et al., 2011).	106
Abb. 71:	Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB683 unter Normbedingungen.	110
Abb. 72:	Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB685 unter Normbedingungen.	111
Abb. 73:	Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB686 unter Normbedingungen.	112
Abb. 74:	Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB687 unter Normbedingungen.	112

Abb. 75:	Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB688 unter Normbedingungen.	113
Abb. 76:	Kumulatives Gas- und Kondensatvolumen aus der Bohrung RB689 unter Normbedingungen.	113
Abb. 77:	Verteilung der KW-führenden Bereiche in der Bohrung RB688 unter Tageslicht und UV-Strahlung.	114
Abb. 78:	Zeitlicher Ablauf der berechneten Massenfließrate und des gemessenen Intervalldruckes in der Bohrung RB688.	115
Abb. 79:	Gemessener Druckaufbau in der Bohrung RB687.	117
Abb. 80:	Extrapolation des Druckes in der Anfangsphase in der Bohrung RB688.	118
Abb. 81:	Durchlässigkeiten in den Kurzbohrungen im Querschlag 1 West über die Bohrungstiefe aufgetragen.	123
Abb. 82:	Kurzzeit-Bruchgrenze und Dilatanzgrenzen (Gl. 20, rot) und (Gl. 21, grün) mit Darstellung der Ergebnisse aus verschiedenen Detektionsverfahren (aus: SCHULZE 2007).	128
Abb. 83:	Vergleich der Bruchfestigkeit und der Dilatanzgrenze (Gl. 21) in der $\Delta\sigma = f(\sigma_{\min})$ -Darstellung für Kompression ($m = -1$) und Extension ($m = +1$).	129
Abb. 84:	Zusammenstellung verschiedener Formulierungen für die Dilatanzgrenze zum Lastpfad "Kompression" ($m = -1$) (aus: SCHULZE 2007).	130
Abb. 85:	Verschiebung eines Spannungszustands bei Porendruck-Wirkung relativ zur Kurzzeit-Bruchgrenze und zur Dilatanzgrenze (Gl. 21).	133
Abb. 86:	Triaxial-Kriechversuch (99179) an z2HS3-Steinsalz aus der Bohrung RB119.	144
Abb. 87:	Triaxial-Kriechversuch (98224) an z2HS2-Steinsalz aus der Bohrung RB210 (12.74 m).	145
Abb. 88:	Triaxial-Kriechversuch (98225) an z2HS2-Steinsalz aus der Bohrung RB210 (14.22 m).	146
Abb. 89:	Triaxial-Kriechversuch (98237) an z2HS3-Steinsalz aus der Bohrung RB210 (31.28 m).	147
Abb. 90:	Triaxial-Kriechversuch (00071) an z2HS1-Steinsalz aus der Bohrung RB341 (6.21 m); Zugabe von NaCl-Lösung ($< 1 \text{ cm}^3$) am 230-ten Versuchstag.	148
Abb. 91:	Triaxial-Kriechversuch (99017) an z2HS1-Steinsalz aus der Bohrung RB341 (13.51 m).	149
Abb. 92:	Triaxial-Kriechversuch (00072) an z2HS1-Steinsalz aus der Bohrung RB341 (19.37 m); Zugabe von NaCl-Lösung ($< 1 \text{ cm}^3$) am 230-ten Versuchstag.	150

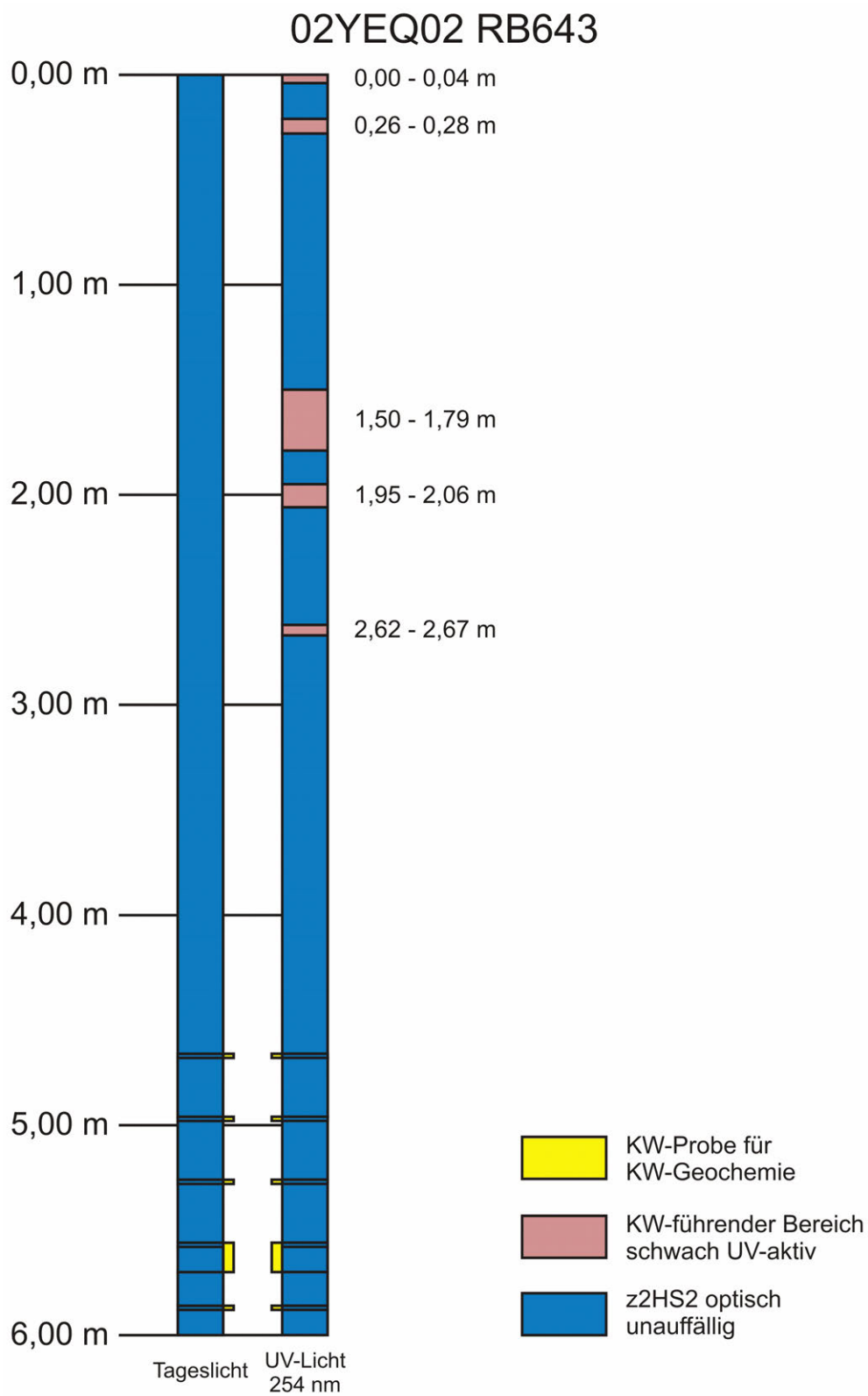
Abb. 93:	Triaxial-Kriechversuch (00073) an z2HS1-Steinsalz aus der Bohrung RB341 (23.06 m) mit Temperatur-Wechsel (30 °C > 50 °C).	151
Abb. 94:	Triaxial-Kriechversuche aus Abb. 90 und Abb. 92; mit und ohne Dilatanz-Wirkung, Zugabe von NaCl-Lösung am 230-ten Tag.	154
Abb. 95:	Messung der thermisch induzierten Längenänderung bei isostatischer Einspannung ($p_{iso} = 20$ MPa) an einem Aluminium-Prüfkörper als Referenz zum Kalibrieren der Mess-Strecke. Der Graph „alpha_ALU+System“ folgt aus der ermittelten Temperaturempfindlichkeit von Prüfkörper und Mess-System.	156
Abb. 96:	Lineare Anpassung zur Ermittlung der T-Empfindlichkeit an die Ideal-Kurve für Aluminium und an die Messwerte für das Gesamt-System. Durch den Daten-Filter werden nur die Messwerte innerhalb einer Phase mit konstanter Temperatur berücksichtigt.	157
Abb. 97:	Messung der thermisch induzierten Längenänderung bei isostatischer Einspannung ($p_{iso} = 20$ MPa) am Steinsalz-Prüfkörper Asse-Speisesalz, z2SP; File: 08039 als Referenz zum Kalibrieren der Mess-Strecke. Der Graph „alpha_Salz+System“ folgt aus der ermittelten Temperaturempfindlichkeit von Prüfkörper und Mess-System.	158
Abb. 98:	Lineare Anpassung zur Ermittlung der T-Empfindlichkeit an die Ideal-Kurve für den Steinsalz-Prüfkörper (08039) aus Asse-Speisesalz und an die Messwerte für das Gesamt-System. Durch den Daten-Filter werden nur die Messwerte innerhalb einer Phase mit konstanter Temperatur berücksichtigt. Die lineare Anpassung trifft für alle Phasen im Temperatur-Programm zu.	158
Abb. 99:	Messung der thermisch induzierten Längenänderung bei isostatischer Einspannung ($p_{iso} = 20$ MPa) am Steinsalz-Prüfkörper GoEB1RB793/004/06, z2HS1; File: 11079. Der Graph „alpha_Salz+System“ folgt aus der Temperaturempfindlichkeit von Prüfkörper und Mess-System.	159
Abb. 100:	Lineare Anpassung zur Ermittlung der T-Empfindlichkeit für den Steinsalz-Prüfkörper (11079) und an die Messwerte für das Gesamt-System. Durch den Daten-Filter werden nur die Messwerte innerhalb einer Phase mit konstanter Temperatur berücksichtigt. Die lineare Anpassung erreicht asymptotisch erst im dritten Zyklus des Temperatur-Programms den stabilen Endwert.	160
Abb. 101:	Messung der thermisch induzierten Längenänderung bei isostatischer Einspannung ($p_{iso} = 20$ MPa) am Steinsalz-Prüfkörper GoEB1RB793/005/02, z2HS1; File: 11080. Der Graph „alpha_Salz+System“ folgt aus der Temperaturempfindlichkeit von Prüfkörper und Mess-System.	160

- Abb. 102: Lineare Anpassung zur Ermittlung der T-Empfindlichkeit für den Steinsalz-Prüfkörper (11080) und an die Messwerte für das Gesamt-System. Durch den Daten-Filter werden nur die Messwerte innerhalb einer Phase mit konstanter Temperatur berücksichtigt. Die lineare Anpassung erreicht asymptotisch erst im dritten Zyklus des Temperatur-Programms den stabilen Endwert. 161
- Abb. 103: Hochdruckreaktor für Aufheizversuche an Hauptsalz-Prüfkörpern aus dem Salzstock Gorleben. 164
- Abb. 104: Möglicher Aufbau des Messarbeitsplatzes für die Aufheizversuche an den Hauptsalz-Prüfkörpern. 165
- Abb. 105: Halter für Proben für die geplanten Modellreaktionen in verschweißten Goldkapseln. 166
- Abb. 106: Temperaturprofil einer auf 300 °C aufgeheizten Probe. Computer-gesteuerte Aufheiz- und Abkühlraten schonen die Salzproben im Hinblick auf Rissbildung durch thermisch bedingte Ausdehnung, bzw. Kontraktion. Die rote Linie beschreibt einen natürlichen, nicht kontrollierten Abkühlverlauf, wie er bei den auf 200 °C aufgeheizten Proben bedingt durch das Abschalten des Wärmeofens entsteht. 167
- Abb. 107A: Fluidverteilungen auf intrakristallinen Anhydriteinschlüssen in getemperten Salzproben. Fluidphasen schwärzen die Oberflächen des Kristalls nach der Aufheizung (RB653.007_350). Bildbreite 500 µm. Photo: N. Thiemeyer. 169
- Abb. 107B: Durch Aufheizung der Proben können Fluidphasen durch eine Umverteilung variabler auftreten (RB652.010_2_350). Bildbreite 400 µm. Photo: N. Thiemeyer. 169
- Abb. 107C: Die Temperaturerhöhungen sorgen für „wachsende“ Fluidtropfen. Ihre Anzahl nimmt dadurch ab, bis teilweise nur noch einzelne Tropfen übrigbleiben (sehr kleine Einschlüsse bei a) rechts oben). Bildbreite 180 µm. Photo: N. Thiemeyer. 169
- Abb. 107D: Nicht aufgeheizte Probe zum Vergleich. Die Fluidphasen sind in ihrer Tropfenform einheitlich und zahlreicher (RB661.006s). Bildbreite 500 µm. a) bis d) unter parallelen Nicols im Durchlicht, Photo: N. Thiemeyer. 169

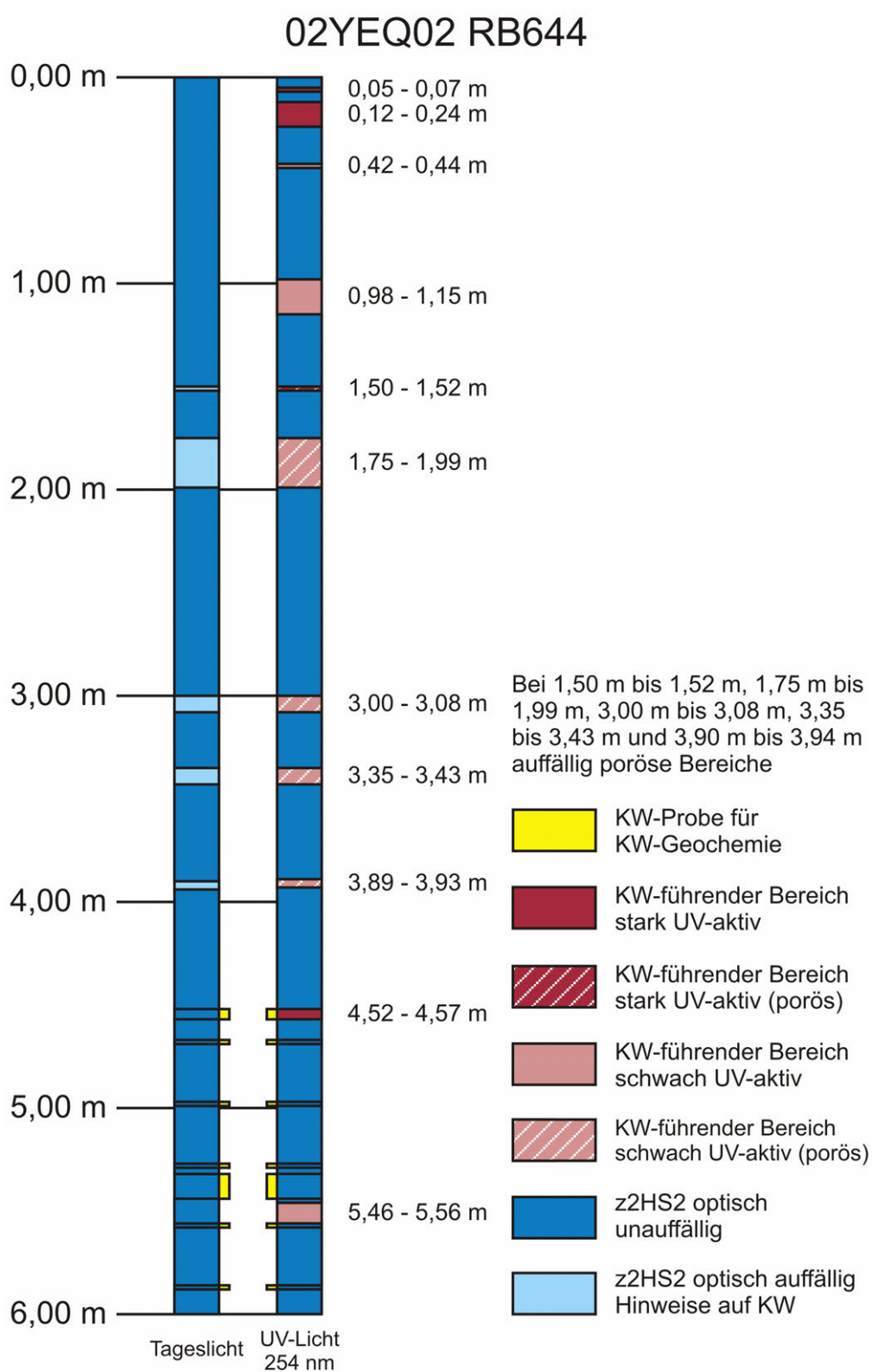
Anhangsverzeichnis	Seite
Anhang 1.1: KW-Profil RB643	199
Anhang 1.2: KW-Profil RB644	200
Anhang 1.3: KW-Profil RB645	201
Anhang 1.4: KW-Profil RB646	202
Anhang 1.5: KW-Profil RB647	203
Anhang 1.6: KW-Profil RB648	204
Anhang 1.7: KW-Profil RB649	205
Anhang 1.8: KW-Profil RB650	206
Anhang 1.9: KW-Profil RB651	207
Anhang 1.10: KW-Profil RB652	208
Anhang 1.11: KW-Profil RB653	209
Anhang 1.12: KW-Profil RB654	210
Anhang 1.13: KW-Profil RB655	211
Anhang 1.14: KW-Profil RB656	212
Anhang 1.15: KW-Profil RB657	213
Anhang 1.16: KW-Profil RB658	214
Anhang 1.17: KW-Profil RB659	215
Anhang 1.18: KW-Profil RB660	216

Anhang 1.19:	
KW-Profil RB661	217
Anhang 1.20:	
KW-Profil RB662	218
Anhang 1.21:	
KW-Profil RB778	219
Anhang 1.22:	
KW-Profil RB779	220
Anhang 1.23:	
KW-Profil RB780	221
Anhang 1.24:	
KW-Profil RB781	222
Anhang 1.25:	
KW-Profil RB782	223
Anhang 2.1:	
KW-Profil Packerbohrung RB683	224
Anhang 2.2:	
KW-Profil Packerbohrung RB684	225
Anhang 2.3:	
KW-Profil Packerbohrung RB685	226
Anhang 2.4:	
KW-Profil Packerbohrung RB686	227
Anhang 2.5:	
KW-Profil Packerbohrung RB687	228
Anhang 2.6:	
KW-Profil Packerbohrung RB688	229
Anhang 2.7:	
KW-Profil Packerbohrung RB689	230
Anhang 2.8:	
KW-Profil Packerbohrung RB690	231
Anhang 2.9:	
KW-Profil Packerbohrung RB691	232
Anhang 2.10:	
KW-Profil Packerbohrung RB692	233
Anhang 3.1:	
Datensatz „Statistikproben“ Querschlag West	234
Anhang 3.2:	
Datensatz „Nachverdichtung“ Querschlag West	236

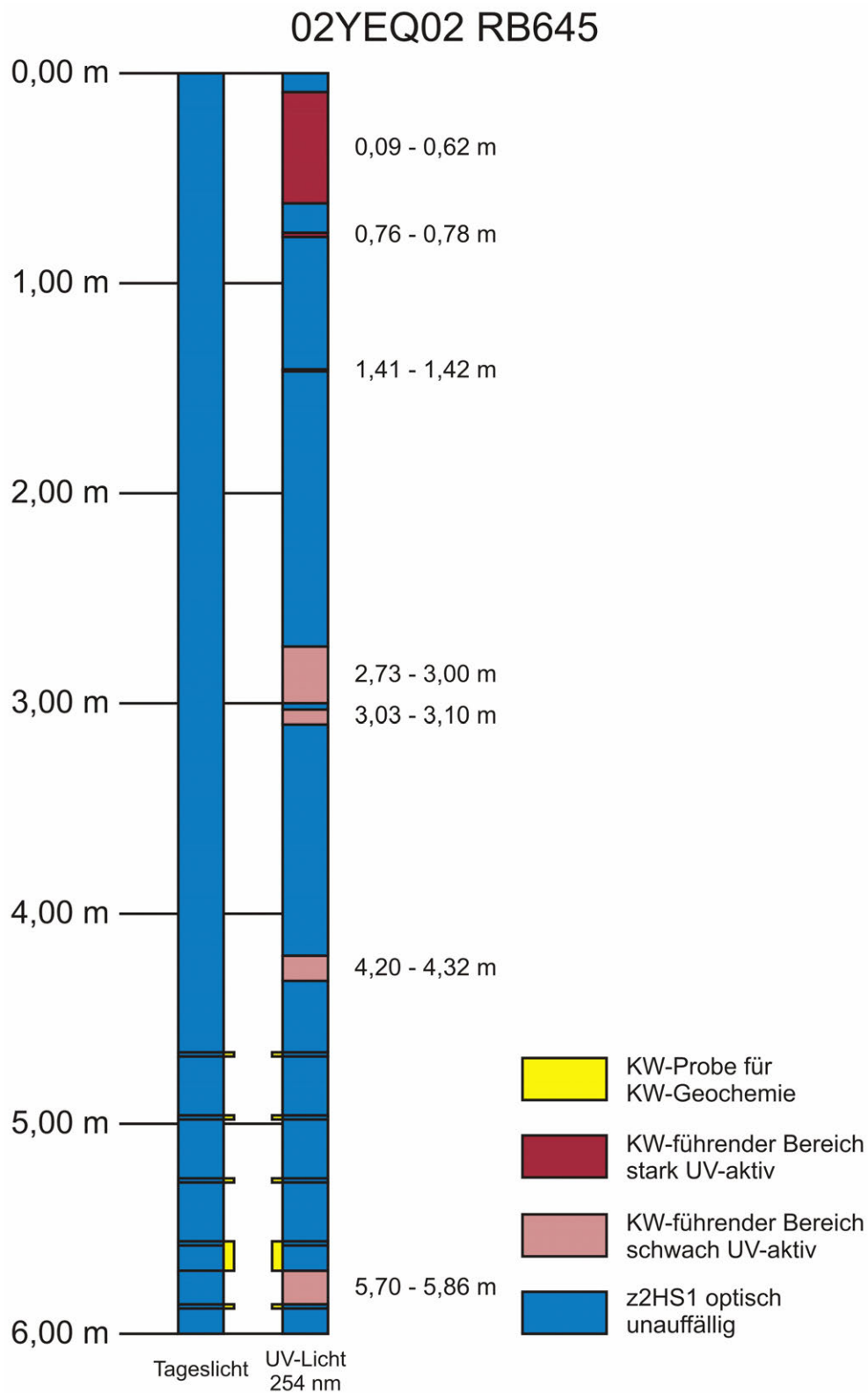
Anhang 1.1: KW-Profil RB643



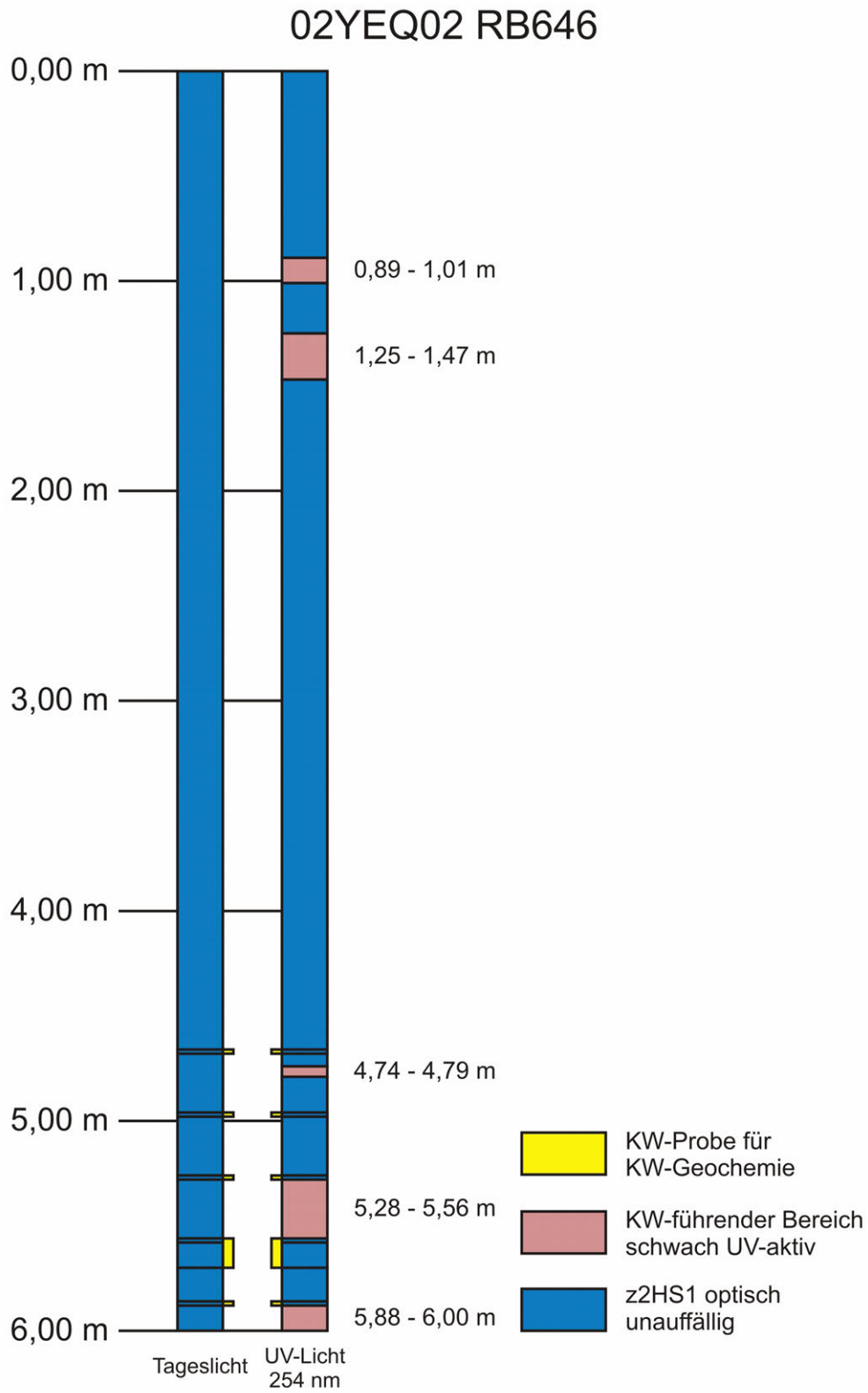
Anhang 1.2: KW-Profil RB644



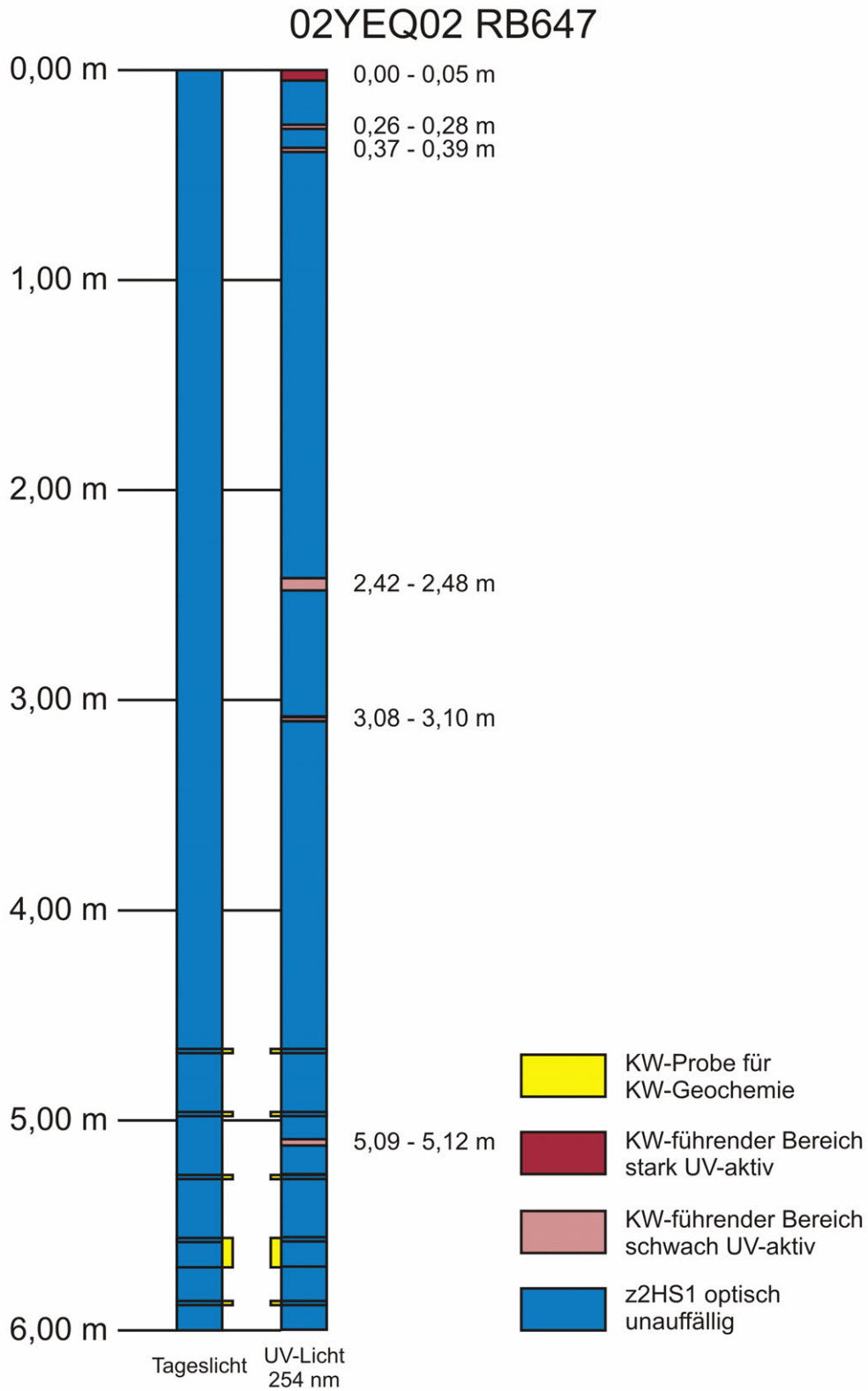
Anhang 1.3: KW-Profil RB645



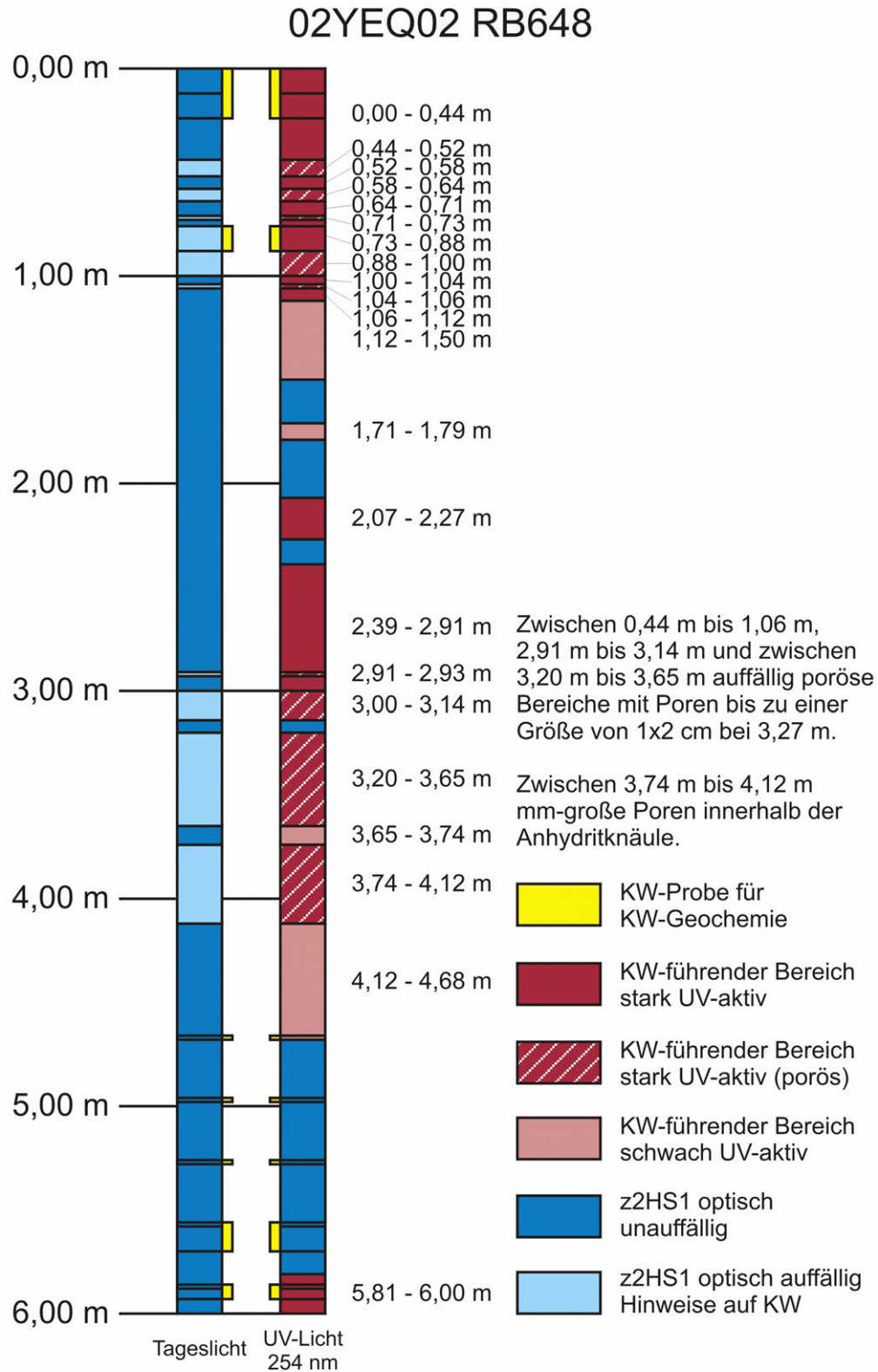
Anhang 1.4: KW-Profil RB646



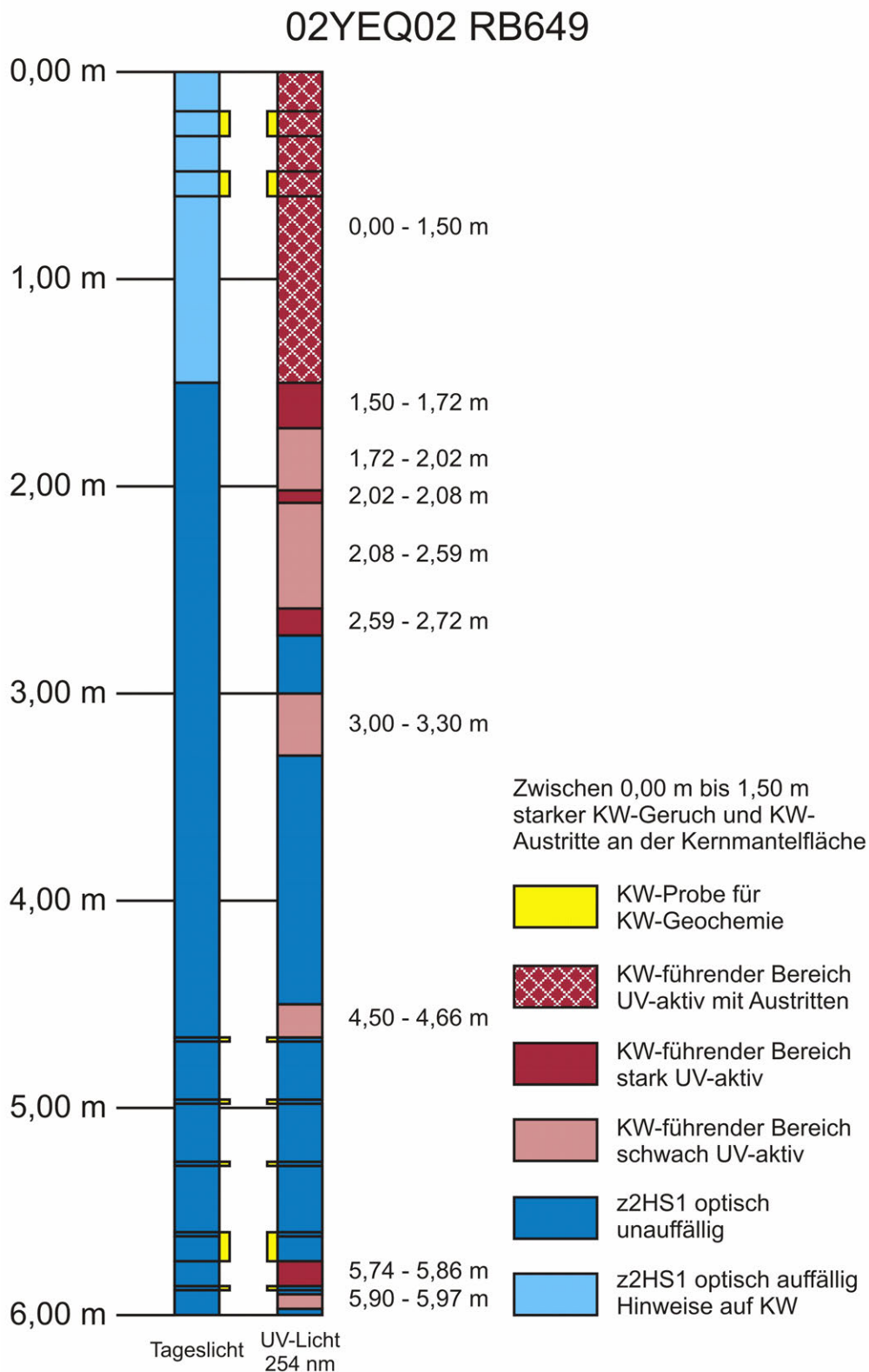
Anhang 1.5: KW-Profil RB647



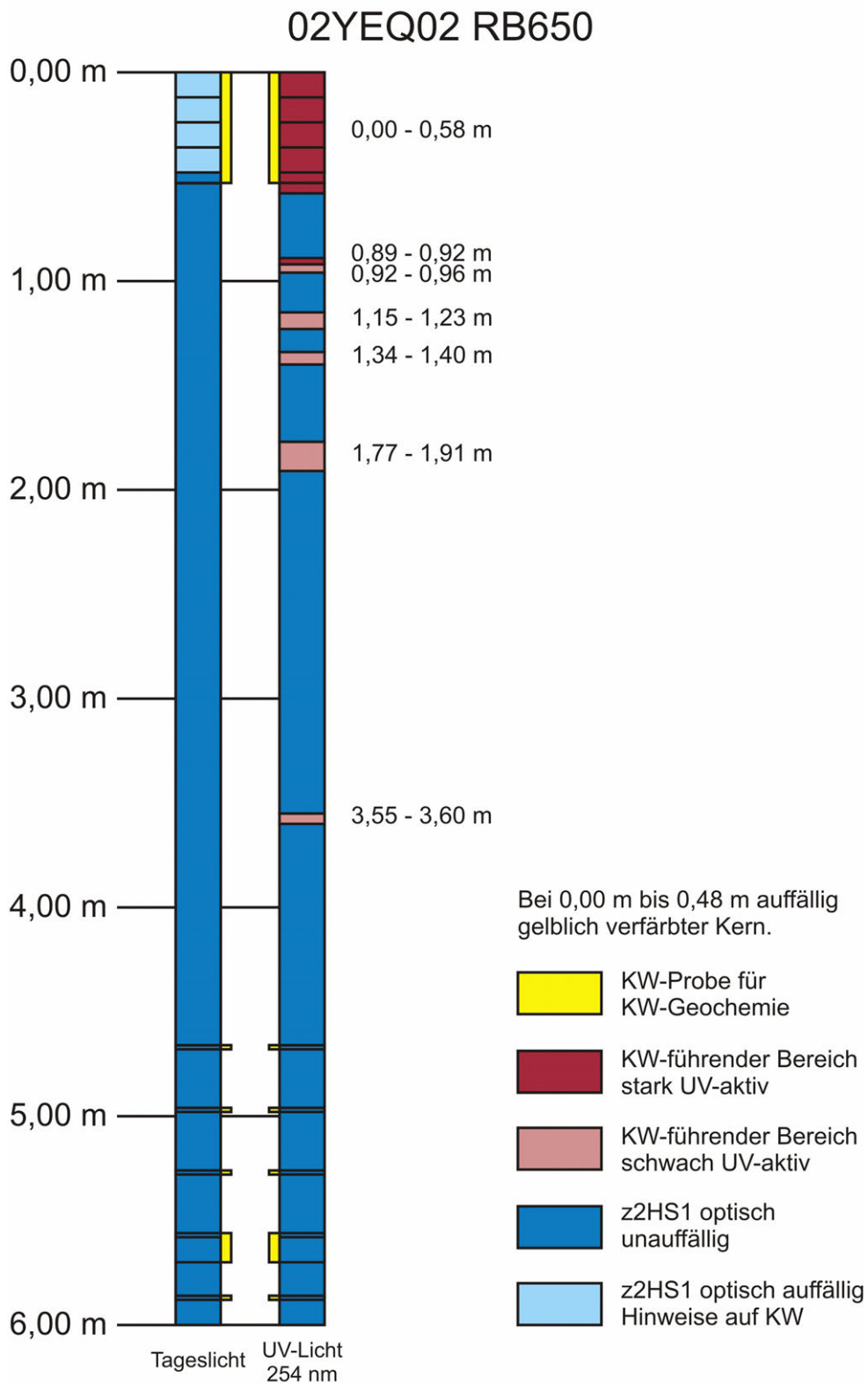
Anhang 1.6: KW-Profil RB648



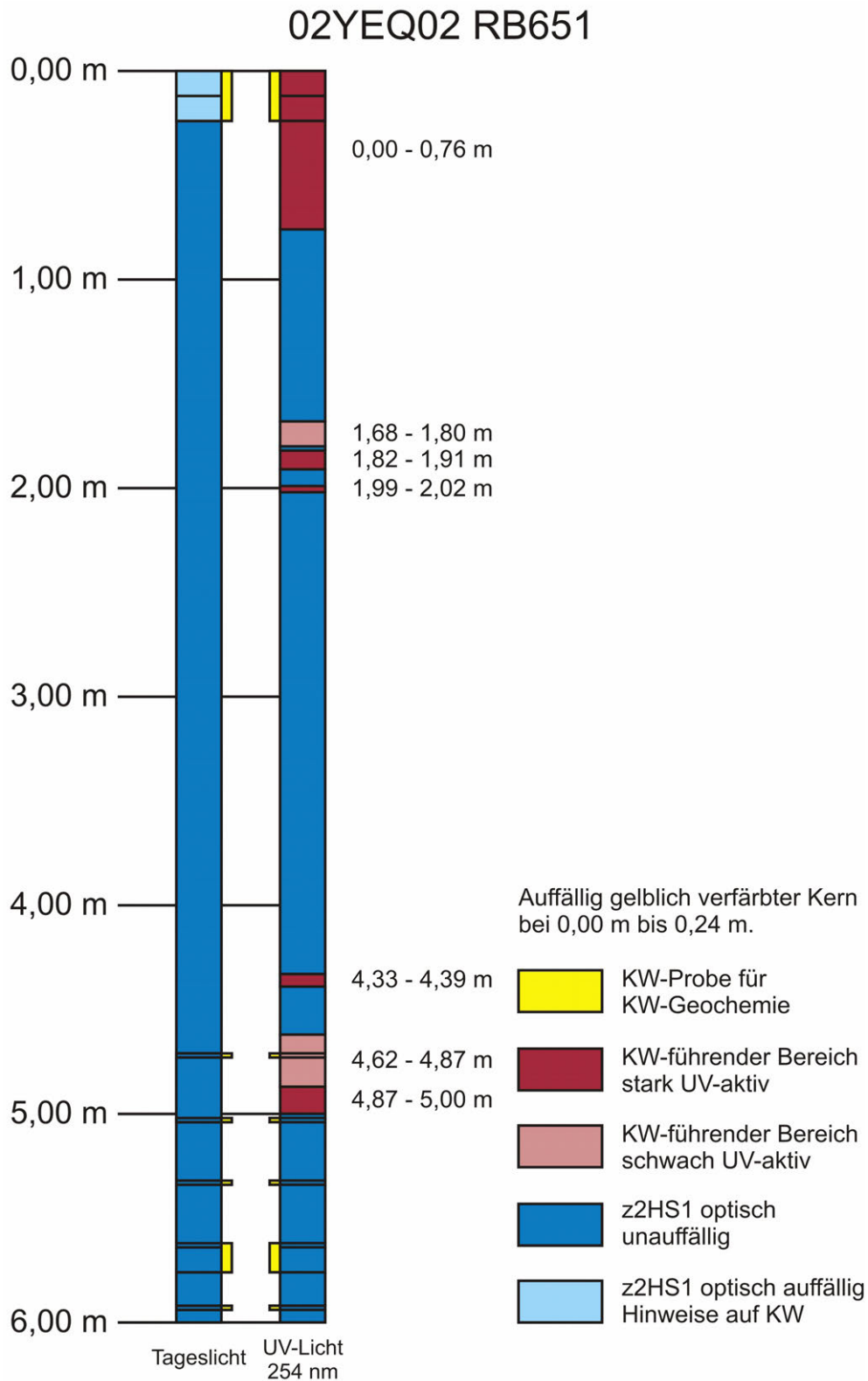
Anhang 1.7: KW-Profil RB649



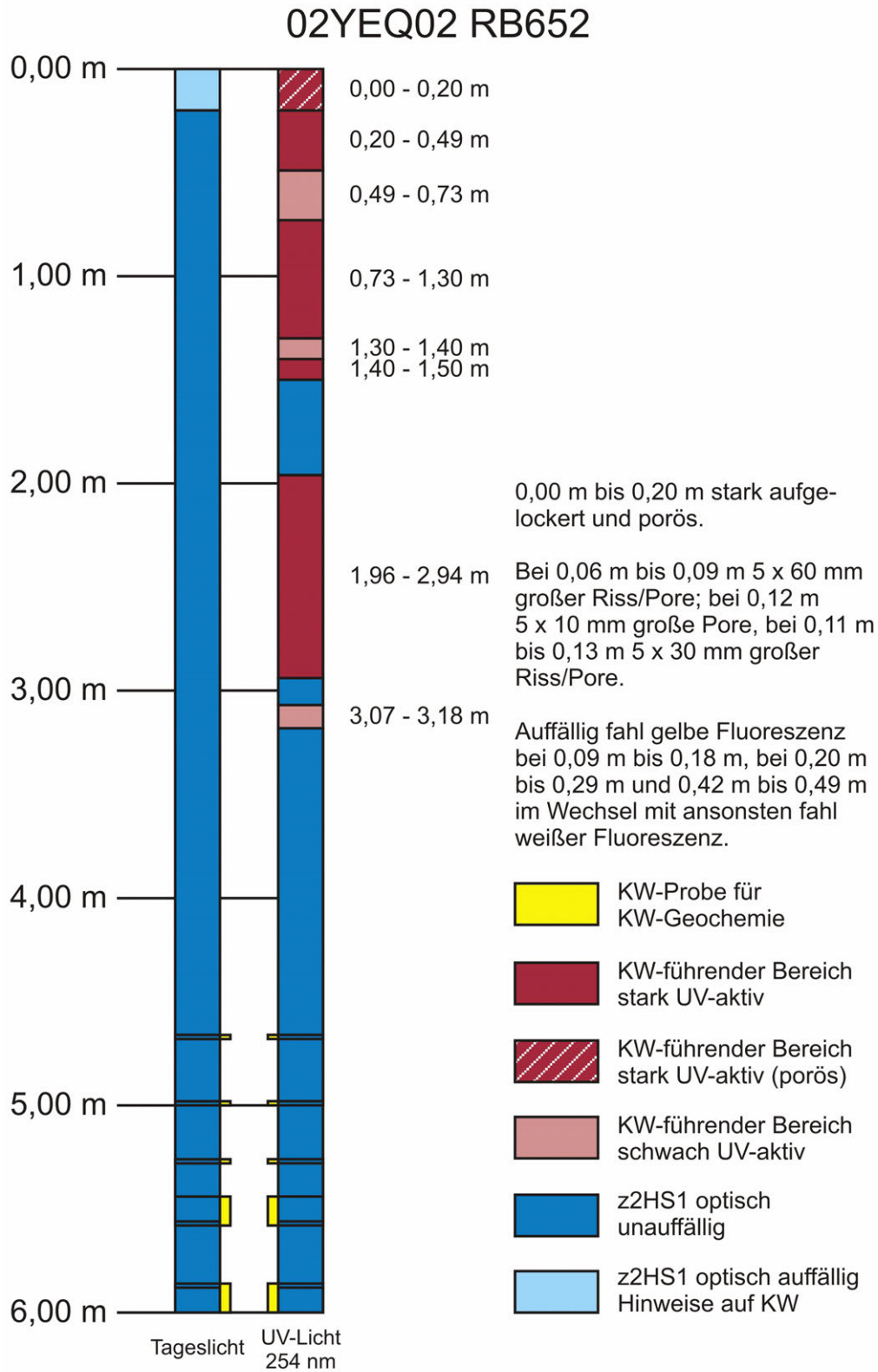
Anhang 1.8: KW-Profil RB650



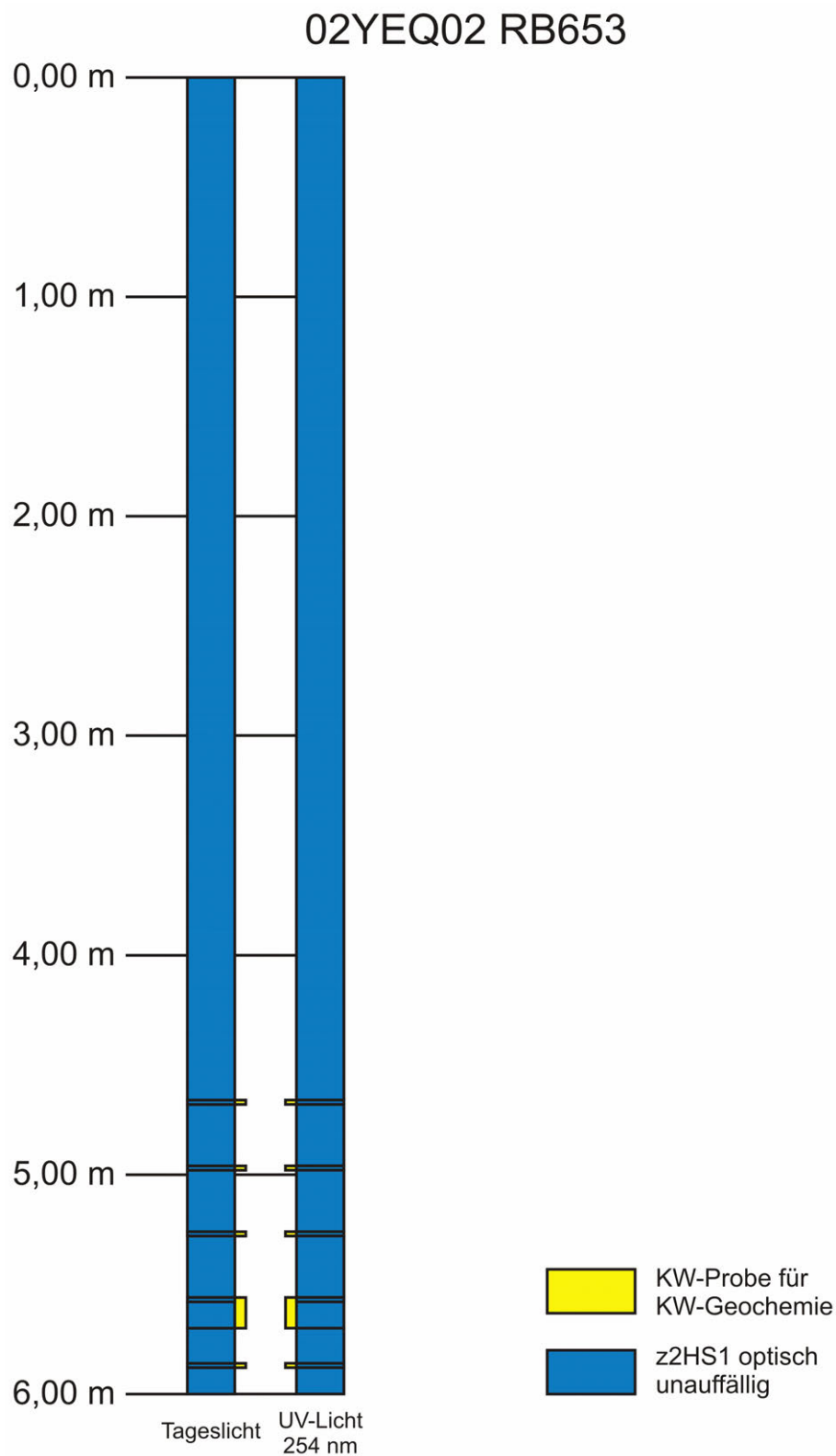
Anhang 1.9: KW-Profil RB651



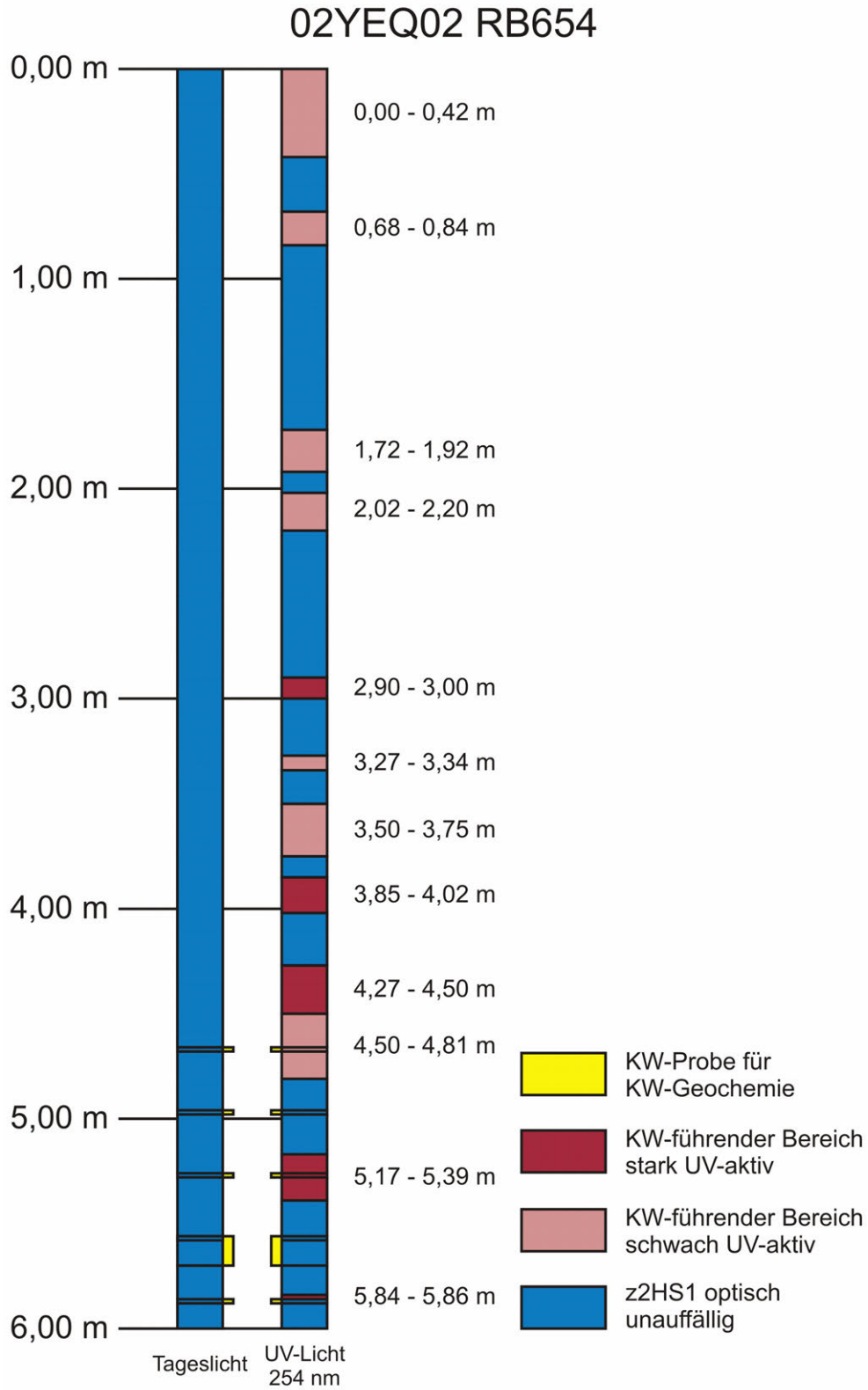
Anhang 1.10: KW-Profil RB652



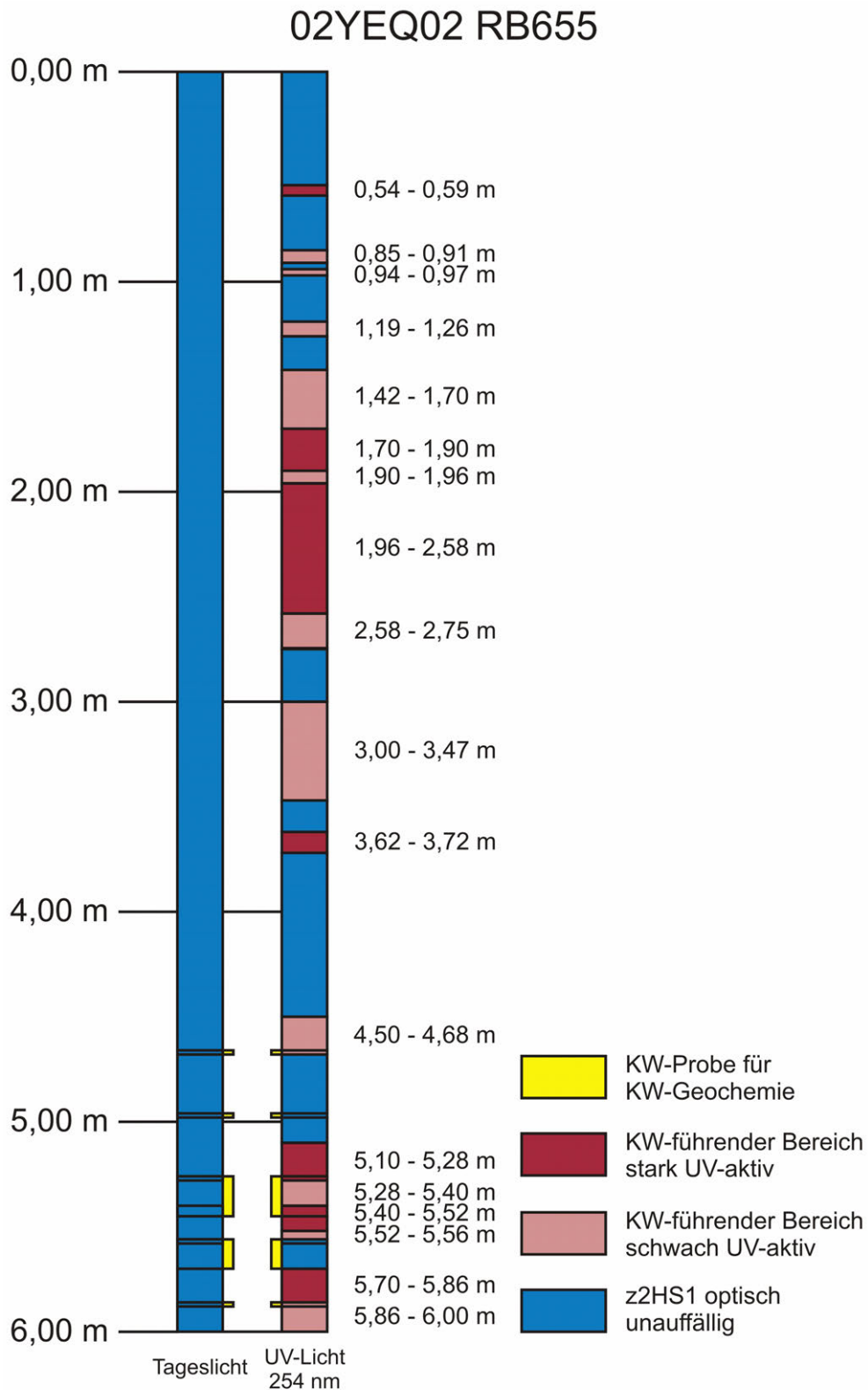
Anhang 1.11: KW-Profil RB653



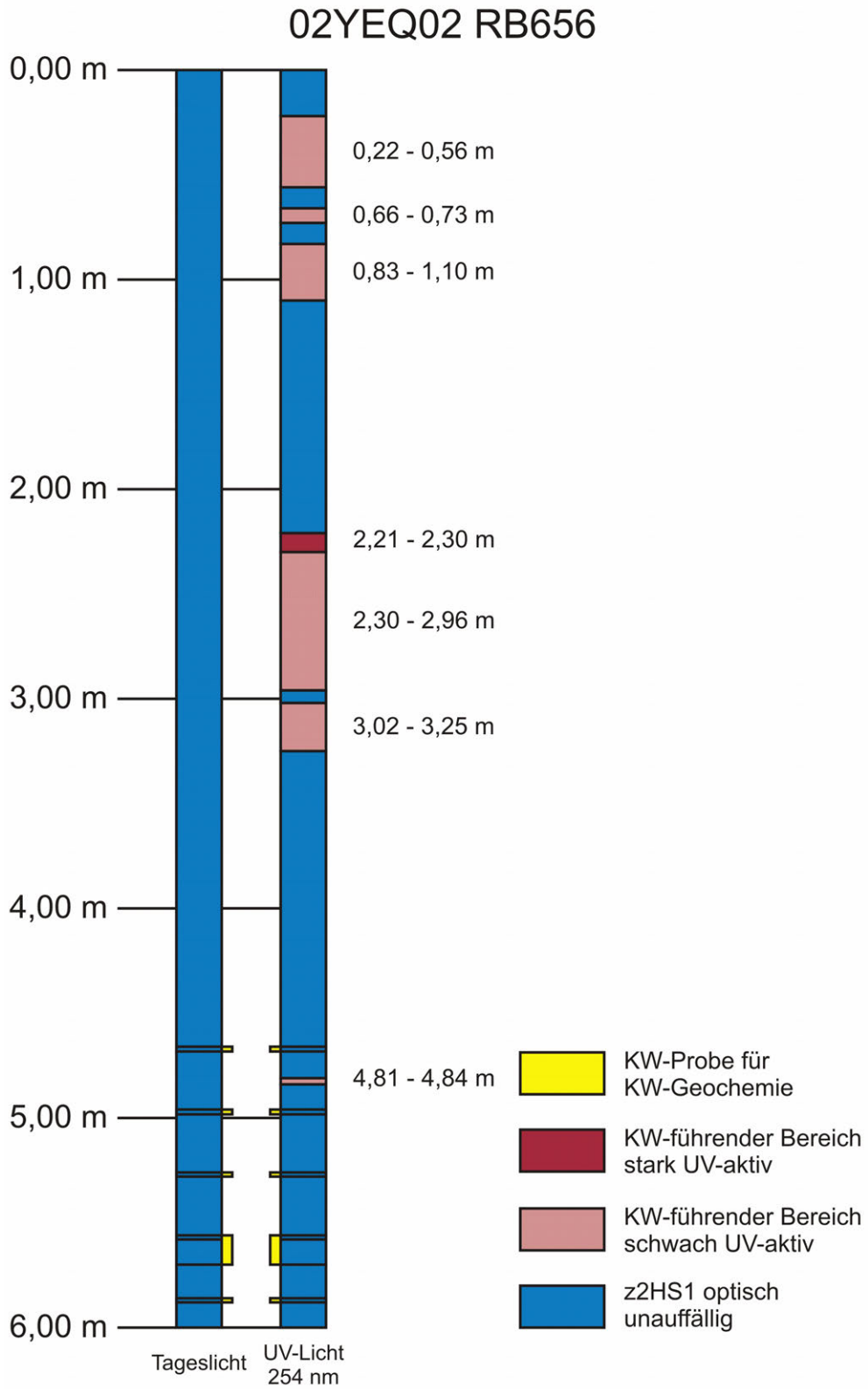
Anhang 1.12: KW-Profil RB654



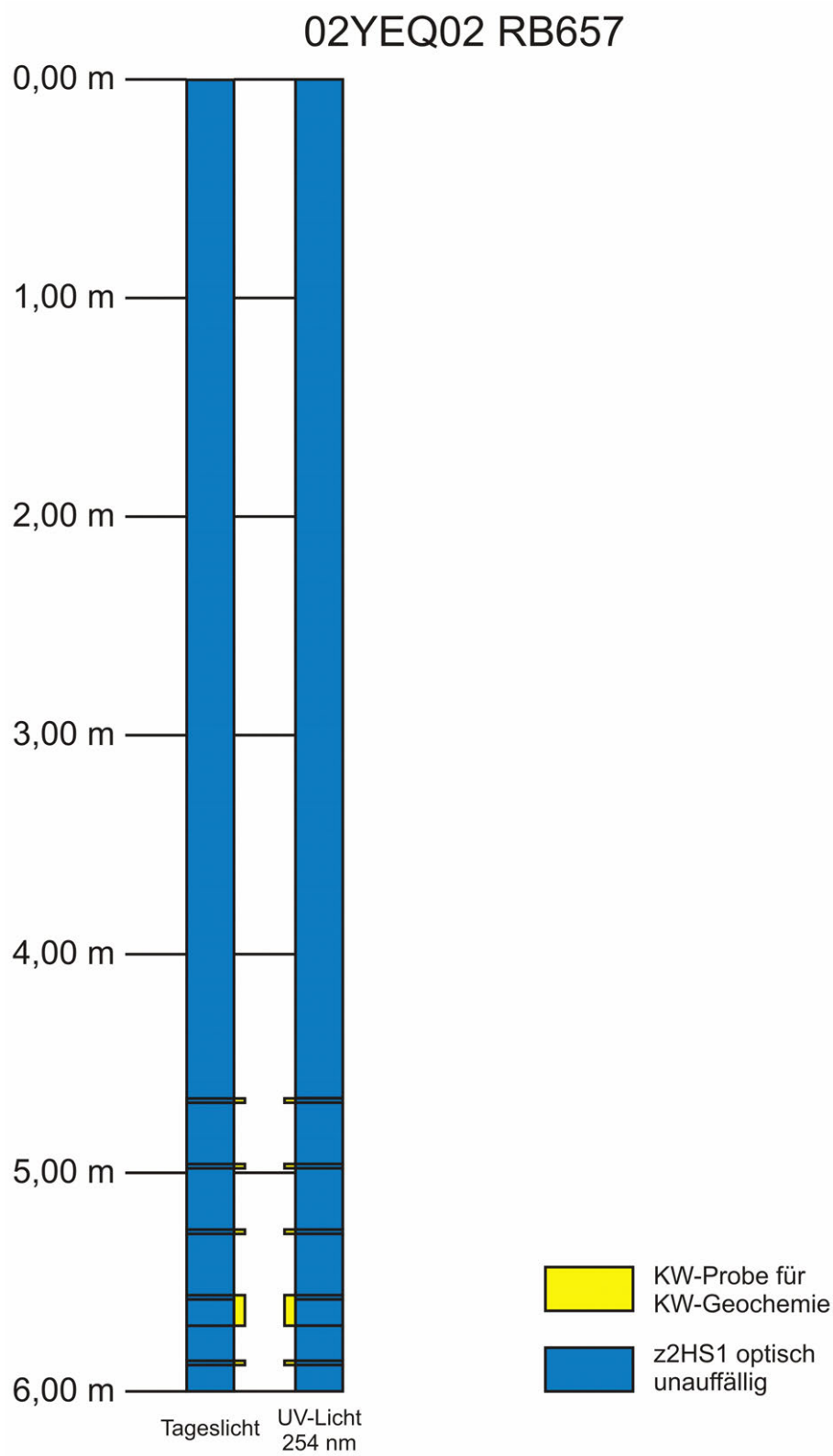
Anhang 1.13: KW-Profil RB655



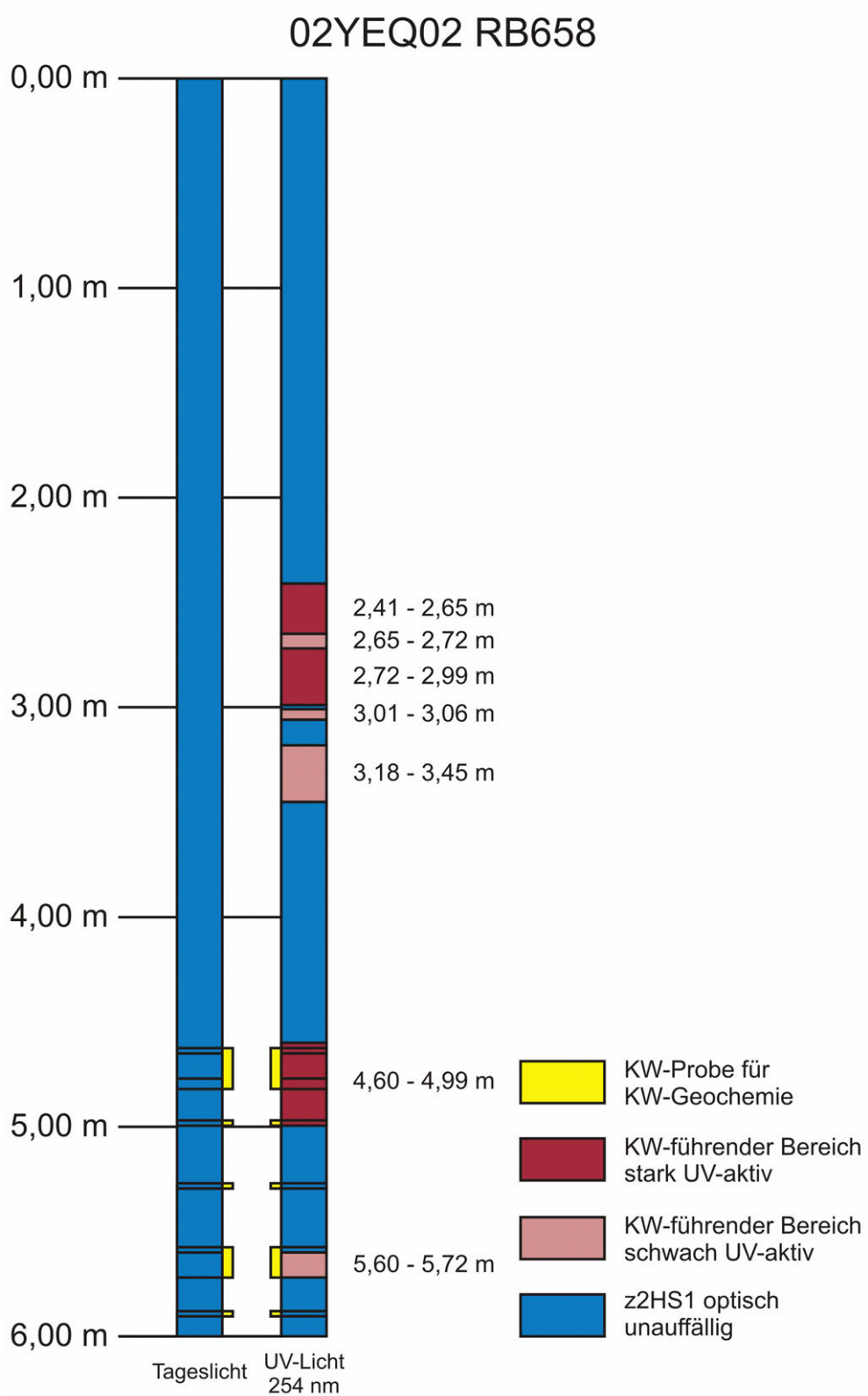
Anhang 1.14: KW-Profil RB656



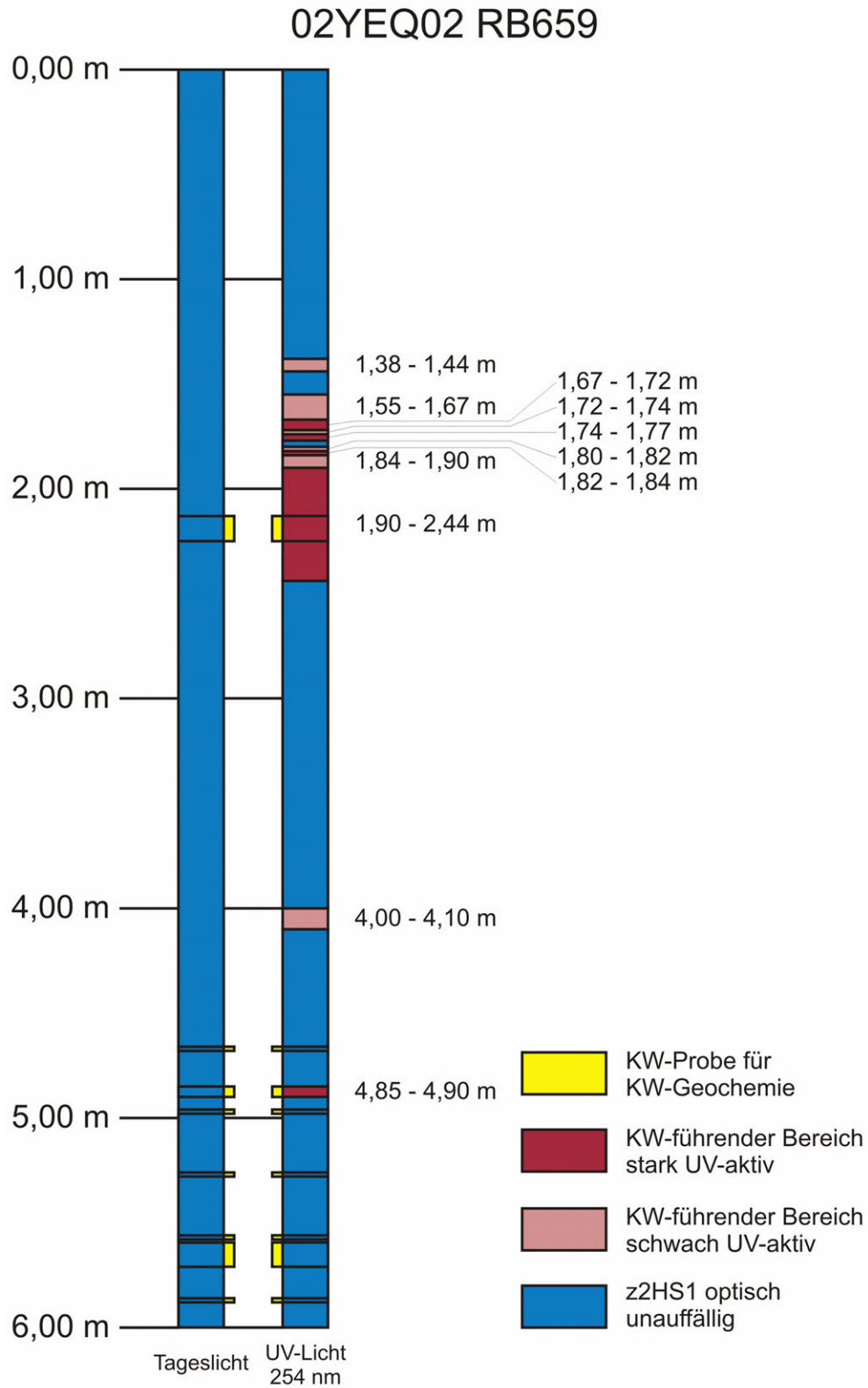
Anhang 1.15: KW-Profil RB657



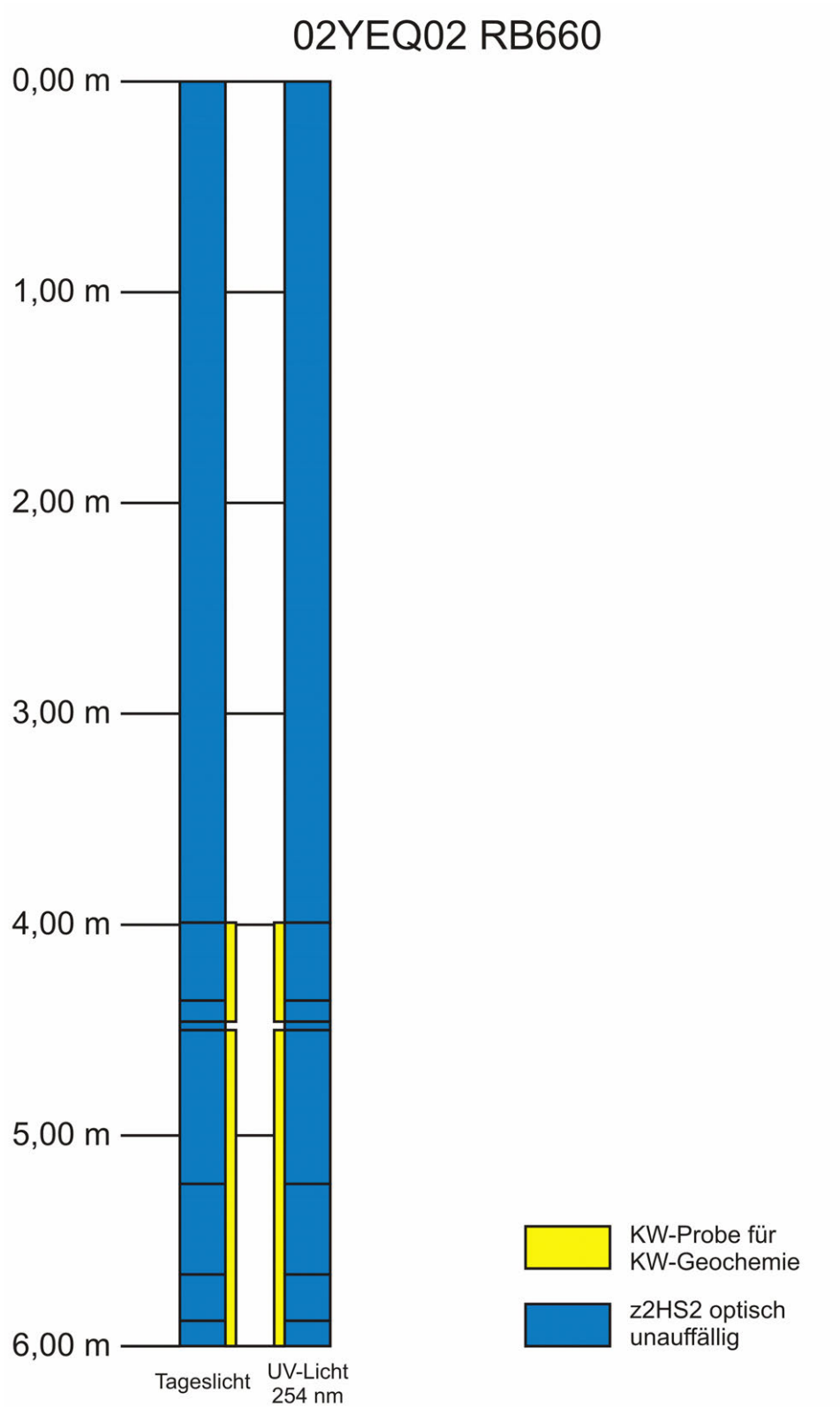
Anhang 1.16: KW-Profil RB658



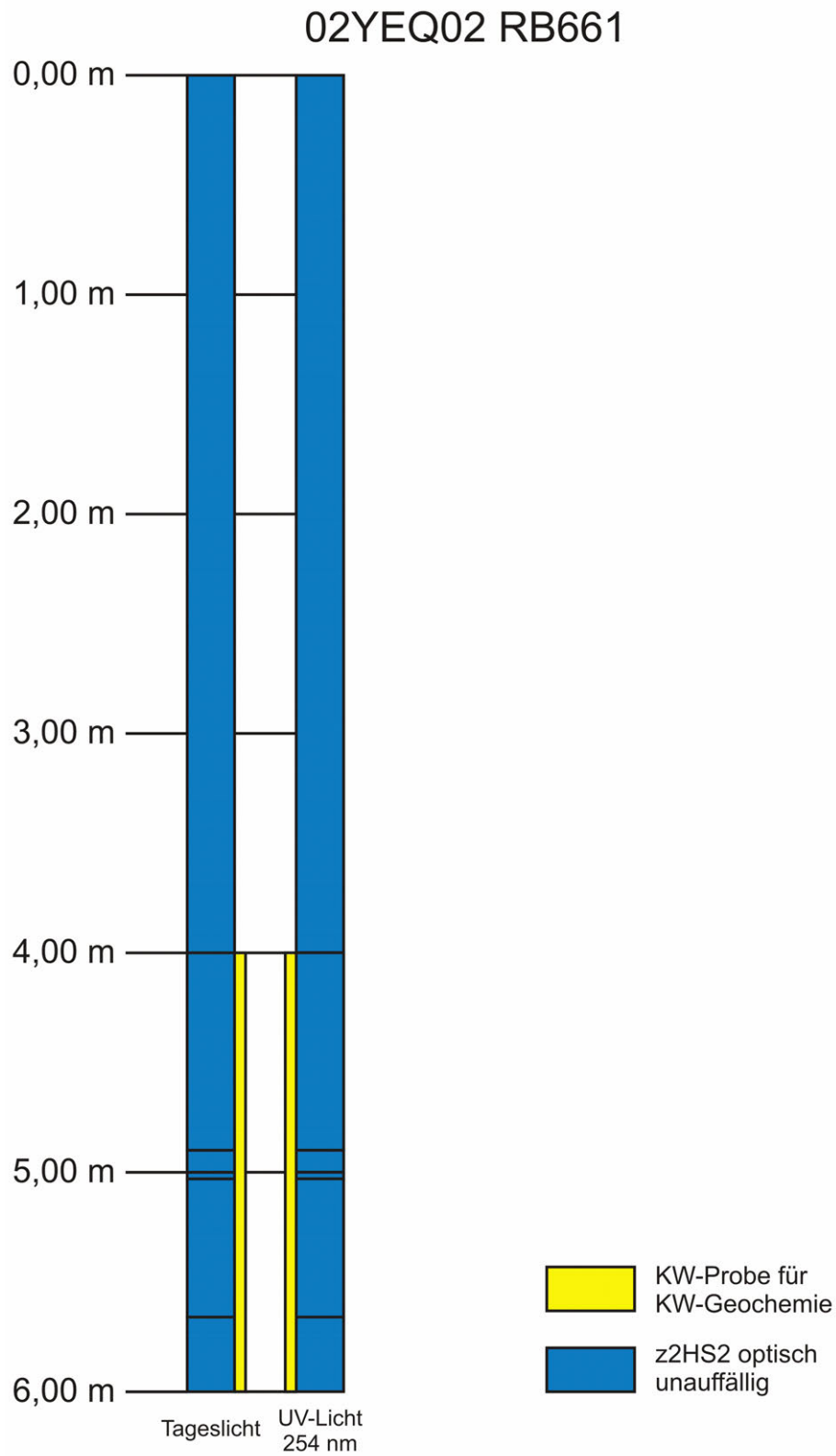
Anhang 1.17: KW-Profil RB659



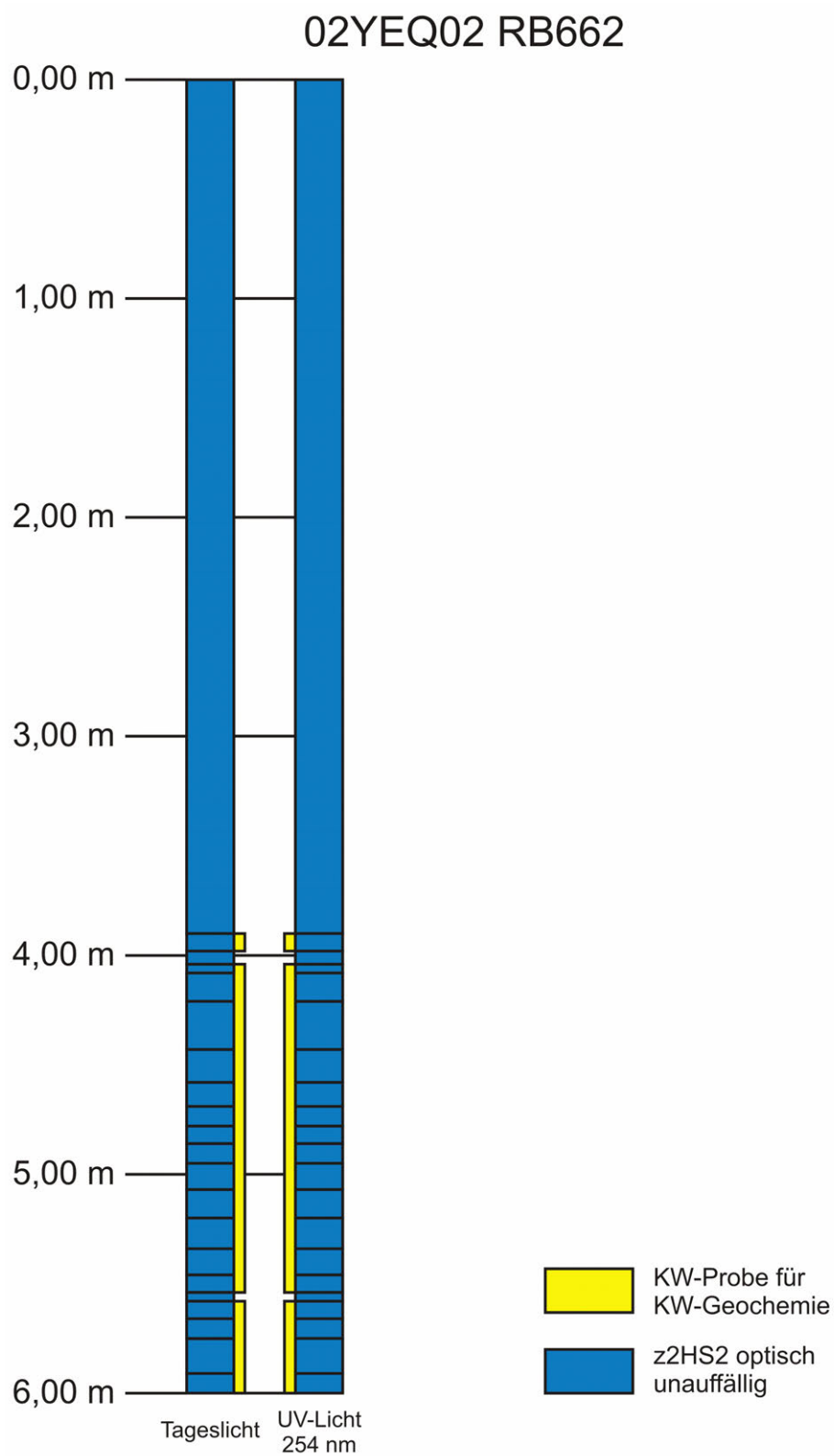
Anhang 1.18: KW-Profil RB660



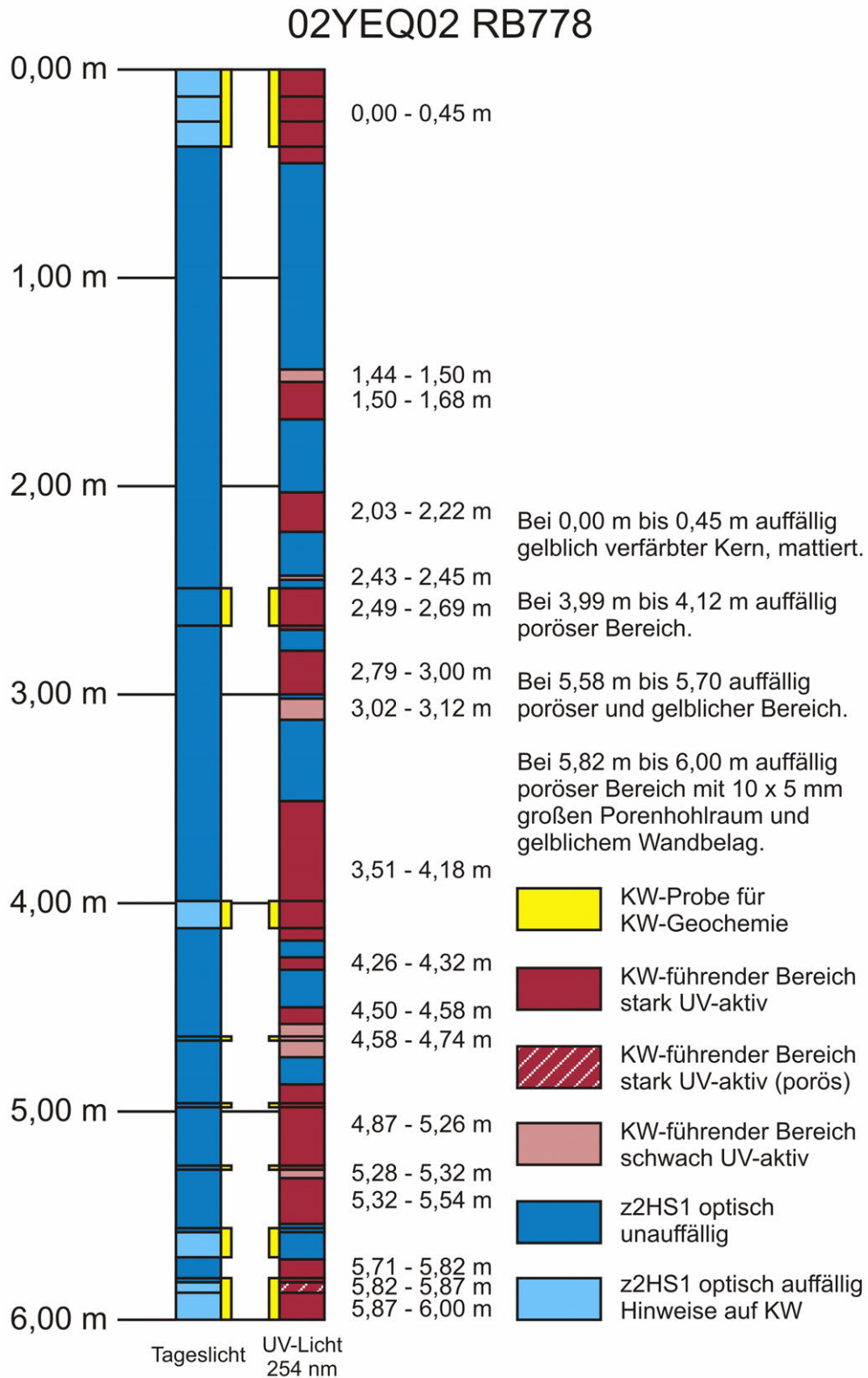
Anhang 1.19: KW-Profil RB661



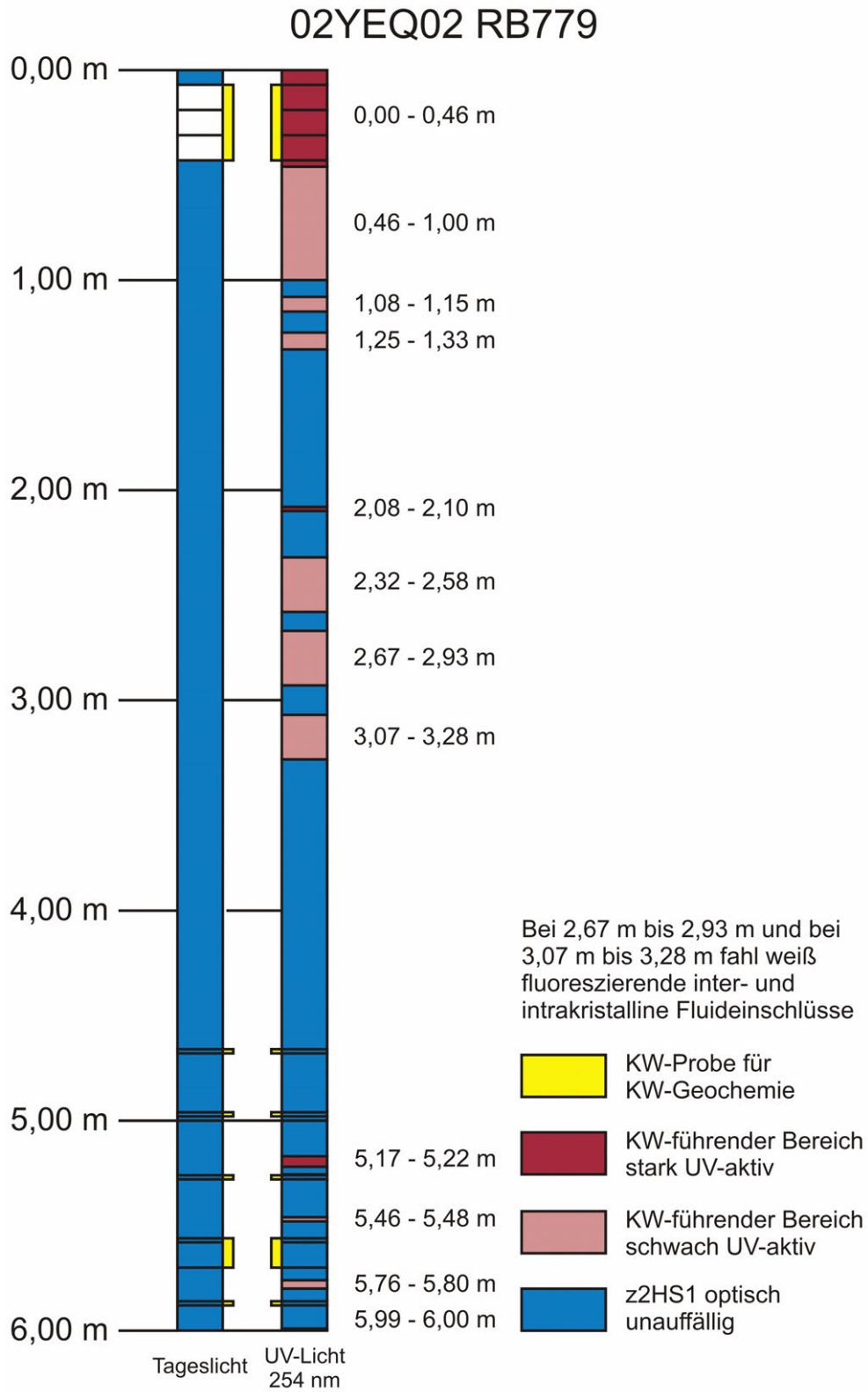
Anhang 1.20: KW-Profil RB662



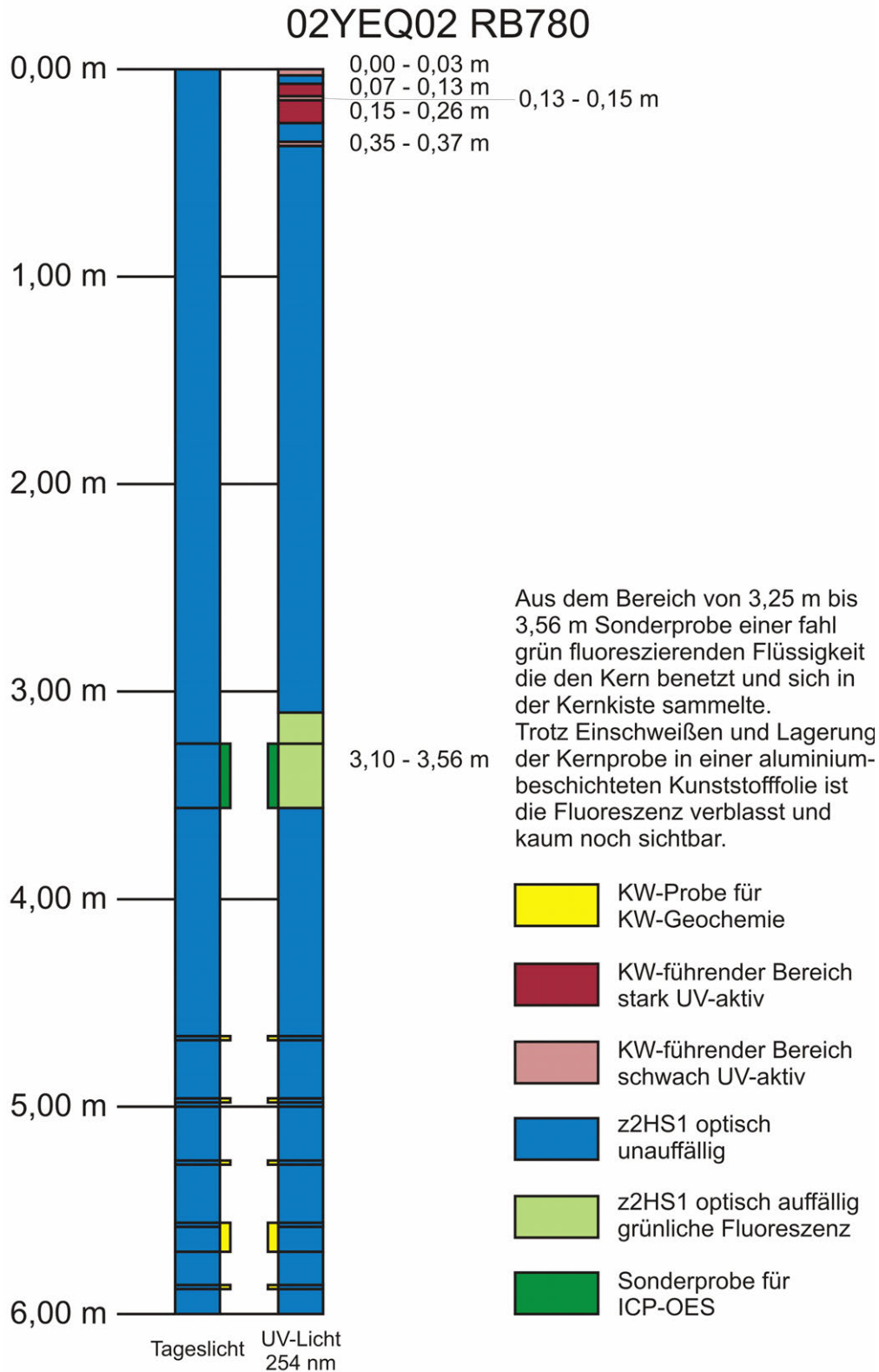
Anhang 1.21: KW-Profil RB778



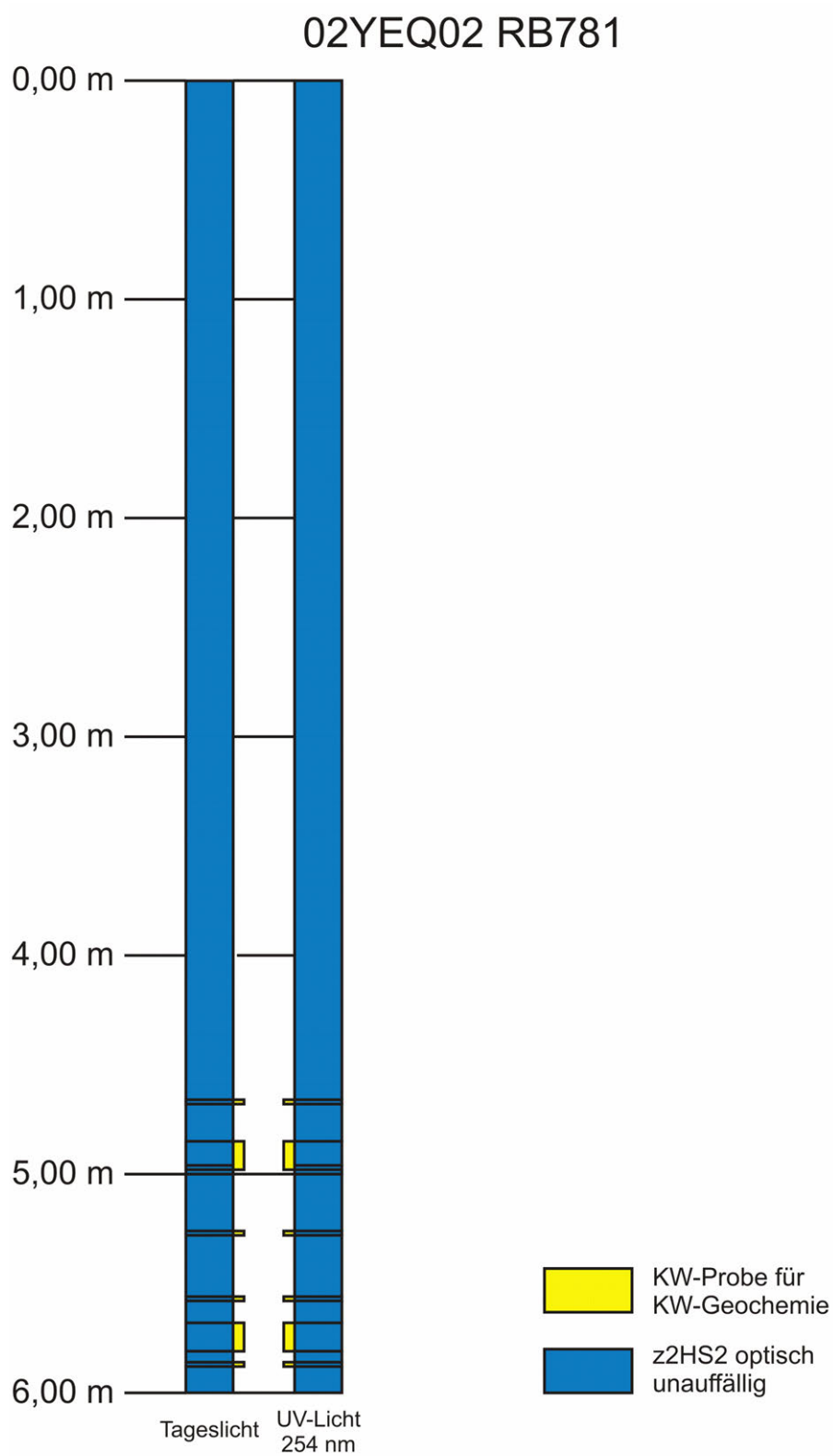
Anhang 1.22: KW-Profil RB779



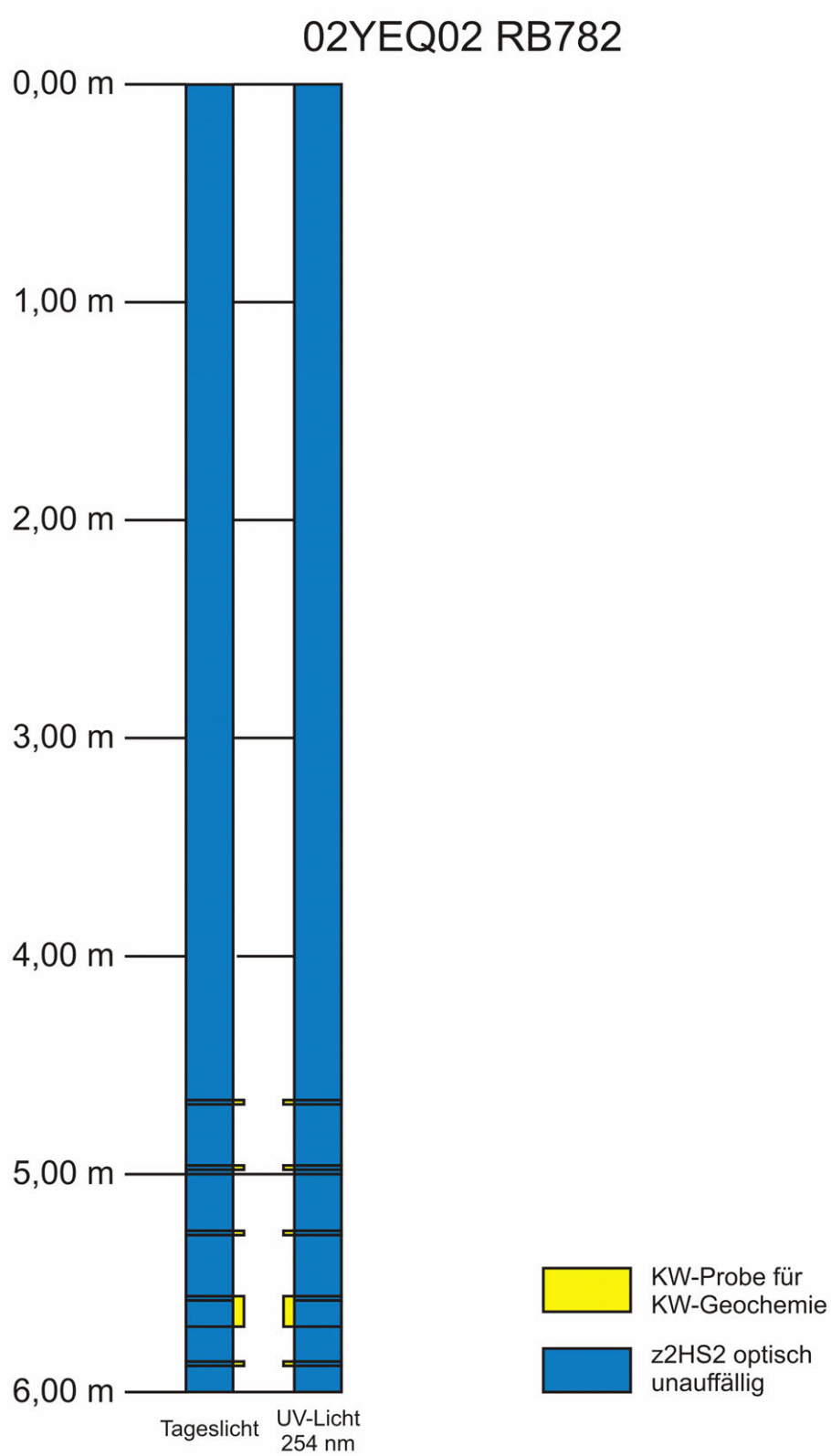
Anhang 1.23: KW-Profil RB780



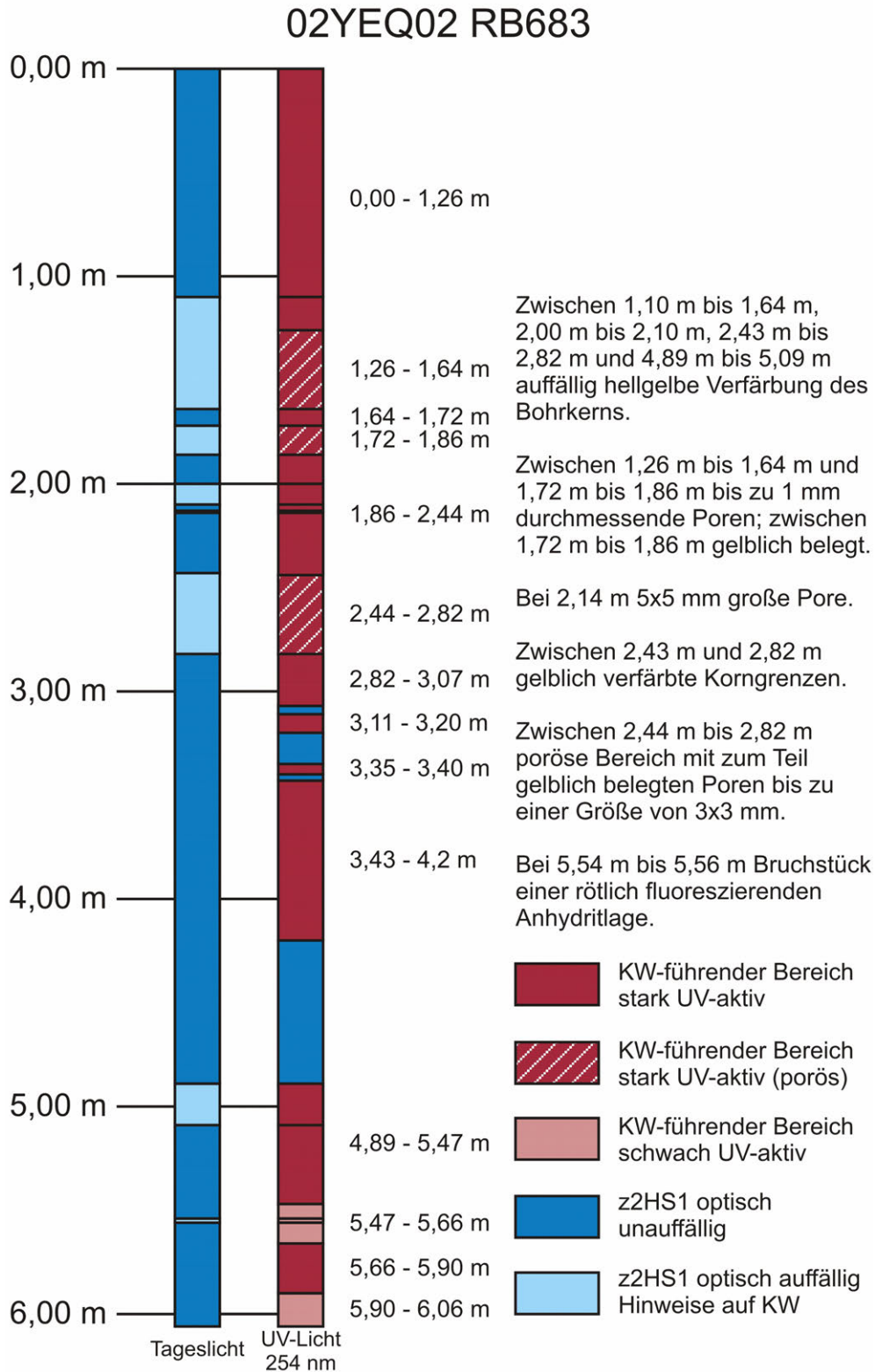
Anhang 1.24: KW-Profil RB781



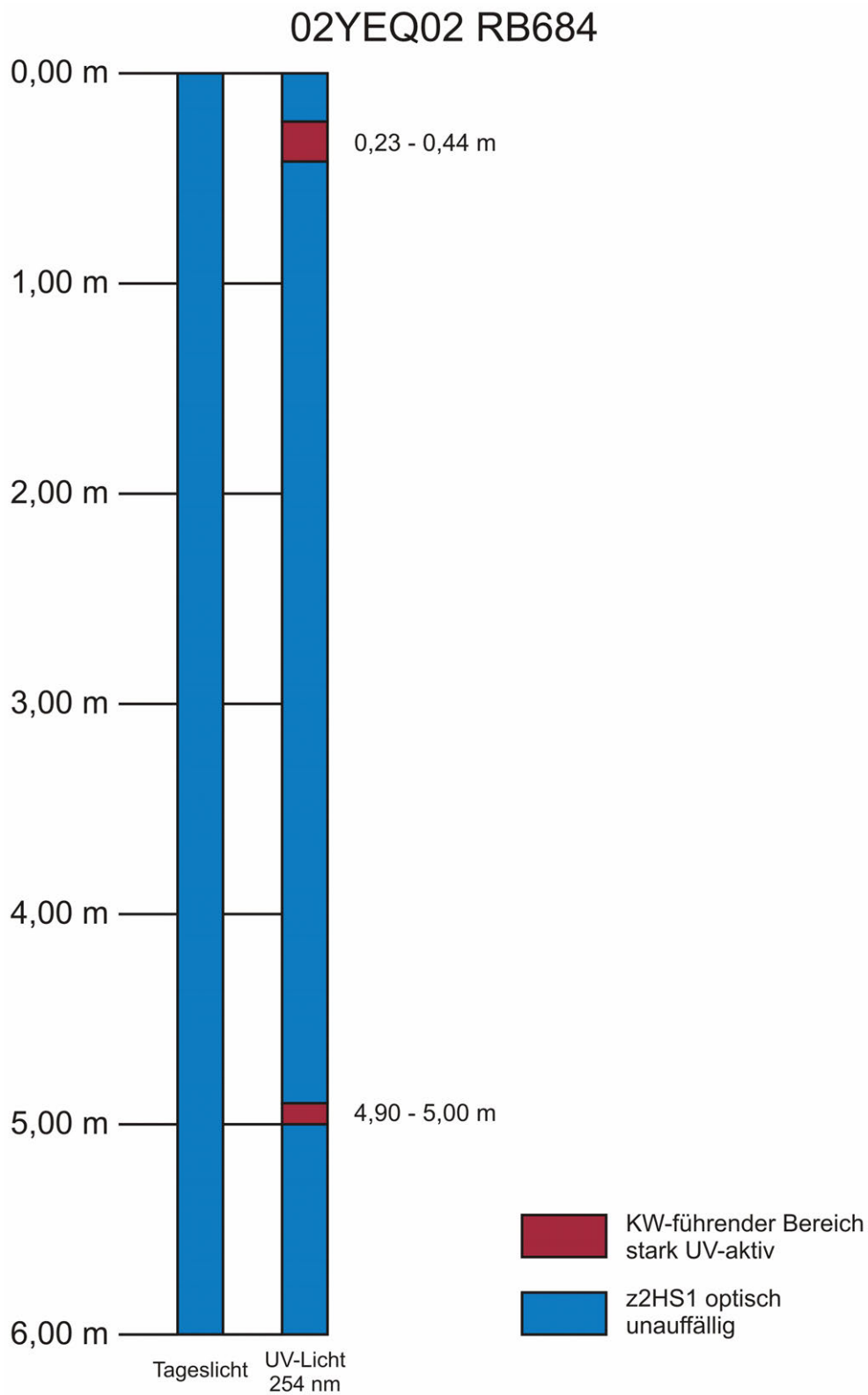
Anhang 1.25: KW-Profil RB782



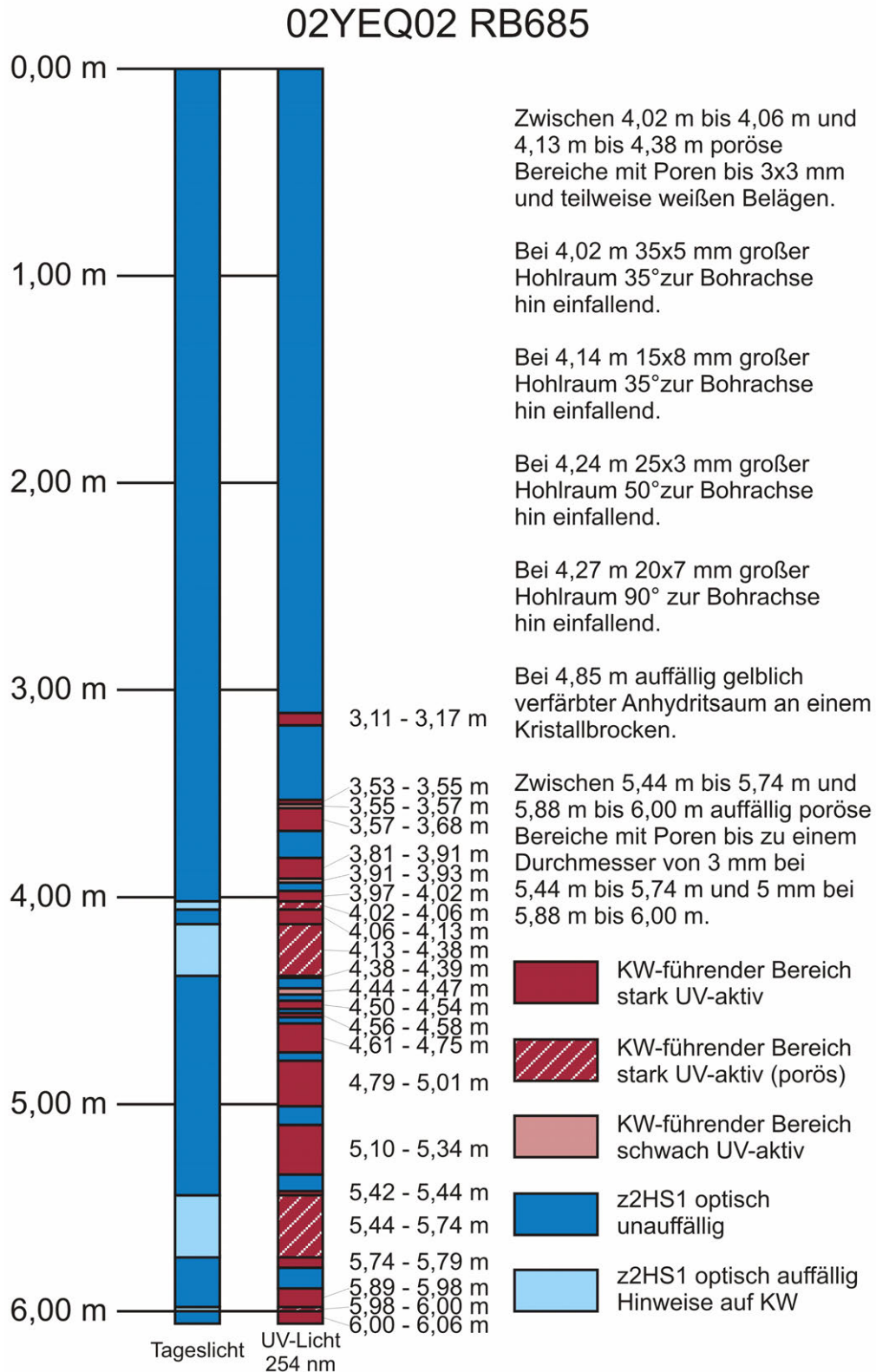
Anhang 2.1: KW-Profil Packerbohrung RB683



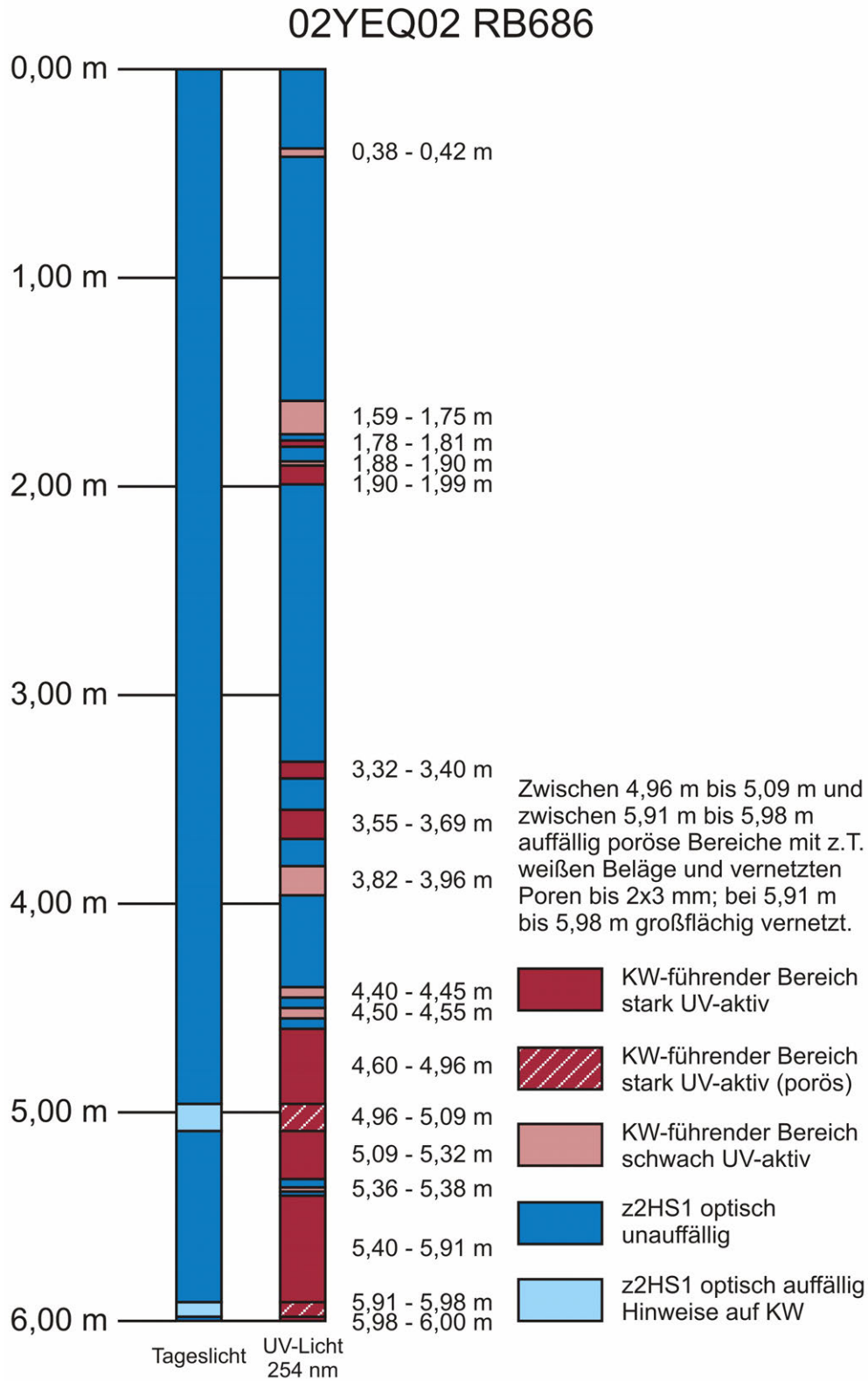
Anhang 2.2: KW-Profil Packerbohrung RB684



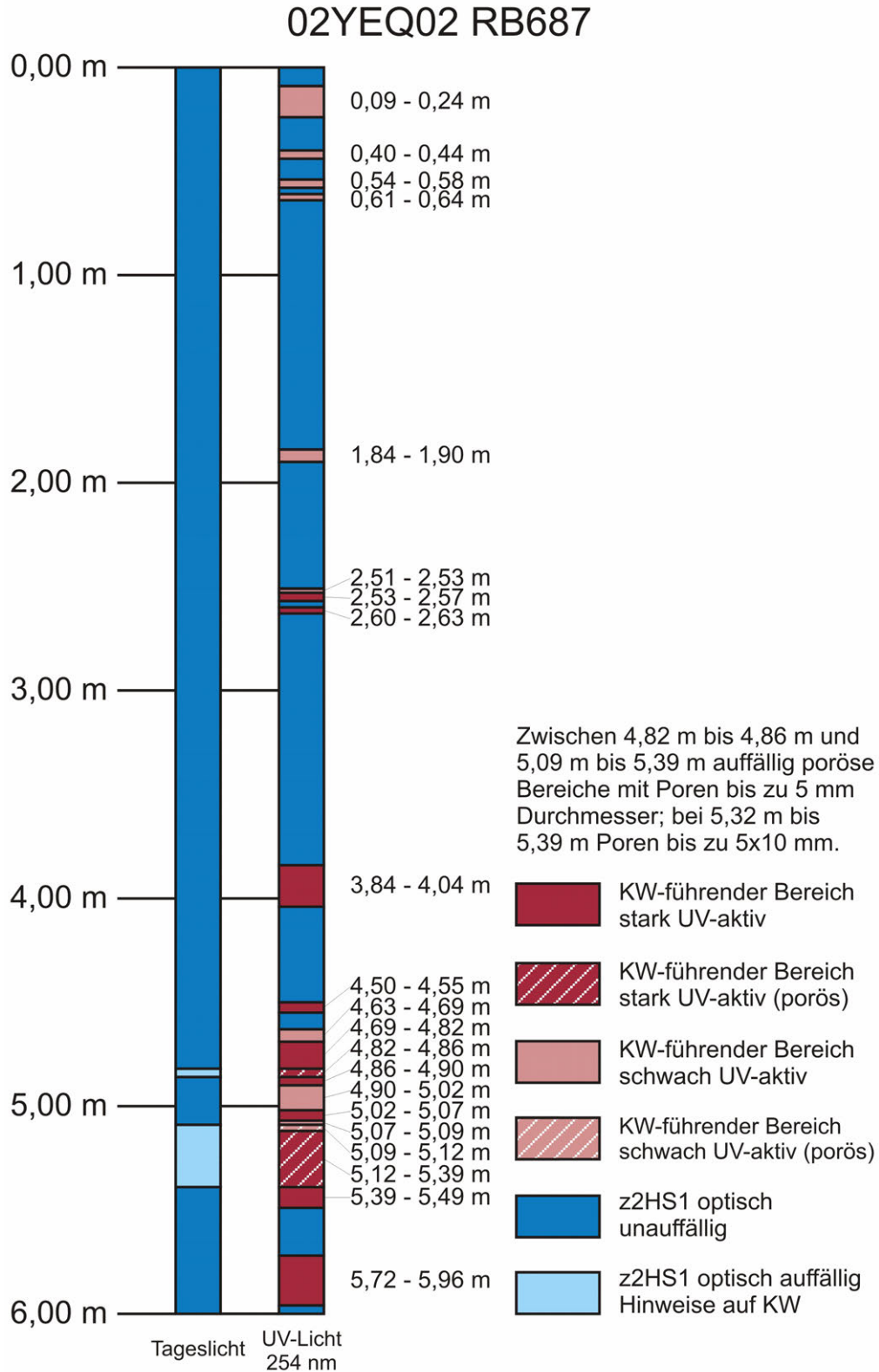
Anhang 2.3: KW-Profil Packerbohrung RB685



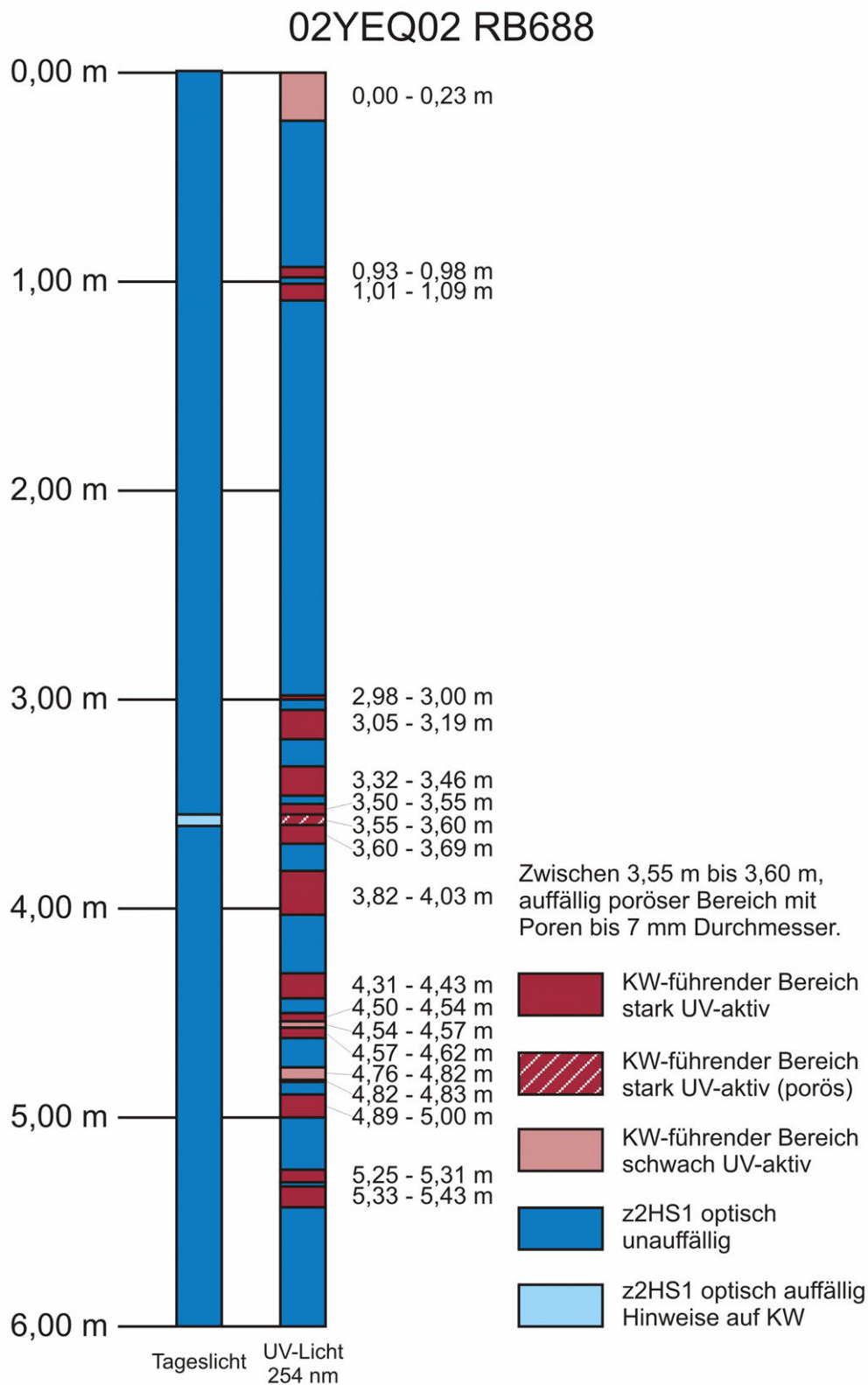
Anhang 2.4: KW-Profil Packerbohrung RB686



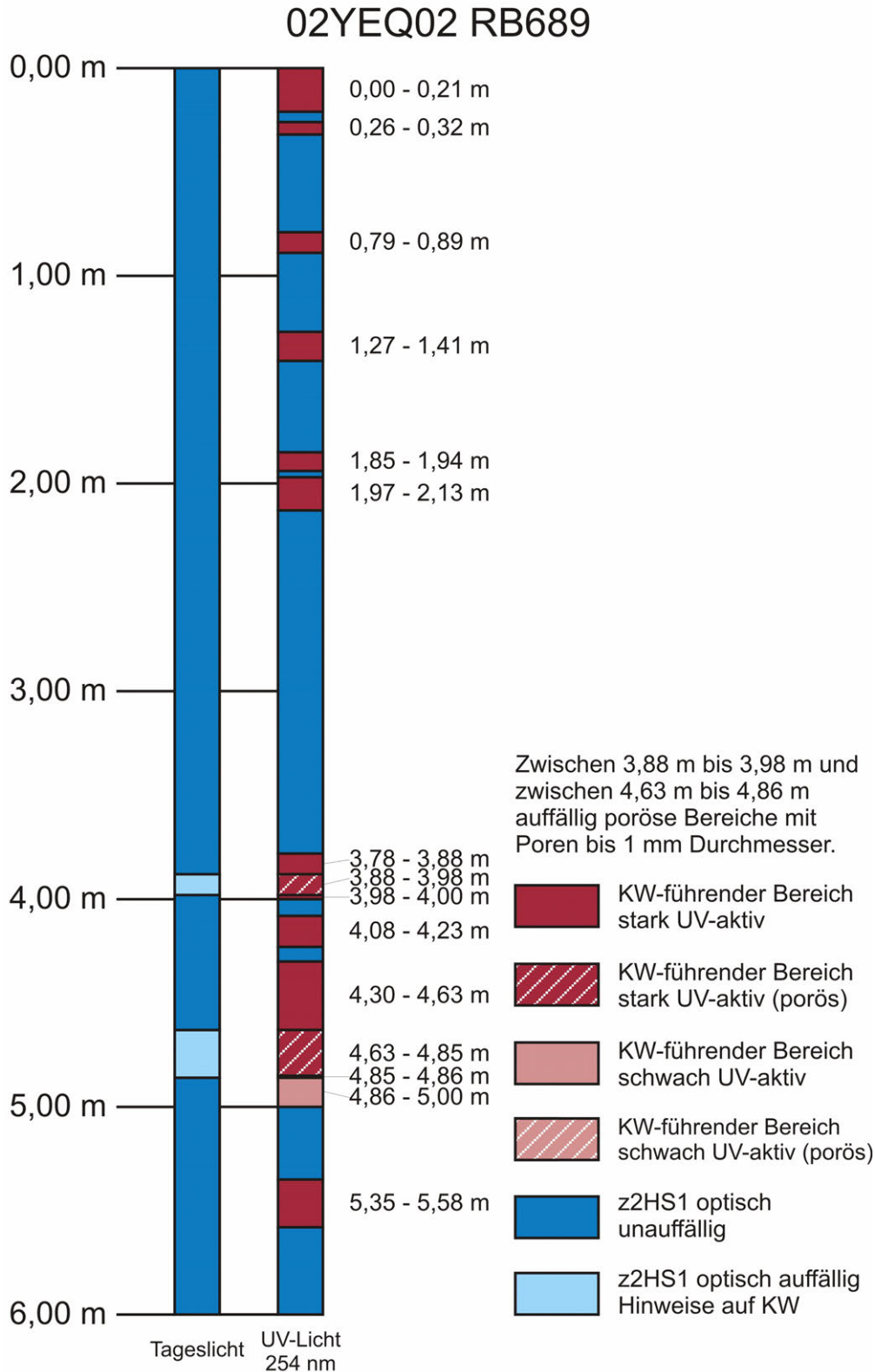
Anhang 2.5: KW-Profil Packerbohrung RB687



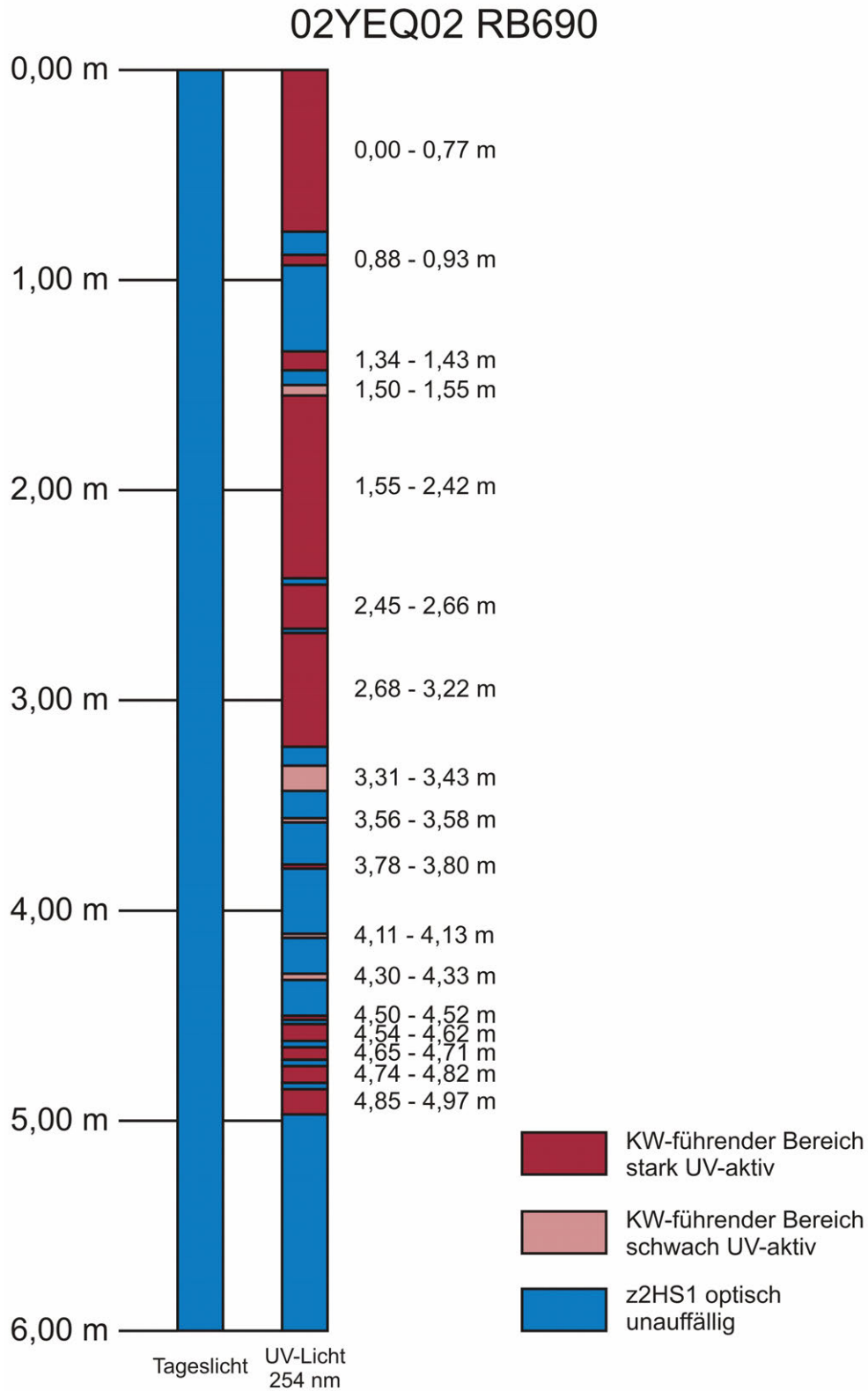
Anhang 2.6: KW-Profil Packerbohrung RB688



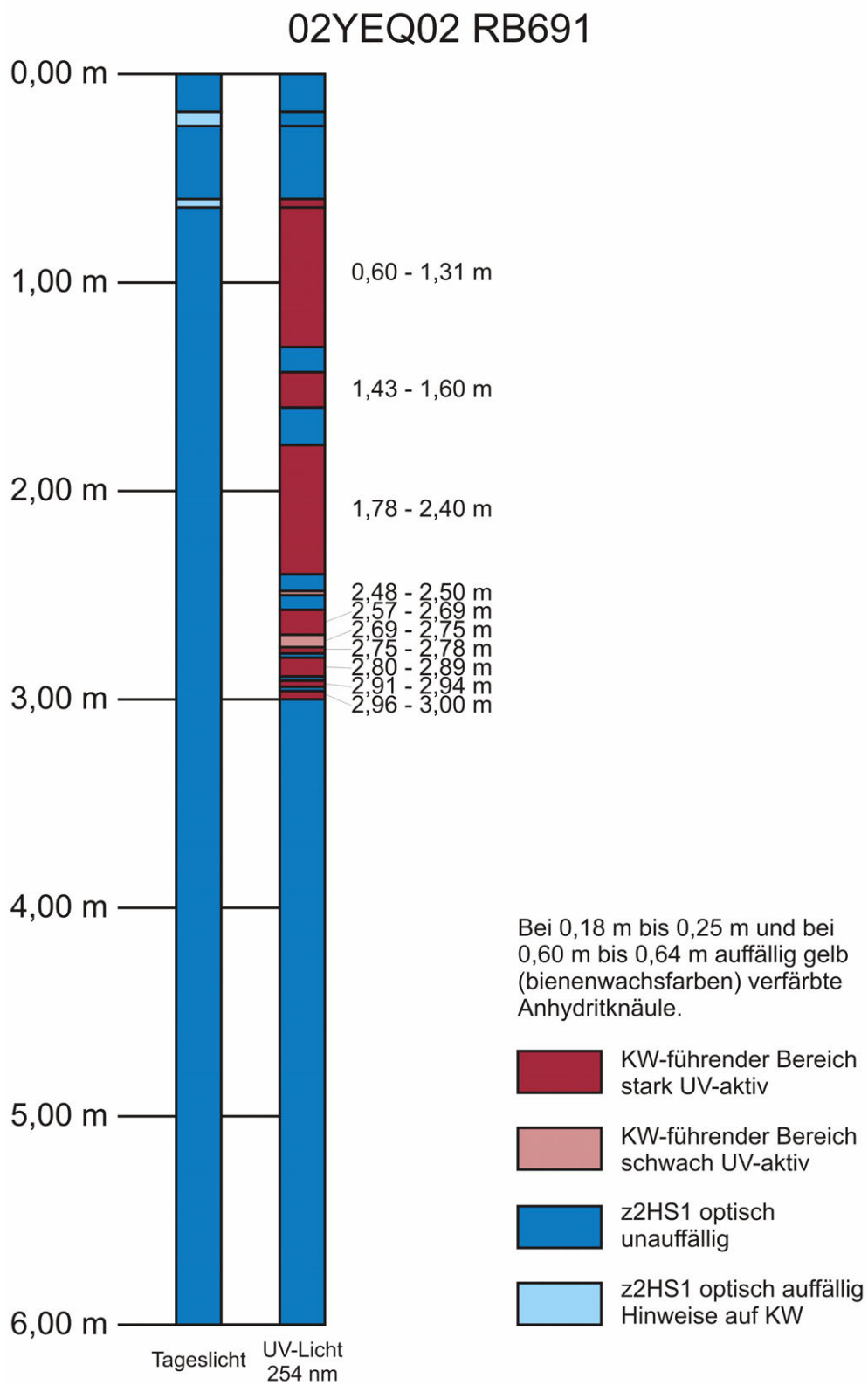
Anhang 2.7: KW-Profil Packerbohrung RB689



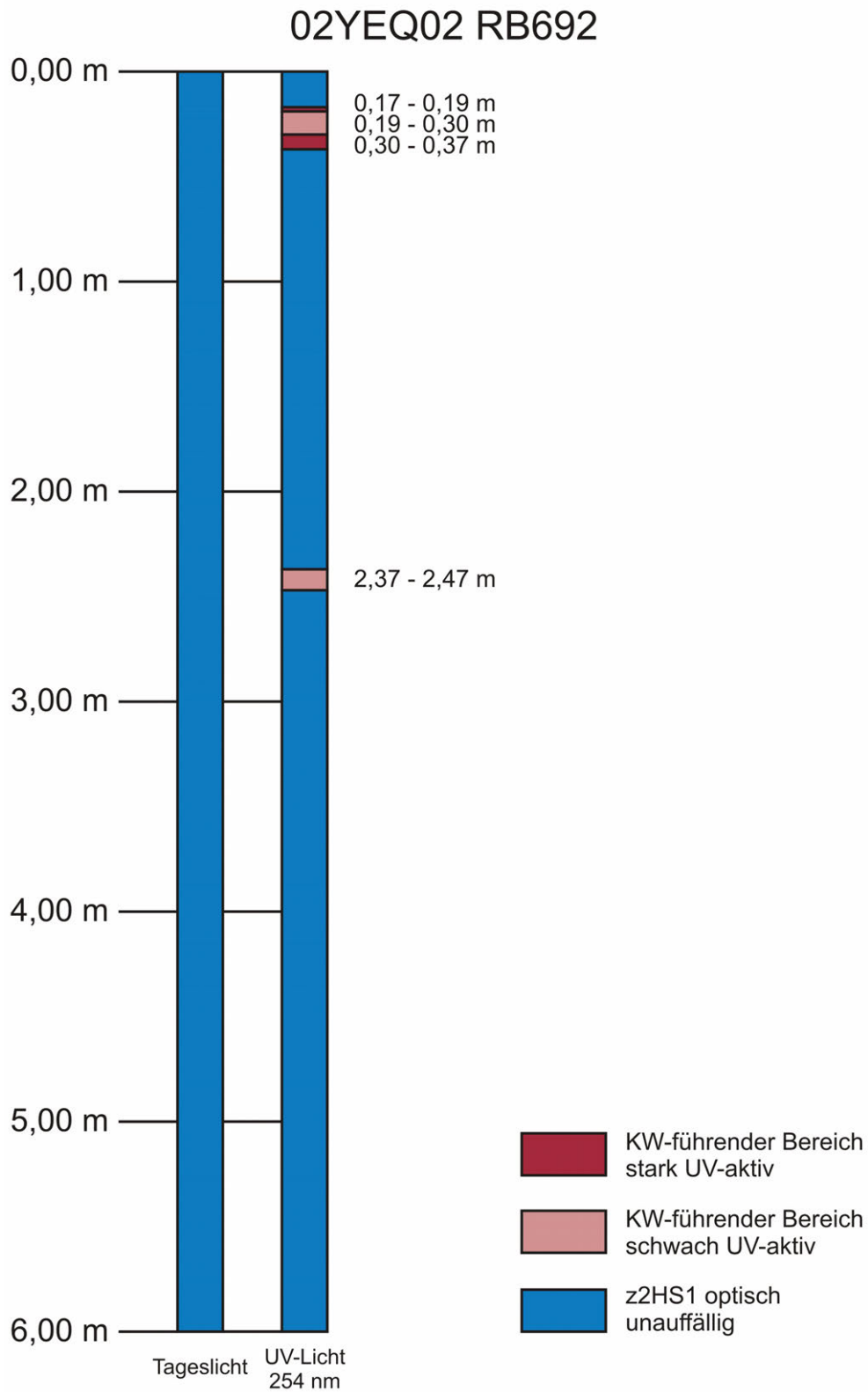
Anhang 2.8: KW-Profil Packerbohrung RB690



Anhang 2.9: KW-Profil Packerbohrung RB691



Anhang 2.10: KW-Profil Packerbohrung RB692



Fortsetzung Datensatz „Statistikproben“ Querschlag West

Probenbezeichnung		Bohrungsname	Kernabschnitt Top Probe [m]	Datum Probenahme	Masse Probe [g]	Fast-RGA										HS-GC-FID				GC-FID	Summe KW
LIMS-Nr.	DBE					Methan	Ethan	Propan	i-Butan	n-Butan	i-Pentan	n-Pentan	i-Hexan	n-Hexan	n-Heptan	Toluol	n-Octan	n-Nonan	n-Decan	Summe >C ₁₀ -C ₄₀ [mg/kg]	Summe KW C ₁ -C ₄₀ [mg/kg]
						[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	
1102578	02YEQ02RB651.006	RB 651	4,96	25.03.2011	195,5	0,5466	0,1603	0,1917	0,0871	0,1501	0,0958	0,0802	0,0827	0,1010	0,0389	0,0680	0,0230	0,0075	0,0043	1,59	3,23
1102579	02YEQ02RB651.007	RB 651	4,65	25.03.2011	199,1	0,8025	0,2386	0,2915	0,1297	0,2277	0,1474	0,1264	n.b.	0,1268	0,0602	0,1006	0,0340	0,0123	0,0074	2,85	5,15
1102699	02YEQ02RB650.001	RB 650	5,86	12.05.2011	209,5	0,0999	0,0293	0,0262	0,0102	0,0207	0,0144	0,0105	0,0049	0,0047	0,0017	0,0404	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,26
1102700	02YEQ02RB650.003	RB 650	5,6	12.05.2011	204	0,1367	0,0325	0,0269	0,0110	0,0196	0,0163	0,0105	0,0068	0,0063	0,0038	0,0284	n.b.	0,0004	n.b.	n.b.	0,30
1102701	02YEQ02RB650.004	RB 650	5,26	12.05.2011	210,3	0,1162	0,0319	0,0275	0,0103	0,0197	0,0154	0,0098	0,0055	0,0047	0,0008	0,0225	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,26
1102702	02YEQ02RB650.005	RB 650	4,96	12.05.2011	208,2	0,1173	0,0343	0,0299	0,0104	0,0207	0,0152	0,0096	0,0047	0,0038	0,0005	0,0224	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,27
1102703	02YEQ02RB650.006	RB 650	4,66	12.05.2011	212,6	0,1442	0,0397	0,0335	0,0116	0,0231	0,0174	0,0111	0,0059	0,0046	0,0010	0,0446	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,34
1102666	02YEQ02RB648.002	RB 648	5,86	05.05.2011	208,4	0,0592	0,0187	0,0213	0,0089	0,0180	0,0125	0,0118	0,0086	0,0127	0,0105	0,0366	0,0483	0,2108	0,2200	27,99	28,68
1102667	02YEQ02RB648.004	RB 648	5,56	05.05.2011	213,6	0,1009	0,0338	0,0367	0,0127	0,0264	0,0127	0,0113	0,0038	0,0052	0,0010	0,0482	n.b.	0,0007	0,0015	n.b.	0,29
1102668	02YEQ02RB648.005	RB 648	5,26	05.05.2011	191,2	0,1162	0,0400	0,0439	0,0150	0,0310	0,0139	0,0124	0,0020	0,0049	0,0006	0,0396	n.b.	0,0002	n.b.	n.b.	0,32
1102669	02YEQ02RB648.006	RB 648	4,96	05.05.2011	211,1	0,2210	0,0700	0,0735	0,0237	0,0481	0,0205	0,0177	0,0053	0,0064	0,0007	0,0394	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,53
1102670	02YEQ02RB648.007	RB 648	4,66	05.05.2011	206,4	0,0977	0,0342	0,0410	0,0177	0,0359	0,0270	0,0250	0,0222	0,0377	0,2111	0,5781	0,4371	0,4714	0,2838	45,46	47,78
1102678	02YEQ02RB646.001	RB 646	5,86	06.05.2011	200,5	0,2110	0,0727	0,0520	0,0209	0,0432	0,0215	0,0157	0,0035	0,0028	0,0005	0,0531	n.b.	0,0013	0,0015	1,25	1,75
1102679	02YEQ02RB646.003	RB 646	5,56	06.05.2011	210,1	0,0900	0,0316	0,0251	0,0109	0,0221	0,0116	0,0090	0,0017	0,0018	n.b.	0,0459	n.b.	0,0003	n.b.	n.b.	0,25
1102680	02YEQ02RB646.004	RB 646	5,26	06.05.2011	201,7	0,0708	0,0244	0,0192	0,0083	0,0166	0,0089	0,0068	0,0025	0,0016	n.b.	0,0212	n.b.	n.b.	n.b.	n.a.	0,18
1102681	02YEQ02RB646.005	RB 646	4,96	06.05.2011	205	0,2148	0,0687	0,0469	0,0163	0,0279	0,0108	0,0063	0,0019	0,0022	n.b.	0,0417	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,44
1102682	02YEQ02RB646.006	RB 646	4,66	06.05.2011	207,9	0,1667	0,0560	0,0408	0,0168	0,0339	0,0187	0,0138	0,0042	0,0035	0,0006	0,0881	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,44
1102659	02YEQ02RB645.001	RB 645	5,86	04.05.2011	202,8	0,1342	0,0450	0,0464	0,0156	0,0248	0,0095	0,0059	0,0013	0,0022	0,0007	0,0325	n.b.	0,0003	n.b.	n.b.	0,32
1102660	02YEQ02RB645.003	RB 645	5,56	04.05.2011	209,1	0,1550	0,0545	0,0565	0,0179	0,0326	0,0116	0,0095	0,0009	0,0020	0,0015	0,0420	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,38
1102661	02YEQ02RB645.004	RB 645	5,26	04.05.2011	205,1	0,1570	0,0506	0,0476	0,0125	0,0191	0,0050	0,0031	0,0003	0,0006	n.b.	0,0238	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,32
1102662	02YEQ02RB645.005	RB 645	4,96	04.05.2011	196	0,0947	0,0334	0,0332	0,0096	0,0155	0,0043	0,0029	0,0003	0,0007	n.b.	0,0259	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,22
1102663	02YEQ02RB645.006	RB 645	4,66	04.05.2011	204,3	0,1416	0,0497	0,0502	0,0150	0,0263	0,0066	0,0051	0,0011	0,0016	n.b.	0,0398	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,34
1102650	02YEQ02RB644.007	RB 644	5,86	03.05.2011	204,4	0,1880	0,0665	0,0344	0,0037	0,0064	0,0009	0,0004	0,0003	0,0002	n.b.	0,0124	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,31
1102651	02YEQ02RB644.006	RB 644	5,56	03.05.2011	207	0,0929	0,0287	0,0194	0,0049	0,0110	0,0041	0,0018	0,0002	0,0003	n.b.	0,0235	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,19
1102652	02YEQ02RB644.004	RB 644	5,27	03.05.2011	222,2	0,1562	0,0422	0,0292	0,0095	0,0194	0,0151	0,0063	0,0013	0,0019	n.b.	0,0575	n.b.	n.b.	n.b.	0,89	1,23
1102653	02YEQ02RB644.003	RB 644	4,97	03.05.2011	182	0,1614	0,0472	0,0431	0,0238	0,0414	0,0734	0,0293	n.b.	0,0394	0,0144	0,0393	0,0119	0,0023	n.b.	1,31	1,83
1102654	02YEQ02RB644.002	RB 644	4,67	03.05.2011	194,7	0,1484	0,0452	0,0491	0,0286	0,0471	0,0621	0,0260	0,0111	0,0224	0,0098	0,0526	0,0043	0,0051	0,0053	2,35	2,87
1102643	02YEQ02RB643.006	RB 643	5,86	02.05.2011	204,3	0,1192	0,0119	0,0068	0,0040	0,0042	0,0022	0,0007	0,0002	0,0002	n.b.	0,0126	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,16
1102644	02YEQ02RB643.004	RB 643	5,56	02.05.2011	205,7	0,1219	0,0120	0,0074	0,0044	0,0052	0,0035	0,0012	0,0002	0,0002	n.b.	0,0363	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,19
1102645	02YEQ02RB643.003	RB 643	5,26	02.05.2011	198,9	0,1166	0,0114	0,0041	0,0004	0,0005	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,13
1102646	02YEQ02RB643.002	RB 643	4,96	02.05.2011	212,6	0,2584	0,0209	0,0038	0,0008	0,0013	0,0002	0,0001	n.b.	n.b.	n.b.	0,0070	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,29
1102647	02YEQ02RB643.001	RB 643	4,66	02.05.2011	205,2	0,1375	0,0077	0,0008	0,0002	0,0005	0,0003	0,0002	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,15

GC-irMS		
$\delta^{13}\text{C CH}_4$ [‰]	$\delta^{13}\text{C C}_2\text{H}_6$ [‰]	$\delta^{13}\text{C C}_3\text{H}_8$ [‰]
-44,7	-30,6	-25,9
-44,9	-30,4	-25,8
-45,7	-30,8	-26,6
-45,9	-31,6	-26,6
-45,2	-30,6	-26,4
-45,7	-30,8	-26,5
-44,8	-30,1	-26,3
-45,3	-30,1	-26,1
-45,1	-30,1	-26,3
-45,3	-30,5	-26,1
-45,3	-30,4	-26,2
-45,0	-30,2	-26,1
-45,5	-29,4	-25,5
-45,5	-29,8	-26,0
-46,0	-29,0	-25,8
-45,1	-29,2	-25,5
-45,4	-29,1	-25,4
-45,6	-29,2	-26,1
-46,2	-29,6	-26,6
-45,1	-28,9	-25,8
-45,1	-28,9	-25,7
-46,3	-28,9	-26,2
-45,8	-33,5	-30,1
-45,6	-32,8	-31,2
-45,3	-33,3	-31,1
-45,4	-33,5	-31,1
-45,8	-33,6	-31,4
-45,8	n.b.	n.b.
-44,8	-31,4	-25,8
-44,9	-31,2	n.b.
-44,9	-30,7	n.b.
-44,5	n.b.	n.b.

Anhang 3.2: Datensatz „Nachverdichtung“ Querschlag West

Probenbezeichnung		Bohrungsname	Kernabschnitt Top Probe [m]	Datum Probenahme	Masse Probe [g]	Fast-RGA										HS-GC-FID				GC-FID		GC-irMS			
LIMS-Nr.	DBE					Methan	Ethan	Propan	i-Butan	n-Butan	i-Pentan	n-Pentan	i-Hexan	n-Hexan	n-Heptan	Toluol	n-Octan	n-Nonan	n-Decan	Summe >C ₁₀ -C ₄₀	Summe KW C ₁ -C ₄₀	δ ¹³ C CH ₄	δ ¹³ C C ₂ H ₆	δ ¹³ C C ₃ H ₈	
						[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[‰]	[‰]	[‰]	
1102692	02YEQ02RB649.006	RB 649	5,86	11.05.2011	213,8	0,1229	0,0399	0,0416	0,0128	0,0251	0,0127	0,0088	0,0017	0,0012	n.b.	0,0519	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,32	-45,7	-30,7	-26,7
1102693	02YEQ02RB649.008	RB 649	5,56	11.05.2011	189,2	0,0863	0,0266	0,0280	0,0094	0,0181	0,0104	0,0072	0,0017	0,0014	n.b.	0,0265	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,22	-44,9	-30,6	-26,3
1102694	02YEQ02RB649.009	RB 649	5,26	11.05.2011	207,5	0,0917	0,0278	0,0286	0,0091	0,0173	0,0094	0,0062	0,0016	0,0013	0,0010	0,0364	n.b.	0,0012	n.b.	n.b.	n.b.	0,23	-45,7	-31,2	-26,2
1102695	02YEQ02RB649.010	RB 649	4,96	11.05.2011	197,7	0,0704	0,0222	0,0238	0,0081	0,0156	0,0096	0,0063	0,0020	0,0017	0,0005	0,0352	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,20	-46,2	-31,2	-26,9
1102696	02YEQ02RB649.011	RB 649	4,66	11.05.2011	210,9	0,2014	0,0678	0,0708	0,0219	0,0450	0,0239	0,0173	0,0034	0,0025	n.b.	0,0582	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,51	-45,1	-30,6	-26,3
1102685	02YEQ02RB647.001	RB 647	5,86	09.05.2011	210	0,0422	0,0126	0,0119	0,0053	0,0090	0,0058	0,0028	0,0015	0,0014	n.b.	0,0181	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,11	-45,7	-30,7	-26,5
1102686	02YEQ02RB647.003	RB 647	5,56	09.05.2011	210,3	0,0749	0,0243	0,0219	0,0087	0,0153	0,0077	0,0038	0,0013	0,0012	n.b.	0,0247	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,18	-45,6	-30,4	-26,1
1102687	02YEQ02RB647.004	RB 647	5,25	09.05.2011	214	0,1025	0,0321	0,0281	0,0113	0,0196	0,0104	0,0049	0,0018	0,0018	n.b.	0,0461	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,26	-45,4	-30,0	-26,4
1102688	02YEQ02RB647.005	RB 647	4,96	09.05.2011	199,6	0,0830	0,0284	0,0265	0,0111	0,0194	0,0096	0,0049	0,0019	0,0020	n.b.	0,0345	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,22	-45,0	-29,6	-26,0
1102689	02YEQ02RB647.006	RB 647	4,66	09.05.2011	213,6	0,0580	0,0199	0,0198	0,0107	0,0175	0,0061	0,0031	0,0012	0,0012	n.b.	0,0171	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,16	-46,4	-29,5	-26,4
1102708	02YEQ02RB779.001	RB 779	5,86	12.05.2011	209,1	0,0633	0,0216	0,0244	0,0077	0,0156	0,0065	0,0057	0,0020	0,0025	n.b.	0,0128	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,16	-45,0	-30,2	-26,1
1102709	02YEQ02RB779.003	RB 779	5,56	12.05.2011	197,4	0,1262	0,0414	0,0431	0,0122	0,0238	0,0093	0,0079	0,0022	0,0029	0,0007	0,0257	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,30	-46,0	-30,7	-26,3
1102710	02YEQ02RB779.004	RB 779	5,26	12.05.2011	205,8	0,1653	0,0573	0,0624	0,0187	0,0369	0,0154	0,0129	0,0039	0,0048	0,0008	0,0423	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,42	-45,4	-30,6	-26,3
1102711	02YEQ02RB779.005	RB 779	4,96	12.05.2011	205,7	0,1210	0,0434	0,0475	0,0138	0,0273	0,0107	0,0087	0,0023	0,0027	0,0005	0,0478	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,33	-45,4	-30,4	-26,7
1102712	02YEQ02RB779.006	RB 779	4,66	12.05.2011	197,8	0,1259	0,0439	0,0486	0,0148	0,0297	0,0126	0,0108	0,0036	0,0045	0,0009	0,0494	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	n.b.	0,34	-45,2	-30,5	-26,0
1102715	02YEQ02RB778.003	RB 778	5,8	13.05.2011	215,3	0,6081	0,2052	0,3142	0,2442	0,5293	0,9656	1,0198	1,2326	1,9735	4,3716	8,4919	1,2420	0,8650	0,6096	419,94	442,62	-45,3	-29,2	-24,3	
1102716	02YEQ02RB778.004	RB 778	5,56	13.05.2011	197,6	4,4608	1,5138	1,8997	1,0180	1,6629	1,3703	1,2592	0,9352	1,3894	3,3988	6,8629	1,2589	0,8668	0,5760	363,36	391,83	-45,0	-29,9	-25,9	
1102717	02YEQ02RB778.005	RB 778	5,26	13.05.2011	207,6	0,6008	0,2144	0,2629	0,1240	0,2236	0,1612	0,1521	0,1024	0,1497	0,1890	0,4847	0,2051	0,2637	0,1983	28,89	32,22	-45,6	-30,3	-25,9	
1102718	02YEQ02RB778.006	RB 778	4,96	13.05.2011	196,5	4,5789	1,5487	1,9275	1,0239	1,6657	1,3058	1,1843	0,7575	1,0277	1,6692	3,8974	0,9747	0,6844	0,4845	285,74	308,47	-46,5	-30,8	-26,1	
1102719	02YEQ02RB778.007	RB 778	4,66	13.05.2011	187,4	0,0848	0,0311	0,0366	0,0140	0,0307	0,0172	0,0172	0,0068	0,0103	0,0022	0,0906	0,0017	0,0037	0,0035	2,70	3,05	-42,1	-29,3	-25,6	