

# F+E Endlagerung

9Y3207000000

## Endlagerstandortmodell SÜD (AnSichT)

Teil II: Zusammenstellung von  
Gesteinseigenschaften für den  
Langzeitsicherheitsnachweis



Ergebnisbericht

Hannover, Januar 2016

BUNDESANSTALT FÜR GEOWISSENSCHAFTEN UND ROHSTOFFE  
HANNOVER

F+E Endlagerung

Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und  
Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein

Endlagerstandortmodell SÜD (AnSichT)  
Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den  
Langzeitsicherheitsnachweis

Ergebnisbericht

Autoren: Jahn, Steffen, Dr.; Mrugalla, Sabine;  
Stark, Lena

Auftraggeber: Karlsruher Institut für Technologie (KIT)/  
Projektträger Karlsruhe,  
Wassertechnologie und Entsorgung  
(PTKA-WTE) für das Bundesministerium  
für Wirtschaft und Technologie (BMWi)

Auftragsnummer: Förderkennzeichen: 02E11061C

Geschäftszeichen: B3/B50112-43/2015-0005/001

Datum: 08.01.2016

Im Auftrag:

gez. V. Bräuer

Direktor und Professor Dr. V. Bräuer (Abteilungsleiter B3), Projektleitung Endlagerung

	Seite
Verkürzte Zusammenfassung.....	5
1 Einleitung.....	6
2 Notwendigkeit der Datenübertragung und Überblick über wichtige Quellen.....	6
3 Einführung.....	9
3.1 Allgemeine Informationen, Lithologie und Fazies des Wirtsgesteins (Opalinuston).....	9
3.2 Allgemeine Informationen zum Nebengebirge.....	13
4 Mineralogische und sedimentpetrographische Parameter des Wirtsgesteins (Opalinuston).....	14
4.1 Korngrößenverteilungen.....	15
4.2 Spezifische Oberfläche.....	17
4.3 Gefüge.....	19
4.4 Mineralogische Zusammensetzung.....	20
4.4.1 Qualitative Mineralogie.....	20
4.4.2 Quantitative Mineralogie.....	23
4.5 Wassergehalt.....	25
4.6 Chemische Zusammensetzung.....	27
4.7 Isotopengeochemie.....	31
4.8 Kationenaustauschkapazität.....	32
4.9 Fluideinschlüsse in Mineralen.....	33
4.10 Hydrochemie von Wässern aus dem Opalinuston.....	34
4.11 Gase im Opalinuston.....	38
5 Kohlenwasserstoffe.....	39
5.1 Werte aus der Rock-Eval-Pyrolyse.....	40
5.2 Mazerale.....	43
5.3 Vitritreflexionsdaten und daraus abgeleitete Reifegrade.....	44
5.4 Weitere Reifeparameter.....	47
5.5 Menge und Zusammensetzung der Kohlenwasserstoffe.....	49
5.5.1 Niedrigmolekulare Kohlenwasserstoffe.....	50
5.5.2 Menge und Zusammensetzung schwerflüchtiger Kohlenwasserstoffe.....	52
6 Petrophysikalische Eigenschaften und Parameter.....	54
6.1 Dichte.....	54
6.1.1 Dichtewerte für das Wirtsgestein (Opalinuston).....	54
6.1.2 Dichtewerte für das Nebengebirge.....	55
6.2 Porosität.....	57

Seite

6.2.1	Porositäten für das Wirtsgestein (Opalinuston)	58
6.2.2	Porositäten für das Nebengebirge	60
6.3	Permeabilität, Durchlässigkeitsbeiwert und Transmissivität	62
6.3.1	Durchlässigkeitswerte für das Wirtsgestein (Opalinuston)	63
6.3.2	Durchlässigkeitswerte für das Nebengebirge	64
6.3.3	Parameter zur Beschreibung von Zweiphasenfluss im Wirtsgestein	65
6.4	Thermische Parameter	67
6.4.1	Spezifische Wärmekapazität für das Wirtsgestein (Opalinuston)	68
6.4.2	Spezifische Wärmekapazitäten für das Nebengebirge	69
6.4.3	Wärmeleitfähigkeit für das Wirtsgestein (Opalinuston)	70
6.4.4	Wärmeleitfähigkeiten für das Nebengebirge	73
6.4.5	Wärmeausdehnungskoeffizient für das Wirtsgestein (Opalinuston)	74
6.4.6	Wärmeausdehnungskoeffizienten für das Nebengebirge	75
6.5	Seismische Geschwindigkeiten	78
6.5.1	Seismische Geschwindigkeiten für das Wirtsgestein (Opalinuston)	78
6.5.2	Seismische Geschwindigkeiten für das Nebengebirge	78
7	Transportparameter	80
7.1	Diffusionskoeffizient und scheinbarer Diffusionskoeffizient	80
7.1.1	Diffusionsparameter für das Wirtsgestein (Opalinuston)	81
7.1.2	Sorptions-Verteilungskoeffizient	83
8	Gesteinsmechanische Parameter	85
8.1	Elastizitätsparameter	86
8.1.1	Elastizitätsparameter für das Wirtsgestein (Opalinuston)	86
8.1.2	Viskoelastische Parameter für das Wirtsgestein (Kriechen)	91
8.1.3	Elastizitätsparameter für das Nebengebirge	92
8.2	Festigkeitsparameter	95
8.2.1	Festigkeitsparameter für das Wirtsgestein (Opalinuston)	95
8.2.2	Festigkeitsparameter für das Nebengebirge	99
8.2.3	Mohr-Coulomb-Festigkeitsparameter für das Wirtsgestein (Opalinuston)	105
9	Hydro-mechanisch gekoppelte Parameter	107
9.1	Quelldruckeigenschaften für das Wirtsgestein (Opalinuston)	109
9.2	Quellhebung für das Wirtsgestein (Opalinuston)	110
9.3	Quelleigenschaften des Nebengebirges	111
9.4	Biot-Koeffizient und Biot-Modul für das Wirtsgestein	113
9.5	Biot-Koeffizient und Biot-Modul für das Nebengebirge	115
10	Zusammenfassung	117

## Seite

Literaturverzeichnis.....	118
Abkürzungsverzeichnis.....	138
Tabellenverzeichnis.....	141
Abbildungsverzeichnis.....	146

Gesamtblattzahl: 146

## Verkürzte Zusammenfassung

Autoren:	Jahn, Steffen, Dr.; Mrugalla, Sabine; Stark, Lena
Titel:	Endlagerstandortmodell SÜD (AnSichT) - Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis
Schlagwörter:	Endlagerung, Gesteinseigenschaften, Parameter, Süddeutschland, Tongestein

Der vorliegende Ergebnisbericht ist Teil des gemeinsam von der DBE TECHNOLOGY GmbH, der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH und der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe durchgeführten Projekts AnSichT, in dem die Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tongestein für generische Standorte in Nord- und Süddeutschland erarbeitet und getestet wird. In diesem Bericht sind Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis für das Endlagerstandortmodell SÜD zusammengestellt. Dazu zählen mineralogisch-geochemische, hydrogeologische und petrophysikalische Parameter für den Opalinuston als Wirtsgestein sowie für die weiteren Einheiten des geologischen Modells. Aus Süddeutschland liegen keine Ergebnisse aus Standortuntersuchungen für einen HAW-Endlagerstandort im Tongestein vor. Die Gesteinsparameter wurden deshalb aus Daten, die im Verlauf von Standorterkundungsprogrammen im Rahmen von Endlagerprojekten in der Schweiz und in Frankreich gewonnen worden sind, zusammengestellt und in Analogieschlüssen und Vergleichen auf die Situation im generischen Endlagerstandortmodell SÜD übertragen.

## 1 Einleitung

Zur Erstellung eines geologischen Endlagerstandortmodells SÜD wurde von REINHOLD & SÖNNKE (2012) ein Referenzprofil SÜD mit der stratigraphischen Einheit der Opalinuston-Formation im Mitteljura als Wirtsgestein vorgeschlagen, welches die wirtsgesteinsunabhängigen Ausschlusskriterien und die Mindestanforderungen des AkEND (2002) und die Ergebnisse der „Regionalen Tonstudie“ der BGR (HOTH et al. 2007) berücksichtigt. Basierend auf dem Referenzprofil SÜD wurde ein geologisch konsistentes Endlagerstandortmodell SÜD (REINHOLD et al. 2016) erstellt. Die Charakterisierung des Endlagerstandortmodells SÜD gliedert sich in drei Teile. Der hier vorgelegte Teil II ergänzt den zuvor genannten ersten Teil durch die Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Bereich des Referenzprofils SÜD. Teil II bildet wiederum die Datenquelle für den dritten Teil der Beschreibung des Endlagerstandortmodells SÜD (Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Modellberechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis im Gebiet des Endlagerstandortmodells SÜD, MASSMANN 2016).

Ziel des vorliegenden Parameterberichts ist es, den Opalinuston als Wirtsgestein sowie die weiteren geologischen Einheiten des Endlagerstandortmodells SÜD hinsichtlich ihrer mineralogisch-geochemischen, hydrogeologischen und petrophysikalischen Merkmale (im Weiteren „Parameter“ genannt) nachvollziehbar zu beschreiben.

Die Zusammenstellung der Bandbreiten der verschiedenen Parameter für die Modelleinheiten im Endlagerstandortmodell SÜD geht in die Ausarbeitung von Features, Events, Processes (FEP) ein, die wiederum Grundlage für die Szenarien möglicher zukünftiger Entwicklungen sind. Sie stellt einen zentralen Bestandteil des Projektes AnSichT dar.

## 2 Notwendigkeit der Datenübertragung und Überblick über wichtige Quellen

Ungeachtet ihrer weiten Verbreitung sind Tongesteine in Deutschland hinsichtlich ihrer Barriereigenschaften deutlich weniger untersucht als Salzgesteine. Bereits HOTH et al. (2007) weisen u. a. auf Defizite in der Verfügbarkeit petrophysikalischer Daten für sonst geologisch und geochemisch gut charakterisierte Tongesteine hin und betonen die Notwendigkeit weiterer Untersuchungen z. B. zu den Zusammenhängen zwischen chemischen und mechanischen Eigenschaften dieser Gesteine.

Das gilt auch für den Opalinuston in Süddeutschland, für den mineralogische, geochemische und petrophysikalische Angaben kaum existieren. Insbesondere für den Tiefenbereich in ca. 600 m u. GOK, wie er im Endlagerstandortmodell SÜD vorliegt, sind keine Daten vorhanden. Der größte Teil der wenigen verfügbaren mineralogischen, geochemischen und

petrophysikalischen Daten für deutsche Opalinuston-Vorkommen wurde an oberflächennah gewonnenen Proben aus Ziegeleigruben, aus den beim Bau von Straßen und Bahnstrecken angelegten temporären Aufschlüssen sowie aus Flachbohrungen gewonnen. In der Datenbank „BETTON“ (GERARDI 2005) finden sich zwar Angaben zu Untersuchungsbohrungen in hydrogeologischen Versuchsfeldern am Nordrand der Schwäbischen Alb, jedoch fehlen hier – wie auch in der Originalliteratur (HEKEL 1992, HEKEL 1994) – petrophysikalische und mineralogisch-geochemische Parameter nahezu vollständig.

Im Rahmen von Standorterkundungsprogrammen und begleitenden Projekten werden derzeit in mehreren Ländern verfestigte Tongesteine untersucht. Dazu zählen z. B. der Opalinuston in der Nordschweiz und die Gesteine des Callovium-Oxfordium bei Bure (Meuse/Haute-Marne) in Frankreich (ANDRA 2005). Tongesteine mit ähnlicher Zusammensetzung wie der Opalinuston werden in den Untertage-Felslaboren Bure (Frankreich) und Mol (Belgien) erforscht. In der Schweiz wird der Opalinuston im eigens dafür aufgefahrebenen Untertage-Felslabor Mont Terri im schweizerischen Faltenjura (BOSSART & THURY 2008) und in Kernen aus acht relevanten Tiefbohrungen in der Nordostschweiz untersucht. Zu diesen Tiefbohrungen gehören die Sondierbohrung Benken im Tafeljura (NAGRA 2001, NAGRA 2002), die Sondierbohrungen Weiach, Riniken, Schafisheim, Leuggern, Kaisten und Beznau sowie die Geothermiebohrung Schlattigen SLA-1 (siehe auch NAGRA 2002a: 44).

Aufgrund der schlechten Datenlage zu den deutschen Tonsteinvorkommen im Bereich des Referenzprofils SÜD werden für die Charakterisierung des Wirtsgesteins vor allem die im Rahmen von Standorterkundungsprogrammen in der Schweiz erzielten Erkenntnisse zur Opalinuston-Formation und die dort ermittelten Parameter auf das Modellgebiet übertragen. Dabei wurden vor allem Daten aus der Bohrung Benken verwendet.

Speziell für die Festlegung von geotechnischen, geochemischen und hydrogeologischen In-situ-Parametern für den Opalinuston werden Informationen aus dem Felslabor Mont Terri genutzt. Für den „Clay Club Catalogue“ (BOISSON 2005) wurde für den Opalinuston von Mont Terri eine Vielzahl von Parametern zusammengestellt (BOSSART 2008), die ebenfalls für diesen Bericht ausgewertet wurden. Darüber hinaus wurde auch auf gesteinsmechanische Daten aus BOCK (2009) zurückgegriffen.

Die auf das Referenzprofil SÜD übertragenen Werte sind nicht allgemeingültig und tatsächliche Messungen in Süddeutschland könnten abweichende Werte aufzeigen. Einige Gründe dafür sind nachfolgend dokumentiert.

Da das Felslabor Mont Terri im Faltenjura errichtet, die Sondierbohrungen hingegen im Tafeljura niedergebracht wurden, ergibt sich als Problem, dass der zur Parameterermittlung verwendete Opalinuston aus unterschiedlichen tektonischen Bereichen bzw. unterschiedlichen Teufen stammt. Ferner hat sich in Mont Terri, dem Opalinuston-Aufschluss mit



dem detailliertesten Untersuchungsgrad, gezeigt, dass die mineralogische Variabilität des Opalinustons (und damit auch die Variabilität der geochemischen, hydrogeologischen und petrophysikalischen Merkmale dieses Gesteins) in lateraler und vertikaler Richtung deutlich größer ist als bisher angenommen. Ohne ausreichende standortbezogene Daten kann eine solche Variabilität kaum dargestellt werden, daher wurde der Opalinuston im generischen Modell zunächst als gut charakterisierbares Tongestein mit geringer lithologischer Variabilität angenommen. Daher können auch für diese Einheit Parameterbandbreiten angegeben werden, die sie insgesamt beschreiben. Im Falle einer Standorterkundung können die lokalen Heterogenitäten durch Messungen erfasst und in Standortmodellen berücksichtigt werden.

Um Aussagen zur Übertragbarkeit der jeweiligen Parameter von den schweizerischen Opalinuston-Aufschlüssen in den Bereich des Referenzprofils SÜD überhaupt erst zu ermöglichen, wurden die Parameter aus allen zur Verfügung stehenden Quellen zusammengestellt. Wo es möglich war, wurden im vorliegenden Bericht zu jedem Parameter statistische Angaben mit Werteanzahl, Minimum- und Maximumwerten sowie Standardabweichung aus der Literatur übernommen bzw. berechnet und tabelliert. In mehreren Veröffentlichungen (z. B. BOSSART & THURY 2008, BOSSART 2008) sind keine Mittelwerte, sondern „beste Schätzwerte“ („Best Estimate“) angegeben.

## 3 Einführung

### 3.1 *Allgemeine Informationen, Lithologie und Fazies des Wirtsgesteins (Opalinuston)*

Tongesteine werden für HAW-Endlager als Wirtsgestein in Betracht gezogen, da sie vor allem im ungestörten Zustand sehr geringe Permeabilitäten aufweisen und sich durch chemische Pufferwirkung und Rückhaltekapazitäten für Schadstoffe und Radionuklide auszeichnen. Infolge dieser Eigenschaften sind sie bei der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle sowohl als Barriere- als auch als Wirtsgesteine interessant.

Infolge der ausgeprägten Schichtung der Tongesteine sowie ihres hinsichtlich der mineralogischen Zusammensetzung heterogenen Aufbaus zeigen einige der in diesem Bericht beschriebenen gesteinsphysikalischen Parameter eine deutliche Anisotropie, d. h. ein mehr oder weniger starkes richtungsabhängiges Differieren ihres Wertes. Dies wird bei Messungen vieler Gesteins-Kenngrößen berücksichtigt (vgl. z. B. Kapitel 6.4 Thermische Parameter und 6.5 Seismische Geschwindigkeiten). Auch bei In-situ-Messungen in Bohrlöchern wird dies beachtet, indem die Bohrungen z. B. in unterschiedlichen Richtungen zur Schichtung gestoßen werden (vgl. auch NAGRA 2001). Soweit möglich, wurde auch beim Übertragen von Daten aus anderen Regionen oder Projekten darauf geachtet, dass diese Richtungsabhängigkeit belegt ist.

Im Referenzprofil SÜD ist das Wirtsgestein (Opalinuston) entsprechend den Festlegungen im Projekt AnSichT als gut verfestigter glimmerführender, schluffiger Tonstein ausgebildet, der nur eine geringe Variabilität der Lithologie zeigt. Sandigere und kalkreichere Tongesteinschichten kommen dort nur im oberen Bereich der Abfolge vor (REINHOLD et al. 2016). Nachfolgend wird kurz die Ausprägung des Opalinustons in der Schweiz erläutert, so dass die Unterschiede und Gemeinsamkeiten zum Wirtsgestein des Referenzprofils SÜD deutlicher werden.

Im Zürcher Weinland in der nordöstlichen Schweiz wurden im Opalinuston z. B. aufgrund des makroskopischen Kernbefundes in der Bohrung Benken sowie im Felslabor Mont Terri im Faltenjura lithostratigraphische Untereinheiten nachgewiesen. Für diese Gliederung sind v. a. der variable Gehalt an Schluff- und Feinsandsteinlagen und Siderit-Konkretionen in den Tonsteinen verantwortlich. Die Mächtigkeit dieser Lagen liegt maximal im Bereich von Zentimetern, und die laterale Kontinuität ist auf maximal einige Dezimeter beschränkt. Aufgrund der Zementierung der Schluff- und Feinsandsteinlagen mit Calcit enthalten diese im Gegensatz zu den Tonsteinen auch erheblich mehr Karbonat. Eine typische Schluff-/Sandsteinlage besteht zu etwa gleichen Teilen aus Quarz und Calcit. Angesichts der fehlenden lateralen Kontinuität und der Zementation sind die Schluff-/Sandsteinlagen für die Stofftransporteigenschaften des Wirtsgesteins ohne Bedeutung.

Die sechs Untereinheiten, nummeriert vom Liegenden zum Hangenden, werden wie folgt gegliedert, wobei bei den Sandsteinlagen auch Schluffsteinlagen eingeschlossen sind:

- 6 - Tonsteine mit Sandsteinlagen und Sideritkongkretionen (*Murchisonae*-Schichten)
- 5 - Tonsteine mit Sandsteinlagen und Sideritkongkretionen (Opalinuston)
- 4 - Tonsteine mit zahlreichen Sandsteinlagen (Opalinuston)
- 3 - Tonsteine mit wenigen Sandsteinlagen (Opalinuston)
- 2 - Tonsteine mit Sideritkongkretionen (Opalinuston)
- 1 - Tonsteine (Opalinuston)

Dabei ist zu berücksichtigen, dass neuerdings z. B. in der Bohrung Benken die ehemals als „*Murchisonae*-Schichten in Opalinuston-Fazies“ bezeichnete Untereinheit zum Opalinuston gezählt und der Top des Opalinustons damit neu definiert wird (BLÄSI et al. 2013). Lithologisch am markantesten ist Untereinheit 4, welche durch hellere Farbtöne leicht zu identifizieren ist. Generell ist der Opalinuston im Zürcher Weinland im unteren Teil (Untereinheiten 1 – 3) sehr tonreich, während im oberen Teil (Untereinheiten 4 – 6) etwas sand- und kalkreichere Lithologien vorherrschen. In allen Untereinheiten dominieren Tonsteine. Die laterale Variabilität der Fazies und Lithologie des Opalinustons in der Nordschweiz und der Schwäbischen Alb ist gering, auch hinsichtlich der hydrogeologischen, geochemischen und transportrelevanten Eigenschaften wird der Opalinuston im Zürcher Weinland großräumig als weitgehend homogen angesehen (NAGRA 2002: 228). Trotz dieser geringen lateralen Variabilität weist der Opalinuston im Millimeter- bis Zentimetermaßstab eine z. T. beträchtliche räumliche Heterogenität auf (NAGRA 2002). Die Heterogenität hängt stark vom Wechsel von Ton- und Silt-/Sandsteinlagen ab. Mit nur kleinen Änderungen lässt sich die lithologisch-mineralogische Unterteilung des Opalinustons in der gesamten Nordschweiz wiederfinden, d. h. auch im regionalen Bild ist der untere Teil des Opalinustons sehr tonreich und wird von etwas sand- und kalkreicheren Untereinheiten überlagert. Die Mineralogie ähnelt sehr den Verhältnissen in der Bohrung Benken (NAGRA 2002: 231).

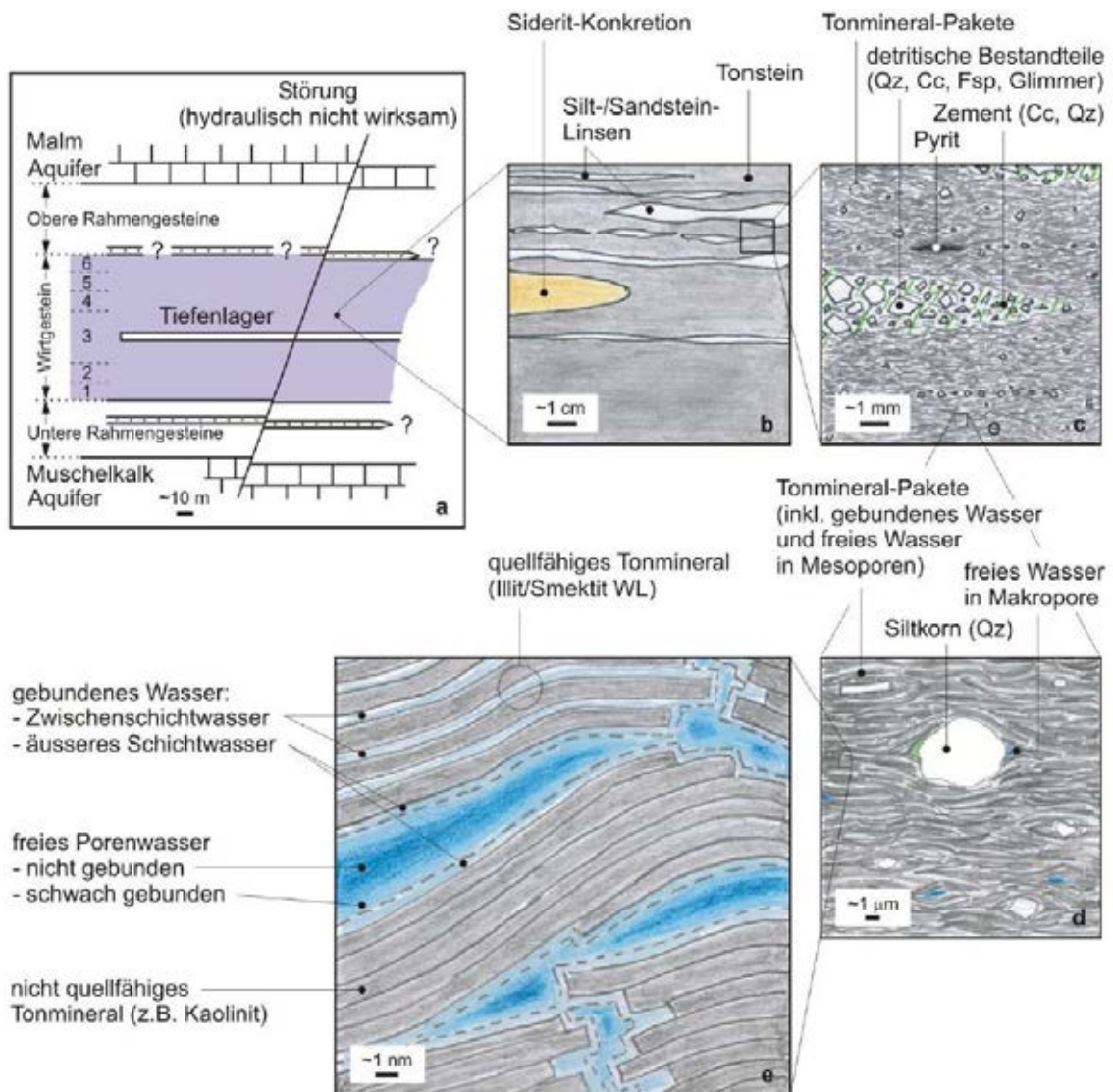


Abb. 1: Vereinfachte Darstellung des Aufbaus des Opalinustons in verschiedenen Maßstäben (a – Dekameter- bis e – Nanometerbereich) (aus: NAGRA 2002: 223)

Der in Abb. 1 gezeigte Aufbau und die Sedimentstruktur des Opalinustons vom Dekameter- bis hin zum Nanometer-Maßstab (NAGRA 2002) wird im Folgenden kurz erklärt:

- (a) Für die großräumige Charakterisierung der Struktur spielen v. a. Störungen eine Rolle. Sie unterscheiden sich hydraulisch aber nicht von ungestörten Bereichen der Opalinuston-Formation und haben keine erhöhte hydraulische Durchlässigkeit zur Folge.
- (b) Im Maßstab von Metern bis Zehnermetern ist eine Variabilität in der vertikalen Richtung durch Unterschiede im Feinsand- oder Karbonatanteil gegeben.

- (c) Im Maßstab von Millimetern bis Dezimetern verursacht die Feinschichtung des Opalinustons einen Unterschied in der Homogenität in vertikaler und horizontaler Richtung. Dies beeinflusst Parameter wie die hydraulische Durchlässigkeit, die Diffusionskonstanten oder die felsmechanischen Eigenschaften.
- (d) Im Maßstab von Bruchteilen von Mikrometern und Millimetern verursachen die unterschiedliche Verteilung von klastischen und biogenen Bestandteilen und die Größe der Tonminerale eine schichtbedingte Anisotropie.
- (e) Im Maßstab von Nanometern vollziehen sich vor allem Prozesse wie Quellen, Selbstabdichtung, Bruch- und Kriechverhalten, die auf den Eigenschaften der jeweiligen Tonminerale und deren Wechselwirkungen mit dem Porenwasser beruhen.

Im Felslabor Mont Terri ist der Opalinuston in drei Faziestypen ausgebildet (BOSSART 2008). Insgesamt zeigt er sich dort etwas tonreicher und entspricht mineralogisch den drei tonreicheren Untereinheiten der Bohrung Benken.

Die tonige Fazies von Mont Terri besteht aus Ton- und Mergelschiefern sowie knolligen, durch Bioturbation gekennzeichneten Mergellagen, die sandige Fazies ist durch Mergelschiefer mit Linsen aus grauen sandigen Kalksteinen sowie millimetermächtige Lagen aus Sandsteinen mit Pyrit gekennzeichnet, die sandig-kalkige („karbonatreiche“) Fazies zeigt kalkige Sandsteine in Wechsellagerung mit bioturbierten Kalksteinschichten mit hohem Anteil an detritischem Quarz. Die Untereinheit 4 („Tonsteine mit zahlreichen Sandsteinlagen“) in Benken ist in Mont Terri besonders kalk- und schluff- bzw. sandreich ausgebildet und wird hier als „sandig-kalkige Fazies“ bezeichnet. Die Mächtigkeit dieser Fazies nimmt in Richtung Westen zu, in Richtung Osten ab. In den Bohrungen im Molassebecken ist sie nicht mehr vorhanden. Im Felslabor Mont Terri wurden die meisten Experimente früher in den tonigeren Fazies durchgeführt; erst seit 2013 wird verstärkt auch die sandige Fazies für die Experimente verwendet (vgl. z. B. KAUFHOLD et al. 2013).

Diese Übersicht zeigt, dass nicht alle in der Schweiz gewonnenen Daten auf das Referenzprofil SÜD übertragbar sind. Verwendet wurden daher vor allem jene, die sich auf homogenere Tongesteinsbereiche beziehen und somit größere Übereinstimmungen zu den Modellannahmen zeigen.

### 3.2 Allgemeine Informationen zum Nebengebirge

Das generische Endlagerstandortmodell SÜD wurde in 16 Modelleinheiten gegliedert. Neben der Verfügbarkeit von Daten basiert die Aufteilung insbesondere auf lithologischen sowie hydrogeologischen Merkmalen innerhalb der mehr als 1000 m mächtigen Schichtenfolge (REINHOLD et al. 2016). Das zuvor beschriebene Wirtsgestein ist die Modelleinheit jm1 mit denselben lithologischen Merkmalen wie die tonigen Ablagerungen der Opalinuston-Formation. Tab. 1 zeigt eine Zusammenstellung der Modelleinheiten, der dazu gehörigen lithostratigraphischen Einheiten des Referenzprofils SÜD und der vereinfacht angesetzten Lithologie. Diese Tabelle wird in den nachfolgenden Kapiteln, soweit möglich, als Basis verwendet, anhand derer die übertragenen Parameterbandbreiten aufgelistet werden. Die in den Spalten angegebene Literaturquelle gilt dort entsprechend.

Tab. 1: Modelleinheiten (ME) im Endlagerstandortmodell SÜD, ihre Äquivalente sowie Zusammenstellung ihrer lithologischen Eigenschaften

ME	Lithostratigraphie (vgl. REINHOLD et al. 2016: Abb. 2)	Lithologie (vgl. REINHOLD et al. 2016: Abb. 37)
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein (wechselnde Anteile von Kalk und Ton), Kalkstein
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein, Mergelstein
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein, Dolomitstein
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein, Kalkmergelstein, Mergelstein
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	Tongestein
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalimergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pylonotenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonatkonkretionen
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tongestein
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein



Im Rahmen des Projektes „Erkennen und Quantifizieren von Strömung: Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des tiefen Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe“ haben u. a. CLAUSER et al. (2002) und RATH & CLAUSER (2005) im Untersuchungsgebiet „Westliche Molasse“ im Süddeutschen Molassebecken ein ausschließlich auf Wärmeleitung beruhendes Referenzmodell auf Basis bekannter geologischer Strukturinformation aufgebaut. Die dort verwendeten thermischen und hydrogeologischen Parameter wurden, soweit übertragbar, auch zur Kennzeichnung des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD verwendet.

Für alle diejenigen Parameter in den einzelnen Modelleinheiten, für die aus den stratigraphischen Einheiten des Referenzprofils SÜD bzw. aus dem Gebiet des süddeutschen Molassebeckens oder der Nordschweiz keine Werte bekannt sind, wurden Werte für solche Sedimentgesteine (Sandstein, Kalkstein, Tonstein, Mergel etc.) zusammengestellt, die den Modelleinheiten des Standortmodells SÜD möglichst gut entsprechen.

#### **4 Mineralogische und sedimentpetrographische Parameter des Wirtsgesteins (Opalinuston)**

Die mineralogische Zusammensetzung des Tongesteins beeinflusst dessen hydrogeologische, geochemische und felsmechanische Eigenschaften. Da dies vor allem für das Wirtsgestein von Bedeutung ist, wird in diesem Kapitel hauptsächlich der Opalinuston behandelt. Nachfolgende Liste gibt eine Übersicht über wichtige Beeinflussungen des mineralogischen Aufbaus der Tongesteine (NAGRA 2002: 227).

- Die Mineralogie, insbesondere Tonminerale mit ihren großen und reaktiven Oberflächen, beeinflusst die Sorptionskapazität des Gesteins für gelöste Stoffe.
- Tonminerale bestimmen wegen ihrer besonderen Kristallformen und -größen die Geometrie des Porenraums (und dadurch Transportparameter wie hydraulische Durchlässigkeit oder Diffusionskonstanten) sowie das felsmechanische Verhalten (Brechen, „Kriechen“, Quellen, Selbstabdichtung) und damit das Materialgesetz.
- Karbonat- und Tonminerale puffern die Zusammensetzung des Porenwassers. Äußere Störungen des geochemischen Systems werden durch schnell ablaufende Reaktionen wie Calcitlösung/-ausfällung oder Kationenaustausch wesentlich abgemildert.
- Veränderungen der Porenwasserchemie werden insbesondere durch Minerale wie Pyrit, Siderit sowie das organische Material gepuffert.

## 4.1 Korngrößenverteilungen

Korngrößenverteilungen charakterisieren das untersuchte Gestein und liefern erste Hinweise zu dessen Porosität und Durchlässigkeit. Die Korngröße (insbesondere die der Karbonatminerale) ist ein festigkeitsbestimmender Faktor. Der Anteil der Karbonatminerale im feinen bzw. im größeren Korngrößenbereich beeinflusst die mechanische Festigkeit des Opalinustons. Sind die Karbonate bevorzugt in feineren Fraktionen (also in der Matrix) vorhanden, ist der Opalinuston mechanisch deutlich stabiler (vgl. dazu auch Kap. 4.3).

Bei einem breiten Korngrößenspektrum stellt sich die Frage nach der wirksamen Korngröße, wobei die Schichtstruktur der Tonminerale eine besondere Bedeutung besitzt (NÜESCH 1991). Allerdings lassen sich nach MATTER (1984) aus Korngrößenanalysen von Tonsteinen keine sedimentologischen Aussagen gewinnen, da sich die Tonpartikel bei der Sedimentation meist als flokkulierte Aggregate und nicht als Einzelteilchen absetzen. Auch ist es bei verfestigten Tönen oft unmöglich, sie vollständig in ihre Mineralkörner bzw. Mineralblättchen zu zerlegen. Die mikroskopische Kontrolle des dispergierten Feinanteils zeigt in solchen Fällen, dass ein großer Teil noch als Aggregate vorliegt, so dass solche Analysen oft ein zu grobkörniges Sediment vortäuschen (MATTER 1984). Aufgrund der Bedeutung von Korngrößenanalysen von Tönen für die Interpretation geotechnischer Parameter wird auf solche Analysen aber trotzdem selten völlig verzichtet. Daher sind nachfolgend einige Analyseergebnisse für den Opalinuston zusammengestellt.

MADSEN & MÜLLER-VONMOOS (1985) bestimmten an Opalinuston-Proben aus 19 im Rahmen eines Tunnelbauprojektes bei Brugg (Nordschweiz) gewonnenen Bohrkernen den Anteil der Tonfraktion ( $< 2 \mu\text{m}$ ). Der Anteil der Tonfraktion schwankte dabei zwischen  $37 \pm 1 \%$  und  $59 \pm 1 \%$ , der Mittelwert betrug  $49 \pm 1 \%$ . Das Mineralinventar der Tonfraktion bestand aus einem Wechsellagerungsmineral, Illit, Kaolinit und Chlorit. Aussagen zu den quantitativen Gehalten fehlen.

NÜESCH (1991) charakterisierte Opalinuston-Proben aus einer Kernbohrung (Bözberg AG, Schweiz). Die Fraktion  $63 - 20 \mu\text{m}$  wurde über Nasssiebung, die Fraktion  $< 20 \mu\text{m}$  mittels Schweresedimentation, die Fraktion  $< 63 \mu\text{m}$  mit einem automatischen Partikelmessgerät bestimmt. Die Gehalte der einzelnen Fraktionen sind in Tab. 2 zusammengestellt.



Tab. 2: Korngrößenverteilung im Opalinuston aus der Kernbohrung Bözberg AG. Angegeben sind die Verteilung in der Gesamtfraktion sowie in bestimmten Einzelfraktionen (aus: NÜESCH 1991)

Probenart	Anteil an der jeweiligen Korngrößenklasse [µm] in Gew.-%						Anteil [Gew.-%]		
	< 2	2 – 10	10 – 20	20 – 32	32 – 63	> 63	Ton	Schluff	Sand
Gesamtfraktion	53	22	18	2	3	2	53	45	2
Fraktion < 250 µm	56	19	18	3	2	2	56	42	2
Fraktion < 125 µm	48	21	22	3	5	1	48	51	1
Fraktion < 2 µm	52	–	–	–	–	–	52	–	–
Fraktion > 2 µm	15	33	34	5	12	1	15	84	1

Für das verwendete Probenmaterial nimmt NÜESCH (1991) einen durchschnittlichen Anteil der Tonfraktion (< 2 µm) von 52 % an. Die untersuchten Siebfraktionen (< 250 µm und < 125 µm) unterscheiden sich in den Gew.-%-Anteilen der Korngrößen < 63 µm nur unwesentlich von der Gesamtfraktion des Opalinustons; die Werte liegen innerhalb einer möglichen Streuung (vgl. Tab. 2). Die Werte für die Gesamtfraktion liegen zwischen denen der beiden Siebfraktionen, woraus geschlussfolgert wird, dass sich das Korngrößenspektrum des Opalinustons weder durch den Aufmahlvorgang noch durch das Sieben wesentlich verändert. Die durch die Schweresedimentation übrig bleibende Schlufffraktion > 2 µm besitzt noch einen erstaunlich hohen Tonanteil von 15 %, was nach mikroskopischen Untersuchungen des Opalinustons auf starke Vererzungen zurückgeführt wurde. MADSEN (1976) ermittelte an Proben vom Bözberg für den Anteil < 2 µm mittlere Gehalte von 45,5 ± 12,9 Gew.-%. Allerdings streuen die Werte stark.

FERRARI et al. (2012) haben Korngrößenanalysen an Opalinuston-Proben aus der Bohrung Schlattingen SLA-1 durchgeführt, die aus dem Teufenbereich 831 – 949 m unter GOK stammen. Die für die drei Opalinustonsteine ermittelten Gehalte der Ton-, Schluff- und Sandfraktionen finden sich in Tab. 3.

Tab. 3: Anteile der Ton-, Schluff- und Sandfraktionen ausgewählter Opalinuston-Proben der Bohrung Schlattingen SLA-1 und entsprechende Ansprache nach Schweizer Norm zur Klassifizierung von Böden SN 670 004-2a (aus: FERRARI et al. 2012)

Probe	Teufe unter GOK [m]	Lithologie	Anteil an [Gew.-%]			Ansprache nach SN 670 004-2a
			Ton	Schluff	Sand	
OPA-20	854,60 – 854,82	Tonstein	18	57	25	Magerton mit Sand
OPA-6	882,20 – 882,50	Tonstein mit feinsandigen Lagen (ca. 1 mm)	18	58	24	schluffiger Ton mit Sand
OPA-18	891,00 – 891,25	Tonstein mit sandigen Lagen	22	53	25	Magerton mit Sand

Die Korngrößenverteilungen des Opalinustons der Bohrungen Schlattingen SLA-1 und Bözberg 5256.20 bzw. aus den Untertagelabor Mont Terri unterscheiden sich trotz der räumlichen Nähe der Bohrpunkte deutlich voneinander. Unterschiede bestehen vor allem im Anteil der Tonfraktion  $< 2 \mu\text{m}$ , welcher bei NÜESCH (1991) und MADSEN (1976) ca. 50 Gew.-%, in den Analysen von FERRARI et al. (2012) hingegen nur maximal 27 Gew.-% beträgt. Als Gründe dafür kommen zuerst die unterschiedlichen Analysenverfahren in Frage.

Tests, bei der dieselbe Probe mit unterschiedlichen Verfahren untersucht wurde, ergaben völlig unterschiedliche Kornsummenkurven. Bei Klassifizierung des Gesteins nach den Korngrößen der Minerale erhält man einen schluffigen Ton, bei Berücksichtigung der Tonkörperchen einen schluffigen Kiessand. Die bei der Nassaufbereitung erhaltenen Kornsummenkurven verschieben sich in den gröberen Bereich.

Weitere Darstellungen von Korngrößenverteilungen im Opalinuston aus oberflächennahen Aufschlüssen (ohne Angabe von Werten) finden sich u. a. in EINSELE & WALLRAUCH (1964), WALLRAUCH (1969), HEKEL (1994), BÖNSCH (2006) und STIEGELER et al. (2006). Die aus solchen Aufschlüssen stammenden Proben sind unterschiedlich stark verwittert und lassen sich unterschiedlichen Verwitterungsstufen zuordnen. Für das Referenzprofil SÜD sind diese Werte jedoch nicht aussagekräftig, da sich das Wirtsgestein in Tiefen von ca. 600 m u. GOK befindet.

## **4.2 Spezifische Oberfläche**

Eine Eigenschaft, die für die Komponenten des FEP-Kataloges im Projekt AnSichT angegeben wird, ist die Oberflächenbeschaffenheit. Bei Tonmineralen kann sie z. B. das Quellverhalten oder das Sorptionsvermögen mitbestimmen.

Bei porösen oder körnigen Feststoffen wird zwischen der inneren und äußeren Oberfläche unterschieden, wobei die innere Oberfläche häufig um mehrere Größenordnungen größer ist. Sie umfasst die Gesamtheit aller darin enthaltenen Oberflächen, also auch jene, die sich zwischen Körnern und innerhalb von Poren befinden. Die eigentliche Messgröße der inneren Oberfläche ist die spezifische Oberfläche, die massen- oder volumenbezogen ermittelt wird. Die äußere Oberfläche stellt die von außerhalb direkt ersichtliche Oberfläche (Oberfläche der Begrenzungen von Mineralkörnern in einem Gestein) dar. Die totale Oberfläche ist die Summe der äußeren und inneren Oberflächen.

In Tab. 4 sind einige Werte für äußere, innere und totale spezifische Oberflächen von Opalinuston-Proben aus Lokalitäten in der Nordschweiz und Baden-Württemberg zusammengestellt.

Tab. 4: Äußere, innere und totale spezifische Oberflächen von Opalinuston-Proben aus Lokalitäten in der Nordschweiz und Baden-Württemberg und daraus abgeleitet die Abschätzung für das Referenzprofil SÜD

Lokalität Opalinuston	äußere spezifische Oberfläche [m <sup>2</sup> ·g <sup>-1</sup> ]				innere spezifische Oberfläche [m <sup>2</sup> ·g <sup>-1</sup> ]			totale spezifische Oberfläche [m <sup>2</sup> ·g <sup>-1</sup> ]				Literatur
	n	Min	Max	MW ± 1σ	Min	Max	MW	n	Min	Max	MW ± 1σ	
Benken	7 <sup>a)</sup>	19	49	28	–	–	62 <sup>f)</sup>	3 <sup>b)</sup>	80	107	94	1
	–	–	–	–	–	–	–	1 <sup>c)</sup>	56	129	85	1
Mont Terri	a)	24	37	31	112	147	130 <sup>d)</sup>	–	–	–	–	2
	?	–	–	30	–	–	–	–	–	–	–	3
	?	–	–	35,2	–	–	–	–	–	–	–	4
Beznau	6 <sup>a)</sup>	24,8	34,9	30,6 ± 4,0	86,1	132,4	108,7 <sup>h)</sup>	6 <sup>e)</sup>	121	167	139 ± 15,6	5
Tunnelbau bei Brugg	19	22	37	30,1 ± 4,0	–	–	–	? <sup>g)</sup>	130	140	135 ± 5	6

<sup>a)</sup> N2-BET-Verfahren (BRUNAUER et al. 1938), <sup>b)</sup> mit Ethylen-Glykol-Monoethyl-Ether, <sup>c)</sup> aus H<sub>2</sub>O-Isothermen, <sup>d)</sup> Adsorption nach KEELING et al. (1980), <sup>e)</sup> Glycerin-Methode nach JACKSON (1964), <sup>f)</sup> Differenz totale/äußere Oberfläche, <sup>g)</sup> Fraktion < 2 µm, <sup>h)</sup> 1 NAGRA (2002a), 2 BOSSART (2008), 3 PASQUIOU & ROBINET (1997), 4 BRADBURY & BAEYENS (1998), 5 MATTER (1984), 6 MADSEN & MÜLLER-VONMOOS (1985)

Aussagen zur Tiefenabhängigkeit der spezifischen Oberflächen der Opalinuston-Proben sind nur für sehr wenige Datensätze möglich. Dabei zeigen z. B. die an Proben aus der Bohrung Beznau ermittelten Werte eine konstante Zunahme mit der Tiefe sowohl von äußerer als auch totaler spezifischer Oberfläche (MATTER 1984).

### 4.3 Gefüge

Unter dem Begriff Gefüge werden die Struktur und die Textur von Gesteinen beschrieben. Bei Tongesteinen hängen z. B. mechanische Eigenschaften, wie das Quellvermögen, auch vom Gefüge ab. BAUER-PLAINDOUX et al. (1998) zeigten an Tonsteinen aus dem Callovium-Oxfordium (Meuse/Haute-Marne) und dem Toarcium (Tournemire), dass verschiedene Tongesteine mit vergleichbarem Calcit-Gehalt ein völlig unterschiedliches physikalisches und mechanisches Verhalten aufweisen können. In Tab. 5 sind die Unterschiede im Gefüge anhand der Ausprägungen der sandigen und tonigen Fazies des Opalinustons dargestellt.

Tab. 5: Vergleich von toniger und sandiger Fazies des Opalinustons von Mont Terri hinsichtlich Makro- und Mikrogefüge und weiterer Parameter unter Verwendung der Resultate von KLINKENBERG et al. (2009) und KAUFHOLD et al. (2013)

Opalinuston Mont Terri		
	tonige Fazies (KLINKENBERG et al. 2009)	sandige Fazies (KAUFHOLD et al. 2013)
<b>Makrogefüge</b>	teils homogen ohne Lagen oder Linsen, teils große Fossilien nur selten karbonatreiche Lagen	heterogener als tonige Fazies große karbonatreiche Linsen und Lagen alternierende karbonat-/quarzreiche und tonige Lagen Anordnung von Lagen und Linsen parallel zur Schichtung
<b>Mikrogefüge</b>	Tonminerale bilden Matrix in Matrix grobkörnigere Partikel (meist Calcit, oft in Form von Fossilien) Anordnung dieser Fossilien parallel zur Schichtung weitere grobkörnige Partikel: Pyrit als Framboide Feinschichtung durch texturierte Tonminerale	Quarz ist häufigstes Mineral und wird durch Karbonate zementiert; Karbonate bilden Matrix Karbonate auch in der Feinsandfraktion sowie in biogener Form vorhanden chemische Zonierung (Ca/Mg-Verhältnis) der Karbonate ist charakteristisch Quarz bevorzugt in der Schluff- und Feinsandfraktion Pyrit in Form idiomorpher Kristalle und als Framboide Tonminerale (TM) füllen Räume zwischen Quarz und Karbonaten und treten auch in dünnen schichtparallelen Lagen auf
<b>Korngrenzen/ Mikrorisse</b>	Auftreten von Mikrorissen an Korngrenzen der grobkörnigen Karbonatkörner (Schalen) Vernetzungsgrad nimmt mit steigendem Gehalt an größeren Körnern zu ansonsten enden diese Risse in der tonigen Matrix Risse z. T. mit Gips gefüllt	Korngrenzen der Karbonatpartikel regelmäßig bis unregelmäßig fast alle Partikel (Karbonate, aber auch Quarz und Feldspäte) weisen Mikrorisse ohne bevorzugte Orientierung auf diese Mikrorisse sind auch transgranular
<b>Karbonate</b>	hauptsächlich in Form von schichtungsparallel angeordneten biogenen Relikten sowie idiomorphen Calciten Partikelform variiert von dominierend isometrisch bis plattig Karbonatpartikel sind schichtungsparallel orientiert	bilden die Matrix Karbonatpartikel fast ausschließlich isometrisch, kaum plattig keine bevorzugte Orientierung der Karbonatpartikel

Bereits in NAGRA (2002) wurde gezeigt, dass Mikrostrukturen einen signifikanten Einfluss auf die gesteinsmechanischen Eigenschaften von Tongesteinen ausüben. KLINKENBERG et al. (2009), KAUFHOLD et al. (2013) und SIEGESMUND et al. (2014) haben das bestätigt und verdeutlicht, dass bei der tonigen Fazies des Opalinustons von Mont Terri die mechanische Festigkeit mit steigendem Karbonatgehalt (hier: biogene Fragmente wie Muschelschalen) sinkt, während sie in der sandigen Fazies des Opalinustons von Mont Terri – wie auch in den Tonen des Callovium-Oxfordium von Meuse/Haute Marne – mit wachsendem Karbonatgehalt (hier: feinkörnig und matrixbildend) steigt. Fraglich ist, ob in der sandigen Fazies die Größe der Festigkeit durch Unterschiede im Karbonattyp (Mineralogie, Ausbildung etc.) beeinflusst wird. Ferner erwies sich, dass mit steigendem Stützdruck die Festigkeit des Opalinustons zunimmt.

## **4.4 Mineralogische Zusammensetzung**

### **4.4.1 Qualitative Mineralogie**

Daten zur mineralogischen Zusammensetzung des Opalinustons wurden folgenden Quellen entnommen:

- DEURER (1974) mit Daten aus den Tongruben Schlatt bei Hechingen, Heimingen und Frickenhausen (Südwestdeutschland, oberflächennahe Aufschlüsse)
- Bundesbahn-Neubaustrecke bei Donzdorf südöstlich Göppingen, dort auch Flachbohrungen bis in 70 m Teufe (Datenkompilation in HEKEL 1994)
- NAGRA (2001), MAZUREK (2001) und NAGRA (2002) mit Zusammenstellungen der mineralogischen Zusammensetzung des Opalinustons der NAGRA-Bohrungen (Benken, Weiach, Riniken, Schafisheim) im Tafeljura sowie aus dem Felslabor Mont Terri im Faltenjura

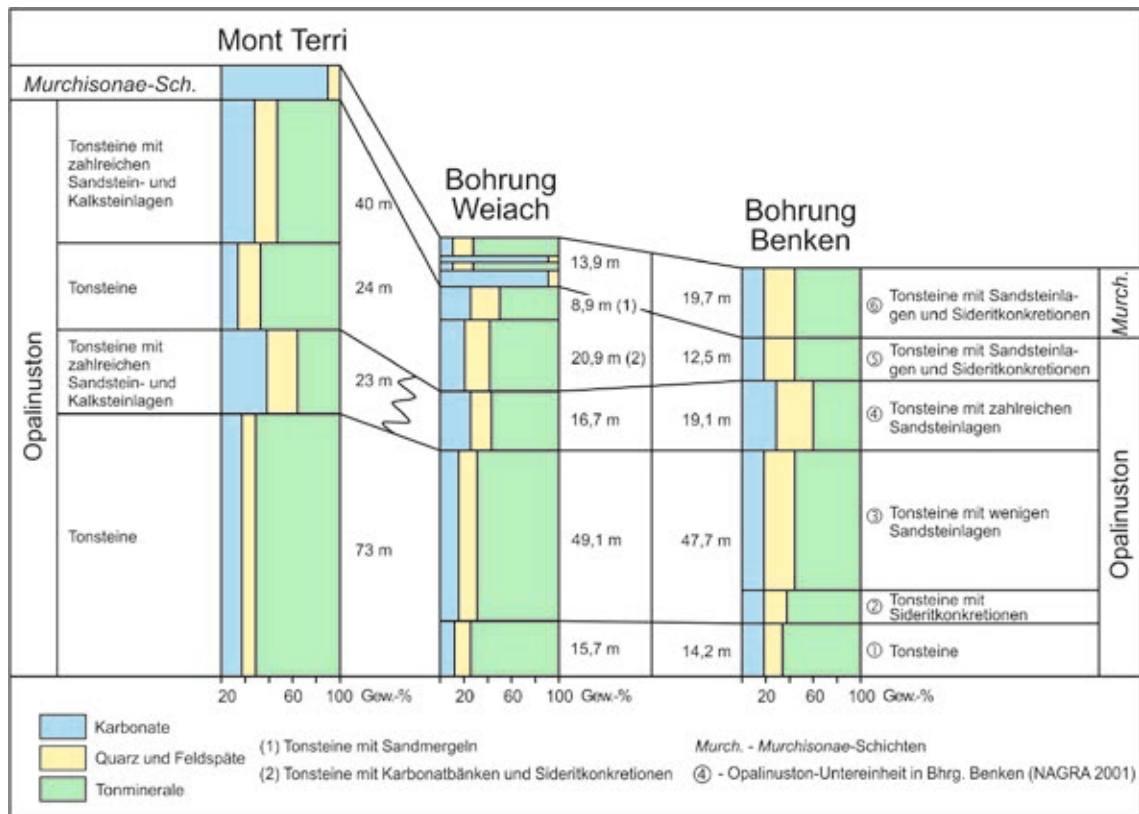


Abb. 2: Gliederung und Korrelation des Opalinustons aus den Sondierbohrungen Benken und Weiach im Vergleich mit dem Opalinuston des Felslabor Mont Terri aufgrund seiner jeweiligen Lithologie und mineralogischen Zusammensetzung (nach: NAGRA 2002)

Besonders detailliert wurde die mineralogische sowie tonmineralogische Zusammensetzung des Opalinustons aus den NAGRA-Bohrungen in der Nordschweiz und dem Felslabor Mont Terri untersucht. Dabei stellte sich heraus, dass die qualitative Mineralogie des Opalinustons der untersuchten Proben aller Aufschlüsse mehr oder weniger identisch ist. Abb. 2 vergleicht die Gliederung und Korrelation des Opalinustons von Mont Terri mit dem Opalinuston der Bohrungen Weiach und Benken aufgrund seiner jeweiligen Lithologie und mineralogischen Zusammensetzung.

Auch in den einzelnen Faziestypen ist die qualitative Zusammensetzung des Opalinustons identisch. Nachgewiesen wurden Calcit (selten Aragonit), Dolomit und/oder Ankerit, Siderit, Quarz, Albit und/oder Plagioklas, Kalifeldspat, Illit, ein Illit-Smektit-Wechselagerungsmineral, Chlorit, Kaolinit, Pyrit und organischer Kohlenstoff. Auch in kleinen Mengen vorkommende Minerale wie Siderit, Pyrit oder Feldspäte sowie organischer Kohlenstoff sind in fast allen Proben identifizierbar und somit stets im Gestein vorhanden, wenn auch z. T. in stark schwankenden Mengen. Lediglich durch REM-EDX-Analysen nachgewiesene Spurenminerale sind Apatit, Coelestin, Zirkon und Monazit. Zu den sekundär gebildeten, nur qualitativ nachgewiesenen Mineralen zählen Coelestin und Baryt in Gängen sowie

gediegener Schwefel. In durch Oxidation verändertem Material wurden Gips und Spuren von Jarosit identifiziert (PEARSON et al. 2003a: 34). Tab. 6 zeigt eine Zusammenstellung der qualitativen mineralogischen Zusammensetzung des Opalinustons verschiedener Lokalitäten.

Die mineralogische Zusammensetzung der tonigen Fazies in Mont Terri wird als Beispiel für die mineralogische Zusammensetzung des Wirtsgesteins im Referenzprofil Süd angesehen.

Tab. 6: Qualitative mineralogische Zusammensetzung des Opalinustons

Lokalität/Fazies	Hauptgemengteile (> 10 %)	Nebengemengteile (≤ 10 %)	Spuren (≤ 3 %)	Literatur
Bohrung Beznau	Quarz, Calcit, Illit, Kaolinit	Chlorit, Illit/ Montmorillonit-WL	Feldspäte (Albit, Kalifeldspat), Dolomit, Ankerit, Pyrit	PETERS (1984a)
Bohrung Weiach	Quarz, Calcit, Illit, Kaolinit	Chlorit, Illit/Smektit	Siderit, Ankerit, Albit, Kalifeldspat	NAGRA (1988a)
Bohrung Benken	Quarz, Calcit, Illit, Kaolinit, Illit/Smektit-WL	Siderit, Chlorit	Albit, Kalifeldspat, Dolomit/Ankerit, Pyrit	NAGRA (2001)
Mont Terri sandige Fazies	Quarz, Karbonate (Calcit, Kutnahorit)	Smektit und/oder Illit-Smektit-WL, Kaolinit	Feldspat, Pyrit, Gips, Rutil, Apatit	KAUFHOLD et al. (2013)
Mont Terri tonige Fazies	Quarz, Calcit, 2:1-dioctaedrische Schichtsilikate (Illit, Smektit, Muskovit, Illit-Smektit-ML), Kaolinit	Klinochlor (Mg/Fe), Pyrit	Gips, Siderit, Na/Ca-Feldspat, Kalifeldspat, Goethit, Anatas/Rutil, Apatit	KLINKENBERG et al. (2009)
Mont Terri tonige Fazies	Quarz, Calcit, Illit, Illit-Smektit, Chlorit		Kalifeldspat, Albit, Pyrit, Siderit, Dolomit/Ankerit	PEARSON et al. (2003a)
Mont Terri karbonatreiche sandige Fazies	Quarz, Calcit,	Illit, Illit-Smektit-WL, Chlorit, Kalifeldspat	Albit, Pyrit, Siderit, Dolomit/Ankerit	
Mont Terri sandige Fazies	Quarz, Calcit, Illit, Illit-Smektit, Chlorit		Kalifeldspat, Albit, Pyrit, Siderit, Dolomit/Ankerit	

WL: Wechsellagerungsmineral



#### 4.4.2 Quantitative Mineralogie

Im Gegensatz zur qualitativen Mineralogie des Opalinustons schwankt dessen quantitative Zusammensetzung im Bereich der nordschweizerischen Aufschlüsse deutlich. Eine Übersicht dazu findet sich in MAZUREK (2001); LANGER et al. (2001) geben einen detaillierten Vergleich der Tonmineralogien von Benken bzw. Mont Terri. Abb. 3 gibt einen Überblick über die mineralogischen Zusammensetzungen des Opalinustons in der Nordschweiz und verschiedener Regionen international. Der Großteil der Analysen fällt in die Felder der karbonatischen sandigen Tonsteine, karbonatischen stark sandigen Tonsteine bzw. sandigen Tonsteine. Obwohl die Felder für die verschiedenen Lokalitäten weitgehend überlappen, kann festgestellt werden, dass der Opalinuston aus der Bohrung Benken im Mittel etwas weniger tonreich ist als in den anderen Lokalitäten (MAZUREK 2011).

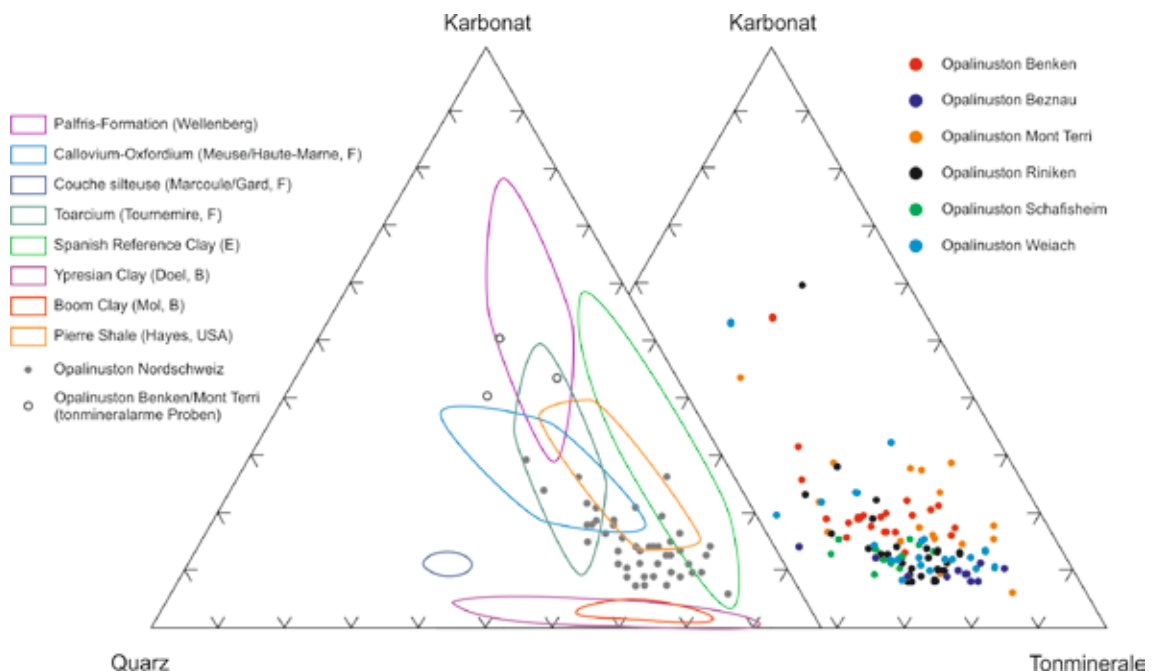


Abb. 3: Mineralogische Zusammensetzung des Opalinustons in der Nordschweiz (linkes Dreieck, graue Punktsignatur) im Vergleich mit anderen gut untersuchten tonreichen Formationen weltweit (nach: NAGRA 2002a). Im rechten Dreieck sind die Proben aus den schweizerischen Opalinuston-Aufschlüssen farblich differenziert dargestellt (nach: MAZUREK 2011).

Bandbreiten und Mittelwerte der mineralogischen Zusammensetzung des Opalinustons aus süddeutschen und schweizerischen Vorkommen sind in Tab. 7 zusammengestellt. BOSSART & THURY (2008) kompilieren Analysenergebnisse der mineralogischen Untersuchungen der verschiedenen Fazies des Opalinustons im Felslabor Mont Terri, die im Rahmen einer internationalen Laborvergleichsstudie zur quantitativen Mineralanalyse (MAZUREK 1998) gewonnen wurden. Deren Resultate sind trotz der Unterschiede in den verwendeten Methoden der beteiligten Labore „erstaunlich gut“ (MAZUREK 1999). Die Resultate der Universität Bern an Material aus der tonigen Fazies sind ebenfalls in Tab. 7 enthalten.



Tab. 7: Bandbreiten und Mittelwerte der mineralogischen Zusammensetzung des Opalinustons (tonige Fazies) aus süddeutschen und schweizerischen Lokalitäten

Literatur	1		2a	2b	3	4		5	
Mineral	Mittelwert	Bandbreite	Bandbreite	Bandbreite	Mittelwert	Mittelwert	Bandbreite	Mittelwert	Bandbreite
	alle Werte in Gew.-%								
Quarz	18	11 – 23	14 – 18	11 – 13	45	30	19 – 42	5 ± 0	5
Kalifeldspat	–	–	1 – 3	< 2	1	1	1 – 3	–	–
Albit	–	–	0,5 – 1,5	0,5 – 1,5	2	1	0 – 1	–	–
<b>Σ Feldspäte</b>	<b>1</b>	<b>0 – 6</b>	<b>–</b>	<b>–</b>	<b>3</b>	<b>2</b>	<b>1 – 4</b>	<b>–</b>	<b>–</b>
Illit	31	19 – 38	17 – 25	16 – 24	15	25	21 – 30	48 ± 3	40 – 50
Kaolinit	17	4 – 34	25 – 37	22 – 32	8	16	13 – 21	33 ± 3	30 – 40
Chlorit	10	1 – 19	5 – 7	4 – 6	3	4	3 – 6	11 ± 2	10 – 15
Smektit	–	–	6 – 10	7 – 11	0	0	0	–	–
Mixed Layer	10	1 – 15	–	–	7	13	11 – 15	5 ± 0	0 – 5
<b>Σ Schichtsilikate</b>	<b>68</b>	<b>25 – 75</b>	<b>53 – 70</b>	<b>49 – 73</b>	<b>33</b>	<b>60</b>	<b>48 – 73</b>	<b>97</b>	<b>–</b>
Gips	–	–	–	–	0	0	0	–	–
Pyrit	1	1 – 2	1,2 – 1,4	0,9 – 1,1	1	1	0 – 3	–	–
Calcit	8 – 10	3 – 67	6 – 8	18 – 22	16	6	2 – 15	0	0
Dolomit/Ankerit	–	–	0,5 – 1,5	0,5 – 1,5	0	0	0	0	0
Siderit	4	0 – 40	4 – 6	2,5 – 3,5	2	3	0 – 7	–	–
<b>Σ Karbonate</b>	<b>12 – 14</b>	<b>–</b>	<b>–</b>	<b>–</b>	<b>18</b>	<b>9</b>	<b>4 – 15</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
Goethit	–	–	–	–	0	0	0 – 1	–	–
C <sub>org</sub> (TOC)	–	–	0,4	0,5	–	–	–	–	–
Literaturquellen: <b>1</b> – Opalinuston Bohrungen Weiach, Riniken, Schafisheim (NAGRA 1988b), <b>2</b> – Opalinuston tonige Fazies Mont Terri (a – SHGN-Nische, b – Reserve-Nische) (BOSSART & THURY 2008), <b>3</b> – BAB-Baustelle Aichelberg (HEKEL 1994), <b>4</b> – Opalinuston Donzdorf, DB-Neubaustrecke Bohrung B 30 (HEKEL 1994), <b>5</b> – Bohrung Buttenhausen 1 bei Ehingen (DEURER 1974).									

Die mineralogischen Parameter des von der NAGRA in der Nordschweiz untersuchten Opalinustons variieren in der Vertikalen jeder Bohrung, lateral innerhalb des untersuchten Gebietes sowie regional. Auch den Kompilationen MAZUREK (2011) sowie TRABER & BLASER (2013) zufolge ist die Zusammensetzung des Opalinustons sowohl für einzelne Lokalitäten als auch in der gesamten Nordschweiz nicht homogen. So beträgt der Tonmineralgehalt des Opalinustons typischerweise um 60 Gew.-% bei Schwankungen zwischen 40 und 75 Gew.-%. Zur Abdeckung dieser Variationen haben TRABER & BLASER (2013) aus einem größeren Datensatz am Opalinuston der gesamten Nordschweiz kompiliert für alle Minerale des Opalinustons je einen Referenzwert sowie einen oberen und unteren Eckwert berechnet. Diese Werte können aber nicht auf das Referenzprofil SÜD übertragen werden, da sie den Gesamtbereich des Opalinustons widerspiegeln, während im Referenzprofil SÜD ein Homogenbereich in der tonigen Fazies angenommen wird.

Tab. 8 zeigt die mineralogischen Kennwerte (Bandbreiten und Mittelwerte) zweier Faziesbereiche im Opalinuston der Bohrung Benken, die auf die oberen 10 m der Abfolge im Referenzprofil SÜD sowie auf den Homogenbereich des Wirtsgesteins übertragen werden.

Tab. 8: Bandbreiten und Mittelwerte [Gew.-%] der mineralogischen Zusammensetzung des Opalinustons aus Proben der Bohrung Benken (aus: NAGRA 2001) und Übertragung auf das Referenzprofil SÜD

Lokation	Bohrung Benken					
Lithologie	Tonsteine mit wenigen Sandsteinlagen			Tonsteine		
Teufenbereich [m] unter GOK	590,11 – 629,80			637,80 – 652,04		
im Referenzprofil SÜD übertragen auf	obere 10 m der Abfolge			Wirtsgestein (Homogenbereich)		
Probenanzahl	5			2		
Mineral	Min	Max	MW	Min	Max	MW
Illit			21			20
Illit-Smektit-WL			16			16
Chlorit			4			6
Kaolinit			14			21
Σ Schichtsilikate	52	59	55	62	63	63
Quarz	20	24	22	13	14	13
Albit	1	1	1	1	1	1
Kalifeldspat	2	2	2	< 1	2	1
Σ Feldspäte			3			2
Calcit	11	17	13	12	15	13
Dolomit/Ankerit	< 1	1	1	< 1	1	< 1
Siderit	2	7	5	6	8	7
Pyrit	0,2	1,1	0,5	0,9	1,3	1,1
C <sub>org</sub>	0,7	0,9	0,8	0,5	0,5	0,5
Σ Karbonate*			23			24

\* Inklusive der Akzessorien. MW = Mittelwert.

## 4.5 Wassergehalt

BOCK (2009) zufolge bezieht sich der Parameter Wassergehalt auf die Menge an Wasser im Gestein in dessen natürlichem Zustand. Er umfasst nur das „freie“ Wasser in den Poren des Opalinustons, nicht das adsorbierte oder strukturell gebundene Wasser. Nach Untersuchungen von CHIFFOLEAU & ROBINET (1999) ist im Opalinuston die Menge des „freien Wassers“ (≈ 40 %) geringer als die des adsorbierten Wassers (≈ 60 %). NAGRA (2002) zufolge beträgt der Anteil des freien Wassers am Gesamtwassergehalt ca. 26 %. In Tab. 9 sind einige Wassergehalte des Opalinustons, die im Felslabor Mont Terri ermittelt wurden, aufgelistet.

Tab. 9: Bei 105 – 110 °C ermittelte Wassergehalte des Opalinustons aus dem Felslabor Mont Terri und zugehörige statistische Parameter

Fazies	Minimum	Maximum	Mittelwert	Standard- abweichung 1 $\sigma$	Literatur
	alle Werte in Gew.-%				
alle Fazies	–	–	6,1	1,9	BOCK (2001)
	–	–	6,4	0,8	BOCK (2009)
tonige Fazies, t	6,00	8,58	7,38	0,64	PEARSON et al. (2003c)
tonige Fazies, t	5,3	9,8	7,0	–	BOSSART (2008)
tonige Fazies, w	5,0	8,9	6,6	–	

t: Gew.-% vom Trockengewicht; w: Gew.-% vom wassergesättigten Gewicht

Unter geringer Auflast ist der Opalinuston fähig, große Mengen an Wasser in die Zwischenschichten der Tonminerale einzubauen („gebundenes Wasser“) und in die offenen Poren aufzunehmen, wodurch seine Festigkeit deutlich herabgesetzt wird. Bekannt sind die dadurch hervorgerufenen Rutschungen in Gebieten mit oberflächennaher Lagerung des Opalinustons (NAGRA 1988b: 165f.).

#### 4.6 Chemische Zusammensetzung

Chemische Analysen von Opalinuston-Gesamtgesteinsproben liegen u. a. aus der Bohrung Benken (NAGRA 2001) und aus Mont Terri (GAUCHER et al. 2003) vor. Die Werte für die Hauptelementgehalte aus dem Bereich der tonigen Fazies sind in Tab. 10 zusammengestellt.

Tab. 10: Haupt- und Nebenelementgehalte [Gew.-%] im Opalinuston der Bohrung Benken (NAGRA 2001) und aus Mont Terri (GAUCHER et al. 2003)

	Benken	Mont Terri		
	toniger Opalinuston bei 630,71 m u. GOK	tonige Fazies		
Probenanzahl	1	6		
		Min	Max	MW
SiO <sub>2</sub>	48,29	30,00	53,12	40,18
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	18,79	16,70	19,70	18,12
FeO	–	2,60	2,90	2,79
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	–	1,68	2,49	1,97
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (tot.)	7,79	4,80	6,23	5,36
MnO	0,09	0,05	0,07	0,06
MgO	2,28	1,70	2,47	2,06
CaO	5,13	2,96	16,20	11,33
Na <sub>2</sub> O	0,42	0,59	0,76	0,64
K <sub>2</sub> O	2,62	2,20	2,92	2,52
TiO <sub>2</sub>	0,91	0,69	1,00	0,76
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0,49	0,09	0,21	0,13
BaO	–	0,02	0,03	0,02
SrO	–	0,02	0,03	0,02
F	–	0,03	0,04	0,03
Cl	–	0,052	0,052	0,052
Glühverlust	13,55	–	–	–
H <sub>2</sub> O <sup>-</sup>	–	0,89	3,40	2,27
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	–	0,48	6,55	4,12
Total CO <sub>2</sub>	–	8,34	16,50	13,36
Total SO <sub>2</sub>	–	0,76	1,14	0,91
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	–	0,067	0,190	0,109

Die Werte für die Spurenelementgehalte sind in Tab. 11 kompiliert. Am Opalinuston von Mont Terri sind Spurenelemente nur für die tonige Fazies bestimmt worden.

Tab. 11: Am Opalinuston aus der Bohrung Benken (NAGRA 2001) und aus dem Felslabor Mont Terri (GAUCHER et al. 2003, BATH & PEARSON 2003) ermittelte Spurenelementgehalte (alle Werte in ppm)

Element	Bhrg. Benken, toniger Opalinuston	Mont Terri, tonige Fazies			Element	Bhrg. Benken, toniger Opalinuston	Mont Terri, tonige Fazies		
	n = 1	n = 6				n = 1	n = 6		
		Min	Max	MW			Min	Max	MW
As	7	< 25	–	–	U	2,61	2,4	2,5	2,5
Be	3	< 5	–	–	V	152	86	110	95
Ba	298	0,02	0,03	0,02	V (2)	150	–	–	–
Ba (2)	273	–	–	–	W	2,8	–	–	–
Co	13	13	17	14	Y	40	12	14	
Cr	110	74	100	87	Y (2)	35,9	–	–	–
Cs	6,9	–	–	–	Zn	46	56	95	72
Cu	18	22	26		Zr	153	n.d.	44	
Ga	22	–	–	–	Zr (2)	154	–	–	–
Ge	1,8	–	–	–	La	47,5	34	38	36
Hf	4,5	–	–	–	Ce	104,0	61	72	65
Nb	15,8	–	–	–	Pr	12,80	–	–	–
Ni	47	35	54	42	Nd	50,10	–	–	–
Pb	7	–	–	–	Sm	9,98	–	–	–
Rb	114	–	–	–	Eu	2,31	–	–	–
Sb	0,3	–	–	–	Gd	8,69	–	–	–
Sc	20	–	–	–	Tb	1,34	–	–	–
Sn	2	< 10	16		Dy	7,20	–	–	–
Sr	271	–	–	–	Ho	1,36	–	–	–
Sr (2)	245	–	–	–	Er	3,79	–	–	–
Ta	1,3	–	–	–	Tm	0,52	–	–	–
Th	12,10	13 ?	–	–	Yb	3,26	–	–	–
Tl	0,30	–	–	–	Lu	0,46	–	–	–

Silber, Bismut, Indium und Molybdän wurden nur in den Proben aus Benken analysiert, die Gehalte sind sämtlich mit „n.n.“ angegeben.

Die Gesteine enthalten z. T. auch Elemente, die natürliche Radioisotope bilden können. Da es in Sicherheitsnachweisen nötig sein kann, diese von den eingebrachten Radioisotopen getrennt zu betrachten, sind in Tab. 12 U-, Th- und K-Gehalte aufgeführt, die in der Bohrung Beznau mittels Gammastrahlungsmessung ermittelt wurden (RYBACH 1984b). Sie wurden, soweit eine Übertragung möglich war, sowohl dem Wirtsgestein als auch den Nebengebirgsschichten des Referenzprofils SÜD zugeordnet.

Tab. 12: Ergebnisse gammaspektrometrischer Messungen an Kernproben aus der Bohrung Beznau/Schweiz (aus: RYBACH 1984b)

ME	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Teufe [m u. GOK]	K [Gew.-%]	U [ppm]	Th [ppm]
q	keine Angaben vorhanden					
tms						
jo2						
jo1						
jm3						
jm2						
jm1	Tongestein	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	24,00 – 31,04	2,17	2,20	12,00
			31,04 – 38,61	2,36	2,20	12,80
			38,61 – 46,15	2,52	2,20	13,90
			46,15 – 53,65	2,64	2,40	14,00
			53,65 – 60,25	2,80	2,60	14,00
			60,25 – 65,73	2,89	2,60	14,40
ju2	Tonmergelstein, Mergelstein	Jurensismergel-Fm.	66,69 – 66,82	1,51	2,00	6,80
		Posidonienschiefer-Fm.	71,32 – 71,55	1,73	5,20	7,20
			74,20 – 74,37	1,88	4,00	7,60
		Amaltheenton-Fm. Numismalimergel-Fm.	keine Angaben vorhanden			
		Obtususton-Fm.	77,58 – 77,75	2,14	2,60	11,70
			80,33 – 80,53	1,53	2,00	9,10
			82,99 – 83,14	2,49	2,90	12,10
88,75 – 88,90	2,67		2,20	13,10		
ju1	keine Angaben vorhanden					
k3						
k2						

ME	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Teufe [m u. GOK]	K [Gew.-%]	U [ppm]	Th [ppm]
k1	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	Bunte-Mergel-Schichten	100,46 – 100,66	1,74	1,80	9,20
			104,95 – 105,05	1,59	1,10	7,60
		Stuttgart-Fm.	117,73 – 117,83	3,83	1,70	10,90
			121,79 – 121,90	3,67	1,90	8,90
			126,80 – 127,00	1,93	2,40	4,30
		Benk-Fm.	139,83 – 140,00	0,72	1,10	2,90
			150,15 – 150,25	1,56	1,40	5,80
			159,65 – 159,75	0,82	1,30	2,70
			159,90 – 160,00	0,94	1,50	3,00
			179,90 – 180,00	3,25	2,20	10,40
			190,00 – 190,10	2,66	2,10	8,20
			199,60 – 199,70	1,32	1,50	3,70
			214,00 – 214,35	0,11	0,90	0,60
		Erfurt-Fm.	keine Angaben vorhanden			
m3	Dolomitstein	Rottweil-Fm.	225,25 – 225,70	0,02	1,70	0,30
			234,60 – 235,00	0,06	2,50	0,60
			245,25 – 245,65	0,13	1,00	0,40
m2	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen	Mittlerer Muschelkalk	295,35 – 295,85	0,09	3,90	0,60
			305,67 – 306,10	0,46	1,90	1,20
			314,92 – 315,40	0,16	0,30	0,40
m1	toniger, fein- bis grobkörniger arkosider Sandstein	Eschenbach-Fm.	keine Angaben vorhanden			

## 4.7 Isotopengeochemie

Isotopengeochemische Zusammensetzungen von Opalinuston und Mineralen (Calcit) aus Klüften im Opalinuston sind aus der Bohrung Benken (NAGRA 2001) sowie aus Mont Terri (GAUCHER et al. 2003) bekannt. In Tab. 13 sind die Ergebnisse einiger Analysen wiedergegeben, von denen vor allem die aus den tonigen Bereichen in ähnlicher Ausprägung auch im Referenzprofil SÜD angenommen werden können.

Tab. 13: Isotopengeochemische Zusammensetzung des Opalinustons der Bohrung Benken (NAGRA 2001) und aus Mont Terri (aus: GAUCHER et al. 2003)

Lokation	Lithologie	Typ	$\delta^{13}\text{C}$ [‰ V-PDB]	$\delta^{18}\text{O}$ [‰ V-SMOW]	Sr [ppm]	$^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr} \pm 1\sigma$
Benken	Kalkmergel, sandig	GGK <sup>1)</sup>	-7,47	25,93	256	0,707729 ± 0,000018
	Calcit aus diskordanter Verschiebungsfläche		-2,88	19,21	–	–
	Tonstein, kalkig, sandig	GGK <sup>1)</sup>	-0,97	23,91	163	0,707892 ± 0,000018
		GG <sup>2)</sup>	–	–	266	0,714052 ± 0,000018
	Tonstein, kalkig, sandig	GGK <sup>1)</sup>	-1,08	24,12	–	–
	Calcit aus geschlossener steiler Kluft		1,39	18,45	283	0,708474 ± 0,000032
	Tonstein, sandig	GGK <sup>1)</sup>	-0,61	22,51	134	0,708180 ± 0,000022
	Tonstein, kalkig, sandig	GGK <sup>1)</sup>	-3,25	23,82	203	0,708076 ± 0,000018
GG <sup>2)</sup>		–	–	307	0,713614 ± 0,000012	
Mont Terri	schichtparallele Calcit-Kluft		0,01	23,16	–	–
	Tonstein	k. A.	-0,08	25,23	–	–
	Tonstein	k. A.	0,21	25,28	240,4	0,710197 ± 0,000055
	schichtparallele Calcit-Kluft		-0,41	23,37	543,3	0,708496 ± 0,000035
	Tonstein	k. A.	0,18	26,09	–	–
	Tonstein	k. A.	0,73	27,30	227,4	0,710143 ± 0,000035

<sup>1)</sup>GGK = Extrakt von Gesamtgestein mit kalter 10% HCl (Karbonatfraktion), <sup>2)</sup>GG = HF-Aufschluss der Gesamtgesteinsprobe, k. A. = keine Angabe



## 4.8 Kationenaustauschkapazität

Die Kationenaustauschkapazität (KAK) ist ein Maß für die austauschbaren Kationen und damit die Zahl an negativen Bindungsplätzen von Kationenaustauschern im Tongestein. Sie hängt von der mineralogischen Zusammensetzung des Gesteins ab. Da hauptsächlich die Tonminerale zur KAK beitragen und diese vor allem im Korngrößenbereich < 2 µm enthalten sind, besteht auch ein direkter Zusammenhang zwischen KAK und Korngrößenverteilung. Neben der Kationenaustauschkapazität mit den Ionen Ca<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, K<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, Al<sup>3+</sup>, H<sup>+</sup> unterscheidet man die Anionenaustauschkapazität (AAK), die im sauren Bereich die Ionen HPO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, SiO<sub>3</sub><sup>2-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup> und Cl<sup>-</sup> betrifft.

Am Opalinuston aus der Bohrung Beznau bestimmte PETERS (1984b) die KAK und die Art der in den Proben vorhandenen austauschbaren Kationen. KAK-Werte für den Opalinuston aus der Bohrung Benken stammen aus NAGRA (2001), für den Opalinuston aus Mont Terri aus NAGRA (2002). Für den Opalinuston zeigen die in Tab. 14 zusammengestellten Daten für die totale KAK keine einheitlichen Werte. Zusätzlich wurden in der Tabelle Werte für die Posidonienschiefer nach PETERS (1984b) angegeben, da diese Einheit Teil der Abfolge des Referenzprofils SÜD ist. Im Endlagerstandortmodell SÜD sind sie in der Modelleinheit ju2 enthalten.

Tab. 14: KAK von Proben aus der Bohrung Benken, der Bohrung Beznau und dem Felslabor Mont Terri mit austauschbaren Kationen und Gesamtionenbelegung (Werte in meq/kg Gestein)

Literatur	NAGRA (2001)			PETERS (1984b)						WABER et al. (2003)		
Lokation	Bohrung Benken Tonsteine kalkig, sandig			Opalinuston Bohrung Beznau ca. 24 – 66 m u. GOK (n = 6)			Posidonienschiefer (ju2) Bohrung Beznau ca. 71 – 74 m u. GOK (n = 2)			Mont Terri (n = 9 für K, Na, Ca, Mg; n = 7 für Sr)		
	Min	Max	MW	Min	Max	MW	Min	Max	MW	Min	Max	MW ± 1σ
K <sup>+</sup>	7,9	8,6	8	5,0	8,0	5,7	7,0	7,0	–	5,4	9,3	7,8 ± 1,4
Na <sup>+</sup>	53,2	57,6	55	23,0	65,0	50,5	37,0	40,0	–	27,0	77,4	52,9 ± 17,4
Ca <sup>2+</sup>	24,3	34,3	29	57,0	118,0	85,2	173,0	185,0	–	22,5	55,0	33,4 ± 9,6
Mg <sup>2+</sup>	12,2	15,2	14	11,0	21,0	15,0	33,0	34,0	–	15,6	28,0	21,4 ± 4,0
Sr <sup>2+</sup>	1,0	1,6	1	–	–	–	–	–	–	1,0	3,6	2,1 ± 1,0
Gesamt	102,2	113,6	108	130,0	174,0	156,3	250,0	266,0	–	83,6	171,6	117,1

In den Tonsteinen des Opalinustons der Bohrung Benken sind jeweils mehr als 50 % der Oberflächenplätze mit Na besetzt, gefolgt von Ca, Mg und K. Sr ist mit rund 1 % auf den austauschbaren Plätzen vertreten (Tab. 14). Die starke Dominanz von austauschbarem Na in den tonreichen Abschnitten des Opalinustons der Bohrung Benken weist für diese Gesteine auf heutige Formationswässer hin, welche den chemischen Typen Na-Cl bis Na-Cl-SO<sub>4</sub> entsprechen.

Den Großteil der KAK liefern Illit und Illit/Montmorillonit-Wechselagerungsminerale. Zu KAK-Werten für die anderen Gesteine der Bohrung Beznau siehe PETERS (1984b).

#### **4.9 Fluideinschlüsse in Mineralen**

Studien an Fluideinschlüssen werden durchgeführt, um Informationen über die Art und Zusammensetzung von eingeschlossenen Fluiden sowie über die Temperatur- und Druckbedingungen während der Bildung der Einschlüsse zu erhalten. In der Bohrung Benken wurden Einschlüsse an Kluft-, Gang-, und Drusenfüllungen des Mesozoikums vom Oberjura bis zum Buntsandstein sowie Einschlüsse in authigenen Zementphasen aus Opalinuston, Keuper (Löwenstein-Formation) und Buntsandstein untersucht; analysiert wurden dabei Calcit, Coelestin, Baryt und Quarz (NAGRA 2001: 97). Aufgrund ihres durch Gefrierpunktniedrigung des Wassers gemessenen Salzgehaltes lassen sich die analysierten Fluideinschlüsse in drei Gruppen unterteilen, wobei die salzarmen sowie die sehr salzreichen Einschlüsse in Mineralen des Opalinuston keine Rolle spielen. Dagegen sind die überwiegend primären, relativ salzreichen Einschlüsse u. a. in authigenen Quarz- und Calcit-Zementen des Opalinustons (sowie der Löwenstein-Formation im Keuper) zu beobachten. Die gemessenen Schmelzpunkte dieser Gruppe von Fluideinschlüssen liegen zwischen -7 °C und -2 °C. Die entsprechenden Salzgehalte sind mit durchschnittlich 6,6 Gew.-% NaCl<sub>aq</sub> etwa doppelt so hoch wie im Meerwasser. In zwei Proben des Opalinustons wurden in Quarz-Zementen primäre und sekundäre, einphasige Einschlüsse beobachtet, die Salinitäten von 6,5 Gew.-% bis 7,7 Gew.-% NaCl<sub>aq</sub> lieferten. Aufgrund der Größe der Einschlüsse ( $\varnothing < 3 \mu\text{m}$ ) ließ sich die Bildungstemperatur nicht bestimmen, sondern nur auf  $< 100 \text{ °C}$  eingrenzen (GOLDSTEIN & REYNOLDS 1994). Es ist davon auszugehen, dass die Fluideinschlüsse in den Zementen die chemische Zusammensetzung des Porenwassers in den Formationen während der Diagenese widerspiegeln. Wie es zu den deutlich erhöhten Salzgehalten im Porenwasser des unter marinen Bedingungen sedimentierten Opalinustons kam, ist noch ungeklärt (NAGRA 2001). Weiter östlich, im Raum Bodensee, ist die Datenlage günstiger. An Material der Bohrungen Herdern-1, Berlingen-1 und Meersburg haben BLÄSI et al. (1996) im Bereich der Stuttgart-Formation (Keuper) mehrheitlich zweiphasige Einschlüsse in Zementen und Gängen identifiziert und Homogenisierungstemperaturen erhalten, die zum großen Teil im Intervall 80 – 120 °C

liegen. Aufgrund textueller Kriterien folgern BLÄSI et al. (2002), dass die Einschlüsse in den Zementen mit dem ersten Temperaturmaximum, also der mesozoischen Versenkung, zusammenhängen. Die Einschlüsse in den Gängen sind jünger und möglicherweise der jungtertiären Versenkung zuzuordnen. Die im Vergleich zum Raum Benken höheren Temperaturen in Mont Terri stimmen mit der regionalen Geologie überein, zumal die Schichtmächtigkeiten der Molasse (und somit auch die Versenkungstiefen) nach Osten generell zunehmen (NAGRA 2002: 59f.)

#### **4.10 Hydrochemie von Wässern aus dem Opalinuston**

Es existieren nur wenige Analysen von Wässern aus dem Opalinuston im westlichen Bereich des Süddeutschen Molassebeckens. HEKEL (1994) analysierte im Gebiet der Schwäbischen Alb zwar zahlreiche Kluftwasserproben, jedoch stammen diese fast ausschließlich aus oberflächennahen Bohrlochabschnitten oder sogar aus Oberflächenaufschlüssen. An den genannten Flachbohrungen wies HEKEL (1994) anhand von hydrochemischen Analysen und Isotopenmessungen ( $\delta^{18}\text{O}$ ,  $\delta^2\text{H}$ , Tritium) an zahlreichen konventionell entnommenen Wasserproben eine hydrochemische Tiefenzonierung nach. Mit zunehmender Tiefe nehmen Klüftung und Tritiumgehalt ab; die Mineralisation steigt durch Karbonatlösung, Kationenaustauschprozesse und Zumischung saliner Porenwässer an. Analysen von Proben aus Tiefen > 22 m sind in Tab. 15 zusammengestellt. Zusätzlich wurde ein Analyseergebnis, aus dem Posidonienschiefer stammt aufgenommen, da diese Schicht im Nebengebirge des Referenzprofils SÜD enthalten ist.

Tab. 15: Hydrochemische Parameter von Wasserproben aus verschiedenen Versuchsfeldern (VF) im Südwestdeutschen Molassebecken und ausgepresster Porenwässer aus dem Opalinuston der Bohrung Benken und von Mont Terri

Entnahmeort	VF Geisingen (1)		VF Jungingen 2 Proben (1)		Bohrung Benken (2)		Mont Terri (3)			Mont Terri (4)						VF Mössingen (1)	
	Sample A		Sample B		Bohrloch BWS-A1		Bohrloch BWS-A2		Bohrloch BWS-A3								
Teufe u. GOK	22,5 m		51 m	51 m	645,65 m		verschiedene Entnahmeorte im Untertagelabor										41,4 m
Stratigraphie	Opalinuston (jm1)															POS (ju2)	
Lithologie	Kluftwässer, langsam zirkulierend		aus Kluftzone erhöhte Durchlässigkeit		Tonstein ca. 70% Tonanteil		tonige Fazies			tonige Fazies						starke Klüftung, verheilt mit Calcit/Pyrit	
<b>Allgemeine Angaben</b>																	
Druck [MPa]	–		–	–	512		70	70	–	–	–	–	–	–	–	–	–
Presszeit [d]	–		–	–	3		–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–
erhaltene Menge	–		–	–	12 g		21,2 ml	18,0 ml	–	–	–	–	–	–	–	–	–
Temperatur [°C]	–		–	–	–		–	–	13	15	13,5	10,5	14,2	12,6	9,8	13,0	12,1
Feuchtigkeitsgehalt [% Trockenmasse]	–		–	–	–		11,3	12,2	–	–	–	–	–	–	–	–	–
<b>Analyseergebnisse</b>																	
								<b>Min</b>	<b>Max</b>	<b>MW</b>	<b>Min</b>	<b>Max</b>	<b>MW</b>	<b>Min</b>	<b>Max</b>	<b>MW</b>	
pH-Wert	7,51	7,8	7,12	8,3	6,78	7,51	7,96	8,8	8,26	7,17	8,26	7,54	7,2	7,6	7,38	7,47	
elektr. Leitfähigkeit [ $\mu\text{S}\cdot\text{cm}^{-1}$ ]	1500	17110	13800	11400			18742	26920	22831	12978	20730	17729	9775	14480	12855	6120	
TDS [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	–	20270	21686	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	
TOC [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	280	29,8	40,6	14	38,42	23,84	3,5	448	154,2	58,5	64,42	61,46	–	
TIC [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	17,8	–	–	4,86	9,75	7,76	3,3	118	60,6	58,5	64,42	61,46	–	
H <sub>2</sub> SiO <sub>3</sub> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	10,6	6,9	7	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	
Fe <sub>tot</sub> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	0,38	–	–	3,5·10 <sup>-6</sup> ± 3,2·10 <sup>-6</sup>			7,2·10 <sup>-6</sup> ± 4,0·10 <sup>-6</sup>			4,4·10 <sup>-6</sup> ± 5,0·10 <sup>-6</sup>			–	
<b>Kationen</b>																	
Li <sup>+</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	0,51	–	–	0,4	0,444	0,427	0,49	1	0,81	0,91	0,993	0,952	–	
Na <sup>+</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	320,0	3421	3390	1736	5000	5370	5420	5640	5552	4180	4400	4271	2694	2980	2859	1430	
K <sup>+</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	6,3	12,3	30,0	57,8	94,3	104	43,3	65,3	56,5	27,9	130	58,3	25,9	64,3	39,9	10,4	
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	1,34	7,14	6,30	–	–	–	–	–	10,2	< 0,1	8,26	–	< 0,1	5,44	–	1,72	
Mg <sup>2+</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	18,4	127,0	120,0	290	720	753	343,9	415	384,2	90,5	311	234	134	151	144	34,7	
Ca <sup>2+</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	39,7	299,0	330,0	836	790	759	570	609	589	43,2	400	272	242	311	279	41,7	
Sr <sup>2+</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	37,3	–	–	35	42,1	38,2	2,15	40	28	28	37	31,6	–	
Ba <sup>2+</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	0,49	–	–	0,018	0,034	0,024	0,011	0,031	0,021	0,019	0,023	0,021	–	
Mn <sup>2+</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	0,23	0,18	–	0,09	–	–	6,3·10 <sup>-6</sup> ± 5,1·10 <sup>-6</sup>			3,6·10 <sup>-6</sup> ± 7,6·10 <sup>-7</sup>			5,5·10 <sup>-6</sup> ± 1,7·10 <sup>-6</sup>			0,02	
Fe <sup>2+</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	0,05	2,44	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	0,14	–	–	0,03	
Si [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	–	–	–	0,638	2,15	1,495	0,99	4,6	2,86	2,3	12	5,9	–	
Al [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	1,97	–	–	0,013	0,3	0,088	0,011	0,011	0,021	< 0,006	0,005	–	–	
B [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	–	–	–	1,41	1,87	1,63	2,1	12	7,05	2,373	–	–	–	
<b>Anionen</b>																	
F <sup>-</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	2,9	0,32	0,34	0,59	0,77	0,72	0,16	0,24	0,19	0,33	0,47	0,38	–	
Cl <sup>-</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	64,7	6013	6060	3034	7000	7250	9830	10395	10100	6067	6500	6369	4200	4909	4521	1430	
Br <sup>-</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	2,84	22,5	22,4	35	36,3	35,9	22	25	23,6	17	17	15,5	–	
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	287,0	1,2	9,3	2288	6430	7150	1251	1320	1291	1405	1903	1615	773	1082	914	520,0	
S <sub>2</sub> O <sub>3</sub> <sup>2-</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	< 1	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	
NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	0,00	0,34	0,00	367	40,8	40,2	< 0,1	< 20	–	–	0,1	< 0,1	0,1	–	–	0,00	
NO <sub>2</sub> <sup>-</sup> [ $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ]	–	–	–	0,47	–	–	< 4	< 4	< 4	< 4	–	–	< 4	–	–	–	

Entnahmeort	VF Geisingen (1)	VF Jungingen 2 Proben (1)		Bohrung Benken (2)		Mont Terri (3)		Mont Terri (4)							VF Mössingen (1)	
				Sample A		Sample B	Bohrloch BWS-A1		Bohrloch BWS-A2		Bohrloch BWS-A3					
Teufe u. GOK	22,5 m	51 m	51 m	645,65 m		verschiedene Entnahmeorte im Untertagelabor										41,4 m
Stratigraphie	Opalinuston (jm1)														POS (ju2)	
HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> [mg·l <sup>-1</sup> ]	595,0	198,0	198,0	–	113	179	52,4	152,5	87,3	195	620	408	233	1098	474	1021
<b>Summenparameter</b>																
Σ analysierte Komponenten	–	–	–	8667	–	–	17652	18448	18118	12978	13579	13318	–	–	–	–
<b>Ladungsbilanz</b>																
Differenz/Summe [%]	–	–	–	0,77	–	–	-2,73	-0,76	-1,79	-0,62	4,78	1,27	–	–	–	–
Σ Kationen [mol·l <sup>-1</sup> ]	–	–	–	143	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–
Σ Anionen [mol·l <sup>-1</sup> ]	–	–	–	139,3	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–
Ionenstärke [mol·l <sup>-1</sup> ]	–	–	–	0,1659	–	–	0,336	0,360	0,351	0,243	0,258	0,249	–	–	–	–
<b>Isotope Wasser</b>																
δ <sup>18</sup> O [‰ (SMOW)]	-9,71	-8,30	-8,50	-49,2	-8,2	-7,7	-8,53	-8,41	-8,48	-9,18	-8,70	-9,00	–	–	–	-9,12
δ <sup>2</sup> H [‰ (SMOW)]	–	–	–	-7,19	-55,0	-57,0	-56	-50,1	-53,4	-62,90	-58,00	-60,20	-65,1	-63,45	-64,16	–
Tritium <sup>3</sup> H [TU]	–	–	–	–	–	–	< 0,6	7,3	–	< 0,8	–	–	< 0,6	1,0	0,8	–
<b>Isotope gelöste Stoffe</b>																
δ <sup>13</sup> C [‰ PBD]	–	–	–	–	–	–	-13,1	-12,19	-12,64	-8,98	-0,23	-3,94	-10,83	-1,75	-6,22	–
<sup>14</sup> C [PMC]	–	–	–	–	–	–	9,8	–	–	1,56	–	–	2,21	5,08	3,64	–
δ <sup>34</sup> S [‰ CD]	–	–	–	–	–	–	21,88	22,2	22,04	16,3	19,6	17,95	21,01	–	–	–
δ <sup>18</sup> O [‰ SMOW]	–	–	–	–	–	–	10,8	11,97	11,38	3,1	9,3	6,2	12,28	–	–	–
Wassertyp	Na-HCO <sub>3</sub> -SO <sub>4</sub>	Na-Cl	Na-Cl	Na-Ca-(Mg)-Cl-SO <sub>4</sub>	Na-Cl-SO <sub>4</sub>	Na-Cl-SO <sub>4</sub>	–	–	–	–	–	–	–	–	–	Na-Cl-HCO <sub>3</sub>
Literaturquellen: 1 – HEKEL (1994), 2 – NAGRA 2001: Beilage 8-5, 3 – GAUTSCHI et al. (1993), 4 – PEARSON et al. (2003b)																

Die Hydrochemie des Opalinuston in der Bohrung Benken (vgl. Tab. 15) wurde an ausgepressten Porenwässern untersucht (NAGRA 2001: Beil. 8-5). Aufgrund des sehr hohen Pressdrucks von 512 MPa und dem Kontakt mit Luftsauerstoff spiegeln die enthaltenen Werte den In-situ-Zustand nur teilweise wider. Auswirkungen davon sind z. B. eine Drucklösung von Karbonaten oder eine Oxidation von Pyrit während des Pressvorganges. Aus diesem Grund entsprechen nur die Gehalte der chemisch konservativen Elemente (Na und Cl) den In-situ-Bedingungen, während die anderen Parameter durch verschiedene Prozesse während des Pressvorgangs verändert wurden (NAGRA 2001: 236). Umfangreiche Untersuchungen dazu, wie sich der Chemismus der Porenwässer aus Opalinuston-Bohrkernen durch das Anlegen von verschiedenen Drücken beim Auspressen ändert, haben insbesondere FERNÁNDEZ et al. (2003) durchgeführt und dokumentiert.

Daten zur Chemie der Wässer von Mont Terri (Tab. 15) wurden an Wasserproben ermittelt, die über drei verschiedene Verfahren gewonnen wurden (GAUTSCHI et al. 1993). Außerdem sind in der Tabelle Daten aus PEARSON et al. (2003b) enthalten, die ebenfalls in Mont Terri ermittelt wurden. In allen Proben ist  $\text{Na}^+$  das dominierende Kation und gleicht nahezu die gesamte  $\text{Cl}^-$ -Ladung aus. Der Parameter mit der höchsten Konzentrationsspanne ist die Alkalinität (vorwiegend  $\text{HCO}_3^-$  und  $\text{CO}_3^{2-}$  – mit Ausnahme des Wassers aus BWS-A1 mit niedrigen Alkalinitäten, wozu Bor als  $\text{B}(\text{OH})_4^-$  signifikant beiträgt), da dieser Parameter sehr leicht durch Artefakte beeinflusst wird. Es existiert jedoch ein deutlicher Trend einer Zunahme der Alkalinität mit gleichzeitiger Abnahme der  $\text{Cl}^-$ -Menge. Mit sinkendem Gehalt an  $\text{Cl}^-$  sinken auch die Konzentrationen an  $\text{Ca}^{2+}$  und  $\text{Mg}^{2+}$ . Für die Aufrechterhaltung der Karbonatmineral-Gleichgewichte bei sinkenden  $\text{Ca}^{2+}$ - und  $\text{Mg}^{2+}$ -Konzentrationen ist eine Erhöhung der  $\text{CO}_3^{2-}$ -Aktivität notwendig. Dies wird begleitet mit dem Anwachsen des  $\text{CO}_2$ -Partialdrucks und der Alkalinität mit sinkendem  $\text{Cl}^-$ . Dagegen ist die Konzentration von  $\text{Sr}^{2+}$  in nahezu allen Bohrlöchern identisch. Coelestin ist im Opalinuston in geringen Mengen vorhanden; für die konstanten Konzentrationen können das Coelestin-Gleichgewicht und/oder ein Kationenaustausch verantwortlich sein. Interessanterweise variieren die eine beträchtliche Bandbreite aufweisenden Konzentrationen an  $\text{K}^+$  nicht einfach mit denen von  $\text{Na}^+$ . Sie scheinen an einen Kationenaustausch gebunden zu sein, wobei dieser Austausch komplex und schwer zu quantifizieren ist (PEARSON et al. 2003b: 68f.). Die generelle Konsistenz zwischen der Hauptionenzusammensetzung der Bohrlochwässer und den auf Kationenaustausch und Karbonatmineral-Equilibria basierenden Resultaten der Modellierung beweist, dass die Bohrlochwässer wichtige Merkmale der In-situ-Porenwässer repräsentieren (PEARSON et al. 2003b: 94).

Aus dem erläuterten Datenmaterial können aus der Tab. 15 die Werte aus der Messung im Bohrloch BWS-A1 auf den Opalinuston des Referenzprofils SÜD übertragen werden.

## 4.11 Gase im Opalinuston

Potentiell im Opalinuston auftretende Gase sind Stickstoff N<sub>2</sub>, Sauerstoff O<sub>2</sub>, Wasserstoff H<sub>2</sub>, Kohlenstoffdioxid CO<sub>2</sub> und Kohlenstoffmonoxid CO, die gasförmigen Alkane Methan CH<sub>4</sub>, Ethan C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, Propan C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, Butan *n*-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub> und Isobutan *i*-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub> sowie die Edelgase Helium, Neon, Argon, Krypton, Xenon und das radioaktive Radon. Im Hinblick auf freie Gase haben PEARSON et al. (2003a) und hier insbesondere WABER (2003) den Opalinuston im Untertagelabor Mont Terri untersucht (Tab. 16). Analysiert wurden dabei neben aus Porenwässern und direkt aus Opalinuston-Bohrkernen erhaltenen Gasen v. a. über Headspaces in abgepackerten Bohrlochabschnitten gewonnene Gase (Dampfraumgase). Die Mengen aller dieser Gase sind sehr gering; ihre Gewinnung technisch aufwendig und mit Schwierigkeiten verbunden, die sich auf die Qualität der Analyseergebnisse auswirken.

Tab. 16: Chemische und Isotopen-Zusammensetzung von Dampfraumgasen aus abgepackerten Intervallen der Bohrlöcher BWS-A1, -A2, -A3 und -A6 im Untertagelabor Mont Terri. Alle Angaben in Vol.-% (aus: WABER 2003).

	BWS-A1			BWS-A2			BWS-A3			BWS-A6		
	n	Min	Max	n	Min	Max	n	Min	Max	n	Min	Max
H <sub>2</sub>	7	< 0,001	2,81	5	< 0,001	0,006	5	< 0,01	0,057	3	< 0,001	< 0,01
N <sub>2</sub>	7	77,9	98	5	94,74	98	5	75,54	98,5	3	98	98,7
O <sub>2</sub>	7	< 0,1	16,7	5	0,14	2,47	5	0,1	21,48	3	0,12	0,27
CO <sub>2</sub>	7	0,1	3,5	5	0,95	1,31	5	0,33	0,87	3	0,19	0,24
He	7	< 0,001	0,17	5	< 0,001	0,019	5	< 0,001	0,01	3	< 0,001	0,05
Ar	7	< 0,1	0,68	5	< 0,1	0,9	5	0,11	0,92	3	0,12	0,25
CH <sub>4</sub>	7	0,0055	1,41	5	< 0,1	0,2	5	0,0007	0,24	3	< 0,1	0,25
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	7	0,0005	0,1798	5	0,0071	0,02	5	0,0009	0,03	3	0,0035	0,06
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	7	0,0021	0,1403	5	0,001	0,02	5	0,0008	0,02	3	0,0074	0,09
<i>i</i> -C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	7	0,0015	0,0358	5	0,0003	0,007	5	< 0,0001	0,005	3	0,0027	0,03
<i>n</i> -C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	7	0,0056	0,0386	5	0,0006	0,008	5	< 0,0001	0,004	3	0,0041	0,05
δ <sup>13</sup> C <sub>CH4</sub>	2	-40,9	-28,5	3	-40,6	-28,8	3	-42	-39,9	3	-40,4	-19,8
δ <sup>2</sup> H <sub>CH4</sub>	2	-204,8	-117	2	-147	-114	2	-148	-147	2	-162	-152
δ <sup>13</sup> C <sub>C2H6</sub>	2	-42,4	-41	2	-41,5	-37	1	-	-43,8	1	-	-34,2
δ <sup>13</sup> C <sub>C3H8</sub>	2	-34,7	-34	2	-34	-33,9	1	-	-35,8	1	-	-31,7
δ <sup>13</sup> C <sub>C4H10</sub>	2	-32,6	-28	1	-	-32,5	-	-	-	-	-	-
δ <sup>13</sup> O <sub>CO2</sub>	1	-	-13,4	3	-14,9	-6,3	3	-13,5	-9,1	3	-5,3	-2,03
δ <sup>18</sup> O <sub>CO2</sub>	1	-	-8,4	1	-	1,2	-	-	-	-	-	-
δ <sup>15</sup> N <sub>N2</sub>	1	-	0,8	-	-	-	2	0,1	0,9	-	-	-
<sup>40</sup> Ar/ <sup>36</sup> Ar	3	290	320	3	316	394	-	-	-	-	-	-

Der in den abgepackerten Intervallen im Verlauf von bis zu zehn Monaten aufgebaute Druck betrug einige zehn bis einige hundert Millibar. Verglichen mit einem hydrostatischen Druck von ca. 20 bar deutet das darauf hin, dass im Opalinuston von Mont Terri keine freie Gasphase existiert und dass sich die Headspace-Gase aus der Entgasung von Formationswässern bzw. aus Reaktionen im Bohrloch selbst herleiten (WABER 2003: 275).



Aus diesem Grund wird auch für das Referenzprofil SÜD angenommen, dass im Wirtsgestein eine freie Gasphase nicht vorliegt. Daher werden auch die in Headspace-Gasen ermittelten Werte in diesem Bericht nicht weiter erläutert. Analysen und Diskussionen zu den Headspace-Gasen können WABER (2003) entnommen werden. Betrachtungen zur Bildung und den Gehalten von Edelgasen liegen in ANDREWS (1985), LEHMANN & LOOSLI (1991) und TOLSTIKHIN et al. (1996) sowie in RÜBEL & LEHMANN (2003) vor.

## 5 Kohlenwasserstoffe

Im südwestdeutschen Molassebecken sind produktive KW-Felder wie Ellwangen, Fronhofen-Illmensee, Gaisbeuren, Hauerz, Hoßkirch, Kirchdorf, Markdorf, Mönchsrot, Oberschwarzach, Pfullendorf-Ostrach, Saulgau, Wald und Wurzach bekannt, deren Förderhorizonte im Tertiär (Obere Meeres- und Untere Süßwassermolasse, Bausteinschichten), im Oberen, Mittleren und Unteren Jura, im Oberen und Mittleren Keuper sowie Oberen und Unteren Muschelkalk liegen. Allerdings befindet sich der Bereich untersuchungswürdiger Tongesteinsformationen für eine Nutzung als Endlager-Wirtsgestein nach HOTH et al. (2007) nördlich und außerhalb dieses Erdöl/Erdgas-Lagerstättengürtels.

Im Gebiet des Lagerstättengürtels ist der Reifegrad der potentiellen Erdölmuttergesteine für eine Ölbildung zu gering. So sind die KW wahrscheinlich aus dem weiter südlich liegenden, tiefer versenkten Beckenbereich migriert. Die Migration aus den potentiellen Muttergesteinen sowie ihre Akkumulation in den Lagerstätten im westlichen Molassebecken erfolgte seit dem Miozän und hält bis in die Gegenwart an (BOIGK 1981, WEHNER et al. 1983, DILL et al. 2008). Nördlich des Bodensees hat der Opalinuston als mögliches Muttergestein, allerdings nur in Tiefen unterhalb 2100 m, in drei Bohrungen Erdgas abgegeben.

Auf der Schwäbischen Alb (Dotternhausen) haben RÖHL & SCHMID-RÖHL (2005) in den Gesteinen des Unteren Toarcium TOC-Gehalte (Total Organic Carbon) von 0,2 – 16 % (MW 6,2 %) festgestellt. Die bituminösen Tonsteine und die Ölschieferfazies der Posidonienschiefer-Formation weisen dabei TOC-Gehalte von durchschnittlich 7,7 % auf. Der durchschnittliche Wert des Reifeparameters  $T_{\max}$  (Temperatur des maximalen thermischen Kerogenabbaus) von 423 °C deuten auf ausnahmslos geringe Reife der organischen Substanz, was auch die Vitritreflexionswerte  $R_m$  von < 0,5 % belegen.

In den NAGRA-Bohrungen und in den Erdölbohrungen des zentralen und ostschweizerischen Mittellandes wurden im Opalinuston nirgends Erdöl- oder Erdgasspuren beobachtet (NAGRA 1988a, NAGRA 2001, NAGRA 2002). Untersuchungen an Gesteinsproben der Bohrung Weiach im zürcherischen Tafeljura (Nordostschweiz) zeigten, dass unterrotliegende Sedimente und oberkarbone Kohleflöze schon während des Perms den



Reifebereich der KW-Bildung erreichten und auch KW gebildet haben, die aber während späterer Bruchbildung, Hebung und Erosion teilweise entwichen sind. Dies erklärt die nur unbedeutenden KW-Anzeichen in der Bohrung Weiach und führt zu der Vermutung, dass im Permokarbon-Trog Überreste dieser KW erhalten geblieben sind. Beide Einheiten verfügen über ein bedeutendes Restpotential zur KW-Bildung, welches aber nur bei merklicher Aufheizung freigesetzt werden würde. Die Posidonienschiefer sowie der Opalinuston besitzen ebenfalls Muttergesteinscharakter für flüssige KW (NAGRA 1988a: 75f., NAGRA 1988a: 127, MUKHOPADHYAY & LEYTHAEUSER 1984: 55).

Die Frage, welche KW bei entsprechender Absenkung und Temperatur aus den organischen Substanzen in den Sedimentgesteinen gebildet werden, hängt im Wesentlichen von der Elementzusammensetzung des Kerogens ab. Kerogene mit höherem atomarem H/C-Verhältnis (Typ-I- und Typ-II-Kerogene nach TISSOT et al. 1974) generieren in dem als „Erdölfenster“ bezeichneten Temperaturintervall von ca. 50 °C bis 150 °C vor allem Erdöl. Tongesteine mit Kerogenen mit niedrigem H/C-Verhältnis stellen dagegen potentielle Muttergesteine für Erdgas und Kondensate dar. Zur Analyse des Kerogens werden insbesondere Methoden der organischen Chemie und der Kohlenpetrographie verwendet, die das Potenzial der Generierung von flüssigen und gasförmigen KW aus den organischen Substanzen der Sedimentgesteine bestimmen.

### **5.1 Werte aus der Rock-Eval-Pyrolyse**

Eine schnelle Einstufung in die zuvor genannten prinzipiellen Kategorien ist mit dem Rock-Eval-Verfahren (ESPITALIÉ et al. 1977) möglich. Die dabei ermittelten Werte des Wasserstoff-Index (HI) und des Sauerstoff-Index (OI) sind Äquivalente der atomaren H/C- bzw. O/C-Verhältnisse. Zur Ansprache der Kerogenqualität einer Probe wird das Van-Krevelen-Diagramm (H/C-O/C-Diagramm) verwendet, in dem als Referenz die drei in der Natur vorkommenden Kerogen-Typen I–III und gelegentlich auch ein weiterer Typ IV eingetragen sind (MUKHOPADHYAY & LEYTHAEUSER 1984: 55). Wichtig ist auch der Wert für TOC.

Die Art des organischen Materials und seine Reife in Proben aus dem Opalinuston und dem Nebengebirge (im stratigraphischen Intervall vom mittleren Jura bis zur mittleren Trias) wurden mit verschiedenen Methoden an Kernen aus der Bohrung Beznau untersucht (vgl. auch PETERS 1984b, MUKHOPADHYAY & LEYTHAEUSER 1984 sowie SCHAEFER & LEYTHAEUSER 1984). Analysewerte, die aus diesen Untersuchungen stammen, gingen auch in Tab. 17 ein. Die dabei ermittelten Werte für TOC unterscheiden sich hinsichtlich der Größe sowie im Tiefentrend z. T. deutlich, was an der Analyse verschiedener Bohrkernbereiche und an unterschiedlichen Analysemethoden liegt.

Tab. 17: Geochemische Daten aus Rock-Eval-Pyrolyse-Messungen von Kernproben aus der Bohrung Beznau zur Kerogen-Charakterisierung (Daten aus: MUKHOPADHYAY & LEYTHAEUSER 1984: 57)

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie aus der Bohrung	TOC [%]	HI [mg KW/g C <sub>org</sub> ]	OI [mg CO <sub>2</sub> /g C <sub>org</sub> ]	Produktionsindex [s <sub>1</sub> /s <sub>1</sub> +s <sub>2</sub> ]	T <sub>max</sub> [°C]
jm1	Opalinuston-Fm.	Tonstein	1,02	145	44	0,02	433
		Tonstein	0,83	113	89	0,03	432
		Tonstein	1,06	117	81	0,04	434
		Tonstein	1,05	114	43	0,03	433
		Tonstein	1,03	133	62	0,03	431
		Tonstein	1,06	131	35	0,03	430
ju2	Posidonienschiefer-Fm.	Tonstein	1,67	303	36	0,01	437
k1	Stuttgart-Fm. Erfurt-Fm.	Tonmergel	0,05	31	119	0,51	–
		Ton in Gips	0,64	32	19	0,05	418
		dolomitischer Tonmergel	0,20	112	139	0,16	432
			0,56	172	49	0,06	434
		Dolomit	1,19	122	9	0,05	431
m2	Mittlerer Muschelkalk	Dolomit/ Anhydrit	1,04	387	21	0,12	431

HI = Wasserstoffindex, OI = Sauerstoffindex

Der TOC-Gehalt der Opalinuston-Proben aus Tab. 17 liegt zwischen 0,83 und 1,67 %. Zum Vergleich zeigen z. B. die von PETERS (1984b) für den Opalinuston ermittelten Werte aus der Bohrung Beznau TOC-Gehalte von 0,42 bis 0,92 Gew.-%. Sie wurden in einem engen Raster an insgesamt 39 Proben ermittelt. Beim Opalinuston und Posidonienschiefer ist auch in Tab. 17 eine undeutliche Zunahme des TOC-Wertes mit der Teufe zu erkennen. Im Gegensatz zu den Werten von MUKHOPADHYAY & LEYTHAEUSER (1984) sind die von PETERS (1984b) ermittelten TOC-Gehalte deutlich geringer. Beim Posidonienschiefer gibt PETERS (1984b) TOC-Gehalte von 0,12 bis 9,13 Gew.-% an, während MUKHOPADHYAY & LEYTHAEUSER (1984) einen TOC-Wert von nur 1,67 Gew.-% ermittelten, der deutlich unterhalb des Maximalwertes von 9,13 Gew.-% liegt.

Die aus der Rock-Eval-Pyrolyse gewonnenen Parameter zeigen, dass die meisten der Proben in Tab. 17 ein wasserstoffarmes Typ-III-Kerogen führen. Dieser Kerogentyp enthält überwiegend kondensierte Polyaromaten mit geringen Anteilen an aliphatischen Ketten und sauerstoffhaltigen funktionellen Gruppen. Im Vergleich zu den Typen I und II besitzt das Typ-III-Kerogen ein geringes Öl- und Gasbildungspotential. Lediglich die Proben aus dem Posidonienschiefer und dem Mittleren Muschelkalk enthalten ein Kerogen mit erhöhten H/C-Werten und rechtfertigen damit eine Einstufung als potentielle Erdölmuttergesteine. Der erhöhte H/C-Wert der untersuchten Muschelkalkprobe geht aber wohl auf millimeterdünne, algenreiche Zwischenlagen zurück (NAGRA 1984).

Bei den Opalinuston-Proben, die in einem kurzen Intervall von ca. 40 m gewonnen wurden, zeigt der Wert des geochemischen Reifeparameters  $T_{\max}$  keine Tiefenabhängigkeit und bei einer nur geringen Variation einen Mittelwert von 432 °C. Mit diesem Wert ist der Beginn des Ölfensters gerade erreicht; er deutet damit auf einen relativ niedrigen Reifegrad des organischen Materials hin. Die Reife entspricht auf der Basis dieses Parameters etwa dem Beginn der KW-Genese ( $R_m = 0,5 \%$  für Typ-II-Kerogene). Der berechnete Produktionsindex (Tab. 17) erlaubt u. a. die Feststellung der Migration von KW. Die für fast alle Proben aus der Bohrung Beznau sehr niedrigen Werte für diesen Index deuten darauf hin, dass eine KW-Migration in nennenswertem Umfang nicht stattgefunden hat, was auch im Einklang mit der niedrigen Reife dieser Sedimente steht (vgl. dazu auch die in Tab. 20 kompilierten Ergebnisse).

GAUCHER et al. (2003) und ELIE & MAZUREK (2008) haben Rock-Eval-Parameter an Opalinuston- und Posidonienschieferproben aus Mont Terri und der Bohrung Benken ermittelt. Die TOC-Gehalte variieren im Opalinuston mit zwei Ausnahmen von 0,72 bis 1,12 Gew.-% und im Posidonienschiefer zwischen 6,5 und 8,8 Gew.-%. Die  $T_{\max}$ -Werte aus der Rock-Eval-Pyrolyse liegen bei  $\leq 435$  °C, was für Kerogene geringer thermischer Reife typisch ist. Die Produktionsindizes zeigen, dass Opalinuston und Posidonienschiefer keine größeren Mengen Erdöl generiert haben können. Im OI-HI-Diagramm wird ersichtlich, dass die Opalinuston-Proben in das Feld der Typ-III-Kerogene und die Posidonienschieferproben in das Feld der Typ-II-Kerogene fallen. Der OI-Wert ist in der organischen Substanz aus v. a. in calcitreichen Opalinuston-Proben höher (vgl. Benken 571,55 m in Tab. 18). SCHOLTIS et al. (1999) zufolge stammt die organische Substanz im Opalinuston von Mont Terri hauptsächlich aus terrigenen Quellen und kann als Kerogen-Typ III klassifiziert werden, dessen dominierendes Mazeral Vitrit ist. Ein hoher Anteil des inerten Kohlenstoffs kommt aus älteren und aufgearbeiteten terrigenen Quellen.

Tab. 18: Rock-Eval-Parameter und Daten aus GC-MS-Analysen der aliphatischen KW-Fraktion aus Proben aus dem Opalinuston (OPA) und dem Posidonienschiefer (POS) von Mont Terri und der Bohrung Benken (Daten aus: GAUCHER et al. 2003 und ELIE & MAZUREK 2008)

Lokation	Teufe unter GOK [m]	Resultate Rock-Eval-Pyrolyse						$\Sigma$ TM/TOC	Extract Yield	Pr/n-C <sub>17</sub>	Ph/n-C <sub>18</sub>	Pr/Ph	CPI
		TOC	T <sub>max</sub>	HC	HI	OI	PI						
OPA Mont Terri BGP-4 tonige Fazies		0,91	431	–	168	46	–	–	–	–	–	–	1,95 – 2,0
		0,88	427	–	88	35	–	–	–	–	–	–	
		0,94	426	–	107	23	–	–	–	–	–	–	
		0,83	431	–	96	38	–	–	–	–	–	–	
		0,95	430	–	101	35	–	–	–	–	–	–	
OPA Mont Terri BWS-A3 tonige Fazies		0,93	430	–	121	43	–	–	–	–	–	–	1,95 – 2,0
		0,85	431	–	109	37	–	–	–	–	–	–	
		0,83	431	–	104	32	–	–	–	–	–	–	
OPA Benken	571,55	0,21	429	4,8	86	143	0,05	105	48	2,77	2,77	7,63	1,48
OPA Benken	613,48	0,80	432	1,3	164	50	0,01	79	13	1,44	1,44	3,88	1,73
OPA Benken	645,05	0,89	434	1,1	110	22	0,01	83	11	2,36	2,36	5,49	1,78
OPA Mont Terri		0,72	431	1,4	92	28	0,01	72	14	1,32	0,51	3,19	1,68
OPA Mont Terri		0,81	430	1,2	96	25	0,01	83	25	3,00	0,85	4,97	2,24
POS Benken	663,85	6,49	425	5,1	658	11	0,01	8	62	2,00	1,73	1,80	1,08
POS Mont Terri		8,77	424	7,5	642	6	0,01	6	80	2,23	1,94	1,56	1,11

TOC [Gew.-%], T<sub>max</sub> [°C], HC = freie KW [mg HC/g TOC], HI = Wasserstoffindex [mg HC/g TOC], OI = Sauerstoffindex [mg CO<sub>2</sub>/g TOC], PI = Produktionsindex,  $\Sigma$  TM/TOC = Quotient  $\Sigma$  Tonminerale / TOC, Chloroform Extract Yields [mg/g TOC]

## 5.2 Mazerale

Zur Charakterisierung des im Gestein in feiner Verteilung vorkommenden organischen Materials können auch die im Kerogenkonzentrat mikroskopisch erfassbaren organischen Partikel (Mazerale) herangezogen werden. Die aus der Bohrung Beznau nachgewiesenen Mazerale bestehen hauptsächlich aus Vitriniten (Tab. 19). Bei den Liptiniten lassen sich mehrere Typen unterscheiden (vgl. Tab. 19). Ein Teil der Vitrinite ist nicht autochthon, sondern aufgearbeitet und re-sedimentiert (Vitrodetrinite). In den meisten Fällen besteht das Kerogenkonzentrat zu  $\frac{2}{3}$  aus Vitriniten und Inertiniten, was sich mit der Zuordnung dieser Proben zum Kerogen-Typ III deckt, dessen Ausgangssubstanzen überwiegend Landpflanzen sind. Die aufgrund ihres hohen H/C-Verhältnisses zur KW-Bildung prädestinierten Liptinite sind zu > 50 % nur in den Proben aus dem Posidonienschiefer und der Stuttgart-Formation vorhanden. Auf Basis der Rock-Eval- und Mazeral-Daten zeigt von allen Proben aus der

Bohrung Beznau der Posidonienschiefer die beste Kerogenqualität; er stellt damit das beste potentielle Erdölmuttergestein der gesamten Schichtenfolge dar. Die Kerogene der Proben aus dem Jura sind reicher an Sporen und biodegradierten Liptiniten als die aus der Trias. Die Mazeralzusammensetzung deutet auf eine nichtmarine Entstehung des organischen Materials der Opalinuston-Proben.

Tab. 19: Mazeralzusammensetzung der Kerogenkonzentrate aus Kernproben der Bohrung Beznau/Schweiz (aus: MUKHOPADHYAY & LEYTHAEUSER 1984)

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Vitrinit [Vol.-%]	Inertinit [Vol.-%]	Liptinit [Vol.-%]				
				I	II	III	IV	Σ I – IV
jm1	Opalinuston-Fm.	50	10	–	–	5	35	40
		40	20	40	–	–	–	40
		58	11	31	–	–	–	31
		55	15	10	–	–	20	30
		60	10	5	–	–	25	30
		57	8	5	–	5	25	35
		71	9	–	–	–	20	20
ju2	Posidonienschiefer-Fm.	25	5	52	–	–	18	70
k1	Stuttgart-Fm.	60	5	5	–	–	30	35
	Erfurt-Fm.	50	7	32	–	–	11	43
	Erfurt-Fm.	39	3	15	1	1	41	58
m2	Mittlerer Muschelkalk	40	5	6	5	3	41	55

I – Sporinit/Kutinit/Suberinit/Resinit, II – Reste von Phyto- oder Zooplankton, III – Alginit, IV – unfigurierter Liptinit

### 5.3 Vitrinitreflexionsdaten und daraus abgeleitete Reifegrade

Durch die Bestimmung des Inkohlungsgrads des organischen Materials sind Aussagen zur thermischen Geschichte von Sedimentgesteinen und damit zur Reife der organischen Substanz möglich. Er wird mit Hilfe von Reflexionsmessungen an Vitriniten ermittelt, wobei der Reflexionsgrad des Vitriniten bei steigender Inkohlung irreversibel zunimmt (TISSOT & WELTE 1984). Zur Abschätzung der Reife der organischen Substanz dient auch die Fluoreszenzfarbe von Liptiniten, die sich mit steigender Inkohlung bei gleichzeitiger Abnahme der Intensität von Grün nach Rot verschiebt. Der Beginn der thermokatalytischen Produktion von flüssigen KW entspricht einer Vitrinit-Reflexion von 0,5 – 0,6 %. Der Reifegrad der Sedimente der Bohrung Beznau wurde über die Vitrinitreflexion gemessen und über weitere Reifebestimmungen mittels Fluoreszenzmikroskopie gesichert (vgl. Tab. 20). Es wurde ausschließlich autochthoner Vitrinit verwendet und re-sedimentierter Vitrinit ausgeschlossen. Da die beiden reifeabhängigen Parameter  $\lambda_{\max}$ -Wert (Wellenlänge der maximalen Fluoreszenzintensität, Spalte II in Tab. 20) und Q-Wert oder „Rot/Grün-Quotient“ (Verhältnis der relativen Fluoreszenzintensitäten bei 650 nm und 500 nm, Spalte III) in bekannten Abhängigkeiten zur Vitrinitreflexion stehen, lassen sie sich zur Umrechnung in %  $R_m$ -Werte (Spalte VI in Tab. 20) benutzen.

Der Posidonienschiefer als einziges in der Bohrung Beznau angetroffenes potentiell Erdölmuttergestein hat laut Tiefentrend in MUKHOPADHYAY & LEYTHAEUSER (1984) einen Reifegrad von ca. 0,45 – 0,52 %  $R_m$  erreicht, was angesichts des Kerogentyps II in diesem Gestein dem Beginn des Stadiums der Erdölgenese entspricht. Folglich hat die KW-Genese unter den gegebenen geothermischen Verhältnissen in diesem Muttergestein gerade erst begonnen, was auch die Gehalte an leichtflüchtigen ( $C_2 - C_7$ ) und höhermolekularen ( $\geq C_{15}$ ) KW bestätigen.

Tab. 20: Reflexionsmikroskopisch ermittelte Reifeparameter für Kernproben der Bohrung Beznau/Schweiz (aus: NAGRA 1984)

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	mittl. Vitrinit-reflexion $\pm 1\sigma$ [% $R_m$ ]	Anzahl Messpunkte	Spektralfluoreszenzmessungen				VI
		I		II	III	IV	V	
jm1	Opalinuston-Fm.	0,38 $\pm$ 0,05	11	–	–	–	0,61	0,50
		0,40 $\pm$ 0,05	5	576	1,00	0,56 – 0,58	0,60	0,52
		0,39 $\pm$ 0,05	17	–	–	–	0,62	0,51
		0,42 $\pm$ 0,06	5	580	1,05	0,57 – 0,59	0,61	0,54
		0,37 $\pm$ 0,04	13	–	–	–	0,58	0,48
		0,37 $\pm$ 0,02	4	–	–	–	0,58	0,48
		0,39	1	–	–	–	0,55	0,47
ju2	Posidonienschiefer-Fm.	0,35 $\pm$ 0,01	3	–	–	–	–	0,35
k1	Stuttgart-Fm.	0,76 (?)	1	–	–	–	–	0,76 ?
		0,64 $\pm$ 0,03	6	568	0,87	0,54 – 0,56	0,45	0,55
	Erfurt-Fm.	0,62 $\pm$ 0,03	6	570	0,92	0,55 – 0,57	0,60	0,59
		0,68 $\pm$ 0,03	15	–	–	–	0,62	0,65
		0,58 $\pm$ 0,05	43	584	1,20	0,60 – 0,65	0,58	0,60
m2	Mittlerer Muschelkalk	0,81 (?) $\pm$ 0,04	19	–	–	–	–	0,81 ?

II –  $I_{max}$  = Wellenlänge der maximalen relativen Fluoreszenzintensität im Spektrum 400 - 700 nm  
 III – Q = Rot/Grün-Quotient (Spektralquotient) = relative Intensität bei 650 nm / relative Intensität bei 500 nm  
 IV – Mittlere Vitrinitreflexion nach TEICHMÜLLER (1982) berechnet aus  $I_{max}$  und Q  
 V – Mittlere Vitrinitreflexion nach OURAND & OUVIN (1979) berechnet aus  $T_{max}$   
 VI – aus Spalten I, IV und V berechneter Mittelwert der Vitrinitreflexion (%  $R_m$ )

In den meisten Proben der Bohrung Benken fand sich nur eine geringe Anzahl von Vitriniten; in einigen wenigen konnten Vitrinit-Reflexionsmessungen gar nicht durchgeführt werden (Tab. 21). Im Bereich des Opalinustons liegen die Werte bei 0,52 – 0,58 %; es wurde eine deutliche Abhängigkeit der Vitrinit-Reflexion von der Tiefe erkannt. Aus den Werten wurde gefolgert, dass die Maturität des organischen Materials im Wirtsgestein gering ist und sich knapp unterhalb oder am Anfang des Ölfensters befindet (NAGRA 2001, NAGRA 2002).

Tab. 21: Zusammenstellung von Vitrinit-Reflexionswerten für den Opalinuston aus nord-schweizerischen Bohrungen/Aufschlüssen

Lokalität	Teufe u. GOK [m]	R [%]	n	Min	Max	MW	Bemerkung	Literatur
Beznau	24,16 – 65,70	R <sub>m</sub>	8	0,47	0,54	0,50	berechnet	NAGRA (1984)
Benken	mittl. T. 586,99	R <sub>0</sub>	3	0,56	0,62	0,59	–	NAGRA (2001)
	555,31 – 635,67	R <sub>0</sub>	3	0,41	0,44	0,42	–	NAGRA (2001)
Mont Terri	–	R <sub>0</sub>	8	0,4	0,6	–	gemessen	SCHOLTIS et al. (1999)
	–	–	4	–	–	0,45	gemessen	SCHOLTIS et al. (1999))
	–	–	–	–	–	–	gemessen	GAUCHER et al. (2003)
	–	R <sub>0</sub>	–	0,40	1,50	0,58	–	BOSSART (2008)

Ein hoher Anteil des inerten Kohlenstoffs im Opalinuston von Mont Terri stammt SCHOLTIS et al. (1999) zufolge aus älteren und aufgearbeiteten terrigenen Quellen. Der Reifegrad dieser Komponente kann 2,0 % R<sub>0</sub> erreichen, wohingegen der bei der Ablagerung des Opalinustons erfolgte terrigene Eintrag Reifegrade von 0,4 – 0,6 % R<sub>0</sub> besitzt. Diese Abschätzung der Reife stimmt gut mit den Fluoreszenzeigenschaften der autochthonen marinen Organoklasten überein. Die Reife der extrahierbaren organischen Substanz, welche die gleichzeitig entstandene organische Substanz repräsentiert, liegt bei 0,4 – 0,6 % R<sub>0</sub>, was gut mit den petrologischen Daten übereinstimmt. Es wurden auch keine Anzeichen migrierender Erdölfluide beobachtet, die möglicherweise aus älteren Schichten mit Ölbildungspotential stammen. Auch fehlen Anzeichen dafür, dass die Sedimente perkolierenden meteorischen Wässern und begleitenden Biodegradations- oder Auswascheffekten ausgesetzt waren. Die ermittelten Vitrinitreflexionswerte des Opalinustons an Material aus Mont Terri sind nahezu identisch mit denjenigen des Opalinustons der Bohrung Benken, woraus ähnliche Maturitäten an beiden Lokalitäten geschlussfolgert werden können. Auch die von BOSSART (2008) zusammengefassten Vitrinitreflexionswerte des Opalinustons von Mont Terri (vgl. Tab. 21) zeigen, dass der Reifegrad der organischen Substanz relativ gering ist.

Insgesamt wird deutlich, dass der in Mont Terri aufgeschlossene Opalinuston nicht das Hauptstadium der Ölbildung erreicht hat. Aufgrund seiner geringen Extraktionsausbeute, dem hohen Anteil an aufgearbeiteter inerter organischer Substanz und dem intensiven Abbau bei der bakteriellen Sulfatreduktion während der Diagenese kommt dem Opalinuston auch kein Ölbildungspotential zu (SCHOLTIS et al. 1999, NAGRA 2002, BOSSART 2008). Diese Aussage gilt auch für den Opalinuston des Referenzprofils SÜD, dessen geologische Entwicklung ebenfalls nicht auf eine Erdölbildung hindeutet (STARK 2014).



## 5.4 Weitere Reifeparameter

Zu den weiteren Reifeparametern, die in Analysen berücksichtigt werden, zählen die löslichen KW-Anteile. ELIE & MAZUREK (2008) geben für nicht erhitzte Proben des Opalinustons lösliche KW-Anteile (Trichlormethan) von 0,9 – 48 mg/g TOC und für den Posidonienschiefer 62 – 91 mg/g TOC an, was die unterschiedlichen Typen von TOC und deren unterschiedliche Empfindlichkeit zur Erzeugung von KW widerspiegelt (vgl. Tab. 22). Der Prozentsatz von gesättigten Komponenten im löslichen Anteil aus dem Posidonienschiefer ist höher und der der ungesättigten ist geringer als der des Opalinustons. Diese Differenzen sind den unterschiedlichen TOC-Typen geschuldet, da die räumliche Nähe von Opalinuston und Posidonienschiefer auf eine vergleichbare Reife deutet. Mit Ausnahme einer ungewöhnlich Ca-reichen Benken-Probe aus 571,55 m Tiefe ist die Zusammensetzung aller löslichen organischen Anteile der tabellierten Opalinuston-Proben vergleichbar.

Die Ergebnisse von Gaschromatographie-MS-Analysen aliphatischer KW, die in Tab. 22 zusammengestellt sind, zeigen folgendes:

In Benken wird die Verteilung von *n*-Alkanen aus dem Posidonienschiefer durch Komponenten mit geringem Molekulargewicht dominiert. Dagegen indiziert die Verteilung der *n*-Alkane für den Opalinuston eine terrigene Materialquelle. Darauf deuten auch die Dominanz von ungeradzahligen über geradzahlige *n*-Alkane im Bereich  $C_{25} - C_{35}$  (SCHAEFER & LEYTHAEUSER (1984)), die CPI-Werte sowie die Pristan/Phytan-Verhältnisse ( $Pr/Ph$ )  $> 3$  hin. Zudem kann daraus eine Ablagerung unter eher oxidierenden Bedingungen abgeleitet werden. Im Posidonienschiefer deuten der CPI-Wert und das  $Pr/Ph$ -Verhältnis hingegen auf eine marine Lieferquelle und Ablagerung unter reduzierenden Verhältnissen. Das Phytan/*n*- $C_{18}$ -Pristan/*n*- $C_{17}$ -Verhältnis ist hingegen nicht eindeutig. Die Isoprenoid-Daten weisen zwar auf einen marinen Vorläufer der Posidonienschiefer-Probe, allerdings nicht auf einen eindeutig terrigenen Vorläufer für die Opalinuston-Proben. Biodegradation führt zur Erhöhung des  $Pr/Ph$ -Verhältnisses, da aerobe Bakterien die *n*-Alkane im Allgemeinen vor den Isoprenoiden angreifen.



Mont Terri: Die geochemischen Werte ähneln stark denjenigen von Benken. Die Isoprenoid-Daten unterstützen hier jedoch die marine Herkunft des organischen Vorläufers des Posidonienschiefers und die terrigene Herkunft des Vorläufers der Opalinuston-Proben.

Auch in der analysierten Opalinuston-Probe der Bohrung Beznau ist die Verteilung der *n*-Alkane in Richtung geringerer Molekulargewichte verschoben. Auch dort ist nach SCHAEFER & LEYTHAEUSER (1984) eine erhebliche Bevorzugung der ungeradzahigen *n*-Alkane im C<sub>25</sub>- bis C<sub>35</sub>-Bereich zu erkennen. Die daraus berechneten CPI-Werte liegen zwischen 1,5 und 1,8. Die Pr/Ph-Verhältnisse liegen sowohl im unteren als auch im oberen Bereich des Opalinuston bei Werten deutlich > 3 (Tab. 22). Alle genannten Werte belegen eine Herkunft aus terrigenen Quellen sowie einen niedrigen Reifezustand des organischen Materials. Der Posidonienschiefer zeigt in der gesättigten KW-Fraktion eine Bevorzugung der ungeradzahigen *n*-Alkane im C<sub>25</sub>- bis C<sub>35</sub>-Bereich. Die Abnahme des CPI-Werts auf ca. 1,2 wird in dieser Formation als Folge des Wechsels im Typ des organischen Materials zu einem Typ-II-Kerogen interpretiert.

Tab. 22: Lösliches organisches Material (in [mg/g TOC]) und geochemische Daten aus GS-MS-Analysen der aliphatischen KW-Fraktion von Opalinuston (OPA) und Posidonienschiefer (POS) (Daten aus: NAGRA 1984, GAUCHER et al. 2003 und ELIE & MAZUREK 2008)

Probenherkunft Stratigraphie		ME	lös. org. Material	Pristan/n-C <sub>17</sub>	Phytan/n-C <sub>18</sub>	Pr/Ph	CPI	CPI <sub>25-31</sub>	CPI <sub>29</sub>	22S/(22S+22R) αβ-C32-Hopane	Verhältnis Normo- retan/Norhopan	20S/(20S+20R) αα-C29-Steran	βα-Diasteran-Verhältnis
Bohrung Beznau	oberer Bereich OPA	jm1	–	0,91	0,32	4,0	–	1,57	1,68	–	–	–	–
			–	1,1	0,49	3,0	–	1,59	1,71	–	–	–	–
	unterster OPA		–	1,3	0,47	3,5	–	1,55	1,67	–	–	–	–
			–	1,3	0,44	4,1	–	1,52	1,66	–	–	–	–
	Jurensis-mergel	ju2	–	1,4	0,56	3,4	–	1,52	1,68	–	–	–	–
	POS		–	1,7	0,56	4,0	–	1,60	1,81	–	–	–	–
			–	1,5	0,76	3,8	–	1,16	1,21	–	–	–	–
	Obtususton		–	0,74	0,22	3,5	–	1,31	1,47	–	–	–	–
OPA Benken	jm1	48	2,77	2,77	7,63	1,48	–	–	0,26	0,71	0,22	1,15	
OPA Benken		13	1,44	1,44	3,88	1,73	–	–	0,28	0,64	0,11	1,06	
OPA Benken		11	2,36	2,36	5,49	1,78	–	–	0,23	0,62	0,08	1,07	
OPA Mont Terri	jm1	14	1,32	0,51	3,19	1,68	–	–	0,23	0,59	0,14	0,64	
OPA Mont Terri		25	3,00	0,85	4,97	2,24	–	–	0,27	0,63	0,12	1,13	
POS Benken	ju2	62	2,00	1,73	1,80	1,08	–	–	0,40	0,37	0,13	1,16	
POS Mont Terri		80	2,23	1,94	1,56	1,11	–	–	0,49	0,41	0,20	1,95	

Auch der im Vergleich zum Opalinuston deutlich geringere Anteil der  $n$ -C<sub>27</sub>- bis  $n$ -C<sub>35</sub>-Alkane an der Gesamtverteilung weist auf eine andere Herkunft des organischen Materials im Posidonienschiefer hin, wobei ein größerer Anteil an Phytoplankton und Algenmaterial und ein kleinerer Anteil höherer Landpflanzen für die Bildung des Kerogens in den Posidonienschiefer angenommen werden kann. Die Detailzusammensetzung der  $n$ -Alkane bestätigt damit die aus Pyrolysedaten abgeleitete Schlussfolgerung einer guten Kerogenqualität im Posidonienschiefer. Die schwer zu interpretierenden Isoprenoiddaten mit einem hohen Pr/Ph-Verhältnis von 3,8 deuten eher auf einen Mischtyp als auf eine marine Lieferquelle (NAGRA 1984).

Die Jurensismergel (ME ju 2) der Bohrung Beznau ähneln insgesamt dem Opalinuston in dessen unterstem Teil. Wie dort sind im C<sub>25</sub>- bis C<sub>35</sub>-Bereich eine Bevorzugung der ungeradzahligen  $n$ -Alkane und ein erheblicher Anteil der  $n$ -C<sub>27</sub>- bis  $n$ -C<sub>35</sub>-Alkane an der Gesamtverteilung zu erkennen. Dieses sowie das Pr/Ph-Verhältnis von 4,0 und der CPI-Wert von 1,60 indizieren die Herkunft der organischen Substanz im Jurensismergel aus vorherrschend terrigenen Quellen und eine Ablagerung unter oxidierenden Bedingungen. Sehr charakteristisch ist die Abreicherung dieser Probe an leichten Gasen (vgl. auch das Chromatogramm in SCHAEFER & LEYTHAEUSER 1984). Für den Obtususton (ME ju2) der Bohrung Beznau belegt das Pr/Ph-Verhältnis von 3,5 und der CPI-Wert von 1,31 ebenfalls eine Herkunft aus vorherrschend terrigenen Quellen.

## **5.5 Menge und Zusammensetzung der Kohlenwasserstoffe**

Aussagen zur Menge und Zusammensetzung von niedrigmolekularen und schwerflüchtigen KW im Opalinuston gibt es kaum. Bei den Daten aus dem Süddeutschen Molassebecken, aber auch in den Arbeiten über den Opalinuston aus den nordschweizerischen Bohrungen und Aufschlüssen, wird diese Thematik kaum berücksichtigt. Eine Ausnahme ist das obere Drittel der Bohrung Beznau (24 – 88 m u. GOK), an deren Kernen vom Opalinuston bis zum Obtususton nicht nur die extrahierbaren, schwerflüchtigen KW („Bitumen“), sondern auch die niedrigmolekularen KW (C<sub>2</sub> – C<sub>7</sub>) untersucht worden sind. Aufgrund dieser Daten waren auch Aussagen über Migrationsprozesse der niedrigmolekularen mobilen KW in dieser Bohrung möglich (SCHAEFER & LEYTHAEUSER 1984), auf die im Folgenden eingegangen wird.

### 5.5.1 Niedrigmolekulare Kohlenwasserstoffe

Niedrigmolekulare KW bestehen aus C<sub>2</sub>- bis C<sub>7</sub>-Molekülen, wobei es sich um weitverbreitete Spurenbestandteile in Sedimenten handelt, deren Untersuchung insbesondere für geochemische Fragestellungen von Interesse ist. Der Ablauf der Genese dieser Verbindungsgruppe spiegelt sehr empfindlich die thermisch kontrollierten dia- und katagenetischen Veränderungen wider, die Kerogene bei einer Versenkung und Temperaturerhöhung erfahren. TISSOT et al. (1971) zeigten, dass die Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeiten mit kürzer werdender Kettenlänge der abgespaltenen Spezies zunimmt. Niedrigmolekulare KW sind aufgrund ihrer relativ hohen Wasserlöslichkeit sowie ihrer durch molekulare Diffusion großen Mobilität geeignet, KW-Migrationsprozesse in empfindlicher Weise zu verdeutlichen (LEYTHAEUSER et al. 1979, LEYTHAEUSER et al. 1980, LEYTHAEUSER et al. 1983, SCHAEFER et al. 1983, THOMPSON 1979).

Tab. 23: Ausbeute leichtflüchtiger KW in Opalinuston- und Posidonienschiefer-Proben (POS) aus der Bohrung Beznau/Schweiz (Daten aus: NAGRA 1984)

Teufe u. GOK	Opalinuston (jm1)															POS (ju2)
	24,16 m	25,45 m	27,07 m	28,40 m	29,35 m	34,26 m	39,09 m	44,03 m	49,08 m	54,16 m	58,69 m	61,45 m	63,23 m	64,70 m	65,43 m	71,09 m
<b>Kohlenwasserstoff-Konzentration (ng/g Trockengewicht)</b>																
1	0,15	0,11	0,08	0,08	0,07	0,05	0,05	0,03	–	–	0,07	0,05	0,06	0,04	0,05	0,05
2	1,3	0,22	0,14	0,38	0,38	6,7	8,1	3,3	17,5	3,3	17,4	7,4	9,8	9,5	4,6	29,7
3	–	0,30	0,06	–	0,09	–	–	–	–	–	0,10	–	–	0,45	–	–
4	1,4	0,20	0,20	0,61	0,60	62,4	46,6	30,6	67,9	8,2	42,8	32,5	35,2	22,4	31,3	93,9
5	0,33	0,14	0,09	6,5	20,4	99,3	64,5	40,9	74,1	10,4	36,8	30,2	26,0	17,7	25,3	51,7
6	0,10	0,10	0,07	0,09	0,14	0,06	0,08	0,07	0,05	0,06	0,08	0,10	0,06	0,08	0,07	0,11
7	0,58	0,17	0,14	0,32	41,8	152	99,4	63,4	113	17,8	59,3	51,2	43,0	32,0	44,1	96,6
8	0,02	0,01	0,02	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–
9	0,02	0,03	0,01	0,01	0,13	0,20	0,09	0,06	0,12	0,02	0,07	0,07	0,06	0,04	0,07	0,14
10	0,3	0,23	0,25	0,22	90,1	133	90,7	62,6	104	27,5	60,7	55,8	40,6	38,5	44,1	63,1
11	0,53	0,23	0,30	0,32	84,6	117	83,4	57,4	93,5	31,7	61,5	59,7	42,3	46,6	48,9	82,9
12	–	–	–	0,20	0,21	0,26	0,18	0,13	0,20	0,07	0,14	0,15	0,11	0,12	0,13	0,18
13	0,03	–	–	0,04	10,2	20,6	13,6	10,8	16,0	6,5	8,8	7,9	6,3	7,5	6,7	12,8
14	–	0,33	–	3,6	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–
15	1,4	0,59	2,2	–	45,6	56,1	42,9	29,5	44,5	20,1	35,6	39,3	26,6	37,2	35,6	52,0
16	0,50	0,62	0,86	0,26	16,3	20,7	16,2	11,8	18,3	9,2	16,3	18,3	12,6	17,9	16,8	23,8
17	1,7	1,0	3,0	0,32	45,9	54,8	43,7	29,1	42,0	21,1	33,7	39,3	25,9	40,6	37,0	60,7
18	0,24	0,13	0,45	0,16	64,5	89,3	66,8	54,0	83,5	45,1	64,9	66,3	47,9	66,7	57,7	82,7
19	0,47	0,54	0,40	0,90	0,36	0,40	0,33	0,23	0,33	0,15	0,54	0,18	0,34	0,21	0,27	0,57
20	0,46	0,19	0,21	7,3	14,1	34,1	18,5	15,7	21,3	12,5	12,0	10,9	11,5	14,6	13,1	25,8
21	0,08	0,04	0,12	0,04	18,2	25,4	18,4	15,6	22,9	12,5	16,8	17,0	12,8	17,8	15,1	21,4
22	0,96	0,78	2,0	0,34	8,3	9,3	8,6	6,2	8,2	4,5	7,2	9,2	5,9	10,8	9,6	19,8

Teufe u. GOK	Opalinuston (jm1)															POS (ju2)
	24,16 m	25,45 m	27,07 m	28,40 m	29,35 m	34,26 m	39,09 m	44,03 m	49,08 m	54,16 m	58,69 m	61,45 m	63,23 m	64,70 m	65,43 m	
<b>Kohlenwasserstoff-Konzentration (ng/g Trockengewicht)</b>																
23	1,1	1,2	1,2	1,9	6,0	7,0	5,9	4,3	5,9	3,1	5,1	6,4	4,3	7,5	6,8	13,3
24	0,82	0,69	1,9	0,27	8,0	9,4	8,8	6,7	9,3	5,7	10,0	13,5	9,1	17,5	15,8	35,6
25	0,36	0,27	0,68	0,07	8,6	11,0	9,6	8,0	11,9	7,8	13,3	16,7	11,7	20,5	17,7	29,8
26	0,39	0,23	0,72	0,18	8,5	10,8	9,4	8,1	12,1	7,5	13,2	16,8	12,4	20,4	18,3	31,0
27	0,75	0,18	0,69	1,9	9,0	11,8	10,8	9,4	15,3	11,4	21,0	27,7	19,6	35,7	30,9	56,4
28	4,0	3,1	7,8	1,5	27,1	29,7	29,0	21,1	26,1	15,3	22,0	28,5	18,2	36,0	31,0	74,6
29	0,08	–	0,09	0,10	1,5	2,0	2,0	1,7	2,8	1,9	3,4	4,8	3,5	6,3	5,4	8,8
30	2,3	1,5	3,9	1,0	52,8	65,3	54,0	45,2	60,5	36,5	53,8	65,8	45,5	78,5	66,0	101,0
31	0,15	0,11	0,10	0,25	0,12	–	0,17	–	–	–	–	0,18	–	0,26	0,27	0,97
32	0,59	0,42	0,83	0,40	6,7	8,2	7,5	6,3	8,7	6,3	10,2	13,6	9,6	18,1	15,4	28,4
33	0,47	0,51	0,42	1,0	1,6	2,0	2,1	1,8	2,4	1,7	3,2	4,8	3,4	7,5	6,8	18,9
34	–	0,28	0,5	1,2	–	–	–	–	–	–	6,0	5,7	4,2	12,9	11,3	32,0
35	5,5	0,64	2,0	9,0	40,8	58,3	37,3	33,1	48,3	31,6	22,9	21,6	20,2	22,4	19,5	21,7
1: Ethen, 2: Ethan, 3: Propen, 4: Propan, 5: Methylpropan, 6: Methylpropen + 1-Buten, 7: <i>n</i> -Butan, 8: <i>trans</i> -2-Buten, 9: 2,2-Dimethylpropan, 10: Methylbutan, 11: <i>n</i> -Pentan, 12: 2,2-Dimethylbutan, 13: Cyclopentan, 14: 2,3-Dimethylbutan, 15: 2-Methylpentan, 16: 3-Methylpentan, 17: <i>n</i> -Hexan, 18: Methylcyclopentan + 2,2-Dimethylpentan, 19: 2,4-Dimethylpentan, 20: Benzol, 21: Cyclohexan, 22: 2-Methylhexan, 23: 2,3-Dimethylpentan + 1,1-Dimethylcyclopentan, 24: 3-Methylhexan, 25: 1, <i>cis</i> -3-Dimethylcyclopentan, 26: 1, <i>trans</i> -3-Dimethylcyclopentan, 27: 1, <i>trans</i> -2-Dimethylcyclopentan, 28: <i>n</i> -Heptan, 29: 1, <i>cis</i> -2-Dimethylcyclopentan, 30: Methylcyclohexan, 31: 2,5-Dimethylhexan, 32: Ethylcyclopentan, 33: 1, <i>trans</i> -2, <i>cis</i> -4-Trimethylcyclopentan, 34: 1, <i>trans</i> -2, <i>cis</i> -3-Trimethylcyclopentan, 35: Toluol.																

Nach SCHAEFER et al. (1983) weist die Zusammensetzung der niedrigmolekularen KW (am Beispiel der C<sub>7</sub>-Verbindungen) im Tiefenintervall 20 – 90 m der Bohrung Beznau generell eine deutliche Tiefenabhängigkeit auf. Abgesehen von den vier obersten Proben bewegt sich der mittlere Relativgehalt des *n*-Heptans um 14 %, der verzweigten C<sub>7</sub>-KW bei 13 % sowie der C<sub>7</sub>-alicyclischen Verbindungen bei 58 % (bei steigender Tendenz mit der Tiefenzunahme). Umgekehrt verhält sich der Toluolgehalt, der im betrachteten Tiefenintervall zwischen 5 % und 26 % liegt. Von 29 m bis 54 m Tiefe finden sich etwas erhöhte Toluolgehalte (MW 23 %), unterhalb von 58 m etwas geringere Toluolgehalte von etwa 11 %. Der niedrigste Wert stammt aus dem Posidonienschiefer (71,09 m) mit 5,2 %. Dieser Wert ist charakteristisch für Muttergesteine niedrigen Reifegrades, die ein Typ-II-Kerogen enthalten (SCHAEFER et al. 1983). Die relativ niedrigen Gehalte an *n*-Heptan und verzweigten C<sub>7</sub>-KW und recht hohe Gehalte an alicyclischen Verbindungen deuten auf den relativ niedrigen Reifegrad des organischen Materials.

Die in Tab. 24 kompilierten Werte illustrieren die Zusammensetzungen von Gasen aus Lagerstätten/Förderhorizonten im westlichen Teil des Süddeutschen Molassebeckens.

Tab. 24: Chemische Zusammensetzung von Erdöl- und Gaskappengasen aus dem westlichen Teils des Süddeutschen Molassebeckens (aus: BOIGK 1981)

Bohrung	ME	Lithostratigraphie	Gaszusammensetzung [Vol.-%]					
			CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	C <sub>4</sub> <sup>*)</sup>	N <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>
Fronhofen 4	tms	Untere Süßwassermolasse	87,90	3,60	1,90	2,00	4,60	–
Fronhofen 101a			90,20	3,70	1,60	1,50	3,00	–
Arlesried 24	jm2	Eisensandstein-Fm.	92,59	4,75	0,66	0,45	0,55	1,00
Fronhofen 3			82,11	9,49	2,81	1,91	2,71	0,97
Fronhofen-Ost 1			81,90	10,10	3,70	1,90	1,60	0,80
Kirchdorf 3			92,98	3,46	0,63	0,42	2,89	0,62
Mönchsrot 14			89,25	4,49	1,55	1,96	2,25	0,50
Pfullendorf 3			72,80	9,30	3,55	3,50	10,45	0,40
Fronhofen 4	ju1	unterer Unterjura*	61,70	14,70	9,00	6,70	7,00	0,90
Fronhofen 7			75,72	6,63	2,70	1,98	9,48	3,49
Pfullendorf 2		unterer Unterjura* + Rhätsandstein	86,90	3,30	0,50	0,90	6,40	2,00
Pfullendorf 3			88,90	2,30	0,40	0,70	6,35	1,35
Pfullendorf 11			89,01	2,79	0,56	0,33	5,83	1,48
Arlesried 26A	k2	Löwenstein-Fm.	92,06	4,93	0,72	0,61	0,58	1,10
Fronhofen 4			82,40	3,20	0,90	0,50	13,00	–
Fronhofen-Ost 1			81,60	4,60	1,80	1,30	9,80	0,90
Pfullendorf 15			71,77	5,79	3,87	3,21	15,01	0,35

\* = in BOIGK (1981) nicht näher bezeichnet

### 5.5.2 Menge und Zusammensetzung schwerflüchtiger Kohlenwasserstoffe

Bei den schwerflüchtigen KW handelt es sich um langkettige Verbindungen, die auch als „Bitumen“ bezeichnet werden. SCHAEFER & LEYTHAEUSER (1984) haben an ausgewählten Proben der Bohrung Beznau mit Dichlormethan gewonnene Extrakte flüssigchromatographisch getrennt. In Tab. 25 sind die dabei ermittelten Werte, zu denen auch die Anteile der verbliebenen schwerflüchtigen KW zählen, dargestellt.

Tab. 25: Gehalt und Zusammensetzung des löslichen organischen Materials ( $C_{15+}$ ) ausgewählter Kernproben der Bohrung Beznau/Schweiz (aus: NAGRA 1984)

Stratigraphie	ME	Teufe [m u. GOK]	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Opalinuston-Fm.	jm1	24,16	0,95	90	9,5	5,0	20,0	32,9	47,1
		49,08	1,28	98	7,7	4,1	17,2	36,8	46,0
		61,45	1,23	47	3,8	1,7	15,9	27,3	56,8
		63,23	0,99	117	11,8	6,3	17,3	35,6	47,1
		65,43	1,10	125	11,4	5,8	16,2	35,1	48,7
Jurensismergel-Fm.	ju2	65,70	0,81	73	9,0	4,3	13,8	33,8	52,4
Posidonienschiefer-Fm.		71,09	1,79	482	26,9	13,7	22,2	28,8	49,0
Obtususton-Fm.		87,94	0,85	28	3,3	1,6	15,0	35,0	50,0

II: Gehalt an organischem Kohlenstoff [%], bezogen auf Trockengewicht,  
 III: lösliches organisches Material [ $\mu\text{g/g}$  Gestein],  
 IV: lösliches organisches Material [ $\text{mg/g}$  TOC],  
 V: KW-Gehalt [ $\text{mg/g}$   $C_{\text{org}}$ ],  
 VI: Anteil gesättigter Kohlenwasserstoffe (% von III),  
 VII: Anteil aromatischer Kohlenwasserstoffe (% von III),  
 VIII: N,S,O-Komponenten, Rückstand (% von III).

Die Gehalte an löslichem organischem Material (Spalte III) liegen um oder unter  $100 \mu\text{g/g}$  Gestein; nur die Proben aus dem als gutes Erdölmuttergestein eingestuftem Posidonienschiefer enthalten fast  $500 \mu\text{g/g}$  lösliches organisches Material. Die kohlenstoffnormierten Werte (Spalte IV) liegen zwischen  $3,3 \text{ mg/g}$  TOC und  $26,9 \text{ mg/g}$  TOC für den Gesamtextrakt bzw.  $1,6 \text{ mg/g}$   $C_{\text{org}}$  und  $13,7 \text{ mg/g}$   $C_{\text{org}}$  für die KW (Spalte V). Auch diese Gehalte zeigen, dass sich das Kerogen im Posidonienschiefer am Beginn des Erdölgenese-Stadiums befindet. Die Proben aller übrigen Formationen haben nur ein sehr geringes Erdölbildungspotential. Hinsichtlich der in SCHAEFER & LEYTHAEUSER (1984) abgebildeten Gaschromatogramme der gesättigten KW-Fraktion von Proben aus der Bohrung Beznau (Opalinuston, Jurensismergel, Posidonienschiefer) sei sei noch einmal auf den Anteil von  $n\text{-C}_{27}$ - bis  $n\text{-C}_{35}$ -Alkanen an der Gesamtverteilung hingewiesen, der bei den Proben aus dem Opalinuston und den Jurensismergeln wesentlich größer ist als im Posidonienschiefer.

## 6 Petrophysikalische Eigenschaften und Parameter

### 6.1 Dichte

Die Dichte eines Körpers wird durch den Quotient aus seiner Masse und seinem Volumen beschrieben. Als Stoffkonstante ist sie eine für das Material des Körpers charakteristische und von seiner Form und Größe unabhängige Eigenschaft.

Als Gesteinsparameter werden unterschiedliche Dichten zur Charakterisierung verwendet. Die Gesteinsdichte wird über die Masse des bergfeuchten Gesteins und dessen Volumen ermittelt. Nach Trocknung bei 105 °C ergibt sich die Trockendichte aus der ermittelten Trockenmasse und dem unveränderten Volumen. Die Korndichte (oder Kornrohndichte) ergibt sich aus dem Verhältnis zwischen Trockenmasse der festen Einzelbestandteile des Gesteins und Volumen der Einzelbestandteile einschließlich ihrer von der Messflüssigkeit nicht benetzten Hohlräume. Sie wird mit Pyknometern nach einer standardisierten Vorschrift ermittelt (DIN 52102).

#### 6.1.1 Dichtewerte für das Wirtsgestein (Opalinuston)

In Tab. 26 sind verschiedene Dichtewerte von Opalinuston-Proben aus der Nordschweiz zusammengestellt (NAGRA 2001, BOSSART 2008, BOCK 2009). Die durchschnittliche Dichte des bergfeuchten Kernmaterials von Opalinuston-Proben aus der Bohrung Benken beträgt  $2520 \pm 30 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  (NAGRA 2001). Aufgrund der ähnlichen Tiefenlage des Opalinustons in dieser Bohrung zu der des Wirtsgesteins im Endlagerstandortmodell eignen sich diese Werte als Referenzwerte für die Modelleinheit jm1. Die von BOSSART (2008) und BOCK (2009) kompilierten Feucht-, Trocken- und Korndichten für Mont Terri sind ebenfalls in Tab. 26 zusammengefasst.

Tab. 26: Überblick über an Proben aus der Nordschweiz gemessene Dichtewerte [ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ] des Opalinustons

Lokalität	Parameter	Anzahl der Analysen	Bandbreite	Mittelwert $\pm 1\sigma$	Literatur
Bohrung Benken	Gesteinsdichte getrocknetes Gestein	8	2370 – 2530	2430 $\pm$ 60	NAGRA (2001)
	Gesteinsdichte bergfeuchtes Gestein	121	2430 – 2650	2520 $\pm$ 30	
	Korndichte	8	2690 – 2740	2720 $\pm$ 10	
Mont Terri	Feuchtdichte	–	2400 – 2530	2450	BOSSART (2008)
	Trockendichte	–	2280 – 2320	2310	
	mittlere Korndichte	–	2700 – 2770	2740	
	Feuchtdichte	335	–	2430 $\pm$ 20	BOCK (2009)
	Trockendichte	21	–	2330 $\pm$ 50	
	mittlere Korndichte	13	–	2700 $\pm$ 20	



Die allein von der mineralogischen Zusammensetzung abhängende Korndichte des Opalinustons von Benken schwankt zwischen  $2690 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  und  $2740 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ . Die zusätzlich von der Porosität abhängende Gesteinsdichte des Opalinustons von Benken weist eine etwas größere Variabilität ( $2370 - 2530 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ) auf. Auf die sandigeren Bereiche, die im Referenzprofil SÜD nur in den oberen zehn Metern der Opalinuston-Formation angenommen werden, können Werte der *Murchisonae*-Schichten der Bohrung Benken übertragen werden. Die Korndichte liegt dort zwischen  $2710 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  und  $2720 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ .

Für die Berechnung der physikalischen Porosität wird auch die Gesteinsdichte verwendet, die wie diese mit der Tiefenlage bzw. der maximalen Versenkung variiert. Um mit der physikalischen Porosität kompatible Gesteinsdichten zu erhalten, haben TRABER & BLASER (2013) – ausgehend von einer mittleren Korndichte von  $2710 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  – Werte für die Gesteinsdichte des Opalinustons aus der Nordschweiz (inkl. Felslabor Mont Terri) aus Referenz- und Eckwerten der physikalischen Porosität berechnet und so die in Tab. 27 kompilierten Daten festgelegt.

Tab. 27: Referenz- und Eckwerte zur Gesteinsdichte des Opalinustons inklusive des Opalinustons aus dem Felslabor Mont Terri (Werte aus: Traber & Blaser 2013)

	physikalische Porosität	Korndichte	berechnete Gesteinsdichte	Statistik (inkl. Felslabor Mont Terri)	
oberer Eckwert	17,0 Vol.-%	$2710 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$2550 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	P95	$2530 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$
Referenzwert	11,0 Vol.-%	$2710 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$2410 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	Median	$2410 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$
unterer Eckwert	6,0 Vol.-%	$2710 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$2250 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	P5	$2300 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$

### 6.1.2 Dichtewerte für das Nebengebirge

Für die stratigraphische Abfolge des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD liegen nicht zu jeder lithologischen Einheit (vgl. Tab. 2) Dichtewerte vor, daher wurde die Lithologie für die Zuordnung der Dichtewerte aus verschiedenen Quellen in Tab. 28 vereinfacht angesetzt. Die verwendeten Werte sind an Bohrkernen aus den Bohrungen Beznau und Benken in der Nordschweiz sowie im Rahmen des Projektes „Erkennen und Quantifizieren von Strömung: Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des tiefen Untergrundes in Deutschland“ (CLAUSER et al. 2002, RATH & CLAUSER 2005) an Bohrkernen aus Gebiet des süddeutschen Molassebeckens bestimmt worden. Für Modelleinheiten, für die aus dem Gebiet des Süddeutschen Molassebeckens bzw. der Nordschweiz keine Werte aus der Literatur bekannt sind, können die von WOHLLENBERG (1982) bzw. von PRINZ (1991) und DACHROTH (2002) kompilierten Gesteinsdichtewerte für die entsprechenden Sedimentgesteine verwendet werden.



Tab. 28: Korndichten der Modelleinheiten des Nebengebirges aus verschiedenen Quellen

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Vereinfachte Lithologie	Korndichte [kg·m <sup>-3</sup> ]	Literatur
q	quartäre Lockersedimente	Sand	2650**	PRINZ (1991)
tms	Untere Süßwassermolasse	Tonstein, Kalkstein	2618 – 2887*	RATH & CLAUSER (2005)
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein	2700 – 2800**	PRINZ (1991)
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein	2700 – 2800**	PRINZ (1991)
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein	2695*	NAGRA (2001)
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonstein	2764*	NAGRA (2001)
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	Sandstein	2803*	NAGRA (2001)
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	Tonstein	siehe Tab. 26	
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalimergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonstein	2713 – 2779*	NAGRA (2001)
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pylonotenton-Fm.	Sandstein	2600 – 2750**	PRINZ (1991)
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein	2820*	NAGRA (2001)
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein	2771*	NAGRA (2001)
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Sandstein, Tonstein	2721 – 2851*	NAGRA (2001)
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	2837*	NAGRA (2001)
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydritstein	2717*	NAGRA (2001)
m1	Eschenbach-Fm.	Sandstein	2600 – 2750**	PRINZ (1991)
* Werte für Nebengesteine des Opalinustons in der Nordschweiz; ** allgemeine Werte, da Daten für Nebengesteine des Opalinustons in der Nordschweiz nicht vorhanden				

Tab. 29: Gesteinsdichtewerte der Modelleinheiten des Nebengebirges aus verschiedenen Quellen

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Vereinfachte Lithologie	Gesteinsdichte [kg·m <sup>-3</sup> ]	Literatur
q	quartäre Lockersedimente	Sand	1400 – 2000	WOHLENBERG (1982)
tms	Untere Süßwassermolasse	Tonstein, Kalkstein	2618 – 2887	RATH & CLAUSER (2005)
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein	2300 – 3000	WOHLENBERG (1982)
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein	2300 – 3000	WOHLENBERG (1982)
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein	2604	NAGRA (2001)
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonstein	2490	NAGRA (2001)
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	Sandstein	2549	NAGRA (2001)
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	Tonstein	siehe Tab. 26	
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalimergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonstein	2407 – 2653	NAGRA (2001)
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pylonotenton-Fm.	Sandstein	2100 – 2900	WOHLENBERG (1982)
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein	2396	NAGRA (2001)
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein	2754	NAGRA (2001)
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Sandstein, Tonstein	2333 – 2507	NAGRA (2001)
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	2144 – 2665	NAGRA (2001)
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydritstein	2628	NAGRA (2001)
m1	Eschenbach-Fm.	Sandstein	2100 – 2900	WOHLENBERG (1982)

## 6.2 Porosität

Die Porosität ist das Verhältnis von Hohlraumvolumen zum Gesamtvolumen. Die effektive Porosität bezeichnet den Anteil der miteinander verbundenen und damit einen hydraulischen Transport von Fluiden zulassenden Poren. Sie stellt somit die für Strömungs- und Transportprozesse relevante Größe dar.

### 6.2.1 Porositäten für das Wirtsgestein (Opalinuston)

In Tongesteinen (vgl. dazu NAGRA 2002a: 236-242) lassen sich in Abhängigkeit von der Untersuchungsmethode drei prinzipielle Porositätstypen unterscheiden: die physikalische bzw. Gesamtporosität, die effektive bzw. Transportporosität und die geochemische Porosität. Von der Definition her identisch mit der geochemischen Porosität ist die Diffusionsporosität. Die physikalische Porosität ist der Anteil eines Gesteins, welcher nicht durch Minerale (und organische Komponenten) eingenommen wird.

Bei der Diffusionsporosität handelt es sich um den für gelöste Stoffe diffusiv zugänglichen Anteil des Porenraums am Gesamtvolumen der Probe. Die Diffusionsporosität wird durch Diffusionsexperimente bestimmt, ihr Wert ist von der Art des gelösten Stoffs abhängig (NAGRA 2002: 237). Bei der geochemischen Porosität handelt es sich um das Verhältnis des Porenraums mit einer gelösten Spezies zum totalen Volumen der Probe. Die geochemische Porosität wird von der Ionenstärke des Porenwassers und der Porenstruktur beeinflusst und beschreibt die Veränderungen in Stoffkonzentrationen als Resultat von Wasser-Gesteins-Wechselwirkungen und Transportprozessen (vgl. PEARSON 1998 und PEARSON 1999).

Der größte Teil der Porenräume im Opalinuston der Bohrung Benken ist weder im Dünnschliff noch im REM erkennbar, so dass die Porengrößen größtenteils deutlich unter 1  $\mu\text{m}$  liegen müssen. In NAGRA (2002) wird ausgeführt, dass – abgeleitet aus Stickstoff- und Wasserisothermen – der Porenraum des Opalinustons in Benken zu ca. 20 % aus Mikroporen (äquivalenter Porenradius  $r_{\text{eq}} < 1 \text{ nm}$ ), zu ca. 50 % – 60 % aus Mesoporen ( $1 \text{ nm} \leq r_{\text{eq}} < 25 \text{ nm}$ ) und zu ca. 20 % – 30 % aus Makroporen ( $r_{\text{eq}} \geq 25 \text{ nm}$ ) besteht. HOUBEN (2013) hat gezeigt, dass in der tonigen Fazies von Mont Terri Poren mit Radien  $< 100 \text{ nm}$  signifikant zur totalen Porosität beitragen. Ihren Daten aus der Hg-Injektions-Porosimetrie zufolge weisen die häufigsten Porenradien in der tonigen Fazies des Opalinustons von Mont Terri Werte zwischen 1 nm und 25 nm auf.

In einer internationalen Laborvergleichsstudie (MAZUREK 1999) wurden Porositäten des Opalinustons von Mont Terri ermittelt. Die dabei verwendeten Messverfahren sind in Tab. 30 aufgeführt.

Tab. 30: Bandbreiten von Porositäten des Opalinustons aus Mont Terri, ermittelt mit verschiedenen Methoden in unterschiedlichen Laboren (aus: MAZUREK 1999)

Methode	Beschreibung	Bandbreite [Vol.-%]	Anzahl Analysen
Hg-Injektion	Messung des Volumens an Hg, welches in die Gesteinsprobe bei 4 kbar Injektionsdruck injiziert wird	5,1 – 10,2	11
He-Pyknometrie	Messung des durch Heliumgas gefüllten Porenraumvolumens von getrockneten Proben	7,6 – 16,1	10
Gravimetrie	Gewichtsverlust durch Evaporation von Porenwasser bei 24 °C – 38 °C und geringer Luftfeuchte	11,5 – 15,3	7
Gravimetrie	Gewichtsverlust durch Evaporation von Porenwasser bei 40 °C und geringer Luftfeuchte	12,7 – 19,1	14
Gravimetrie	Gewichtsverlust durch Evaporation von Porenwasser bei 105 °C und geringer Luftfeuchte	12,5 – 18,5	12
Berechnung	aus Gesamtdichte, mineralogischer Zusammensetzung sowie aus Literaturwerten für die Dichte der Minerale	14,6 – 15,1	4
geochemische Porosität	berechnet aus dem Cl-Gehalt des Porenwassers und des Gesamtgesteins	5,3 – 10,8	12

Es zeigt sich, dass gravimetrische Methoden und He-Pyknometrie zu ähnlichen Werten und Bandbreiten führen, wohingegen die Methode der Hg-Injektion geringere Werte ergibt, deren Bereiche sich aber z. T. überlappen. Dieses Phänomen ist darauf zurückzuführen, dass Hg bei einem maximalen Injektionsdruck von 4 kbar lediglich in Poren mit Radien > 4 nm eintritt, während kleinere Poren mit dieser Methode nicht erreicht werden.

Die geochemische Porosität ist ebenfalls geringer als die physikalische Porosität. Das bedeutet, dass das im Porenraum anwesende Wasser z. T. an den Mineraloberflächen sorbiert ist und deshalb nicht die freie Wasserporosität repräsentiert, in welcher der Lösungstransport stattfindet.

Tab. 30 enthält am Opalinuston von Mont Terri ermittelte Porositäten. In Tab. 31 sind unterschiedliche Porositäten für den Opalinuston aus der Bohrung Benken zusammengestellt. Aufgrund der ähnlichen Tiefenlage des Opalinustons in dieser Bohrung und der im Referenzprofil SÜD können diese Werte als Referenzwerte für die Modelleinheit jm1 übertragen werden.

Tab. 31: Mit unterschiedlichen Methoden und in Laboren der Universitäten Newcastle und Leeds ermittelte Porositätswerte der Gesteine aus der Bohrung Benken (Daten aus: NAGRA 2001)

	Pyknometer-Porosität [Vol.-%]	effektive Porosität [Vol.-%]		Porosität aus Wassergehalt [Vol.-%]	
		Labor Newcastle	Labor Newcastle	Labor Leeds	Trocknung bei 20 °C
<b>Opalinuston</b>	10,4	7,6	6,0	–	–
	7,4	5,2		3,3	5,5
	11,5	7,3	4,5	–	–
	8,8	5,5	6,5	–	–
	10,8	8,3	–	–	–
	13,1	9,8	6,3		
	12,5	8,3	5,9	10,5	12,6
	10,0	7,4			
	12,4	8,6	5,0	11,9	12,4
<b>Mittelwert Opalinuston</b>	10,8	7,7	5,8	8,8	10,8

### 6.2.2 Porositäten für das Nebengebirge

Porositätswerte, die auf die stratigraphischen Einheiten des Nebengebirges übertragen werden können, wurden hauptsächlich durch Bohrungen für die KW-Industrie oder bei Geothermie-Bohrungen erhoben. Bei den aus der KW-Industrie stammenden Daten wird bei der Verwendung des Begriffs „Porosität“ zwischen Gesamtporosität und effektiver Porosität unterschieden. Die effektive Porosität entspricht dabei dem Anteil des hydraulisch aktiven Porenvolumens, während die Gesamtporosität zusätzlich noch isolierte Hohlraumanteile im Gestein berücksichtigt. Die effektive Porosität wird in der KW-Industrie meist über Sättigung und Wägung einer Kernprobe bestimmt. Der Begriff Porosität bezieht sich bei JODOCY & STÖBER (2011) immer auf den Parameter der effektiven Porosität.

In Tab. 32 sind Porositätswerte aus der Literatur kompiliert, die dem Nebengebirge des Referenzprofils SÜD und somit den Modelleinheiten zugewiesen wurden.

Tab. 32: Aus verschiedenen Quellen übertragene effektive Porositäten für das Nebengebirge

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	effektive Porosität [%]	Literatur
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese	10 – 15, vereinzelt > 15	PLUM et al. (2008)
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein /wechselnde Anteile von Kalk und Ton), Kalkstein	3 – 18	JODOCY & STOBER (2011)
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein, Mergelstein	–	–
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein, Dolomitstein	12	JODOCY & STOBER (2011)
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein, Kalkmergelstein, Mergelstein	–	–
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen	–	–
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein	12 – 14	RVBO/LGRB (2005)
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	Tongestein	–	–
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalmergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein	–	–
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pylonotenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen	–	–
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonatkonkretionen	13,6	JODOCY & STOBER (2011) (Median O. und Mi. Keuper)
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tongestein	10 – 20	FEHN et al. (2010): Tab. 6.1
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	12 – 28	LBEG (2007)
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	11 – 18	FEHN et al. (2010): Tab. 6.1
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen	–	–
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein	7 – 14	FEHN et al. (2010): Tab. 6.1

Für die Gesteinsschichten, für die keine übertragbaren Werte gefunden wurden, können die in Tab. 33 aufgelisteten typischen, effektiven Porositäten als Bandbreite verwendet werden. Allerdings wird die Porosität auch von der Versenkungstiefe (Verkleinerung des Porenraumvolumens durch Diagenese) beeinflusst. Außerdem ist bei allen Festgesteinen, insbesondere bei Kalksteinen, der Anteil der Kluftporosität extrem variabel.

Tab. 33: Effektive Porositäten verschiedener Sedimentgesteine

Gestein	Lokalität	effektive Porosität [%]		Literatur
		Min – Max	MW	
Sandstein	Berriasium-Valanginium im Zentralteil des Niedersächsischen Beckens	20 – 30	25	LARUE (2010)
Kalkstein	Riffkalke (Kelheimer Kalkstein)	3 – 10	6	GRUNENBERG (2004)
	Bankkalke (Treuchtingen und Eichstädt): hier Gesamtporosität!	4 – 5		
	unterer Muschelkalk Weferlinger Triasplatte	3 – 10		LANGKUTSCH et al. (1998)
Mergel und mergelige Tonsteine	Apt-Cenoman im Zentralteil des Niedersächsischen Beckens	10 – 20	14	LARUE (2010)
Ton- und Mergelsteine		0 – 13		MATTHESS & UBELL (1983)
Tonstein	Unterkreidetonsteine Hauterivium-Aptium im Zentralteil des Niedersächsischen Beckens	7 – 12	10	LARUE (2010)
Ton- und Schluffstein	Berriasium-Valanginium im Zentralteil des Niedersächsischen Beckens		10	LARUE (2010)
Anhydrit mit Ton- und Karbonateinschlüssen	Allertalzone	1 – 5		LANGKUTSCH et al. (1998)
lockere Sande und Kiese		15 – 25		PRINZ (1991)
Psephite und Psammite		0 – 32		MATTHESS & UBELL (1983)

### 6.3 Permeabilität, Durchlässigkeitsbeiwert und Transmissivität

Die intrinsische Permeabilität ist in der Strömungsmechanik ein Maß zur Quantifizierung der Durchlässigkeit poröser Medien für Flüssigkeiten oder Gase (Wasser, Erdöl, Erdgas) und prinzipiell unabhängig vom durchströmenden Fluid.

Der Durchlässigkeitsbeiwert ( $k_f$ -Wert) (auch hydraulische Leitfähigkeit, Filtrationskoeffizient oder gesättigte Wasserleitfähigkeit) steht mit der Permeabilität in engem Zusammenhang. Er stellt einen Wert dar, der die Durchlässigkeit von Boden oder Fels für Wasser quantifiziert.

Die Transmissivität ergibt sich als Produkt aus Durchlässigkeitsbeiwert und Mächtigkeit der wasserführenden Schicht (Aquifer).

### 6.3.1 Durchlässigkeitswerte für das Wirtsgestein (Opalinuston)

Permeabilitäts-, Transmissivitäts- und  $k_f$ -Werte für den Opalinuston aus unterschiedlichen Lokalitäten sind in Tab. 34 zusammengestellt.

Tab. 34: Hydraulische Durchlässigkeiten und Transmissivitäten für den Opalinuston, ermittelt über Packertests. Zur Lage der Packertest-Intervalle in der Bohrung Benken vgl. NAGRA (2001: 203).

Lokalität	Teufe [m]	Durchlässigkeitsbeiwert ( $k_f$ -Wert) [ $m \cdot s^{-1}$ ]			Transmissivität [ $m^2 \cdot s^{-1}$ ]			spezif. Speicherkoeffizient [ $m^{-1}$ ]		Literatur
		Min	Max	BE	Min	Max	BE	Min	Max	
Bohrung Benken	521,92	$1,0 \cdot 10^{-12}$	$5,8 \cdot 10^{-12}$	$2,1 \cdot 10^{-12}$	$5,1 \cdot 10^{-11}$	$3,0 \cdot 10^{-10}$	$1,1 \cdot 10^{-10}$	–	–	1
	581,48	$3,1 \cdot 10^{-15}$	$3,1 \cdot 10^{-14}$	$1,3 \cdot 10^{-14}$	$9,3 \cdot 10^{-14}$	$9,3 \cdot 10^{-13}$	$3,9 \cdot 10^{-13}$	$1 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-5}$	1
	601,76	$1,0 \cdot 10^{-15}$	$3,2 \cdot 10^{-14}$	$1,2 \cdot 10^{-14}$	$3,4 \cdot 10^{-15}$	$1,1 \cdot 10^{-13}$	$4,1 \cdot 10^{-14}$			1
	614,37	$4,4 \cdot 10^{-14}$	$6,5 \cdot 10^{-14}$	$5,8 \cdot 10^{-14}$	$8,1 \cdot 10^{-13}$	$1,2 \cdot 10^{-12}$	$1,1 \cdot 10^{-12}$			1
	639,71	$2,0 \cdot 10^{-14}$	$1,4 \cdot 10^{-13}$	$3,7 \cdot 10^{-14}$	$6,4 \cdot 10^{-13}$	$4,5 \cdot 10^{-12}$	$1,2 \cdot 10^{-12}$			1
–	–	–	–	–	–	–	–			–
Mont Terri	sandige Fazies	$2 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-13}$	–	–	–	–	–	–	2
	tonige Fazies	$2 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-12}$	–	–	–	–	$3 \cdot 10^{-7}$	$3 \cdot 10^{-5}$	2
	S-Proben ( $\perp$ ) <sup>1)</sup>	$6 \cdot 10^{-14}$	$1,2 \cdot 10^{-13}$	–	–	–	–	–	–	3
	Z-Proben ( $\angle$ ) <sup>1)</sup>	$1 \cdot 10^{-13}$	$2 \cdot 10^{-13}$	–	–	–	–	–	–	3
	isotrop, tonige F. <sup>1)</sup>	$2 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-12}$	–	–	–	–	–	–	3
	isotrop (i, n=19)	–	–	$2 \cdot 10^{-13}$	–	–	–	–	–	3
	S-Proben ( $\perp$ , n=2) <sup>2)</sup>	$6 \cdot 10^{-14}$	$7 \cdot 10^{-14}$	–	–	–	–	–	–	3
	P-Proben ( $\parallel$ , n=2) <sup>2)</sup>	$1,3 \cdot 10^{-13}$	$2,0 \cdot 10^{-13}$	–	–	–	–	–	–	3
Z-Proben ( $\angle$ , n=0)	–	–	–	–	–	–	–	–	3	

1 - NAGRA (2001: 200), 2 - MARSCHALL et al. (2003: 58), 3 - BOCK (2009)  
 BE = best estimate  
<sup>1)</sup> Werte entstammen Kompilationen aus „zahllosen“ Daten  
<sup>2)</sup> Das Anisotropieverhältnis des Durchlässigkeitsbeiwertes von Mont Terri beträgt 2,17 – 2,86



Im Bereich des Ausstrichs des Opalinustons am Nordrand der Schwäbischen Alb haben HEKEL (1992) und HEKEL (1994) entsprechende Werte für ein „Hydrogeologisches Normalprofil“ des Opalinustons aufgestellt. Dort wurden eine Verwitterungszone und eine unverwitterte Zone ausgehalten. Der Vergleich mit den in wesentlich größeren Tiefen ermittelten Durchlässigkeitswerten für den Opalinuston aus der Bohrung Benken sowie aus Mont Terri zeigt, dass die hydraulischen Durchlässigkeiten im ungestörten, aber oberflächennahen Opalinuston um eine bis zwei Zehnerpotenzen über den hydraulischen Durchlässigkeiten der schweizerischen Lokaltäten liegen. Daher sind die Werte aus dem „Hydrogeologischen Normalprofil“ nicht auf das Referenzprofil SÜD übertragbar, in dem das Wirtsgestein ebenfalls in Tiefen unter 600 m u. GOK liegt.

### 6.3.2 Durchlässigkeitswerte für das Nebengebirge

Die Modelleinheiten des Nebengebirges wurden in REINHOLD et al. (2016) anhand der Klassifizierung nach GRIMMELMANN et al. (1997) in Grundwasserleiter (GWL) und Grundwassergeringleiter (GGL) gegliedert und jeder Einheit hydraulische Eigenschaften mit charakteristischen  $k_f$ -Werten zugewiesen (Tab. 35).

Tab. 35: Zusammenstellung der hydraulischen Eigenschaften mit  $k_f$ -Werten der Modelleinheiten im Referenzprofil SÜD (nach: REINHOLD et al. 2016)

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Aquifer-Typ	Durchlässigkeitseinstufung und $k_f$ -Wert [ $m \cdot s^{-1}$ ]
q	quartäre Lockersedimente	Poren-GWL	hohe Durchlässigkeit, > $10^{-3}$ – $10^{-2}$
tms	Untere Süßwassermolasse	Poren-GGL	geringe Durchlässigkeit, > $10^{-7}$ – $10^{-5}$
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kluft-GWL	mäßige Durchlässigkeit, > $10^{-5}$ – $10^{-4}$
jo2	Massenkalk-Fm.	Karst-GWL (Karst, Kluft, Poren)	hohe Durchlässigkeit, > $10^{-3}$ – $10^{-2}$
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kluft-GGL	geringe Durchlässigkeit, > $10^{-7}$ – $10^{-5}$
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	GGL	außerordentlich geringe Durchlässigkeit, < $10^{-10}$
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	GGL	geringe Durchlässigkeit, > $10^{-7}$ – $10^{-5}$
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	GGL	außerordentlich geringe Durchlässigkeit, < $10^{-10}$
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalismergel-Fm. Obtususton-Fm.	GGL	außerordentlich geringe Durchlässigkeit, < $10^{-10}$

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Aquifer-Typ	Durchlässigkeitseinstufung und $k_f$ -Wert [ $m \cdot s^{-1}$ ]
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pylonotenton-Fm.	GGL	geringe Durchlässigkeit, > $10^{-7}$ – $10^{-5}$
k3	Trossingen-Fm.	GGL	außerordentlich geringe Durchlässigkeit, < $10^{-10}$
k2	Löwenstein-Fm.	Poren-, Kluft-GWL	mäßige Durchlässigkeit, > $10^{-5}$ – $10^{-4}$
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Poren-GGL	sehr geringe Durchlässigkeit, > $10^{-9}$ – $10^{-7}$
m3	Rottweil-Fm.	Kluft-, Poren-GGL	geringe Durchlässigkeit, > $10^{-7}$ – $10^{-5}$
m2	Mittlerer Muschelkalk	GGL	sehr geringe Durchlässigkeit, > $10^{-9}$ – $10^{-7}$
m1	Eschenbach-Fm.	Kluft-, Poren-GGL	geringe Durchlässigkeit, > $10^{-7}$ – $10^{-5}$

GWL = Grundwasserleiter; GGL = Grundwassergeringleiter

### 6.3.3 Parameter zur Beschreibung von Zweiphasenfluss im Wirtsgestein

Üblicherweise werden Zweiphasenflussprozesse im Porenraum eines Gesteinskörpers als Verdrängung des Porenwassers durch die Gasphase unter dem Einfluss viskocapillarer Kräfte beschrieben. Dabei verhält sich das Gestein beim Durchgang der Gasphase wie ein linear elastisches poröses Medium. Bestimmender Faktor für die Zweiphasenflusseigenschaften des Mediums ist der Gaseindringdruck  $p_{ae}$  (kapillarer Schwellendruck). Er stellt den Differenzdruck zwischen dem Gas und dem Porenwasser dar, der zur Verdrängung des Porenwassers aus dem ursprünglich voll gesättigten Medium aufgewendet werden muss. Für den Opalinuston ergibt sich anhand der Porenverteilung (vgl. Kapitel 7.2.1) ein äquivalenter Porenradius von 25 nm (Übergang Mesoporen/Makroporen) und daraus ein Gaseindringdruck von ca. 6 MPa. Nach Überschreiten des Gaseindringdrucks wird die Gasmobilität vor allem durch die intrinsische Permeabilität des Gesteins, die Permeabilitäts-Sättigungsbeziehung und die Kapillardruck-Sättigungsbeziehung bestimmt (NAGRA 2002). Der funktionale Zusammenhang zwischen Porenwassersättigung und Kapillardruck wird von VAN GENUCHTEN (1980) durch ein Modell beschrieben, dessen charakteristisches Merkmal der verschwindende Kapillardruck bei vollständiger Porenwassersättigung ist. Die relativen Permeabilitäten von Gas und Wasser können mit dem Ansatz nach MUALEM (1976) beschrieben werden. Beide Modelle/Ansätze wurden von der NAGRA bei den Betrachtungen zum Gastransport im Wirtsgestein verwendet. Für die Ausbreitung der Korrosions- und Degradationsgase im Wirtsgestein ist der Prozess der Porenwasserverdrängung durch die Gasphase entscheidend, weswegen die experimentelle Bestimmung der Zweiphasenflussparameter meist durch Einpressen einer Gasphase in das ursprünglich wassergesättigte Gestein erfolgt (NAGRA 2002).

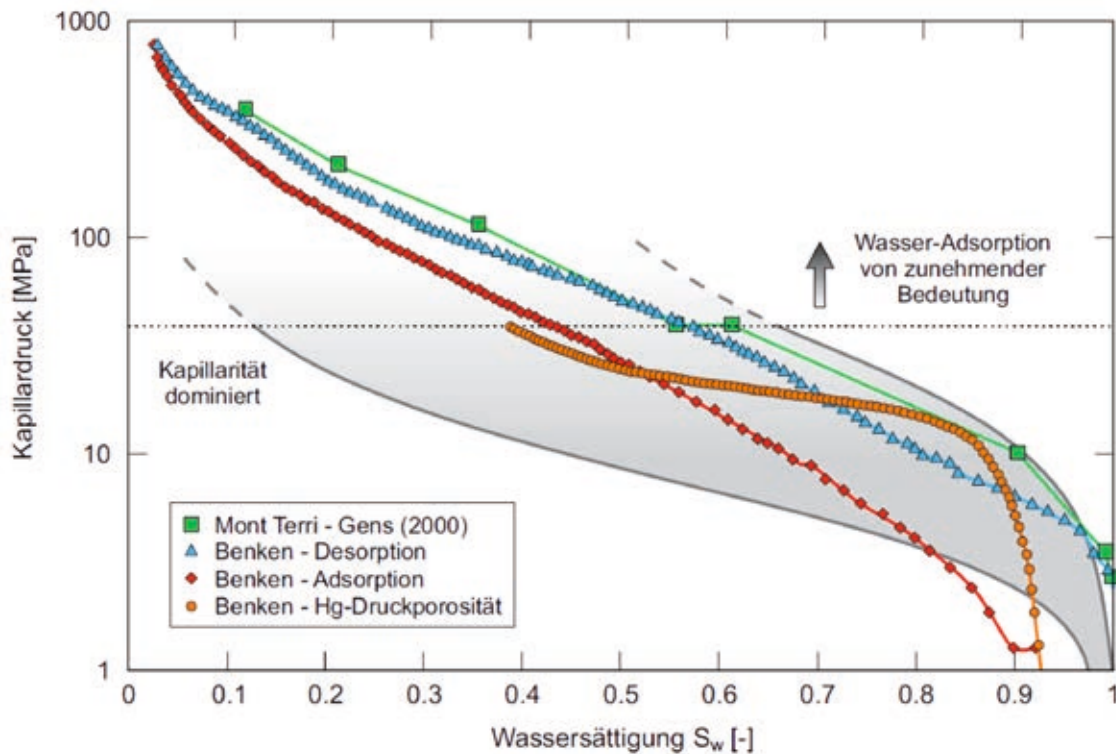


Abb. 4: Kapillardruck-Sättigungsbeziehung (Bohrung Benken und Felslabor Mont Terri). Die Kapillardruck-Sättigungsbeziehung wurde aus Hg-Porosimetrie sowie aus Ad- und Desorptionsisothermen von Wasser an einer Probe aus 590,3 m Tiefe der Bohrung Benken (GIMMI 2003) abgeleitet. Die Saugspannungsmessungen erfolgten an Gesteinsproben aus dem Felslabor Mont Terri (GENS 2000). In grauer Farbe unterlegt ist die Bandbreite der für das schweizerische Wirtsgestein im Zürcher Weinland empfohlenen Kapillardruck-Sättigungsbeziehung auf der Basis des van-Genuchten-Parametermodells (aus: NAGRA 2002: 348).

Bei Laborexperimenten zur Bestimmung der Kapillardruck-Sättigungsbeziehung des Opalinustons wurden für Benken (Probe aus 590,3 m Tiefe) die Ad- und Desorptionsisothermen von Wasser bestimmt (GIMMI 2003), da sich diese auch direkt als Kapillardruck-Sättigungsbeziehungen interpretieren lassen. Die so ermittelten Kapillardruck-Sättigungsbeziehungen werden in Abb. 4 gezeigt. Der Verlauf der Ad- und Desorptionsdaten lässt sich mit dem Modell nach Van Genuchten beschreiben. Die ermittelten Parameterwerte für die Desorption und für die Adsorption sind in Tab. 36 zusammengestellt. Die maximale Sättigung bei der Adsorption beträgt 95 % von der der Desorption. Der Wert von  $\alpha^{-1}$  gibt ungefähr den Bereich an, in dem eine deutliche Entwässerung eintritt. Die von GENS (2000) durchgeführten Kapillardruck-Sättigungsmessungen an Probenmaterial aus Mont Terri führten zu Ergebnissen, die mit den Desorptionskurven des Probenmaterials aus Benken vergleichbar sind (Abb. 4).

Tab. 36: Zweiphasenflussparameter für den Opalinuston aus nordschweizerischen Lokalitäten (aus: NAGRA 2002)

	Benken Desorption	Benken Adsorption	Mont Terri	Empfehlungen Wirtsgestein Opalinuston Schweiz (NAGRA 2002)
$\alpha^{-1}$ = scheinbarer Gaseindringdruck [MPa]	15	7	21	$5 \leq \alpha^{-1} \leq 21$
n = Formfaktor [-]	1,6	1,5	1,7	$1,5 \leq n \leq 2,0$
$S_{wr}$ = residuale Porenwassersättigung [-]	–	–	–	$0 \leq S_{wr} \leq 0,5$
$S_{gr}$ = residuale Gassättigung [-]	–	–	–	$0 \leq S_{gr} \leq 0,05$

Die direkten Messungen der Kapillardruck-Sättigungsbeziehung, aber auch Modellierungen von Labor- und In-Situ-Gaspermeabilitätstests, bestätigen die Verwendbarkeit des Parametermodells nach Van Genuchten. Die relativ große Bandbreite der ermittelten Parameter (vgl. den grau dargestellten Bereich in Abb. 4) ist v. a. auf die beobachtete Korrelation zwischen Gaseintrittsdruck und intrinsischer Permeabilität zurückzuführen. Auf der Grundlage dieser Untersuchungen empfahl die NAGRA (2002) für das Wirtsgestein Opalinuston in der Schweiz die in Tab. 36 zusammengestellten Zweiphasenflussparameter. Diese werden auch auf das Wirtsgestein im Referenzprofil SÜD übertragen.

#### 6.4 Thermische Parameter

In diesem Kapitel werden die Parameter spezifische Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit und Wärmeausdehnung für die Modelleinheiten des Wirtsgesteins und des Nebengebirges behandelt. Die Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit des Opalinustons (Wirtsgestein) wird in BUNTEBARTH (2004) behandelt. Weitere Informationen zu thermischen Parametern – auch für Schichten des Nebengebirges wie Temperaturleitfähigkeit, spezifische volumenbezogene Wärmekapazität (inklusive Temperaturabhängigkeit), der Wärmeleitfähigkeit sowie deren Anisotropie der Temperaturabhängigkeit – sind in CLAUSER et al. (2002), RATH & CLAUSER (2005) und ČERMÁK & RYBACH (1982) zu finden.

### 6.4.1 Spezifische Wärmekapazität für das Wirtsgestein (Opalinuston)

Die Wärmekapazität eines Körpers gibt an, wie viel thermische Energie der Körper bezogen auf eine Temperaturänderung aufnimmt oder abgibt. Die spezifische Wärmekapazität ist die auf die Masse des Körpers bezogene Wärmekapazität. Die umgesetzte Energie hängt im Allgemeinen von der Prozessführung bei der Temperaturänderung ab. Man unterscheidet daher zwischen der Wärmekapazität bei konstantem Druck  $c_p$  und der Wärmekapazität bei konstantem Volumen  $c_v$ . Abgesehen von Gasen ist der Unterschied aber meist vernachlässigbar. Aufgrund der sehr geringen Differenzen nimmt man bei Festkörpern  $c_p = c_v$  an.

Spezifische Wärmekapazitäten wurden im Rahmen der Erkundungsarbeiten der NAGRA an zehn Opalinuston-Proben aus der Bohrung Benken gemessen. Anschließend wurde aus den Wärmekapazitätswerten der Gesteinsmatrix die Wärmekapazitäten für wassergesättigte Gesteinsproben errechnet, vgl. dazu Tab. 37. Der Mittelwert für die spezifische Wärmekapazität des wassergesättigten Opalinustons in der Bohrung Benken beträgt danach  $920 \pm 80 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ .

Während eines Erhitzerversuchs wurden am Opalinuston von Mont Terri (tonige Fazies) die in Tab. 37 angegebenen Wärmekapazitäten ermittelt. Als Referenzwert für einen trockenen Opalinuston wird für  $20 \text{ °C}$  eine spezifische Wärmekapazität von  $860 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1}$  angegeben WILEVEAU (2005). Die spezifische Wärmekapazität des Opalinustons von Mont Terri an Kernproben im Labor haben u. a. WEBER (1997) und KNILL (1998) (kompiliert in (BOSSART 2008)) sowie BUNTEBARTH (2004) bzw. WILEVEAU & ROTHFUCHS (2007) bestimmt.

Tab. 37: Spezifische Wärmekapazitäten [ $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ ] für den Opalinuston der Bohrung Benken und aus Mont Terri

Lokalität	Min	Max	MW $\pm 1\sigma$	Literatur
Bohrung Benken	$720 \pm 40$	$800 \pm 40$	$780 \pm 40$	NAGRA (2001)
Bohrung Benken, Opalinuston wassergesättigt (berechnet)	$880 \pm 80$	$940 \pm 80$	$920 \pm 80$	NAGRA (2001)
Mont Terri	970	1340	1155	BOSSART (2008)
Mont Terri, T = $20 \text{ °C}$	–	–	$1040 \pm 170$	BOCK (2009)
Mont Terri, T = $80 \text{ °C}$	–	–	$1380 \pm 10$	BOCK (2009)
Mont Terri	–	–	860	WILEVEAU (2005) (Referenzwert)

### 6.4.2 Spezifische Wärmekapazitäten für das Nebengebirge

Spezifische Wärmekapazitäten für die Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD können aus den Arbeiten von CLAUSER et al. (2002) und RATH & CLAUSER (2005) abgeleitet werden. Aufgrund der vergleichbaren Lithologie werden den Modelleinheiten jm3 und jo2 dieselben Werte zugewiesen wie den Modelleinheiten jo1 und jo3. Analog wird für die Modelleinheit ju1 dieselbe spezifische Wärmekapazität angenommen wie für die Modelleinheit jm2.

Tab. 38: Bandbreiten und Mittelwerte für die spezifische Wärmekapazität der Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Spezifische Wärmekapazität [J·kg <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> ]		
			Min	Max	MW
			CLAUSER et al. (2002)		RATH & CLAUSER (2005)
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese	950	1050	1050
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein (wechselnde Anteile von Kalk und Ton), Kalkstein	1020	1120	1120
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein, Mergelstein	–	–	860
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein, Dolomitstein	–	–	860 (in Analogie zu ME jo1 und jo3)
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein, Kalkmergelstein, Mergelstein	–	–	860
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen	–	–	860 (in Analogie zu ME jo1 und jo3)
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein	1000	1110	1000
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	Tongestein	siehe Tab. 37		
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalmergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein	840	920	840
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pylonotenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen	1000 (in Analogie zu ME jm2)	1100 (in Analogie zu ME jm2)	1000 (in Analogie zu ME jm2)
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonatkonkretionen	1020	1120	1020
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tongestein	1020	1120	1020

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Spezifische Wärmekapazität [J·kg <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> ]		
			Min	Max	MW
			CLAUSER et al. (2002)		RATH & CLAUSER (2005)
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	1020	1120	1020
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	1020	1120	1020
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen	1020	1120	1020
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein	1020	1120	1020

### 6.4.3 Wärmeleitfähigkeit für das Wirtsgestein (Opalinuston)

Die Wärmeleitfähigkeit ist eine lokale stoffspezifische physikalische Größe, die die Wärmeübertragung durch Wärmeleitung beschreibt. Sie ist prinzipiell eine anisotrope Materialeigenschaft und damit eine tensorielle Größe, kann also in unterschiedlichen Raumrichtungen unterschiedliche Werte annehmen. Der Opalinuston weist für die Wärmeleitfähigkeit eine ausgeprägte Anisotropie bezogen auf die Schichtung auf. Messungen senkrecht zur Schichtung ergeben Minimalwerte, Messungen parallel zur Schichtung Maximalwerte. Die Wärmeleitfähigkeit eines porösen Festkörpers hängt von dessen mineralogischer Zusammensetzung, Porosität, Porenfüllung (Fluid) sowie dem herrschenden Druck und der Temperatur ab.

Wärmeleitfähigkeiten des Opalinustons und des Nebengebirges in der Bohrung Beznau hat RYBACH (1984a) parallel und senkrecht zur Schichtung ermittelt. Für den Opalinuston wurden 26 Bohrkern über die gesamte, ca. 40 m umfassende Tiefe untersucht. Die Kerne befanden sich zum Zeitpunkt der Untersuchung in natürlichem, bergfeuchtem Zustand. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in Tab. 39 zusammengefasst.



Tab. 39: Statistische Parameter zu den Wärmeleitfähigkeiten  $\lambda$  (parallel und senkrecht zur Schichtung) des Opalinustons in der Bohrung Beznau (aus: RYBACH 1984a)

Teufe [m]	Wärmeleitfähigkeit $\lambda \pm 1\sigma$ [W·m <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> ]		Anisotropie- verhältnis $I_{\parallel}/I_{\perp}$	Teufe [m]	Wärmeleitfähigkeit $\lambda \pm 1\sigma$ [W·m <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> ]		Anisotropie- verhältnis $I_{\parallel}/I_{\perp}$
	Orientierung zur Schichtung				Orientierung zur Schichtung		
		⊥				⊥	
25,40	2,36 ± 0,28	1,54 ± 0,47	1,54	38,30	2,41 ± 0,19	1,45 ± 0,29	1,66
25,50	1,92 ± 0,13	1,36 ± 0,14	1,41	42,68	2,34 ± 0,07	1,50 ± 0,13	1,56
28,80	2,27 ± 0,04	1,35 ± 0,09	1,68	42,06	2,41 ± 0,24	1,84 ± 0,32	1,31
28,90	2,31 ± 0,23	1,16 ± 0,30	1,99	42,65	2,18 ± 0,20	1,43 ± 0,31	1,53
30,24	2,71 ± 0,03	2,24 ± 0,26	1,21	43,98	2,20 ± 0,14	1,73 ± 0,25	1,27
30,60	2,72 ± 0,42	1,72 ± 0,42	1,58	46,20	2,49 ± 0,14	1,22 ± 0,17	2,04
32,40	2,53 ± 0,07	1,93 ± 0,15	1,32	46,65	2,53 ± 0,11	1,24 ± 0,16	2,05
32,85	2,11 ± 0,29	1,71 ± 0,15	1,24	49,80	2,52 ± 0,04	1,16 ± 0,12	2,17
37,20	2,21 ± 0,19	1,22 ± 0,15	1,81	53,68	2,52 ± 0,10	1,03 ± 0,13	2,45
37,60	2,29 ± 0,16	1,21 ± 0,18	1,89	56,95	2,25 ± 0,27	1,15 ± 0,30	1,96
37,70	2,30 ± 0,38	1,71 ± 0,54	1,34	62,00	2,48 ± 0,16	1,05 ± 0,13	2,36
37,95	2,55 ± 0,39	1,68 ± 0,37	1,51	65,60	2,36 ± 0,15	1,25 ± 0,25	1,89
38,10	2,31 ± 0,19	1,22 ± 0,18	1,88	64,12	2,29 ± 0,21	1,18 ± 0,25	1,94

|| = parallel, ⊥ = senkrecht zur Schichtung

Zusätzlich zu den Untersuchungen mit natürlichem Wassergehalt wurden entsprechend zur Schichtung orientierte getrocknete Proben analysiert. Der Opalinuston zeigt dabei charakteristische Abhängigkeiten der Wärmeleitfähigkeit von Wassergehalt und mineralogischer Zusammensetzung und eine deutliche Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit (NAGRA 2001: 141, NAGRA 2002: 268ff.). Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in Tab. 40 zusammengestellt.

Quarzreicher Opalinuston aus Benken weist parallel zur Schichtung eine Wärmeleitfähigkeit von durchschnittlich 3,22 W·m<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>, senkrecht dazu von 1,70 W·m<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup> auf. Bei quarzärmerem Opalinuston aus einer Teufe von 642 m ist die Wärmeleitfähigkeit sowohl parallel zur Schichtung als auch senkrecht dazu signifikant geringer. Auch der trockene quarzreiche Opalinuston weist parallel und senkrecht zur Schichtung geringere Wärmeleitfähigkeiten auf als der feuchte quarzreiche Opalinuston. Die deutlich niedrigeren Werte für trockene Proben werden durch die unterschiedlichen Wärmeleitfähigkeiten von Luft mit 0,023 W·m<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup> und Wasser mit 0,59 W·m<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup> verursacht. Die Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit kann durch den Schichtaufbau der untersuchten Tongesteine erklärt werden. Parallel zu den Schichtflächen bestimmen quarzreiche Lagen mit hoher Wärmeleitfähigkeit von 7,7 W·m<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup> den Wärmefluss, während die Wärmeleitfähigkeit senkrecht zu den Schichtflächen von tonreichen Lagen mit wesentlich geringerer Wärmeleitfähigkeit von 1,7 – 3,4 W·m<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup> kontrolliert wird (ČERMÁK & RYBACH 1982). Die 30 – 40 % niedrigeren Wärmeleitfähigkeiten der Proben von der Basis des Opalinustons korrelieren mit der Abnahme des Quarzgehalts unterhalb von 625 m Tiefe (NAGRA 2001: 141). Die Wärmeleitfähigkeiten des Opalinustons

von Benken und von Mont Terri sind in Tab. 40 kompiliert. Aufgrund der ähnlichen Tiefenlage der Schichten können als Bandbreite für die Charakterisierung des Wirtsgesteins im Referenzprofil SÜD z. B. die Werte der Bohrung Benken, die an feuchten Proben ermittelt wurden, angesetzt werden. Allerdings dürfen dafür nur die an Proben mit Gehalten von 10 – 15 Gew.-% Quarz ermittelten Werte benutzt werden, weil nur diese der Zusammensetzung des Wirtsgesteins im Referenzprofil SÜD entsprechen (vgl. Tab. 8).

BUNTEBARTH (2004) untersuchte Opalinustonproben von Mont Terri unter einaxialem Druck von  $p = 2 \text{ MPa}$  und bei vier verschiedenen Temperaturen von  $30 \leq T \leq 145 \text{ °C}$ , so dass Aussagen zur Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Temperatur möglich sind. Während der Temperaturerhöhung nimmt  $\lambda$  zwar erwartungsgemäß ab, jedoch oberhalb von ca.  $110 \text{ °C}$  wieder zu. Dieser Effekt resultiert aus der Trocknung des Prüflings und dem Abklingen der in den Messdaten enthaltenen Effekte des gespeicherten Wassers, womit die reinen Matriceigenschaften wirksam werden. Die Wärmeleitfähigkeit wird charakteristischerweise von der mineralogischen Zusammensetzung der Probe beeinflusst, die in unterschiedlichen Korngrößenintervallen deutliche Unterschiede zeigt. Während die von BUNTEBARTH (2004) untersuchten tonigen Proben Wärmeleitfähigkeiten (gemessen im Winkel von  $45^\circ$  zur Schichtung) von  $1,29 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\text{K}^{-1}$  besitzen, weist ein karbonatischer Schluffstein aus Mont Terri einen erheblich höheren Wert von  $1,73 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\text{K}^{-1}$  auf. Er reflektiert die in diesem Korngrößenintervall andere mineralogische Zusammensetzung der Probe mit erhöhten Quarz- und Calcitgehalten, deren Wärmeleitfähigkeiten ( $\lambda_{\text{Quarz}} = 7,8 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\text{K}^{-1}$ ,  $\lambda_{\text{Calcit}} = 3,4 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\text{K}^{-1}$ ) erheblich höher sind als die der Tonminerale. Aus diesem Grund sind auch die Wärmeleitfähigkeiten der sandigen (karbonatischen) Fazies von Mont Terri größer als die der tonigen Fazies.

Tab. 40: Mittelwerte der linearen Wärmeleitfähigkeiten von verschiedenen Opalinuston-Proben aus der Bohrung Benken und Mont Terri

	Proben-zustand	Quarzgehalt [Gew.-%]	Anzahl der Messungen	Wärmeleitfähigkeit $\lambda$ [ $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\text{K}^{-1}$ ]		Anisotropie-verhältnis $\lambda_{  }/\lambda_{\perp}$	Literatur
				zur Schichtung	$\perp$ zur Schichtung		
Benken	feucht	20 – 25	3	$3,22 \pm 0,11$	$1,70 \pm 0,16$	1,89	NAGRA (2001)
Benken	trocken	20 – 25	2	$2,77 \pm 0,12$	$1,57 \pm 0,04$	1,76	
Benken	feucht	10 – 15	3	$2,04 \pm 0,23$	$1,26 \pm 0,11$	1,61	
Mont Terri	?	?	10 (  ), 9 ( $\perp$ )	$2,25 \pm 0,40$	$1,18 \pm 0,26$	1,91	BOCK (2009)
Mont Terri	?	?	?	2,1	1,2	1,75	BOSSART (2008)
Mont Terri	?	?	<sup>1)</sup>	1,75	0,83	2,11	BUNTEBARTH (2004)
Mont Terri	?	?	4 (  ), 4 ( $\perp$ )	2,1	1,0	2,1	JOBMANN et al. (2007a)

<sup>1)</sup> vier Messungen, Werte auf  $20 \text{ °C}$  extrapoliert. Wärmeleitfähigkeit im Winkel von  $45^\circ$  zur Schichtung:  $1,29 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\text{K}^{-1}$

#### 6.4.4 Wärmeleitfähigkeiten für das Nebengebirge

Wärmeleitfähigkeiten für die Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD können aus den Arbeiten von CLAUSER et al. (2002) und RATH & CLAUSER (2005) abgeleitet werden. Aufgrund der vergleichbaren Lithologie werden den Modelleinheiten jo3, jo2, jo1 und jm3 dieselben Werte zugewiesen. Analog dazu wird für die Modelleinheit ju1 dieselbe lineare Wärmeleitfähigkeit angenommen wie für die Modelleinheit jm2.

Tab. 41: Bandbreiten und Mittelwerte für die lineare Wärmeleitfähigkeit der Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Wärmeleitfähigkeit [ $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ ]		
			Min	Max	MW
			CLAUSER et al. (2002)		RATH & CLAUSER (2005)
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese	1,72	1,89	1,89
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein (wechselnde Anteile von Kalk und Ton), Kalkstein	2,88	3,01	3,01
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein, Mergelstein	–	–	3,00
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein, Dolomitstein	–	–	3,00 (in Analogie zu ME jo3)
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein, Kalkmergelstein, Mergelstein	–	–	3,00 (in Analogie zu ME jo3)
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen	–	–	3,00 (in Analogie zu ME jo3)
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein	2,61	2,89	2,61
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	Tongestein	siehe Tab. 40		
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalmergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein	2,26	2,5	2,38
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pylonotenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen	2,61 (in Analogie zu ME jm2)	2,89 (in Analogie zu ME jm2)	2,61 (in Analogie zu ME jm2)
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonatkonkretionen	–	–	2,34
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tongestein	–	–	2,34
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	≈ 4 Lit.: NAGRA (1988a)	5 Lit.: NAGRA (1988a)	

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Wärmeleitfähigkeit [ $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ]		
			Min	Max	MW
			CLAUSER et al. (2002)		RATH & CLAUSER (2005)
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	–	–	2,34
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen	≈ 4 Lit.: NAGRA (1988a)	5 Lit.: NAGRA (1988a)	
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein	–	–	2,34

#### 6.4.5 Wärmeausdehnungskoeffizient für das Wirtsgestein (Opalinuston)

Der Wärmeausdehnungskoeffizient  $\alpha$  ist ein Kennwert, der das Verhalten eines Stoffes bezüglich Veränderungen seiner Abmessungen bei Temperaturveränderungen beschreibt; und wird deswegen oft auch thermischer Ausdehnungskoeffizient genannt. Der hierfür verantwortliche Effekt ist die temperaturabhängige Änderung der Dichte. Da die Wärmeausdehnung bei vielen Stoffen nicht gleichmäßig über alle Temperaturbereiche erfolgt, ist auch der Wärmeausdehnungskoeffizient selbst temperaturabhängig und wird deshalb für eine bestimmte Bezugstemperatur oder einen bestimmten Temperaturbereich angegeben. Es wird zwischen dem thermischen Längenausdehnungskoeffizienten (linearer Wärmeausdehnungskoeffizient) und dem thermischen Raumausdehnungskoeffizienten (räumlicher Ausdehnungskoeffizient, Volumenausdehnungskoeffizient oder kubischer Ausdehnungskoeffizient) unterschieden.

Für isotrope Festkörper gilt, dass sich die Längenänderung in allen drei Raumrichtungen gleich verhält. Für isotrope Festkörper kann das Dreifache des Längenausdehnungskoeffizienten verwendet werden, um die Volumenausdehnung zu berechnen.

Der Opalinuston zeigt bezogen auf die Schichtung eine ausgeprägte Anisotropie des thermischen Ausdehnungskoeffizienten. Messungen senkrecht zur Schichtung ergeben Minimalwerte, Messungen parallel zur Schichtung Maximalwerte.

Von BOCK (2009) kompilierte Mittelwerte für den linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten des Opalinustons finden sich in Tab. 42. Die Annahme eines konstanten thermischen Expansionskoeffizienten gilt nur für Temperaturen unter  $\approx 40\text{ °C}$  (JOBMANN et al. 2007a).

Tab. 42: Am Opalinuston von Mont Terri durch Labortests und numerische Analysen bestimmte Mittelwerte für den linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten

Aufheizungs- pfad	Ausdehnungskoeffizient $\alpha$ [ $10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ]							Anisotropie- verhältnis $\alpha_{  }/\alpha_{\perp}$	Literatur
					⊥				
	n	Min	Max	MW $\pm 1\sigma$	n	MW $\pm 1\sigma$			
1. Aufheizung	28	–	–	14 $\pm$ 4	14	19 $\pm$ 1,1	0,74	BOCK (2009)	
Abkühlung	4	–	–	10 $\pm$ 2	2	25 $\pm$ 3	0,4	BOCK (2009)	
1. Aufheizung	–	–	–	34,7	–	–	–	GENS (2000)	
Abkühlung	–	–	–	26,5	–	–	–	GENS (2000)	
–	–	0,2	5,4	–	–	–	–	BUNTEBARTH (2004)	
–	–	1,5	10	4,2	–	–	–	BOSSART (2008)	
nur die Werte in der Zusammenstellung von BOCK (2009) wurden anisotrop betrachtet									

#### 6.4.6 Wärmeausdehnungskoeffizienten für das Nebengebirge

Wärmeausdehnungskoeffizienten aus Süddeutschland liegen für die Nebengebirgsschichten nicht vor. Daher wurde für die Charakterisierung des Referenzprofils SÜD auf Daten aus unterschiedlichen Quellen zurückgegriffen. Für Kalk- und Sandsteine liegen die Wärmeausdehnungskoeffizienten in einem engen Bereich zwischen  $5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  und  $25 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ . Da sich die thermische Längenänderung der Gesteine als Summe der Änderung aller Einzelkörner ergibt, muss das thermische Verhalten der Minerale betrachtet werden. In Tab. 43 sind auch die Ausdehnungskoeffizienten einzelner Minerale parallel und senkrecht zur kristallographischen Hauptachse angegeben. Nichtisotrope Minerale zeigen deutliche Ausdehnungsunterschiede parallel und senkrecht zu ihrer Hauptachse. So ist der Ausdehnungskoeffizient von Quarz senkrecht zur Hauptachse ca.  $1\frac{1}{2}$  mal so groß wie parallel dazu. Beim Calcit tritt bei Temperaturerhöhung eine relativ starke Ausdehnung in Richtung der Hauptachse auf; in den Richtungen senkrecht dazu findet dagegen Kontraktion statt. Geht man von einer statistisch gleichmäßigen Verteilung der Calcit- bzw. der Quarzkristalle in einem Gestein aus, ergibt sich jeweils ein Durchschnittswert von  $\approx 10 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ .

Tab. 43: Lineare thermische Ausdehnungskoeffizienten  $\alpha$  für verschiedene Gesteine und Minerale

Gestein/Mineral	T <sup>*)</sup> [°C]	Min – Max [10 <sup>-6</sup> K <sup>-1</sup> ]	MW ± 1 $\sigma$ [10 <sup>-6</sup> K <sup>-1</sup> ]	Literatur
sonstige Sandsteine	0 – 60	10,0 – 12,5	11,0	MÖLLER (1993)
Sandstein	?	–	(9,58 ± 0,94)	FHWA (2011)
Tonstein	?	–	(9,03 ± 0,56)	FHWA (2011)
Dolomit	20 – 60	⊥ 6,5 – 8,6	(7,75 ± 0,69)	HARVEY (1967)
		6,3 – 8,5	(7,44 ± 0,69)	
dolomitischer Kalkstein	20 – 60	⊥ 4,5 – 5,8	(5,13 ± 0,63)	
		4,1 – 5,2	(4,68 ± 0,44)	
Kalksteine mit $\alpha_{\perp} > \alpha_{\parallel}$	20 – 60	⊥ 1,8 – 5,8	(3,42 ± 1,09)	HARVEY (1967)
		1,1 – 5,2	(2,82 ± 1,29)	
Kalksteine mit $\alpha_{\parallel} > \alpha_{\perp}$	20 – 60	⊥ 2,9 – 4,1	(3,47 ± 0,36)	HARVEY (1967)
		3,2 – 4,1	(3,83 ± 0,28)	
Dolomit	?	–	(8,92 ± 0,73)	FHWA (2011)
Kalkstein	?	–	(7,80 ± 0,94)	FHWA (2011)
Kalkstein	20 – 100	4,2 – 22,0	–	KESSLER & SLIGH (1927)
Kalkstein	20 – 100	4 – 12	–	KOHLRAUSCH (1996)
Calcit ⊥ [zur Hauptachse]	20 – 100	–	-5,22	ROSENHOLTZ & SMITH (1949)
Calcit    [zur Hauptachse]	20 – 100	–	23,58	ROSENHOLTZ & SMITH (1949)
Quarz ⊥ [zur Hauptachse]	0 – 118	–	14,2	D'ANS & LAX (1998)
Quarz    [zur Hauptachse]	0 – 118	–	8,7	D'ANS & LAX (1998)
Quarzsand und -kies	?	9,9 – 12,8	–	ARA-ERES (2004)

\*) T = Temperaturintervall, in welchem die Längenausdehnung untersucht wurde

Die Ausdehnungskoeffizienten der tonmineralreichen Sandsteine sind deutlich niedriger als die der tonmineralfreien/-armen Sandsteine. Erklärt wird dies mit der Art der Kornbindung und dem Bindemittel. Ist das Korngerüst überwiegend durch Phasen- und atomare Kontakte (kieseliges Bindemittel) verbunden, wird die Ausdehnung der einzelnen Quarzkörner mit ihrem relativ hohen Ausdehnungskoeffizienten direkt an den Kornverband weitergegeben – das Resultat ist ein höherer Längenänderungskoeffizient für den reinen Quarzsandstein. Erfolgt die Bindung der Komponenten hingegen über tonige Zwischenlagen oder über eine tonige Matrix, so nimmt diese einen Teil der thermischen Dehnung auf. Der Ausdehnungskoeffizient dieser Gesteine ist damit niedriger. KOCHER (2005) untersuchte an verschiedenen Sandsteinen die Längenausdehnung auch parallel und senkrecht zur Schichtung. Die Ausdehnung ist in Richtung senkrecht zur Schichtung geringfügig größer oder in beiden Richtungen gleich. Beim Sandstein ist also eine ganz schwache Anisotropie des thermischen Ausdehnungskoeffizienten zu erkennen.

**Tab. 44: Bandbreiten und Mittelwerte für die linearen Wärmeausdehnungskoeffizienten der Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD**

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	linearer Wärmeausdehnungskoeffizient [ $10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ]	Literatur
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese	9,9 – 12,8	ARA-ERES (2004)
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein (wechselnde Anteile von Kalk und Ton), Kalkstein	7,80 ± 0,94 (Kalkstein) 9,03 ± 0,56 (Tonstein)	FHWA (2011)
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein, Mergelstein	7,80 ± 0,94 (Kalkstein)	FHWA (2011)
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein, Dolomitstein	7,80 ± 0,94 (Kalkstein) 8,92 ± 0,73 (Dolomit)	FHWA (2011)
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein, Kalkmergelstein, Mergelstein	7,80 ± 0,94 (Kalkstein) 9,03 ± 0,56 (Tonstein)	FHWA (2011)
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen	9,03 ± 0,56 (Tonstein)	FHWA (2011)
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein	9,58 ± 0,94 (Sandstein) 9,03 ± 0,56 (Tonstein)	FHWA (2011)
jm1	Opalinuston-Fm.	Tongestein	s. Kap. 8.4.5	
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalimergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein	9,03 ± 0,56 (Tonstein)	FHWA (2011)
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pilonotenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen	9,03 ± 0,56 (Tonstein) 9,58 ± 0,94 (Sandstein)	FHWA (2011)
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonatkonkretionen	7,80 ± 0,94 (Kalkstein) 9,03 ± 0,56 (Tonstein)	FHWA (2011)
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tongestein	9,58 ± 0,94 (Sandstein) 9,03 ± 0,56 (Tonstein)	FHWA (2011)
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	9,03 ± 0,56 (Tonstein) 9,58 ± 0,94 (Sandstein) 8,92 ± 0,73 (Dolomit)	FHWA (2011)
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	8,92 ± 0,73 (Dolomit)	FHWA (2011)
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen	9,03 ± 0,56 (Tonstein) 1,6 (Anhydrit)	FHWA (2011) NIPP & HEUSERMANN (2000)
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein	10,0 – 12,5	MÖLLER (1993)



## 6.5 Seismische Geschwindigkeiten

### 6.5.1 Seismische Geschwindigkeiten für das Wirtsgestein (Opalinuston)

In NAGRA (2001) wurden die Ergebnisse von Ultraschallmessungen an Kernen der Bohrung Benken zur Bestimmung der Geschwindigkeiten von P- und S-Wellen parallel, senkrecht und im Winkel von 45° zu den Schichtflächen zusammengestellt. Die Geschwindigkeiten zeigen hinsichtlich der Orientierung der Schichtflächen eine Anisotropie. In Tab. 45 sind Ergebnisse von Ultraschallmessungen am Opalinuston der Bohrung Benken und aus Mont Terri zusammengefasst.

Die von NAGRA (2001) kompilierten Geschwindigkeiten aus der Bohrung Benken werden auf den Opalinuston des Referenzprofils SÜD und die Standortmodelleinheit jm1 übertragen. Für die P-Wellen werden Bandbreiten für die Geschwindigkeiten von 3,28 – 4,57 km·s<sup>-1</sup> parallel zur Schichtung und 2,26 – 3,62 km·s<sup>-1</sup> senkrecht dazu, für die S-Wellen 1,90 – 2,54 km·s<sup>-1</sup> parallel zur Schichtung und 1,24 – 2,02 km·s<sup>-1</sup> senkrecht zur Schichtung angenommen.

Tab. 45: Am Opalinuston aus der Bohrung Benken sowie aus Mont Terri gemessene Ultraschallgeschwindigkeiten und zugehörige Parameter

Parameter	Orientierung zur Schichtung	Probenanzahl	Min	Max	MW ± 1σ	Literatur
<b>Bohrung Benken</b>						
Geschwindigkeit P-Welle [km·s <sup>-1</sup> ]		71	3,28	4,57	4,03 ± 0,07	NAGRA (2001)
	⊥	68	2,26	3,62	3,03 ± 0,26	
	∠	14	3,40	4,26	3,66 ± 0,30	
Geschwindigkeit S-Welle [km·s <sup>-1</sup> ]		71	1,90	2,54	2,28 ± 0,10	NAGRA (2001)
	⊥	68	1,24	2,02	1,71 ± 0,15	
	∠	14	1,87	2,37	2,03 ± 0,16	
<b>Mont Terri</b>						
Geschwindigkeit P-Welle [km·s <sup>-1</sup> ]		111	3,17	3,65	3,41 ± 0,24	BOSSART (2008)
	⊥	48	2,22	3,02	2,62 ± 0,4	
		88	–	–	3,34 ± 0,13	BOCK (2009)
	⊥	45	–	–	2,62 ± 0,13	
Geschwindigkeit S-Welle [km·s <sup>-1</sup> ]		111	1,84	2,08	1,96 ± 0,12	BOSSART (2008)
	⊥	33	1,26	1,76	1,51 ± 0,25	
		64	–	–	1,90 ± 0,10	BOCK (2009)
	⊥	30	–	–	1,52 ± 0,04	

### 6.5.2 Seismische Geschwindigkeiten für das Nebengebirge

Seismische Geschwindigkeiten der P- bzw. S-Wellen aus Süddeutschland liegen für die Nebengebirgsschichten nicht vor. Daher wurde für die Charakterisierung des Referenzprofils SÜD auf Daten aus unterschiedlichen, von GEBRANDE (1982a) kompilierten Quellen für verschiedene Sedimentgesteine zurückgegriffen (Tab. 46).

Tab. 46: Seismische Geschwindigkeiten (P- und S-Welle) verschiedener Sedimentgesteine bei Normaldruck/Zimmertemperatur. Angegeben sind auch die Gesteinsdichte und die zugehörigen 80%-Vertrauensintervalle (aus: GEBRANDE 1982a)

Gestein		n	$\rho \pm 1\sigma$ [kg·m <sup>-3</sup> ]	P-Welle $v_p \pm 1\sigma$ [m·s <sup>-1</sup> ]	80%-Vertrauens- grenzen $v_p$ [m·s <sup>-1</sup> ]	S-Welle $v_s \pm 1\sigma$ [m·s <sup>-1</sup> ]	80%-Vertrauens- grenzen $v_s$ [m·s <sup>-1</sup> ]
Sandsteine	–	21	2385 ± 210	3630 ± 650	2800 – 4460	–	–
	–	14	2320 ± 210	–	–	2260 ± 520	1590 – 2930
Kalksteine	–	26	2658 ± 90	5630 ± 580	4890 – 6370	3120 ± 450	2540 – 3700
Schluff- und Tonsteine		13	2683 ± 70	4730 ± 640	3910 – 5550	–	–
	⊥	13	2683 ± 70	4100 ± 990	2830 – 5370	–	–
Mer gel		8	2683 ± 40	5680 ± 400	5160 – 6200	–	–
	⊥	8	2683 ± 40	5410 ± 490	4780 – 6040	–	–
Tonschiefer		15	2755 ± 50	5910 ± 430	–	–	–
	⊥	15	2755 ± 50	5150 ± 790	–	–	–
Dolomite	–	10	2794 ± 80	5710 ± 620	4920 – 6500	3320 ± 330	2900 – 3740
Gips	–	–	2250	5450	–	–	–
Anhydrit	–	–	2900	5500	–	–	–

Diese Werte wurden auf die Modelleinheiten des Nebengebirges (Tab. 47) übertragen.

Tab. 47: Übertragene Werte für die Geschwindigkeiten der P- und S-Welle

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab.2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Geschwindigkeit [m·s <sup>-1</sup> ]	
			P-Welle	S-Welle
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese	keine Angaben vorhanden	
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein (wechselnde Anteile von Kalk und Ton), Kalkstein	5680 ± 400 ⊥ 5410 ± 490	keine Angaben vorhanden
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein, Mergelstein	5630 ± 580	3120 ± 450
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein, Dolomitstein	5630 ± 580	3120 ± 450
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein, Kalkmergelstein, Mergelstein	5630 ± 580	3120 ± 450
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen	5680 ± 400 ⊥ 5410 ± 490	keine Angaben vorhanden
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein	3630 ± 650	2260 ± 520
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	Tongestein	siehe Tab. 45	
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalmergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein	5680 ± 400 ⊥ 5410 ± 490	keine Angaben vorhanden
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Psilontenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen	3630 ± 650	2260 ± 520

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab.2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Geschwindigkeit [ $m \cdot s^{-1}$ ]	
			P-Welle	S-Welle
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonatkonkretionen	5680 ± 400 ⊥ 5410 ± 490	keine Angaben vorhanden
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tongestein	3630 ± 650	2260 ± 520
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	4730 ± 640 ⊥ 4100 ± 990	keine Angaben vorhanden
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	5710 ± 620	3320 ± 330
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen	5500	keine Angaben vorhanden
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein	3630 ± 650	2260 ± 520

## 7 Transportparameter

### 7.1 Diffusionskoeffizient und scheinbarer Diffusionskoeffizient

Der Diffusionskoeffizient, auch Diffusionskonstante oder Diffusivität genannt, dient in den Fickschen Gesetzen zur Berechnung der thermisch bedingten zufälligen Bewegung eines Teilchens in einem Gas oder einer Lösung. Der Diffusionskoeffizient ist daher ein Maß für die Beweglichkeit der Teilchen. Zur Angabe des Diffusionskoeffizienten gehört immer die Angabe, welcher Stoff in welchem Stoff diffundiert, sowie als wichtigste Einflussgröße die Temperatur. Es wird zwischen Diffusionskoeffizienten in Gasen, Diffusionskoeffizienten in Lösungen und dem effektiven Diffusionskoeffizienten unterschieden. Diffusionskoeffizienten in Gasen sind stark abhängig von Temperatur und Druck. In erster Näherung gilt, dass eine Verdopplung des Druckes zur Halbierung des Diffusionskoeffizienten führt. Diffusionskoeffizienten in Lösungen betragen i. d. R. etwa ein Zehntausendstel des Diffusionskoeffizienten in Gasen. Der effektive Diffusionskoeffizient beschreibt Diffusion durch den Porenraum poröser Medien. Er ist eine makroskopische Größe und betrachtet nicht einzelne Poren, sondern den gesamten, durch die für den diffusiven Transport verfügbare Porosität, die Tortuosität und die Konstriktivität charakterisierten Porenraum. Der scheinbare Diffusionskoeffizient erweitert den effektiven Diffusionskoeffizienten um den Einfluss der Sorption.

### 7.1.1 Diffusionsparameter für das Wirtsgestein (Opalinuston)

Diffusionsdaten sind im Felslabor Mont Terri sowohl an Proben im Labor als auch durch Tracerversuche im Feld bestimmt worden (vgl. Kompilierung in TEVISSEN & SOLER 2003 und NAGRA 2002). Außerdem wurden Diffusionsparameter auf Grund der großräumigen Verteilung von gelösten Stoffen und Isotopen in Profilen durch die Formation abgeschätzt. Spannungsbreiten und „Best-Estimate“-Werte von Diffusionsparametern aus Labor- und In-situ-Tests hat BOSSART (2008) kompiliert (Tab. 48).

Interpretation großräumiger Profile: Die Auswertung der großräumigen Verteilung des Heliumprofils (RÜBEL et al. 2002) ergab einen abgeschätzten Wert für den scheinbaren Diffusionskoeffizienten von  $(3,5 \pm 1,3) \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . Anhand von Deuterium-,  $^{18}\text{O}$ -, Natrium-, Chlorid- und Bromid-Profilen schätzten DEGUELDRE et al. (2003) Werte von  $2,5 \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  bzw.  $7 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  ab. Unter Annahme einer Porosität von 0,2 ergeben sich für Natrium und die Isotope von Wasser und Helium effektive Diffusivitäten im Bereich von  $0,5 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  bis  $1,5 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . Für die Anionen Chlorid und Bromid werden unter der Annahme einer geringeren Diffusionsporosität etwas geringere effektive Diffusionskonstanten abgeleitet. Diese Ergebnisse aus den In-situ-Profilen stimmen trotz der einfachen Annahmen bezüglich Anfangs- und Randbedingungen gut mit den Labor- und In-situ-Experimenten überein (NAGRA 2002: 359).

Die Diffusionskonstanten der Benken-Proben für Tritium ( $\approx 6 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ) sind um einen Faktor von ca. 2 kleiner als diejenigen, die für die Mont Terri-Proben bestimmt wurden, was mit dem höheren Kompaktionsgrad und der geringeren Porosität des Gesteins übereinstimmt (Tab. 48). Die Werte sind kompatibel mit den Modellrechnungen, die für die Beschreibung der großräumigen Profile von verschiedenen stabilen Isotopen durchgeführt wurden. Die Diffusivitäten für Anionen zeigen gegenüber den Mont-Terri-Messungen deutlich tiefere Werte (Faktor von ca. 6). Dies könnte auf die geringere Porengröße und die damit verbundenen größeren Ionenausschluss-Effekte zurückzuführen sein.

Auf das Wirtsgestein des Referenzprofils SÜD werden die Werte aus der Bohrung Benken übertragen.

Tab. 48: Über Labor- und In-situ-Tests am Opalinuston von Mont Terri ermittelte Diffusionsparameter für Anionen und Kationen (aus: BOSSART 2008) und aus der Bohrung Benken (aus: VAN LOON et al. 2003, VAN LOON et al. 2002 und VAN LOON & SOLER 2003)

Felslabor Mont Terri								
Anion/Kation sowie Diffusionsparameter		O	Labortest			In-situ-Test		
			Min	Max	Best Est.	Min	Max	Best Est.
<sup>3</sup> T	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]		4,0·10 <sup>-11</sup>	1,0·10 <sup>-10</sup>	5,4·10 <sup>-11</sup>	5,0·10 <sup>-11</sup>	6,8·10 <sup>-11</sup>	5,9·10 <sup>-11</sup>
		⊥	1,0·10 <sup>-11</sup>	2,0·10 <sup>-11</sup>	1,5·10 <sup>-11</sup>	–	–	–
	Diffusions-anisotropie (  /⊥)	–	3,00	5,00	3,60	–	–	–
	Φ <sub>Diff</sub> [–]	–	0,15	0,17	0,16	0,12	0,19	0,16
HDO	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]	⊥	–	–	–	–	–	*1,4·10 <sup>-11</sup>
<sup>18</sup> O	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]	⊥	–	–	–	–	–	*1,4·10 <sup>-11</sup>
I <sup>-</sup>	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]		8,0·10 <sup>-12</sup>	1,1·10 <sup>-11</sup>	1,4·10 <sup>-11</sup>	1,3·10 <sup>-11</sup>	3,0·10 <sup>-11</sup>	2,2·10 <sup>-11</sup>
		⊥	2,4·10 <sup>-12</sup>	3,4·10 <sup>-12</sup>	4,2·10 <sup>-12</sup>	–	–	–
	Diffusions-anisotropie (  /⊥)	–	3,33	3,33	3,25	–	–	–
	Φ <sub>Diff</sub> [–]	–	0,05	0,15	0,08	0,05	0,15	0,09
Cl <sup>-</sup>	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]		1,8·10 <sup>-11</sup>	6,8·10 <sup>-11</sup>	4,3·10 <sup>-11</sup>	–	–	–
		⊥	–	–	4,8·10 <sup>-12</sup>	–	–	*0,25·10 <sup>-11</sup>
	Diffusions-anisotropie (  /⊥)	–	–	–	22,50	–	–	–
	Φ <sub>Diff</sub> [–]	–	0,06	0,12	0,09	–	–	–
Br <sup>+</sup>	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]		1,7·10 <sup>-11</sup>	4,5·10 <sup>-11</sup>	3,1·10 <sup>-11</sup>	–	–	3,0·10 <sup>-11</sup>
		⊥	–	–	–	–	–	*0,25·10 <sup>-11</sup>
	Φ <sub>Diff</sub> [–]	–	0,10	0,15	0,13	–	–	0,10
Cs <sup>+</sup>	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]		–	–	2,6·10 <sup>-10</sup>	–	–	2,7·10 <sup>-10</sup>
	Φ <sub>Diff</sub> [–]	–	–	–	0,17	–	–	0,18
<sup>22</sup> Na	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]		–	–	7,2·10 <sup>-11</sup>	–	–	7,2·10 <sup>-11</sup>
		⊥	–	–	–	–	–	*0,5·10 <sup>-11</sup>
	Φ <sub>Diff</sub> [–]	–	–	–	0,17	–	–	0,18
	Retentionsparameter K <sub>d</sub>	–	–	–	0,18	–	–	0,2
<sup>88</sup> Sr	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]	–	–	–	6,5·10 <sup>-11</sup>	–	–	7,0·10 <sup>-11</sup>
	Φ <sub>Diff</sub> [–]	–	–	–	0,17	–	–	0,15
	Retentionsparameter K <sub>d</sub>	–	–	–	1,40	–	–	1,0
<sup>60</sup> Co	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]		–	–	–	–	–	6,0·10 <sup>-11</sup>
	Φ <sub>Diff</sub> [–]	–	–	–	–	–	–	0,15
	Retentionsparameter K <sub>d</sub>	–	–	–	–	–	–	90,0

Felslabor Mont Terri								
Anion/Kation sowie Diffusionsparameter		O	Labortest			In-situ-Test		
			Min	Max	Best Est.	Min	Max	Best Est.
<sup>6</sup> Li	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]	II	–	–	–	–	–	7,0·10 <sup>-11</sup>
	Φ <sub>Diff</sub> [-]	–	–	–	–	–	–	0,16
	Retentionsparameter K <sub>d</sub>	–	–	–	–	–	–	8,8
Werte mit (*) stammen aus In-situ-Gesteinsprofil-Messungen im Felslabor Mont Terri. O = Orientierung zur Schichtung, D <sub>e</sub> = effektive Diffusivität, Φ <sub>Diff</sub> = für den diffusiven Transport verfügbare Porosität								
Bohrung Benken								
			Minimumwert	Maximumwert	Mittelwert			
<sup>3</sup> H <sup>+</sup>	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]	⊥	–	–	(0,61 ± 0,1)·10 <sup>-11</sup>			
		II	–	–	(3,15 ± 0,05)·10 <sup>-11</sup>			
	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]	⊥	(7,12 ± 0,43)·10 <sup>-13</sup>	(9,11 ± 0,55)·10 <sup>-13</sup>	(0,08 ± 0,01)·10 <sup>-11</sup>			
	D <sub>e</sub> [m <sup>2</sup> ·s <sup>-1</sup> ]	⊥	(4,47 ± 0,28)·10 <sup>-13</sup>	(6,57 ± 0,40)·10 <sup>-13</sup>	(0,05 ± 0,02)·10 <sup>-11</sup>			
Die höhere Porosität von <sup>125</sup> I <sup>-</sup> gegenüber <sup>36</sup> Cl <sup>-</sup> wird durch schwache Sorption erklärt. D <sub>e</sub> = effektive Diffusion								

### 7.1.2 Sorptions-Verteilungskoeffizient

Sorption ist die Aufnahme von Stoffen durch Feststoffe, die Abgabe wird als Desorption bezeichnet. Im Fall einer Freisetzung können auch die mit den Tiefenwässern mitgeführten Nuklide an den Oberflächen der durchströmten porösen oder klüftigen Gesteine angelagert (Sorption) bzw. wieder freigesetzt (Desorption) werden. Während des diffusiven Transports können die Radionuklide durch Sorptionsprozesse zurückgehalten werden. Die Rückhaltung ist abhängig von der Nuklidart (chemische Verbindung, Oxidationsstufe u. a.), von der Konzentration der Radionuklide in der Lösung, vom durchflossenen Gestein (Mineralbestand, innere Oberfläche und dgl.), von der chemischen Zusammensetzung des Grundwassers (Mineralisation, Salzkonzentration etc.), von künstlichen und natürlichen Komplexbildnern und vom Verhältnis Volumen-Sorptionsmedium/Sorbensmasse.

Für die NAGRA haben BRADBURY & BAEYENS (2003) Sorptionsverteilungskoeffizienten K<sub>d</sub> für ein ungestörtes Opalinuston-Wirtsgestein zusammengestellt (Tab. 49). Da in dichten Tongesteinen mit niedrigem Wassergehalt wie dem Opalinuston eine systembedingte Unsicherheit bezüglich der In-situ-pH/P<sub>CO2</sub>-Bedingungen besteht, wurden dabei die Porenwasserchemie bei verschiedenen pH-Werten gerechnet und neben einem Referenzfall (pH-Wert = 7,24) zwei weitere pH-Werte von 6,3 und 7,8 betrachtet. Für alle drei Fälle erstellten die Autoren unter Zugrundelegung von Sorptionsmessungen für Cs(I), Sr(II), Ni(II), Eu(III), Sn(IV), Th(IV) und I(-1) an Opalinuston-Proben aus dem Felslabor Mont Terri jeweils eine Sorptionsdatenbank. Für jedes Radionuklid ist in einem eigenen Kapitel die Datenbasis dargelegt oder dargelegt, welches andere Radionuklid als Analogon verwendet werden kann.

Tab. 49: Zusammenstellung von in situ ermittelten Verteilungskoeffizienten  $K_d$  für den Opalinuston (Benken / Mont Terri) bei unterschiedlichen pH-Werten und dem entsprechenden Gesamt-Unsicherheitsfaktor (aus: BRADBURY & BAEYENS 2003)

Radionuklid	Verteilungskoeffizient $K_d$ [ $m^3 \cdot kg^{-1}$ ] bei			Gesamt-Unsicherheitsfaktor
	pH = 6,3	pH = 7,24	pH = 7,8	
H (HTO)	0	0	0	–
C (inorg.)	$1,3 \cdot 10^{-4}$	$1,6 \cdot 10^{-3}$	$6,0 \cdot 10^{-3}$	–
C (org.)	0	0	0	–
Cl(-I)	0	0	0	–
Ca(II)	$9,3 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	6
Co(II)	$1,6 \cdot 10^{-1}$	$4,9 \cdot 10^{-1}$	$9,5 \cdot 10^{-1}$	15,1
Ni(II)	$2,9 \cdot 10^{-1}$	$9,3 \cdot 10^{-1}$	1,9	11,6
Se(-II)	0	0	0	–
Sr(II)	$9,3 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	6
Zr(IV)	39,7	10,9	4,7	19,6
Nb(V)	4	4	4	18,2
Mo(VI)	$3,2 \cdot 10^{-2}$	$1,7 \cdot 10^{-2}$	$1,2 \cdot 10^{-2}$	15,1
Tc(IV)	22	55,4	55,4	6,3
Ru(III/IV)	5	5	5	15
Pd(II)	5	5	5	15
Ag(I)	0	0	0	–
Cd(II)	$5,7 \cdot 10^{-2}$	$1,8 \cdot 10^{-1}$	$3,7 \cdot 10^{-1}$	16,4
Sn(IV)	110	110	110	14
Sb(III)	2,5	5,6	7,0	25,5
I(-I)	$3,5 \cdot 10^{-5}$	$3,5 \cdot 10^{-5}$	$3,5 \cdot 10^{-5}$	14
Cs(I)	$5,5 \cdot 10^{-5}$	$5,5 \cdot 10^{-5}$	$5,5 \cdot 10^{-5}$	6
Ce(III)	5,0	59,8	50,0	6,3
Pm(III)	5,0	59,8	50,0	6,3
Sm(III)	5,0	59,8	50,0	6,3
Eu(III)	5,0	59,8	50,0	4,5
Ho(III)	5,0	59,8	50,0	6,3
Hf(IV)	39,7	10,9	4,7	19,6
Pb(II)	$8,0 \cdot 10^{-1}$	2,7	6,7	47,3
Po(IV)	$7,0 \cdot 10^{-2}$	$1,8 \cdot 10^{-1}$	$2,8 \cdot 10^{-1}$	14
Ra(II)	$6,9 \cdot 10^{-4}$	$7,6 \cdot 10^{-4}$	$7,6 \cdot 10^{-4}$	6
Ac(III)	1,2	17,0	63	8,2
Th(IV)	22	55,4	55,4	4,5
Pa(V)	5	5	5	10
U(IV)	$5,5 \cdot 10^{-1}$	20,5	48,2	6,3
Np(IV)	22	55,4	55,4	6,3
Pu(III)	1,1	22,6	75,2	8,2
Am(III)	1,2	17,0	63	5,8
Cm(III)	1,2	17,0	63	8,2



## 8 Gesteinsmechanische Parameter

Die Ermittlung von gesteinsmechanischen Parametern dient der geotechnischen Charakterisierung der an einem Standort angetroffenen Gesteine. Neben einer generellen Einschätzung durch einige wenige standardisierte Kennwerte, wie den Elastizitätsmodul oder die uniaxiale Bruchfestigkeit, sollten die zu ermittelnden Parameter idealerweise die bei der Bewertung eines Standortes eingesetzten Stoffgesetze abdeckend bedienen. Darüber hinaus sollte auch die Entwicklung von neuen Stoffgesetzen dazu dienen, die Charakteristik der Gesteine möglichst exakt zu beschreiben. Daher könnte es in Zukunft nötig sein, weitere oder andere Parameter an einem Standort zu erheben.

Angepasst an die Ausprägung des Wirtsgesteins und des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD wird für die Parameterbeschreibungen im Weiteren von Festgesteinen ausgegangen. Bei den gesteinsmechanischen Parametern hat das Gefüge und die Struktur, wie z. B. Schichtung, Porenanteil und ihre Füllung, einen Einfluss auf den Wert. Darüber hinaus spielt bei vielen Parametern der Wassergehalt eine entscheidende Rolle (vgl. Abb. 5), der aber im Folgenden nicht explizit berücksichtigt wird.

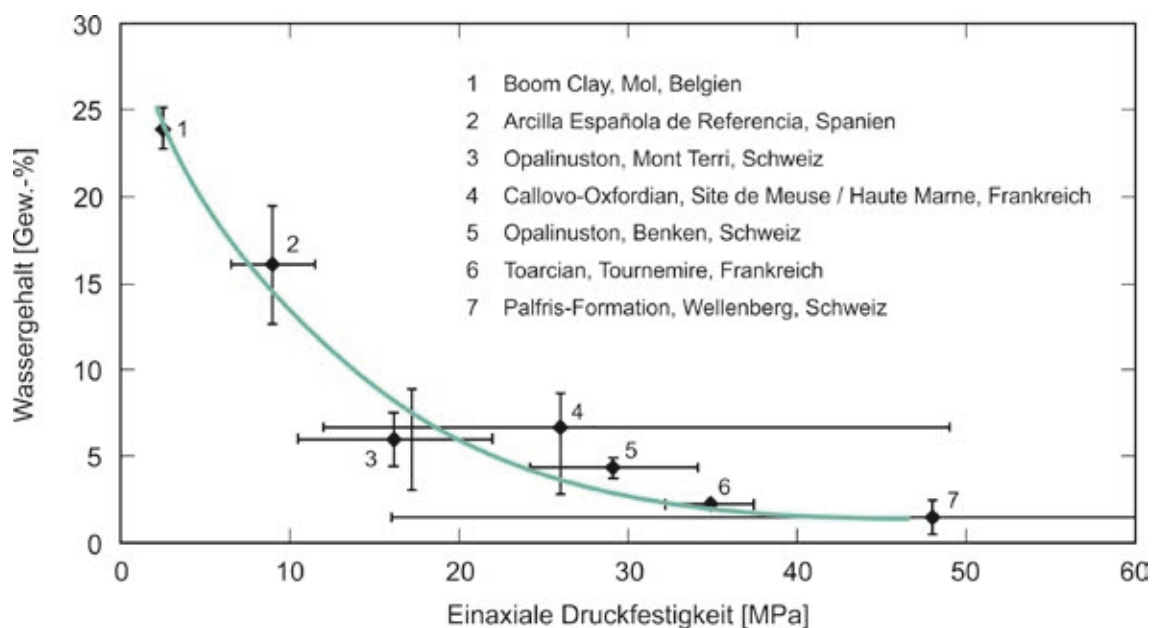


Abb. 5: Vergleich der einaxialen Druckfestigkeiten verschiedener Tonsteine und Tone in Beziehung zum Wassergehalt (nach: NAGRA 2002: 290, verändert)

## 8.1 Elastizitätsparameter

### 8.1.1 Elastizitätsparameter für das Wirtsgestein (Opalinuston)

Bei einem isotrop-elastischen Gestein werden bei den allgemeinen Deformationsparametern nur zwei Materialkonstanten ausgehalten: der Elastizitätsmodul (E-Modul) und die Poissonzahl. Der E-Modul kennzeichnet den Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung bei der Verformung eines festen Körpers bei linear elastischem Verhalten. Die Poissonzahl beschreibt das Verhältnis der Querverformung zur Längsverformung.

Für die Betrachtung des Opalinustons als isotrop-elastisches Gestein können die in Tab. 50 zusammengefassten Parameter herangezogen werden. Auf die Modelleinheit jm1 im Referenzprofil SÜD werden die von Bock (2009) zusammengestellten Werte übertragen.

Tab. 50: Zusammenstellung der Elastizitätsparameter für den Opalinuston, betrachtet als isotrop-elastisches Gestein

Parameter	n	MW ± 1σ	Literatur
E-Modul E [GPa]	17	12,7 ± 4,4	Bock (2001)
$E_{t-50}$ [GPa] <sup>1)</sup>	56	5,2 ± 2,7	
Poissonzahl [-]	31	0,27 ± 0,08	
E-Modul [GPa]	91	7,8 ± 5,1	Bock (2009)
$E_{t-50}$ [GPa]	68	2,7 ± 1,5	
Poissonzahl [-]	31	0,29 ± 0,09	

<sup>1)</sup>  $E_{t-50}$  = Anfangsverformungsmodul bei 50% Druckfestigkeit

Fasst man das Gestein als transversal-isotrop-elastisch auf, können bezüglich der Schichtung ss fünf Materialkonstanten unterschieden werden:

- $E_1$  ( $E \perp ss$ )                      E-Modul senkrecht zur Schichtung
- $E_2 = E_3$  ( $E \parallel ss$ )                E-Modul parallel zur Schichtung
- $\nu_{12} = \nu_{13}$  ( $\nu \parallel ss$ )            Poissonzahl parallel zur Schichtung
- $\nu_{23}$  ( $\nu \perp ss$ )                        Poissonzahl senkrecht zur Schichtung bezogen auf Belastung in der Schichtungsebene
- $G_{12} = G_{13}$                             Schubmodul parallel zur Schichtung

Statische Elastizitätsparameter werden durch Spannungs-Deformationsmessungen in einaxialen und triaxialen Druckversuchen bestimmt, dynamische Elastizitätsparameter aus Ultraschallgeschwindigkeiten und Dichtewerten berechnet. In Tab. 51 sind für Opalinuston-Proben aus der Bohrung Benken und Mont Terri die mittleren statischen Elastizitätsmoduln und Poissonzahlen sowie die berechneten dynamischen Elastizitätsparameter (dynamischer Elastizitätsmodul), Poissonzahl und Schubmodul zusammengefasst. Sie stammen aus NAGRA (2001) sowie aus Kompilationen von BOSSART (2008) und BOCK (2009). Weitere und detailliertere Werte für diese Elastizitätsparameter finden sich z. B. in SCHNIER (2004) und SCHNIER & STÜHRENBERG (2006). Aufgrund der ähnlichen Tiefenlage des Opalinustons in der Bohrung Benken zur Modelleinheit jm1 im Referenzprofil SÜD sind die Werte aus Benken als Referenzparameter für die Modelleinheit jm1 am besten geeignet.

Tab. 51: Zusammenstellung der Elastizitätsparameter (Elastizitätsmoduln, Poissonzahlen und Schubmodul) für Opalinuston aus der Bohrung Benken und Mont Terri

Parameter	Orientierung	Bemerkung	n	Min	Max	Mittelwert	Literatur
<b>Bohrung Benken</b>							
mittlere statische Elastizitätsmoduln [GPa]	ss ( $E_1=E_2$ )	nur triaxial	18	5,6	19,6	11,01 ± 3,35	NAGRA (2001): 150 sowie Beilage 6.3
	⊥ ss ( $E_3$ )	nur triaxial	19	1,5	8,4	4,77 ± 2,25	
Poissonzahl (statisch) [-]	ss ( $n_{12}=n_{13}$ )	nur triaxial	16	0,10	0,40	0,28 ± 0,10	
	⊥ ss ( $n_{31}$ )	nur triaxial	19	0,11	0,41	0,26 ± 0,11	
dynamischer Elastizitätsmodul [GPa]		–	71	–	–	33 ± 3	
	⊥	–	68	–	–	19 ± 3	
Poissonzahl (berechnet, dynamisch) [-]		–	71	–	–	0,27 ± 0,01	
	⊥	–	68	–	–	0,27 ± 0,01	
<b>Mont Terri</b>							
mittlere statische Elastizitätsmoduln [GPa]	ss ( $E_2=E_3$ )	Bohrkern, Labor		11,5	19,5	15,5	BOSSART (2008)
	ss ( $E_2=E_3$ )	Bohrloch, in situ		6,3	8,1	7,2	BOSSART (2008)
	⊥ ss ( $E_1$ )	Bohrkern, Labor		7,1	11,9	9,5	BOSSART (2008)
	⊥ ss ( $E_1$ )	Bohrloch, in situ		2,1	2,8	3,5	BOSSART (2008)
	ss ( $E_2=E_3$ )	Bohrkern, Labor	44			10,1 ± 4,9	BOCK (2009)
	⊥ ss ( $E_1$ )	Bohrkern, Labor	31			4,1 ± 2,0	BOCK (2009)
Poissonzahl (statisch) [-]	ss ( $n_{12}=n_{13}$ )	Bohrkern, Labor		0,16	0,32	0,24	BOSSART (2008)
	⊥ ss ( $n_{23}$ )	Bohrkern, Labor		0,28	0,38	0,33	BOSSART (2008)
	ss ( $n_{12}=n_{13}$ )	Bohrkern, Labor	8			0,25 ± 0,09	BOCK (2009)
	⊥ ss ( $n_{23}$ )	Bohrkern, Labor	7			0,35 ± 0,04	BOCK (2009)
dynamischer Elastizitätsmodul (berechnet) [GPa]	ss					22,0	BOCK (2009)
	⊥ ss					14,0	BOCK (2009)
	ss	Bohrkern, Labor		20,5	26,9	23,7	BOSSART (2008)
	⊥ ss	Bohrkern, Labor		10,3	13,5	11,9	BOSSART (2008)

Parameter	Orientierung	Bemerkung	n	Min	Max	Mittelwert	Literatur
Poissonzahl (berechnet, dynamisch) [-]	ss					0,26	BOCK (2009)
	⊥ ss					0,25	BOCK (2009)
	ss	Bohrkern, Labor		0,21	0,27	0,24	BOSSART (2008)
	⊥ ss	Bohrkern, Labor		0,26	0,30	0,28	BOSSART (2008)
Schubmodul [GPa]	$G_{12} = G_{13}$	Bohrkern, Labor		0,8	1,6	1,2	BOSSART (2008)
						3,7	BOCK (2009)

Zusätzlich zu den in der Tabelle zusammengestellten Analysen wurden im Rahmen von felsmechanischen In-situ-Untersuchungen in Bohrkernen aus der Bohrung Benken Standard-Dilatometertests in zwei Messserien mit jeweils drei Versuchen zwischen 597,6 m und 600,0 m sowie zwischen 625,0 m und 628,0 m Tiefe durchgeführt. Für die Versuche zwischen 597,6 m und 600,0 m Tiefe ergibt sich ein mittlerer Elastizitätsmodul von  $13,3 \pm 0,4$  GPa; für den Testbereich zwischen 625,0 m und 628,0 m einer von  $10,6 \pm 0,5$  GPa. Die in situ bestimmten E-Moduln stimmen innerhalb der Variabilität gut mit den aus einaxialen und triaxialen Druckversuchen an P-Proben bestimmten statischen E-Moduln überein. Aus diesem Grund können an Laborproben ermittelte elastische Gesteinseigenschaften auf den Gebirgsmaßstab übertragen werden (NAGRA 2001). In NAGRA (2002) wird festgestellt, dass die Unterschiede in den Daten von Mont Terri und Benken sowohl für die E-Moduln als auch für die triaxialen Festigkeiten bei 10 MPa Manteldruck weitgehend durch den unterschiedlichen Wassergehalt erklärbar sind. Schubmoduln sind nur am Opalinuston von Mont Terri bestimmt worden. Die Mittelwerte variieren zwischen 1,2 GPa und 3,7 GPa.

Deformationsparameter (statischer Anfangsverformungsmodul, Elastizitätsmodul, Restverformungsmodul) werden an Prüfkörpern in einer Triaxial-Prüfmaschine im Labor ermittelt. Der Elastizitätsmodul stellt den Quotienten aus mechanischer Spannung (stress) und Dehnung/Verformung (strain) dar. Die Größe des Elastizitätsmoduls hängt von Feuchte, Verformungsgeschwindigkeit und anderen Umgebungsbedingungen ab. Er ist von der Temperatur unabhängig, solange die Materialeigenschaften nicht geändert werden. BOCK (2001) unterscheidet ferner einen Unloading Modulus (Entlastungsmodul) und einen Reloading Modulus. Die letzteren beiden entsprechen dem E-Modul.

Der statische Anfangsverformungsmodul (AVM) stellt den Quotienten aus mechanischer Spannung und axialer Dehnung dar und wird im Erstbelastungsast bestimmt. Der Restverformungsmodul (RVM) beschreibt das Verformungsverhalten im Nachbruchbereich.

Bock (2009) weist darauf hin, dass Opalinuston-Proben in Labortests regelmäßig ein nicht-lineares, d. h. inelastisches, Spannungs-Verformungs-Verhalten im Vorbruchbereich zeigen. Bei niedrigen Einspannungen  $< 2$  MPa treten Kompaktionsprozesse auf, während bei hohen Belastungen oberhalb der Fließgrenze, die bereits bei 50 % der Bruchfestigkeit einsetzen kann, irreversible Schädigungsprozesse beginnen. Eine adäquate Berücksichtigung dieser Effekte in den numerischen Modellierungen wäre eine mögliche Strategie für die Simulation der Gesteinsdeformation an bzw. nahe der Oberfläche von untertägigen Hohlräumen.

Statische elastische Parameter und weitere Festigkeitsparameter haben u. a. SCHNIER & STÜHRENBERG (2006) an Prüfkörpern aus Mont Terri mittels Triaxialversuchen im Labor ermittelt. Dabei ergaben sich für den statischen Elastizitätsmodul sowie für die AVM und RVM stark streuende Werte. Für parallel zur Schichtung orientierte Proben sind diese Werte signifikant höher als für senkrecht zur Schichtung orientierte. Dies ist eine direkte Folge der Schichtung. Bei Zimmertemperatur ermittelte E-Moduln zeigen größere Werte als bei 80 °C ermittelte. Für die RVM wurden solche Abhängigkeiten von der Temperatur nicht beobachtet. Werte für AVM und RVM des Opalinustons von Mont Terri sind in Tab. 52 kompiliert. Für den Anfangs- und den Restverformungsmodul der Modelleinheit jm1 werden die in kompilierten Mittelwerte zugewiesen.



### 8.1.2 Viskoelastische Parameter für das Wirtsgestein (Kriechen)

Als Kriechen wird eine zeitabhängige, plastische Verformung relativ inkompetenter, duktil reagierender Gesteine unter gleichbleibender Spannung bezeichnet. Uniaxiale Kriechtests im Labor haben ZHANG et al. (2004) am Opalinuston von Mont Terri bei z. T. geringen Druckspannungen von 0,6 bis 1,0 MPa durchgeführt. Bei 0,7 MPa einaxialer Druckspannung beträgt die Kriechrate  $9,4 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ , bei 5 MPa einaxialer Druckspannung  $2,6 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ . Sie stellten ferner fest, dass bei allen Proben auch bei geringen Spannungen von 0,6 MPa – 0,7 MPa unabhängig vom Wassergehalt ein Kriechverhalten stattfindet, dass Proben mit hohen Wassergehalten von 5,6 Gew.-% – 5,8 Gew.-% bei Druckspannungen von 5,0 – 5,2 MPa brechen und dass die Kriechkurven bei Druckspannungen von 0,7, 5,0 und 5,2 MPa unabhängig von Wassergehalt nach kurzem transienten Kriechen ein lineares Verhalten aufweisen. JOBMANN et al. (2007b) haben im Projekt GENESIS für ein Modellgebiet im Opalinuston des Süddeutschen Molassebeckens bei ihren Kriechberechnungen (Kriech-Stoffmodell mit Norton-Ansatz) die verwendeten Kriechparameter so abgeschätzt, dass ein Spannungsdeviator von 3 MPa eine Kriechrate von ca.  $2 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1}$  bewirkt. Dabei wurde ein Schwellwert für das Kriechen von 1 MPa gewählt. In NAGRA (2002) wird ein Schwellwert für das Kriechen von 7,5 MPa genannt, während ZHANG et al. (2004) bei ihren Laborversuchen zu der Auffassung gelangte, dass ein messbarer Schwellwert für das Kriechen von Tonstein wahrscheinlich gar nicht existiert.

Triaxiale Kriechtests im Labor wurden von GRÄSLE & PLISCHKE (2010) am Opalinuston von Mont Terri während des LT-Experiments in einer konventionellen Karman-Zelle an P- und S-Proben durchgeführt. Die Ergebnisse der Kriechtests finden sich in GRÄSLE & PLISCHKE (2010: Appendix A-6). Insgesamt passen die Daten gut zu anderen veröffentlichten Werten von Messungen am Opalinuston (NAGRA 2002, CZAIKOWSKI et al. 2006), dehnen aber den dort verwendeten Bereich deviatorischer Spannungen in Richtung kleinerer Werte aus. Die Resultate zeigen eine starke Anisotropie mit signifikant höheren Kriechraten bei Belastung rechtwinklig zur Schichtung. Die Kriechraten der S-Proben übertreffen diejenigen der P-Proben um ca. eine halbe Größenordnung, was einem Anisotropie-Verhältnis zwischen 3 und 4 entspricht. Ferner wird deutlich, dass die Kriechrate auch signifikant vom hydraulischen Regime beeinflusst wird. Generell kann bei „drained boundary conditions“ (d. h. bei Verhinderung eines permanenten Aufbaus des Porendrucks) eine Verringerung der stationären Kriechrate beobachtet werden. Obwohl die statistische Analyse durch beträchtliche Probenvariabilität und unterschiedliche Struktur der undrainierten bzw. drainierten Datensätzen behindert wird, ist der Unterschied zwischen undrainierten und drainierten Tests statistisch signifikant. Den Experimenten von GRÄSLE & PLISCHKE (2009) und GRÄSLE & PLISCHKE (2010) zufolge reduziert eine Drainage die stationäre Kriechrate in allen Fällen um 0,2 bis 0,4 Größenordnungen. Dies macht die herausragende Rolle des Porenwasserdrucks für das Kriechverhalten des Opalinustons deutlich. Daneben wird die Kriechrate des Opalinustons auch von weiteren Faktoren wie Deviatorspannung und Manteldruck beeinflusst.



### 8.1.3 Elastizitätsparameter für das Nebengebirge

An Gesteinen des süddeutschen Molassebeckens bzw. der Nordschweiz sind bisher nur wenige Elastizitätsparameter bestimmt worden, die sich für das Nebengebirge des Referenzprofils SÜD verwenden lassen (Tab. 53).

Während der Elastizitätsmodul für die verschiedenen Gesteine eine große Streubreite aufweist, schwankt die Poissonzahl lediglich in einem engen Bereich. Betrachtet man alle Gesteine, liegt sie zwischen 0,15 und 0,30 und wird meist mit 0,25 angenommen (PRINZ 1991). In Tonsteinen sind die Poissonzahlen üblicherweise höher als in Sandsteinen (ANDRULEIT et al. 2012). Große Poissonzahlen kennzeichnen Gesteine mit geringen Elastizitätsmoduln und hohen Kompressibilitäten (z. B. Kalkstein, Dolomitstein). Unverfestigte Sande können bei vernachlässigbaren Scherkräften Poissonzahlen bis zu 0,5 annehmen (FJAER et al. 2008). Dynamische Poissonzahlen lassen sich aus den Geschwindigkeiten der P- und S-Wellen berechnen.

Tab. 53: E-Moduln und Poissonzahlen von Sedimentgesteinen für die Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	E-Modul [GPa]	Literatur	Poissonzahl [-]	Literatur
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese	0,1	NIPP & HEUSERMANN (2000)	0,33	NIPP & HEUSERMANN (2000)
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein (wechselnde Anteile von Kalk und Ton), Kalkstein	3 ± 1	RUST & ZIEGLER (2014)	keine Angaben vorhanden	
		Kalkstein	32 – 100	D'ANS & LAX (1998)	0,20 – 0,25	STRAYLE et al. (1994)
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein	32 – 100	D'ANS & LAX (1998)	0,20 – 0,25	STRAYLE et al. (1994)
		Mergelstein	30 ± 15	RUST & ZIEGLER (2014)	keine Angaben vorhanden	
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein	38 ± 5	RUST & ZIEGLER (2014)	0,20 – 0,25	STRAYLE et al. (1994)
		Dolomitstein	6 – 100	versch. Autoren	0,20 – 0,25	STRAYLE et al. (1994)
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein	20 ± 15	RUST & ZIEGLER (2014)	0,20 – 0,25	STRAYLE et al. (1994)
		Kalkmergelstein	20 – 30		keine Angaben vorhanden	
		Mergelstein	30 ± 15		keine Angaben vorhanden	
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen	MW 20 ± 10	RUST & ZIEGLER (2014)	keine Angaben vorhanden	
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein	MW 20 ± 10	RUST & ZIEGLER (2014)	0,28	ANDRULEIT et al. (2012)

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	E-Modul [GPa]	Literatur	Poisson- zahl [-]	Literatur
jm1	Opalinuston-Fm.	Tongestein	Modelleinheit Wirtsgestein			
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalismergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein	20 – 40	RUST & ZIEGLER (2014) (dort Kalkmergelstein und Mergelstein)	keine Angaben vorhanden	
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pylonotenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein- Lagen	20	ANDRULEIT et al. (2012)	0,26	ANDRULEIT et al. (2012)
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonat- konkretionen	20 – 40	RUST & ZIEGLER (2014) (dort Kalkmergelstein und Mergelstein)	keine Angaben vorhanden	
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tonstein	20	ANDRULEIT et al. (2012)	0,26	ANDRULEIT et al. (2012)
k1	Bunte-Mergel- Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tonstein, feinsandige Schluff-Tonsteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	20	ANDRULEIT et al. (2012)	0,3	ANDRULEIT et al. (2012)
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	6 – 100	versch. Autoren	0,20 – 0,25	STRAYLE et al. (1994)
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tonsteinlagen	12 – 26	NAGRA (1988b)	0,23	NIPP & HEUSERMANN (2000)
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein	20	ANDRULEIT et al. (2012)	0,26	ANDRULEIT et al. (2012)

Für diejenigen Modelleinheiten des Nebengebirges, für die keine Poissonzahlen übertragen werden konnten, lassen sich die entsprechenden Parameter aus den Tab. 54 (isotrop) und Tab. 55 (transversal-isotrop) verwenden. Transversal-isotrop betrachtete Parameter liegen nur für E-Moduln von Sandsteinen und Kalksteinen vor (Tab. 55).

Tab. 54: Elastische Parameter für Sedimentgesteine (isotrop)

Gestein (mit Modelltiefe)	E-Modul [GPa]		Poissonzahl [-]		Schubmodul [GPa]	Literatur
	Min – Max	MW	Min – Max	MW		
Tonstein (bis 455 m)		10		0,3		ANDRULEIT et al. (2012)
Kalkstein (bis 535 m)		10		0,25		
Tonstein (bis 610 m)		10		0,29		
toniger Sandstein (bis 625 m)		10		0,28		
toniger Sandstein (bis 665 m)		20		0,26		
Tonstein (bis 770 m)		20		0,3		
Tonstein (770 – 1225 m)		20		0,3		
Anhydrit	6 – 10		0,15 – 0,20			STRAYLE et al. (1994)
Anhydrit		30		0,23		NIPP & HEUSERMANN (2000)
Dolomitstein	6 – 10		0,20 – 0,25			STRAYLE et al. (1994)
dichte Dolomitsteine und Kalksteine	16 – 80					SCHWEIZERISCHE GEOTECHNISCHE KOMMISSION (1997)
dichte Dolomitsteine und Kalksteine	32 – 100					D'ANS & LAX (1998)
Kalksteine	50 – 105					D'ANS & LAX (1998)
Kalkstein	6 – 20		0,20 – 0,25			STRAYLE et al. (1994)
Kalkstein Solnhofen		65,6		0,337	24,5	KERN (1982)
Kalkstein Solnhofen, Ca <sub>99</sub> , wassergesättigt, Raumtemperatur, p = 0 MPa, Φ = 4,7 %		61,9		0,3	23,8	GEBRANDE (1982b)
Kalkstein Solnhofen, Ca <sub>99</sub> , trocken, Raumtemperatur, p = 0 MPa, Φ = 4,7 %		62,8		0,3	24,1	GEBRANDE (1982b)
Kalkstein, kieselig gebunden	12 – 70					SCHWEIZERISCHE GEOTECHNISCHE KOMMISSION (1997)
Grobsandstein, mäßig gebunden	1,8 – 3,6		0,2 – 0,3			STRAYLE et al. (1994)
Sandstein, kalkgebunden	6 – 32					SCHWEIZERISCHE GEOTECHNISCHE KOMMISSION (1997)
Sandstein, quarzitisch	12 – 54					D'ANS & LAX (1998)
Sandstein, verkieselt	38 – 50		0,10 – 0,15			STRAYLE et al. (1994)
Tonstein, stark kompakt., Typ „Rotliegendes“	3 – 24		0,25 – 0,30			STRAYLE et al. (1994)
Tonstein, mäßig kompakt., Typ „Opalinuston“	0,05 – 0,5		≈ 0,4 (?)			STRAYLE et al. (1994)

Wie die Werte in Tab. 54 zeigen, weichen sie für einzelne Gesteine bei unterschiedlichen Autoren extrem voneinander ab, so dass sich auch extreme Wertebereiche ergeben. In der Literatur sind z. B. für Kalkstein E-Moduln zwischen 6 GPa und 105 GPa angegeben. Um die Heterogenität zu kennzeichnen, wurden die Angaben verschiedener Autoren in der Tabelle aufgenommen, statt die gesamte Bandbreite anzugeben. Manche der Modelleinheiten beinhalten außerdem verschiedene Sedimente. So besteht beispielsweise die Modelleinheit ju1 aus tonigen Sandsteinen bis sandigen Tonsteinen, die außerdem noch Kalksteinlagen enthalten. Für derartige Modelleinheiten kann statt der Verwendung der angegebenen Werte auch eine Berechnung der Werte für Schubmodul aus E-Moduln und Poissonzahlen erfolgen.

Tab. 55: Elastische Parameter für Sedimentgesteine (transversal-isotrop)

Gestein	E-Modul (statisch)* [GPa]		E-Modul (dynamisch) [GPa]		Poissonzahl* [-]		Literatur
		⊥		⊥		⊥	
kieselig gebundener Sandstein (n = 1)	12,3	12,2	17,3	18,5	0,02	0,026	ALFES & SCHIESSL (1994)
Quarzsandstein (n = 2)	7	5,7	11,2 – 16,5	11,1 – 15,3	0,018	0,032	
tonhaltiger Sandstein (n = 1)	7,2	5,0	20,1	14,3	0,031	0,034	
tonig gebundener Sandstein (n = 1)	3,6	3,6	12,5	11,2	0,012	0,016	
tonig-ferritisch gebundener Sandstein (n = 2)	4,9 – 7,9	4,1 – 5,9	10,1 – 12,4	6,7 – 10,2	0,047 – 0,085	0,032 – 0,045	
Kalkstein (n = 1)**	22,5	22,4	48,9	45,3	0,031	0,062	

\* die Werte für den statischen E-Modul und die Poissonzahl gelten für Druckbelastung  
 \*\* Saaler Sandstein („Saaler Kalkstein“): Quarzanteil von nur ≈ 17 %, Quarzkörner liegen in karbonatischer Matrix

## 8.2 Festigkeitsparameter

### 8.2.1 Festigkeitsparameter für das Wirtsgestein (Opalinuston)

Die Festigkeit oder Bruchspannung ist eine mechanische Kenngröße, die das Verhalten eines Stoffes bei Verformung charakterisiert. Sie kennzeichnet jene Spannung, die sich aus der maximal aufnehmbaren Kraft – bezogen auf die ursprüngliche unbeanspruchte Querschnittsfläche der Probe – errechnet. Nach der Art der mechanischen Belastung werden Druck-, Zug-, Scher-, Biege-, Kompressions- und Torsionsfestigkeit unterschieden. Scher-, Druck- und Zugfestigkeit sind dabei insbesondere für das Kurzzeitverhalten relevant und kennzeichnen u. a. die Standfestigkeit des Gesteins, seine Konvergenz und die Größe der Auflockerungszone.

Die Zugfestigkeit (UTS) ist die maximale mechanische Zugspannung, mit der ein Probekörper belastet werden kann, bevor er bricht oder reißt. Daneben gibt es die hydraulische Zugfestigkeit (HTS), die sich u. a. aus dem hydraulischen, ein Versagen initiiierenden Druck errechnet. Für die Zugfestigkeiten gilt (z. B. anhand des Materials der Bohrung Benken)  $HTS \gg UTS$ .

Im Rahmen der Untersuchungen am Opalinuston der Bohrung Benken (NAGRA 2001) wurden dessen Festigkeitseigenschaften durch nachfolgende Versuche ermittelt:

- einaxiale Druckversuche mit natürlichem Wassergehalt,
- triaxiale Druckversuche bei Manteldrücken von 5, 10, 20 oder 40 MPa und variierendem Wassergehalt,
- indirekte Bestimmung der Zugfestigkeit mit Brazilian Tests und mit Spaltzugfestigkeit,
- Minifrac-Versuchen an Proben mit natürlichem Wassergehalt zur Bestimmung der hydraulischen Zugfestigkeit.

Die indirekten Zugfestigkeitstests (Brazilian Tests) an Material aus der Bohrung Benken ergaben mittlere Zugfestigkeiten von  $2,7 \pm 0,8$  MPa parallel zu den Schichtflächen und  $1,2 \pm 0,3$  MPa senkrecht zu den Schichtflächen (Tab. 56). Diese werden auf das Wirtsgestein des Referenzprofils SÜD und auf die Modelleinheit jm1 (Opalinuston) übertragen.

Aus den Minifrac-Untersuchungen zur Ermittlung der hydraulischen Zugfestigkeit bei unterschiedlichen Manteldrücken wurde eine mittlere hydraulische Zugfestigkeit von 10 MPa abgeleitet. Bei diesen Minifrac-Versuchen war die Frac-Bohrung senkrecht zu den Schichtflächen ausgerichtet (NAGRA 2001: 152).

Druck- und Zugfestigkeiten von Opalinuston-Proben aus Mont Terri (tonige Fazies) haben BOCK (2001) und BOSSART (2008) kompiliert (Tab. 56, Tab. 57). Für einaxiale Druckfestigkeiten der sandigen Fazies werden größere Werte angenommen und für gesättigte Proben „Best-Estimate“-Werte zwischen 25 MPa und 40 MPa zugrunde gelegt (BOSSART 2008). Eine lineare Extrapolation der Triaxialtests auf sehr kleine Manteldrücke zeigt deutliche Unterschiede zu den Ergebnissen aus den einaxialen Druckversuchen mit P- und Z-Proben. Die extrapolierten einaxialen Druckfestigkeitswerte sind bei vergleichbarem Wassergehalt deutlich höher als die direkt gemessenen einaxialen Druckfestigkeiten (NAGRA 2002). Die Zugfestigkeit ist viel kleiner als die Druckfestigkeit und beträgt in der Regel ca. ein Zehntel der Druckfestigkeit. Die Spaltzugfestigkeit liegt bei ca. 0,1 – 0,03 der uniaxialen Druckfestigkeit.

In Mont Terri wurden hydraulische Zugfestigkeiten über Tests mit hydraulischer Risserzeugung an Mini-Bohrkernen in Bohrlöchern mit 3 mm Durchmesser ermittelt und daraus freie Zugfestigkeiten abgeleitet (vgl. Bock 2001). Die Spaltzugfestigkeit von Opalinuston (S-Proben) aus Mont Terri variieren bei SCHNIER & STÜHRENBERG (2006) zwischen 1,3 MPa und 1,4 MPa (Tab. 56). Beim Vergleich der gesteinsmechanischen Parameter für Benken und Mont Terri wird deutlich, dass der Opalinuston im Zürcher Weinland (NAGRA 2001) eine bedeutend höhere Festigkeit und höhere elastische Moduln besitzt als der Opalinuston in Mont Terri. Gründe dafür sind die unterschiedliche Überdeckung und die damit verbundene unterschiedliche Vorbelastung und Konsolidierung (NAGRA 2002).

Die Druckfestigkeit zeigt bei Tonen oder Tonsteinen eine starke Abhängigkeit vom Wassergehalt, wie es auch im Vergleich verschiedener Tone und Tonsteine deutlich zum Ausdruck kommt (Abb. 5). Es ist eine signifikante Abnahme der Festigkeitsparameter mit zunehmender Feuchte zu verzeichnen (NAGRA 2002: 287-290). In vielen Gesteinen ist ein Festigkeitsverlust von 30 – 100 % als Resultat der chemischen Alteration des Zements oder des Tonbindemittels typisch (BROCH 1974). Dabei muss zwischen chemischen (Quellen) und mechanischen (Aufbau eines Porenwasserüberdrucks, der die Festigkeit um diesen Druckbetrag reduziert) Einflüssen des Porenwassers unterschieden werden. Allerdings können solche Festigkeitsverluste auch auf andere Effekte – wie z. B. höhere Porosität, stärkere Kompaktion etc. – zurückzuführen sein.

Tab. 56: Über Kurzzeittests im Labor ermittelte Zugfestigkeiten für Opalinuston-Proben aus Benken und Mont Terri (tonige Fazies)

Parameter	Orientierung bezüglich Schichtung											Lit.
	(P-Proben)				⊥ (S-Proben)				Anisotropie ⊥ /			
	n	Min	Max	MW ± 1σ	n	Min	Max	MW ± 1σ	Min	Max	MW	
Bohrung Benken												
mittlere Zugfestigkeit aus Brazilian Tests (Spaltzugfestigkeit) [MPa]	8			2,7 ± 0,8				1,2 ± 0,3			2,25	1
Mont Terri												
uniaxiale HTS [MPa]	14	–	–	9	14	–	–	2	–	–	–	2
freie UTS (abgeschätzt aus HTS) [MPa]	14	–	–	≈ 2	14	–	–	≈ 1	–	–	0,5	2, 3
	5	–	–	1,3 ± 0,2	2	–	–	0,67	–	–	0,5	4
Spaltzugfestigkeit					2	1,3	1,4	1,35 ± 0,05				5
1 – NAGRA (2001), 2 – Bock (2001), 3 – BOSSART (2008), 4 – Bock (2009), 5 – SCHNIER & STÜHRENBERG (2006)												

Die Druckfestigkeit wächst mit zunehmendem Gehalt an druckfesten Mineralen (z. B. Quarz) und nimmt mit zunehmendem Gehalt an spaltbaren Mineralen (z. B. Glimmer) ab. Sie nimmt außerdem mit zunehmender Porosität ab und nimmt bei Sedimentgesteinen mit zunehmender Festigkeit des Bindemittels zu. Druckfestigkeitswerte für den Opalinuston aus der Bohrung Benken und aus Mont Terri sind in Tab. 57 kompiliert.

Aus den uniaxialen Druckfestigkeitswerten der Bohrung Benken werden auf die Modelleinheit jm1 (Opalinuston) des Referenzprofils SÜD Druckfestigkeitswerte von  $28,0 \pm 5,7$  MPa parallel zur Schichtung und  $30,3 \pm 6,6$  MPa senkrecht dazu übertragen.

Tab. 57: Uniaxiale und triaxiale Druckfestigkeiten für den Opalinuston aus der Bohrung Benken und aus Mont Terri (tonige Fazies)

Parameter	Orientierung bezüglich Schichtung									Literatur
	(P-Proben)				⊥ (S-Proben)				$\frac{\perp}{\parallel^{(d)}}$	
	n	Min	Max	MW $\pm 1\sigma$	n	Min	Max	MW $\pm 1\sigma$	MW	
Bohrung Benken										
uniaxiale Druckfestigkeit [MPa]	5			$28,0 \pm 5,7$	8			$30,3 \pm 6,6$		NAGRA (2001)
uniaxiale Druckfestigkeit <sup>(a)</sup> [MPa]				40,0				33,0		NAGRA (2001)
uniaxiale Druckfestigkeit <sup>(b)</sup> [MPa]				20,0				10,0		NAGRA (2001)
Maximalfestigkeit <sup>(c)</sup> [MPa]	4 <sup>1)</sup>	26,6	59,7	$41,5 \pm 16,9$	4	18,2	60,9	$34,1 \pm 19,4$		NAGRA (2001)
	6 <sup>2)</sup>	46,4	116,5	$75,8 \pm 26,2$	6	24,5	104,8	$50,7 \pm 29,2$		NAGRA (2001)
	4 <sup>3)</sup>	55,0	107,0	$80,1 \pm 22,6$	4	35,5	107,9	$65,3 \pm 33,3$		NAGRA (2001)
	6 <sup>4)</sup>	90,5	133,1	$113,8 \pm 19,0$	5	70,3	201,3	$119,5 \pm 54,6$		NAGRA (2001)
Mont Terri										
$\sigma_{1, \max}$ [MPa]	22	4,0	17,0	$13,4 \pm 4,3$	4	23,1	28,1	$25,6 \pm 2,5$	2,44	BOSSART (2008)
	35	–	–	$11,6 \pm 3,9$	15	–	–	$14,9 \pm 5,1$	1,28	BOCK (2009)
<sup>(a)</sup> aus Triaxialtests extrapoliert (Wassergehalt 3,5 Gew.-% – 4,5 Gew.-%) <sup>(b)</sup> aus Triaxialtests extrapoliert (Wassergehalt 4,5 Gew.-% – 7,0 Gew.-%, übersättigt) <sup>(c)</sup> triaxiale Druckfestigkeiten (zu den Wassergehalten vgl. NAGRA (2001): Beilage 6.3) <sup>(d)</sup> Anisotropiefaktor $\frac{\perp}{\parallel}$ <sup>1) – 4)</sup> Manteldruck $\sigma_3 = 5, 10, 20, 40$ MPa										



Triaxiale Druckfestigkeiten sowie die Restfestigkeiten wurden in NAGRA (2001) berechnet und sind in Tab. 58 zusammengestellt. Im Gegensatz zu den Maximalfestigkeiten liegen den Restfestigkeiten lediglich die Ergebnisse der triaxialen Druckversuche zugrunde. In NAGRA (2001) wird darauf hingewiesen, dass mit zunehmendem Wassergehalt kaum Unterschiede zwischen der Maximal- und Restfestigkeit beobachtet worden sind, was bedeutet, dass duktile Deformation vorherrscht. Mit zunehmender Temperatur (80 °C – 100 °C) wird im Nachbruchbereich ein noch duktileres Verhalten als bei tieferen Temperaturen beobachtet (NAGRA 2002).

Tab. 58: Triaxiale Druckfestigkeiten sowie Restfestigkeiten für den Opalinuston aus der Bohrung Benken (aus: NAGRA 2001)

Parameter	Orientierung bezüglich Schichtung												
	$\sigma_3$	parallel (P-Proben)				senkrecht (S-Proben)				45° (Z-Proben)			
n		Min	Max	MW $\pm$ 1 $\sigma$	n	Min	max	MW $\pm$ 1 $\sigma$	n	min	max	MW $\pm$ 1 $\sigma$	
<b>triaxiale Druckfestigkeiten</b>													
Maximalfestigkeit $\sigma_{t,max}$ [MPa]	5	4	26,6	59,7	41,5 $\pm$ 16,9	4	18,2	60,9	34,1 $\pm$ 19,4	5	12,7	35,0	21,7 $\pm$ 9,5
	10	6	46,4	116,5	75,8 $\pm$ 26,2	6	24,5	104,8	59,7 $\pm$ 29,2	5	29,5	58,4	43,8 $\pm$ 10,4
	20	4	55,0	107,0	80,1 $\pm$ 22,6	4	35,5	107,9	65,3 $\pm$ 33,3	4	34,1	77,3	51,6 $\pm$ 18,8
	40	6	90,5	133,1	113,8 $\pm$ 19,0	5	70,3	201,3	119,5 $\pm$ 54,6	5	59,8	142,3	93,3 $\pm$ 35,1
Restfestigkeit $\sigma_{t,res}$ [MPa]	5	4	17,7	35,3	27,1 $\pm$ 8,0	4	15,2	31,4	22,3 $\pm$ 7,5	5	12,3	24,6	16,8 $\pm$ 5,1
	10	6	43,3	96,5	59,4 $\pm$ 22,5	6	23,7	68,7	43,6 $\pm$ 15,9	5	25,1	45,0	32,8 $\pm$ 7,7
	20	5	55,0	105,2	73,9 $\pm$ 20,4	4	31,4	87,3	54,0 $\pm$ 25,1	4	34,1	76,8	51,3 $\pm$ 18,7
	40	6	78,0	124,9	100,7 $\pm$ 19,6	5	65,0	167,1	103,4 $\pm$ 41,0	5	59,8	142,3	90,3 $\pm$ 34,3

### 8.2.2 Festigkeitsparameter für das Nebengebirge

Werte für Festigkeitsparameter für die Gesteine des Nebengebirges des Opalinustons im Süddeutschen Molassebecken bzw. der Nordschweiz gibt es kaum. In diesem Kapitel sind entsprechende Parameter zusammengestellt, die für die jeweiligen Modelleinheiten verwendet werden können. Zugfestigkeitswerte für Gesteine aus dem süddeutschen Molassebecken oder der Nordschweiz, die direkt auf die Modelleinheiten im Referenzprofil SÜD übertragen werden können, existieren nicht. Allgemeine Zugfestigkeitswerte für Sedimentgesteine aus weltweiten Vorkommen sind in Tab. 59 eingetragen. Sie wurden für die Parametrisierung der Modelleinheiten des Nebengebirges verwendet, die in Tab. 60 zusammengestellt sind.

Tab. 59: Allgemeine Werte für Zugfestigkeiten verschiedener Sedimentgesteine aus weltweiten Vorkommen

Gestein	Lokalität	$\sigma_t$ [MPa]		Literatur	
		Min – Max	MW		
Dolomit	Durchschnittswert	9 – 15		SCHWEIZERISCHE GEOTECHNISCHE KOMMISSION (1997)	
dolomitischer Kalkstein	Mankato Stone Co., USA	–	15	RUMMEL (1982)	
Kalkstein	festen Kalksteine und Dolomite	2,5 – 16,5		D'ANS & LAX (1998)	
	sonstige Kalksteine	7 – 17,5		D'ANS & LAX (1998)	
	Eichstätt, „Treuchtlinger Marmor“	10 – 21	–	RUMMEL (1982)	
	Solnhofen	21	–	RUMMEL (1982)	
	Bedford, Indiana/USA, Porosität 14 %		2,5 – 4,5	3,5	RUMMEL (1982)
			4,6 – 5,8	5,2	RUMMEL (1982)
			2,5 – 3,1	2,8	RUMMEL (1982)
			8,8 – 10,8	9,8	RUMMEL (1982)
			5,4 – 6,2	5,8	RUMMEL (1982)
	Hill Co., Texas, USA, Sorte „Cordova Cream“		⊥ 1,7	–	RUMMEL (1982)
			2,7	–	RUMMEL (1982)
	Hill Co., Texas, USA, Sorte „Lueders“		5,0 – 5,8	5,4	RUMMEL (1982)
			5,4 – 6,4	5,9	RUMMEL (1982)
			7,9 – 9,5	–	RUMMEL (1982)
		7,0 – 8,6	7,8	RUMMEL (1982)	
Sandstein	Sandsteine Deutschland (allgemein) (n = 7)	⊥ 1,1 – 3,2	1,9 ± 0,7	ALFES & SCHIESSL (1994)	
		1,2 – 3,8	2,5 ± 0,9		
	Sandstein, tonig gebunden (n = 1)		⊥ 1,9	ALFES & SCHIESSL (1994)	
			2,6		
	Sandstein, tonig-ferritisch gebunden (n = 2)		⊥ 1,1 – 2,0	ALFES & SCHIESSL (1994)	
			2,2 – 2,5		
	quarzitische Sandsteine	8,5 – 22,5		D'ANS & LAX (1998)	
	Ruhsandstein, Witten/NRW, Porosität 5 %		13 – 18	17,6	RUMMEL (1982)
			–	24,3	RUMMEL (1982)
	Berea-Sandstein, Amherst, Ohio/USA		1,1 – 4,7		RUMMEL (1982)
			2,8 – 3,4	–	RUMMEL (1982)
			4,9 – 5,9	–	RUMMEL (1982)
			3,8 – 4,0	–	RUMMEL (1982)
Rangely Oil Well, Colorado/USA, Porosität 5 %		9,2 – 11,2	–	RUMMEL (1982)	
		11,2 – 15,2	13	RUMMEL (1982)	
Tennessee/USA, Sorte „Tennessee Sandstone“		–	6,9	RUMMEL (1982)	
		5,9 – 6,2	–	RUMMEL (1982)	
Tonsteine Unterkreide	Schacht Konrad bei Salzgitter, Niedersachsen	⊥ 1,0 – 2,1	–	JAHN & SÖNNKE (2014)	
		1,8 – 2,5	–		
Mergelstein	Hedbergellenmergel, Mittel-Aptium, Schacht Konrad bei Salzgitter, Niedersachsen	⊥ 1,5		JAHN & SÖNNKE (2014)	
		3,1			

Tab. 60: Auf die Modelleinheiten des Nebengebirges übertragene Zugfestigkeiten

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab.2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Zugfestigkeit [MPa]	Literatur
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese	keine Angaben vorhanden	
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein (wechselnde Anteile von Kalk und Ton), Kalkstein	⊥ 1,5    3,1	JAHN & SÖNNKE (2014)
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein, Mergelstein	2,5 – 16,5	D'ANS & LAX (1998)
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein, Dolomitstein	2,5 – 16,5	D'ANS & LAX (1998)
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein, Kalkmergelstein, Mergelstein	2,5 – 16,5	D'ANS & LAX (1998)
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalenton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen	⊥ 1,5    3,1	JAHN & SÖNNKE (2014)
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein	⊥ 1,2 – 2,0    2,2 – 2,5	ALFES & SCHIESSL (1994)
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	Tongestein	Modelleinheit Wirtsgestein	
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonieschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalmergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein	⊥ 1,5    3,1	JAHN & SÖNNKE (2014)
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pilonotenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen	⊥ 1,9    2,6	JAHN & SÖNNKE (2014)
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonatkonkretionen	⊥ 1,5    3,1	JAHN & SÖNNKE (2014)
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tongestein	⊥ 1,9    2,6	ALFES & SCHIESSL (1994)
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	⊥ 1,0 – 2,1    1,8 – 2,5	JAHN & SÖNNKE (2014)
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	2,5 – 16,5	D'ANS & LAX (1998)
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen	keine Angaben vorhanden	
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein	⊥ 1,9    2,6	ALFES & SCHIESSL (1994)

Allgemeine Druckfestigkeitswerte für Sedimentgesteine aus weltweiten Vorkommen enthält Tab. 61. Sie wurden zusammen mit Druckfestigkeitswerten, die aus dem süddeutschen Molassebecken oder der Nordschweiz stammen, für die Parametrisierung der Modelleinheiten des Nebengebirges verwendet, die in Tab. 62 zusammengestellt sind.

Tab. 61: Einachsige (uniaxiale) Druckfestigkeit von Sedimentgesteinen aus weltweiten Vorkommen

Gestein	uniaxiale Druckfestigkeit [MPa]			Literatur
	Lokalität	Min – Max	MW	
hochplastische Tone	Flinz in der OSM, München	–	0,05	KRISCHKE & WEBER (1981)
Fein- bis Mittelsande und vielfach vermergelte Schluffe und Tone	gesamtes Flinz-Schichtpaket	–	0,5	KRISCHKE & WEBER (1981)
Anhydrit	Durchschnittswert	40 – 128	82	RUMMEL (1982)
	Osterode/Harz	74	–	RUMMEL (1982)
Dolomit	Durchschnittswert	–	175	RUMMEL (1982)
	dichter Dolomit	50 – 200	–	SCHWEIZERISCHE GEOTECHNISCHE KOMMISSION (1997)
	massig, bankig – feingeschichtet, dicht – grobkörnig	80 – 180	–	RICHTER (1989)
Kalkstein	Durchschnittswert	–	104	RUMMEL (1982)
	massig, bankig – feingeschichtet, dicht – grobkörnig	80 – 180	–	RICHTER (1989)
	Solnhofen	275	294	RUMMEL (1982)
	Solnhofen	347	–	RUMMEL (1982)
	Eichstätt	110 – 195	163	RUMMEL (1982)
	„Treuchtlinger Marmor“ (Malm $\delta$ )	50 – 115	–	RUMMEL (1982)
Mergelstein	Flinz in der OSM, München	–	> 6	KRISCHKE & WEBER (1981)
	Impressamergel	10 – 30	–	NEUERBURG (2005)
Sandstein	Durchschnittswert	–	95	RUMMEL (1982)
	Sandsteine Deutschland (n = 7)	$\perp$ 34 – 97	51 $\pm$ 20	ALFES & SCHIESSL (1994)
		$\parallel$ 30 – 96	48 $\pm$ 20	ALFES & SCHIESSL (1994)
	tonig gebundener Sandstein (n = 1)	$\perp$ 44	–	ALFES & SCHIESSL (1994)
		$\parallel$ 37	–	ALFES & SCHIESSL (1994)
	tonig-ferritisch gebundener Sandstein (n = 2)	$\perp$ 41 – 48	–	ALFES & SCHIESSL (1994)
		$\parallel$ 38 – 44	–	ALFES & SCHIESSL (1994)
	kalkig gebundener Sandstein	30 – 180	–	SCHWEIZERISCHE GEOTECHNISCHE KOMMISSION (1997)
kieselig gebundener Sandstein	40 – 250	–	SCHWEIZERISCHE GEOTECHNISCHE KOMMISSION (1997)	
fein geschichtet bis gebankt, fein- bis grobkörnig, witterungsbeständig	30 – 180	–	RICHTER (1989)	

Gestein	uniaxiale Druckfestigkeit [MPa]			Literatur
	Lokalität	Min – Max	MW	
Sandstein	fein geschichtet bis gebankt, fein- bis grobkörnig, zerfällt bei Verwitterung zu bindigem Lockermaterial	10 – 80	–	RICHTER (1989)
	Ettlingen, Baden-Württemberg	85	–	RUMMEL (1982)
	Muttenberg	68	–	RUMMEL (1982)
	Heilbronn	45	–	RUMMEL (1982)
	Ruhrsandstein, Stbr. Imberg, Witten/ NRW	140	–	RUMMEL (1982)
	Ruhrsandstein, Stbr. Rauen, Witten/ NRW	80	–	RUMMEL (1982)
Schluffstein	Durchschnittswert	–	65	RUMMEL (1982)
	Permian Red Beds, Texas/USA	48	–	RUMMEL (1982)
Tonstein	feingeschichtet, dicht bis feinkörnig	20 – 30	–	RICHTER (1989)
	feingeschichtet und geschiefert, dicht	20 – 40	–	RICHTER (1989)

Tab. 62: Auf die Modelleinheiten des Nebengebirges übertragene Druckfestigkeiten

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	uniaxiale Druckfestigkeit [MPa]	Literatur
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese	keine Angaben vorhanden	
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein, wechselnde Anteile von Kalk- und Ton	0,5 – 1,5**	RUST & ZIEGLER (2014)
		Kalkstein	104	RUMMEL (1982)
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein	104	RUMMEL (1982)
		Mergelstein	50 ± 30	Analogie zu jo1
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein	> 100	NAGRA (2002)
		Dolomitstein	keine Angaben vorhanden	
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke- Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein	100 ± 50	RUST & ZIEGLER (2014)
		Kalkmergelstein	50 – 100	
		Mergelstein	10 ± 30	NEUERBURG (2005)
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen	MW: 80 ± 40	RUST & ZIEGLER (2014)
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein	MW: 80 ± 40	RUST & ZIEGLER (2014)
jm1	Opalinuston-Fm.	Tongestein	Modelleinheit Wirtsgestein	
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalismergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein	10 ± 30	analog zum Mergelstein jo1
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pilonotenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen	⊥ 44    37	ALFES & SCHIESSL (1994)
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonatkonkretionen	10 ± 30	analog zum Mergelstein jo1
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tongestein	⊥ 44    37	ALFES & SCHIESSL (1994)
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	20 – 40	RICHTER (1989)
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	20 – 200	SCHWEIZERISCHE GEOTECHNISCHE KOMMISSION (1997)
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen	40 – 128	RUMMEL (1982)
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosider Sandstein	⊥ 44    37	ALFES & SCHIESSL (1994)

Darüber hinaus haben KRISCHKE & WEBER (1981) eine Reihe von uniaxialen Druckfestigkeiten aus dem Süddeutschen Molassebecken zusammengetragen, die mit Modelleinheiten aus dem Referenzprofil SÜD parallelisiert werden können. Diese Zusammenstellung findet sich in Tab. 63.

Tab. 63: Uniaxiale Druckfestigkeiten aus dem Süddeutschen Molassebecken (aus: KRISCHKE & WEBER 1981)

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Bezeichnung des stratigraphischen Horizontes und des Gesteins in KRISCHKE & WEBER (1981)		uniaxiale Druckfestigkeit [MPa]
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein Kalkmergelstein Mergelstein	Weißjura $\alpha + \beta$ Weißjura $\alpha$	Mergel-, Kalkstein Mergelstein (70 %) Kalkstein (30 %)	49 – 176 27 – 32 189 – 325
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen	Braunjura $\varepsilon + \zeta$	Tonstein	29 – 39
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tongestein	Mittlerer Keuper Stubensandstein	Sandstein sandiger Tonstein	20 – 78 29
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tongestein, feinsandige Schluff- Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	Gipskeuper Schilfsandstein Lettenkeuper	Mergelstein Mergelstein + Gips Sandstein Tonstein	10 – 39 39 – 59 29 – 78 9
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	Ob. Muschelkalk	Dolomit + Kalkstein	9 – 98

### 8.2.3 Mohr-Coulomb-Festigkeitsparameter für das Wirtsgestein (Opalinuston)

Zur Beschreibung der Bruchgrenze der im Spannungsraum maximal aufnehmbaren Kraft eines Gesteins wird u. a. das Bruchkriterium von Mohr-Coulomb angewandt, das sich in der einfachsten Form als Gerade mit den Parametern Kohäsion und Winkel der inneren Reibung beschreiben lässt (siehe dazu z. B. WITTKÉ 1984).

Die von BOCK (2001) und BOSSART (2008) zusammengestellten Werte für Kohäsion und inneren Reibungswinkel stammen aus den DM- und ED-B-Experimenten in Mont Terri und beziehen sich v. a. auf die tonige Fazies des Opalinustons. HOMAND et al. (1996) ermittelten diese Parameter hingegen für die sandige und die tonig-schluffige Fazies (Tab. 64).

Tab. 64: Mohr-Coulomb-Festigkeitsparameter für den Opalinuston aus Mont Terri

Mohr-Coulomb-Festigkeitsparameter	HOMAND et al. (1996)		Kompilierung von BOCK (2009)				BOSSART (2008)		
	sandige F.	tonige F.	Orientierung bezüglich Schichtung						
$(\sigma_1 - \sigma_3)_{\max}$ bei Manteldruck 2 MPa	37,23	33,02	(P-Proben)		⊥ (S-Proben)				
$(\sigma_1 - \sigma_3)_{\max}$ bei Manteldruck 10 MPa	64,25	39,10	n	MW	n	MW	Min	Max	„BE“
Kohäsion [MPa]	6	4	41	5,0	39	3,4	2,2	5,5	3,6
Winkel der inneren Reibung [°]	37,5	33	41	24	39	23	24	26	25
Die hier tabellierten Werte für Kohäsion und Winkel der inneren Reibung wurden für Festigkeitswerte ausgewählt, deren Feuchtigkeitsgehalt in den Grenzen der natürlichen Feuchte im Opalinuston ( $4,2 \leq w \leq 8,0$ Gew.-%) liegen. „BE“ = Best Estimate.									



Datensätze zu abgeleiteten Festigkeitsparametern für den Opalinuston (Bohrung Benken) für ein bi-lineares sowie ein vereinfachtes lineares Mohr-Coulomb-Modell (NAGRA 2002, JOBMANN et al. 2007b) finden sich in Tab. 65. Diese Parameter für Kohäsion und Reibungswinkel werden auf die Modelleinheit jm1 des Wirtsgesteins im Referenzprofil SÜD übertragen.

Tab. 65: Abgeleitete Festigkeitsparameter des Opalinustons (Datensatz Bohrung Benken) für ein bilineares und ein lineares Mohr-Coulomb-Modell bei geringer bzw. hoher Normalspannung (Werte aus: NAGRA 2002 und JOBMANN et al. 2007b)

Festigkeitsparameter	Einheit	Normalspannung	Bi-lineares Modell				Lineares Modell			
			Parameter für							
			Matrix		Schichtung		Matrix		Schichtung	
			norm.	abg.	norm.	abg.	norm.	abg.	norm.	abg.
Dichte	[kg/m <sup>3</sup> ]		2520							
Elastizitätsmodul	[MPa]		7000							
Poissonzahl	[-]		0,27							
Zugfestigkeit	[MPa]		2,5	1,75	1,2	0,8	2,5	1,75	1,2	0,8
Spitzenkohäsion	[MPa]	gering	8,7	6,1	1,3	0,9	8,6	6,0	1,9	1,3
		hoch	17,2	12,0	10,1	7,1	–	–	–	–
Reibungswinkel	[°]	gering	30	24,8	34	28,4	24,6	20,1	24,1	19,7
		hoch	14	11,3	12	9,7	–	–	–	–
Restkohäsion	[MPa]	gering	4,3	3,0	0,7	0,5	4,3	3,0	1	0,7
		hoch	16	11,7	5	3,5	–	–	–	–
Restreibungswinkel	[°]	gering	29	23,9	33	27,5	24	19,6	22	17,9
		hoch	13	10,5	11	8,8	–	–	–	–

„norm.“ = normal, „abg.“ = abgemindert

Die an Proben der Bohrung Benken (NAGRA 2001) ermittelten Ergebnisse bildeten die Datenbasis zur Beschreibung des geomechanischen Verhaltens des Opalinustons, wobei ein bi-lineares Bruchkriterium nach Mohr-Coulomb verwendet wurde. In diesem Modell ist die durch den Reibungswinkel und die Kohäsion bestimmte Mohr'sche Bruchkurve abhängig von der minimalen Hauptspannung und wird in zwei Bereiche (bi-linear) unterteilt. Die gleichfalls in Tab. 65 angegebenen „abgeminderten Parameter“ (für Berechnungen mit verminderten Gebirgsfestigkeiten) resultieren aus der Überlegung, dem Einfluss von Inhomogenitäten im Gebirge und Ungenauigkeiten hinsichtlich der Gesteinsparameter Rechnung zu tragen. Dazu wurden die kohäsiven Festigkeiten um 30 % und die Reibungsfestigkeiten um 20 % abgemindert. Gründe für den Zahlenwert dieser prozentualen Abminderungen wurden allerdings nicht dargelegt.

## 9 Hydro-mechanisch gekoppelte Parameter

Zu den hydro-mechanischen Parametern zählt das Quellen eines Gesteins, welches eine zeitabhängige Volumenzunahme darstellt, die auf einer physikalisch-chemischen Reaktion mit Wasser beruht. Dabei ist der Quellmechanismus eine Kombination dieser Reaktion mit einer Spannungsverminderung, wobei erstere normalerweise die Hauptbeteiligte am Quellen ist. Der Quellprozess tritt aber nur gleichzeitig mit einer Spannungsverminderung auf oder folgt dieser unmittelbar (MADSEN & NÜESCH 1990). Beim Quellen findet bei einem eingespannten quellfähigen Gesteinskörper zunächst eine Quelldruckänderung, im freien Zustand eine Volumenzunahme statt. Beide Auswirkungen können zu Veränderungen der Systementwicklung führen, weshalb die Quelleigenschaften der Gesteine wichtige Parameter darstellen. Einen Überblick über verschiedene Verfahren zur Ermittlung der Quelleigenschaften eines Gesteins gibt z. B. PAUL (1981). Detaillierte Beschreibungen zu Untersuchungen der Quelleigenschaften des Opalinustons liegen in VÖGTLI & BOSSART (1998) und NAGRA (2001) vor.

Das Quellverhalten toniger Gesteine ist neben dem Überlagerungsdruck v. a. von deren mineralogischer Zusammensetzung (Art/Menge der Tonminerale, ihrer Oberflächenladung sowie der Valenz der Kationen in der Grenzschicht) und deren Gefüge abhängig. Letzteres bestimmt den zeitlichen Verlauf und die Ausnutzung des vorhandenen mineralogischen Quellpotentials (MADSEN & MÜLLER-VONMOOS 1989, MADSEN & NÜESCH 1990). Das Quellpotential eines Gesteines hängt neben weiteren Faktoren v. a. von der Größe der für Wasser zugänglichen Oberfläche ab.

Bei Proben gleicher Entnahmetiefe (z. B. einem Tunnel) und gleichem Überlagerungsdruck bestimmen v. a. Menge und Art der Tonminerale im Gestein die Quellparameter. Gesteine mit < 25 % Tonfraktion weisen geringes Quellpotential auf, Gesteine mit 25 – 50 % Tonfraktion sind als mittelstark quellfähig zu bezeichnen, die seltenen Tongesteine mit > 50 % Tonfraktion besitzen großes Quellpotential. Neben der Größe der Tonfraktion bestimmt aber auch die Art der Tonminerale das Quellverhalten eines Tongesteins. Tonminerale mit einem hohen Quellvermögen sind Montmorillonit (Smektit) und Wechsellagerungsminerale mit Montmorillonit-Anteilen. Gesteine mit quellfähigen Tonmineralen wie Smektit oder Wechsellagerungsmineralen besitzen ein größeres Quellpotential als solche mit weniger quellfähigen Tonmineralen (z. B. Kaolinit oder Illit), was eine unmittelbare Folge der unterschiedlichen Größe der für Wasser zugänglichen spezifischen Oberfläche der Tonminerale ist. Diese betragen bei Smektiten bis zu etwa  $750 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ , bei Illit maximal  $100 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$  und Kaolinit ca.  $30 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ . Der Opalinuston mit seinen Wechsellagerungsmineralen von Illit/Montmorillonit und Illit sowie Kaolinit und Chlorit nimmt mit einer spezifischen Oberfläche von etwa  $135 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$  eine Zwischenposition ein. Er wird deshalb als weniger quellfähig als die Montmorillonit enthaltende Obere Süßwassermolasse beurteilt

(MADSEN & MÜLLER-VONMOOS 1985, MADSEN & NÜESCH 1990: 46f.). Bei Sulfatgesteinen beruht das Quellen auf der Quellfähigkeit des Anhydrits. Durch Hydratation wandelt sich Anhydrit in Gips um, was mit einer Volumenzunahme von 61 % einhergeht.

Im Bereich des Referenzprofils SÜD enthalten mehrere Modelleinheiten quellfähige Minerale, zu denen Tonminerale und Anhydrit zählen. Sie sind in Tab. 66 hervorgehoben. Tonminerale sind anteilig auch in den Mergeln der Einheiten jo3 und jo1 enthalten, sie treten dort jedoch untergeordnet auf, weshalb auf eine Hervorhebung verzichtet wurde. Anhydrite sind vor allem in der Modelleinheit m2 enthalten. Lokal, und daher nicht in der zusammengefassten Lithologie enthalten, können auch in der Modelleinheit k1 Anhydritkonkretionen auftreten (vgl. REINHOLD et al. 2016).

Tab. 66: Übersicht über Schichtabfolgen aus dem Referenzprofil SÜD mit quellfähigen Mineralen. Die Modelleinheiten mit quellfähigen Mineralen sind farbig hervorgehoben.

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein (wechselnde Anteile von Kalk und Ton), Kalkstein
jo3	Hangende-Bankkalk-Fm. Zementmergel-Fm. Liegende-Bankkalk-Fm.	Kalkstein, Mergelstein
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein, Dolomitstein
jo1	Untere-Felsenkalke-Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete-Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein, Kalkmergelstein, Mergelstein
jm3	Ornatenton-Fm. Dentalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein-Lagen
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tonstein, Tonmergelstein
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	Tongestein
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalmergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatensandstein-Fm. Pylonotenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen,
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonatkonkretionen
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tonstein
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tonstein, feinsandige Schluff-Tonsteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tonsteinlagen
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein

## 9.1 **Quelldruckeigenschaften für das Wirtsgestein (Opalinuston)**

Der Quelldruck, der sich während des Quellens bei eingeschränkter Volumenzunahme im Gestein aufbaut, kann experimentell ermittelt werden. Er kann Auswirkungen auf die Spannungsverteilung und den Fluiddruck im Gestein haben.

Die Ergebnisse von Quelldruckversuchen an Opalinuston-Proben aus der Bohrung Benken (vgl. Tab. 67) zeigen eine deutliche Anisotropie. Dies entspricht auch der allgemeinen Erfahrung, dass – aufgrund der Einregelung der Tonteilchen – der Quelldruck senkrecht zur Schichtung größer ist als parallel dazu (MADSEN & NÜESCH 1990). Außerdem zeigen die Untersuchungen von MADSEN & NÜESCH (1990), dass (überkonsolidierte) Gesteine aus z. B. 300 m Tiefe höhere Quelldrücke und Quellmaße als an der Oberfläche anstehende Gesteine entwickeln.

Tab. 67: Literaturangaben für am schweizerischen Opalinuston ermittelte Quelldrücke

Lokalität	Bemerkungen	Orientierung zur Schichtung	Labor	in situ	Quelldruck [MPa]	Literatur
Opalinuston allgemein					1,0 – 1,5	MADSEN & NÜESCH (1991)
Bohrung Benken	2 Proben	⊥	x		0,8 – 1,4	NAGRA (2001)
	2 Proben	∥	x		0,1 – 0,2	
Mont Terri	schluffig-tonige Fazies	⊥	x		1,2	BOCK (2001), BOCK (2009) BOSSART (2008) VÖGTLI & BOSSART (1998)
		∥	x		0,6	
		⊥ / ∥			2,0	
Tunnelprojekt bei Brugg/Nordschweiz	experimentell		x		0,7 – 2,2	MADSEN & MÜLLER-VONMOOS (1985)
	berechnet	–			0,7 – 2,3 MW: 1,33	
Bözbergtunnel	–	–	x		0,1 – 1,7	MADSEN & NÜESCH (1990)
Bohrung Weiach	Teufe 646,32 m – 646,55 m	–	x		0,1 – 0,3	MADSEN & NÜESCH (1990)
	Teufe 646,55 m – 646,80 m	–	x		0,8 – 1,1	
Autotunnel Belchen	–	–	x		0,8 – 2,0	GROB (1972)
	Contact Stress Cell			x	Max: 0,3 MW: 0,17	

In Tab. 68 sind die Quelldrücke zusammengestellt, die von VÖGTLI & BOSSART (1998) im Rahmen des DT-Experiments an der tonigen Fazies aus Mont Terri ermittelt worden sind. Es ist eine deutliche Abhängigkeit der ermittelten Quelldrücke vom verwendeten Fluid zu erkennen.

Tab. 68: An Bohrkernen im Rahmren des DT-Experiments im Labor mit verschiedenen Bewässerungs-Fluiden ermittelte Quelldrücke der tonigen Fazies aus Mont Terri (aus: VÖGTLI & BOSSART 1998)

Bewässerungs-Fluid	Quelldruck [MPa] des Opalinustons der tonigen Fazies		
	⊥ zur Schichtung	zur Schichtung	Anisotropiefaktor
deionisiertes Wasser	1,22	0,03	33,33
Zapfwasser Nancy	0,85	0,74	1,14
synthet. Porenwasser („Pearson-Wasser“)	1,98	1,07	1,85
KCl-Lösung	0,56	–	–
Mittelwert	1,15	0,61	1,88

Die an Proben der Bohrung Benken bestimmten Quelldrücke weisen mit aus der Literatur bekannten und die bei Versuchen in Mont Terri ermittelten Quelldrücken vergleichbare Werte auf. Für die Abschätzung der Bandbreite des Quelldrucks im Opalinuston im Referenzprofil SÜD werden basierend auf den Angaben in Tab. 67 nachfolgende Werte abgeschätzt:

- Quelldruck senkrecht zur Schichtung: 0,8 MPa – 1,4 MPa
- Quelldruck parallel zur Schichtung: 0,1 MPa – 0,6 MPa

Neben dem Quelldruck kann auch das Quellmaß als weiterer, das Quellpotential eines Gesteins charakterisierender Parameter bestimmt werden. Versuche dazu wurden von MADSEN & NÜESCH (1990) durchgeführt und dokumentiert.

## 9.2 Quellhebung für das Wirtsgestein (Opalinuston)

Quellhebung bezeichnet den Effekt, der eintritt, wenn der durch Wasseraufnahme ausgelöste Quelldruck höher ist als die Belastung. Tritt dieser Effekt auf, kann er sich z. B. auf die Spannungsverteilung im Gebirge auswirken. Untersuchungen zur Quellhebung wurden für den Opalinuston z. B. von VÖGTLI & BOSSART (1998) durchgeführt. Die nachfolgende Tabelle zeigt die Ergebnisse für die tonige Fazies des Opalinuston, da diese Werte am ehesten als Annahme für das Wirtsgestein des Referenzprofils SÜD genutzt werden können.

Tab. 69: An Bohrkernen im Rahmen des DT-Experiments im Labor ermittelte Quellhebungen der tonigen Fazies aus Mont Terri (aus: VÖGTLI & BOSSART 1998)

	⊥ zur Schichtung	zur Schichtung	Anisotropiefaktor
Bewässerungs-Fluid	Quellhebung [%] des Opalinustons der tonigen Fazies von Mont Terri, bei Überlastdruck berechnet		
deionisiertes Wasser	9,20	1,03	8,93
Zapfwasser Nancy	6,90	0,91	7,58
synthet. Porenwasser („Pearson-Wasser“)	6,52	0,53	12,30
KCl-Lösung	4,99	0,42	11,88
Mittelwert	6,90	0,72	10,17
Anisotropiefaktor der Quellhebung (⊥ zur Schichtung/   zur Schichtung) in der tonigen Fazies in Mont Terri nach BOSSART (2008): Min: 4,5; Max: 10,0; Best Estimate: 7,0.			
Quellhebung [%] des Opalinustons der Bohrung Benken			
	1,3 – 7,3	0,7 – 4,7	–

Die von VÖGTLI & BOSSART (1998) ermittelten Quellhebungen (Tab. 69) weisen eine deutliche Abhängigkeit vom verwendeten Fluid auf und zeigen ferner einen klaren Zusammenhang zwischen Quellhebungsrate und Schichtung. In der tonigen Fazies ist die Quellhebung senkrecht zur Schichtung im Mittel zehnmal größer als diejenige parallel zur Schichtung. Untersuchungen zu Quellhebungen des Opalinustons erfolgten auch an Opalinuston-Proben aus der Bohrung Benken (vgl. (NAGRA 2001): 157). Insbesondere die P-Proben (Orientierung || zur Schichtung) weisen Quellhebungen auf, die erheblich von denen der tonigen Fazies aus Mont Terri abweichen. Ursachen dafür sind in unterschiedlichen Tonmineralzusammensetzungen (unterschiedliche Anteile quellfähiger Tonminerale wie Illit-Smektit-Wechselagerungen) zu suchen.

### 9.3 Quelleigenschaften des Nebengebirges

Neben den Tonmineralen kommen im Nebengebirge des Referenzprofils SÜD in der Modelleinheit m2 auch Anhydrite vor, die ebenfalls ein Quellpotential mit entsprechenden Eigenschaften aufweisen. In sehr untergeordnetem Maß führt auch die Modelleinheit k1 lokal Anhydritkonkretionen (vgl. REINHOLD et al. 2016). Eine Übertragung von Werten zu Quelleigenschaften wird aufgrund der geringen Anhydritgehalte für diese Einheit nicht vorgenommen.

Die Ursache des Quellens von Sulfatgesteinen besteht in der Hydratation von Anhydrit. Dabei erfolgt eine Umwandlung in Gips, was mit einer Volumenzunahme von 61 % einhergeht. ANAGNOSTOU (2007) weist darauf hin, dass die hydratationsbedingte Volumenänderung eines anhydrithaltigen Gesteins auch von den Veränderungen des Porenvolumens und somit von der Form, der Größe, der Richtung und der Verteilung der entstehenden Gipskristalle abhängt, die je nach Porengeometrie, Porenwasserchemismus, Porenwasserdruck und

Druck in der festen Phase die Poren verstopfen oder das Gesteinsgefüge sprengen können. Im ersten Fall würde das Porenvolumen ab-, im zweiten Fall zunehmen. Ferner erfolgt die Anhydritumwandlung über die Lösungsphase derart, dass sich Anhydrit im Porenwasser auflöst und Gips aus der Lösung ausfällt, wobei die Calcium- und Sulfationen mit dem Porenwasser zirkulieren. Die Auflösung des Anhydrits und die Ausfällung von Gips werden also durch Transportprozesse überlagert (ANAGNOSTOU 2007).

Nach Untersuchungen von MADSEN & NÜESCH (1990) sind massive Anhydritgesteine nicht quellfähig. In Anhydritgesteinen mit Tongehalten in Form von Lagen, Schlieren oder Linsen wird die Umwandlung von Anhydrit in Gips beschleunigt. Das Quellmaß tonhaltiger Anhydritgesteine hängt direkt von der Menge des in Gips umgewandelten Anhydrits ab. Während massive, tonfreie Anhydritgesteine auch nach sechs Jahren (Versuchsdauer) nicht gequollen sind, wurden bei Gesteinen mit 5 % Ton nach einer Versuchsdauer von zwei Jahren bei allseitig unbehindertem Quellen schon Quellmaße > 100 % gemessen, wobei sich 90 % des Anhydrits in Gips umwandelten (MADSEN & NÜESCH 1990).

Tab. 70: Ergebnisse von Quelldruck- und Quellmaßversuchen an tonigen Sulfatgesteinen (aus: MADSEN & NÜESCH 1990)

Teufe [m]	Gehalte an		Quelldruckversuche				Quellmaßversuche		
	Anhydrit* [Gew.-%]	Ton [Gew.-%]	Dauer [d]	Quelldruck [MPa] nach		axiale Deformation Ausbau [%]	Dauer [d]	Quellmaß [%] nach	
				600 d	Ausbau			600 d	Ausbau
„Anhydritgruppe“ des Mittleren Muschelkalks (Bhrg. Weiach) – entspricht der Modelleinheit m2 im Referenzprofil SÜD									
902,01	45	17	1540	1,4	2,5	2,28	–	–	–
909,03	75 / 60	20 / 30	670	2,2	2,3	1,44	686	81,5	82,1
910,78	80 / 98	4 / < 2	690	0,03	0,03	0,04	686	0,7	0,7
912,67	75 / 85	6 / 4	690	1,7	1,9	1,12	–	–	–
913,80	70	11	690	4,1	4,4	2,00	686	115,7	120,5
915,41	75	20	640	2,8	2,9	1,61	–	–	–
916,61	10	55	1540	1,1	1,6	1,12	–	–	–
918,41	85	3	690	0,5	0,6	0,24	686	33,5	35,3
919,77	50	24	1620	2,8	4,1	2,79	–	–	–
1823	–	–	2099	0,8	1,1	0,41	–	–	–
1823	–	–	2099	1,0	2,1	0,93	–	–	–
Raibler Gips des Oberostalpin (Walgauwerk, Valkastielstollen, Vorarlberg, Österreich). Die Überlagerungshöhe am Probenahmeort beträgt bis ca. 1600 m.									
1953	–	–	1928	1,2	1,8	0,96	–	–	–
1953	–	–	770	1,7	1,8	1,05	–	–	–
1983	–	–	933	1,4	1,4	0,72	–	–	–
2155	–	–	1928	1,1	1,5	1,06	–	–	–
unbekannt	–	–	1681	0,6	1,0	1,31	–	–	–
*Werte für Anhydrit aus XRD-Aufnahmen geschätzt; teilweise liegen Doppelbestimmungen vor									



Basierend auf den Werten in Tab. 70 können für den Anhydrit der Modelleinheit m2 Abschätzungen der Bandbreiten des Quelldrucks und des Quellmaßes erst dann erfolgen, wenn die mineralogische Zusammensetzung und insbesondere das Anhydrit/Ton-Verhältnis bekannt ist. Geht man von Anhydrit-Gehalten um 70 Gew.-% und Tongehalten von 10 – 20 Gew.-% aus, lassen sich für den Quelldruck der Modelleinheit m2 eine Bandbreite von 2,3 bis 4,4 MPa und für das Quellmaß eine Bandbreite von 82 % bis 120 % abschätzen. Ergebnisse von Quelldruckmessungen an ausgewählten deutschen Sandsteinen finden sich z. B. in KOCHER (2005).

#### **9.4 Biot-Koeffizient und Biot-Modul für das Wirtsgestein**

Der Biot-Koeffizient ist ein experimenteller Parameter, der auf die Verteilung der Fluide in den Gesteinsporen hinweist. Mit Werten zwischen 0 (die Poren sind nicht miteinander verbunden) und 1 (alle Poren sind miteinander verbunden) drückt er aus, ob und in welcher Größenordnung die Poren miteinander verbunden sind (siehe auch FJAER et al. 2008). Der dimensionslose Biot-Koeffizient beschreibt in Abhängigkeit vom porösen Gefüge des Gesteins die mechanische Wirksamkeit des Porenfluiddrucks auf das Korngerüst, d. h. die Effektivität der Druckübertragung und charakterisiert zusammen mit dem Biot-Modul die hydromechanische Kopplung einer gesättigten porösen Umgebung. Der Porenfluiddruck, wirkt dabei allseitig und normal auf die Kornoberflächen im Gesteinsgerüst.

Der Biot-Modul ist der Kehrwert des hydraulischen Speicherkoeffizienten. Er lässt sich daher über Kompressibilität des Fluids und des Solids, Porosität und Biot-Koeffizienten berechnen.

Es liegen nur wenige Werte für den Biot-Koeffizienten vor, so dass z. B. WILEVEAU (2005) und auch GENS et al. (2007) darauf hinweisen, dass die Unsicherheiten hinsichtlich der Größe dieses Wertes aufgrund der geringen Anzahl der bisher durchgeführten Labortests groß sind. Der von WILEVEAU (2005) angegebene Wert von 0,6 gilt als Referenzwert für den Opalinuston von Mont Terri. Er wird daher auch als Biot-Koeffizient auf die Modelleinheit jm1 (Opalinuston) des Referenzprofils SÜD übertragen. In Tab. 71 sind weitere Werte für den Biot-Koeffizienten für Tongesteine aufgeführt.

Tab. 71: Biot-Koeffizienten für Opalinuston aus verschiedenen Loationen sowie für Tonsteine des Collovium-Oxfordium aus Bure sowie Tonsteine aus Tournemire

Lokalität	Teufe [m]	Biot-Koeffizient [-]				Literatur
		n	Min	Max	MW ± 1σ	
Mont Terri	–	3	0,438	0,8	–	CHIFFOLEAU & ROBINET (1999)
Mont Terri	–	–	0,42	0,78	0,6	WILEVEAU (2005)
Bhrg. Diepflingen	22, 50, 55	3	0,92	0,94	0,93 ± 0,01	ARISTORENAS (1992)
Bhrg. Wittinsburg	38, 47, 58	3	0,88	0,94	0,92 ± 0,03	
Erzingen SW Balingen	21	1	0,99			
alle 7 Werte	–	7	0,88	0,99	0,93 ± 0,03	
Bure/Frankreich	–	–	–	–	0,60 ± 0,20	ANDRA (2005)
Tournemire/ Frankreich	0,75 ± 0,2 bei 5 MPa effektiver Axialspannung bis ca. 0,5 ± 0,1 bei 25 MPa effektiver Axialspannung					NOIRET et al. (2011)

Für den Biot-Modul des Opalinustons von Mont Terri haben HOXHA et al. (2006) einen Wert von 7,800 GPa angegeben. TE KAMP & KONIETZKY (2009) benutzten bei Berechnungen der Porendrücke ihrer Modelleinheit „Opalinuston“ im Zürcher Weinland einen Biot-Modul von 6,700 GPa. Dieser Wert wird als Biot-Modul auf die Modelleinheit jm1 (Opalinuston) des Referenzprofils SÜD übertragen.

SU (2007) gibt für die Tonsteine des Callovium-Oxfordium (Meuse/Haute-Marne) Biot-Moduln zwischen 0,47 GPa und 10,600 GPa an, wobei die extrem geringen Werte auf eine geringe Entsättigung oder auf die Anwesenheit von Gaseinschlüssen in den Poren der Argillite zurückgeführt werden. Basierend auf theoretischen Beziehungen zwischen gekoppelten Parametern können bei undrainierten E-Moduln von 400 MPa – 6,0 MPa die Biot-Moduln zwischen 4,3 GPa und 8,3 GPa variieren.

Bei Experimenten hinsichtlich des Einflusses von alkalischen Zement-Porenwässern auf die hydraulischen und hydromechanischen Eigenschaften von Tongesteinen des Callovium-Oxfordium hat ROBINET (2005) ein mit einer Mineralauflösung einhergehendes Anwachsen des Biot-Koeffizienten (und auch der Permeabilität) beobachtet. Die Auflösung von smektitartigen Tonmineralen ist dabei der erste Schritt der Wechselwirkung zwischen tonigem Gestein und Zementwässern. Jedoch kann auch die ebenfalls beobachtete Auflösung von TOC die Entwicklung der Permeabilität und des Biot-Koeffizienten beeinflussen. ROBINET (2005) weist darauf hin, dass zur Beurteilung der Entwicklung von Biot-Koeffizient und Permeabilität in späteren Stadien der mineralogischen Umwandlung des Tongesteins weitere Untersuchungen notwendig sind.

## 9.5 Biot-Koeffizient und Biot-Modul für das Nebengebirge

Für die Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD liegen keine Werte für den Biot-Koeffizienten vor, daher wurden Werte aus verschiedenen Veröffentlichungen abgeleitet (Tab. 72). Hou et al. (2014) haben beim Test ihres Modellierungskonzepts an der Bohrung Groß Buchholz GT1 (Modellierte Frac-Ausbreitung) Modellparameter wie Biot-Koeffizienten (horizontal und vertikal) sowie Biot-Moduln für die einzelnen stratigraphischen Einheiten des Buntsandsteins angenommen. Werte für Sandsteine mit unterschiedlichen Porositäten sind in TRAUTWEIN (2005) angegeben, die zwischen 0,6 für dichte und 0,9 für poröse Sandsteine variieren. Biot-Koeffizienten für Sandsteine und Kalksteine haben auch MESRI et al. (1976), RICE & CLEARY (1976), HART & WANG (1995) und FABRE & GUSTKIEWICZ (1997) (zusammengefasst in PATERSON & WONG 2005) ermittelt. Diese Werte können für die Modelleinheiten, für die aus dem Gebiet des süddeutschen Molassebeckens bzw. der Nordschweiz keine Biot-Koeffizienten bekannt sind, verwendet werden.

Tab. 72: Übertragene Biot-Koeffizienten und Biot-Moduln

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Biot-Koeffizient [-]		Biot-Modul [GPa]	Literatur
			horizontal	vertikal		
q	quartäre Lockersedimente	Sande, Kiese	keine Angaben vorhanden			
tms	Untere Süßwassermolasse	Mergelstein (wechselnde Anteile von Kalk und Ton), Kalkstein	Kalksteine: 0,41 – 0,77, Tonsteine: 0,6 – 0,8, Mergelsteine dazwischen angesetzt: 0,5 – 0,7		19,0	FABRE & GUSTKIEWICZ (1997) Hou et al. (2014)
jo3	Hangende-Bankkalk- Fm. Zementmergel- Fm. Liegende-Bankkalk- Fm.	Kalkstein, Mergelstein	0,41 – 0,77 (z. B. Tonnère- Kalkstein: 0,53)		19,0	FABRE & GUSTKIEWICZ (1997) Hou et al. (2014)
jo2	Massenkalk-Fm.	Kalkstein, Dolomitstein	0,41 – 0,77 (z. B. Tonnère- Kalkstein: 0,53)		19,0	FABRE & GUSTKIEWICZ (1997) Hou et al. (2014)
jo1	Untere-Felsenkalke- Fm. Lacunosamergel-Fm. Wohlgeschichtete- Kalke-Fm. Impressamergel-Fm.	Kalkstein, Kalkmergelstein, Mergelstein	0,41 – 0,77 (z. B. Tonnère- Kalkstein: 0,53)		19,0	FABRE & GUSTKIEWICZ (1997) Hou et al. (2014)
jm3	Ornatenton-Fm. Dantalienton-Fm. Hamitenton-Fm. Ostreenkalk-Fm.	Tonmergelstein, einzelne Kalkstein- Lagen	0,41 – 0,77 (z. B. Tonnère- Kalkstein: 0,53)		19,0	FABRE & GUSTKIEWICZ (1997) Hou et al. (2014)
jm2	Wedelsandstein-Fm. Eisensandstein-Fm.	eisenreicher Sandstein (tonig, kalkig), Tongestein, Tonmergelstein	0,6	0,8	19,0	Hou et al. (2014) Solling-Fm. (Wechselfolge von Sand- und Tonsteinen)
jm1	Opalinuston-Fm. (Wirtsgestein)	Tongestein	0,4	0,8	6,7	Referenzwert, s. Text

ME	Lithostratigraphie (vgl. Tab. 2)	Lithologie (vgl. Tab. 2)	Biot-Koeffizient [-]		Biot-Modul [GPa]	Literatur
			horizontal	vertikal		
ju2	Jurensismergel-Fm. Posidonienschiefer-Fm. Amaltheenton-Fm. Numismalmergel-Fm. Obtususton-Fm.	Tonmergelstein, Mergelstein	Kalksteine: 0,41 – 0,77, Tonsteine: 0,6 – 0,8, Mergelsteine dazwischen angesetzt: 0,5 – 0,7		19,0	FABRE & GUSTKIEWICZ (1997) Hou et al. (2014)
ju1	Gryphäensandstein-Fm. Angulatusandstein-Fm. Psilonotenton-Fm.	tonige Sandsteine, sandige Tonmergelsteine, einzelne Kalkstein-Lagen	0,6	0,8	19,0	Hou et al. (2014) (Feinstsandsteine bis Ton-/Schluffsteine)
k3	Trossingen-Fm.	Tonstein, Mergelstein, Karbonat-konkretionen	Kalksteine: 0,41 – 0,77, Tonsteine: 0,6 – 0,8, Mergelsteine dazwischen angesetzt: 0,5 – 0,7		19,0	FABRE & GUSTKIEWICZ (1997) Hou et al. (2014)
k2	Löwenstein-Fm.	Sandstein, untergeordnet Tongestein	0,6	0,8	19,0	Hou et al. (2014) (Wechselfolge Sand- und Tonsteine)
k1	Bunte-Mergel-Schichten Stuttgart-Fm. Benk-Fm. Erfurt-Fm.	Tongestein, feinsandige Schluff-Tongesteine, untergeordnet Dolomitstein und sandige Lagen	0,6	0,8	19,0	Hou et al. (2014) (Tonsteine mit wenig Feinstsandsteinen)
m3	Rottweil-Fm.	Dolomitstein	keine Angaben vorhanden			
m2	Mittlerer Muschelkalk	Anhydrit, einzelne Tongesteinslagen	keine Angaben vorhanden			
m1	Eschenbach-Fm.	toniger, fein- bis grobkörniger arkosischer Sandstein	0,6	0,8	19,0	Hou et al. (2014) (Wechselfolge Sand- und Tonsteine)

## 10 Zusammenfassung

Das Vorhaben AnSichT hat das Ziel, eine Methode des Sicherheitsnachweises für einen HAW-Endlagerstandort im Tongestein zu erarbeiten und dessen Anwendbarkeit für generische Endlagerstandorte in Nord- und Süddeutschland zu testen. In Analogie zum generischen Endlagerstandortmodell NORD ist der vorliegende Ergebnisbericht Teil eines Berichts, der außerdem die Darstellung der geologischen Gesamtsituation des Endlagerstandortmodells SÜD im Bereich des Referenzprofils SÜD (REINHOLD et al. 2015) und die Parameterauswahl für die geplanten thermischen, hydraulischen und mechanischen (THM) Modellberechnungen (MASSMANN 2015) enthält.

Im vorliegenden Berichtsteil werden auf der Grundlage einer umfangreichen Literatursichtung die für den Langzeitsicherheitsnachweis erforderlichen mineralogischen, geochemischen, hydrogeologischen und gesteinsphysikalischen Gesteinseigenschaften zusammengestellt. Solche Werte, die für den Bereich des Referenzprofils SÜD verwendet werden können, stehen aber für den Opalinuston in Süddeutschland kaum oder gar nicht zur Verfügung. Aus diesem Grund wurden Daten für den Opalinuston aus relevanten Tiefbohrungen in der Nordostschweiz und dem Felslabor Mont Terri herangezogen und in Analogieschlüssen und Vergleichen auf die Situation im generischen Endlagerstandortmodell SÜD übertragen.

Da das Felslabor Mont Terri im schweizerischen Faltenjura errichtet, die Tiefbohrungen hingegen im Tafeljura niedergebracht wurden, ergibt sich das Problem, dass der zur Parameterermittlung verwendete Opalinuston aus unterschiedlichen tektonischen Bereichen, unterschiedlichen Teufen und unterschiedlichen lithologischen Fazies stammt. Vor der Übertragung der jeweiligen Parameter von den schweizerischen Opalinuston-Aufschlüssen in den Bereich des Referenzprofils SÜD wurden die Parameter aus möglichst vielen Quellen gesichtet und gut dokumentierte Werte schließlich verwendet. Wo es durchführbar war, wurden für die einzelnen Parameter statistische Angaben mit Werteanzahl, Minimum- und Maximumwerten sowie Standardabweichung aus der Literatur übernommen bzw. berechnet.

Ferner wurden Parameter für das Nebengebirge des Endlagerstandortmodells SÜD zusammengetragen. Da solche Werte in der Literatur für das Süddeutsche Molassebecken nur in geringem Umfang enthalten und entsprechende Daten auch für die Nebengesteine des Opalinustons in der Schweiz nicht verfügbar sind, wurden die Parameterwerte für die entsprechenden Gesteine zum Teil allgemeinen Kompilationen für Sedimente entnommen.

## Literaturverzeichnis

- AKEND (2002): Auswahlverfahren für Endlagerstandorte - Empfehlungen des Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte (AkEnd). – 260 S.; Köln (W und S Druck).
- ALFES, C. & SCHIESSL, P. (1994): Spannungsdehnungsverhalten, Schwinden und Kriechen von Sandsteinen. – In: Sneathlage, R. (Hrsg.): Jahresberichte aus dem Forschungsprogramm Steinzerfall – Steinkonservierung No. 4-1992: 3-17; Berlin (Ernst & Sohn).
- ANAGNOSTOU, G. (2007): Zur Problematik des Tunnelbaus in quellfähigem Gebirge. – Mitteilungen der Schweizerischen Gesellschaft für Boden- und Felsmechanik, 154: 1-9; Bern.
- ANDRA (2005): Dossier 2005 Argile: Tome Phenomenological evolution of a geological repository. – 525 S.; Châtenay-Malabry/France (Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs).
- ANDREWS, J.N. (1985): The isotopic composition of radiogenic helium and its use to study groundwater movement in confined aquifers. – Chem. Geol., 49: 339-351; Amsterdam.
- ANDRULEIT, H., BAHR, A., BÖNNEMANN, C., ERBACHER, J., FRANKE, D., GERLING, J.P., GESTERMANN, N., HIMMELSBACH, T., KOSINOWSKI, M., KRUG, S., PIERAU, R., PLETSCH, T., ROGALLO, U. & SCHLÖMER, S. (2012): Abschätzung des Erdgaspotentials aus dichten Tonsteinen (Schiefergas) in Deutschland. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe: 56 S.; (Hannover).
- ARA-ERES (2004): Guide for Mechanistic-Empirical Design of New and Rehabilitated Pavement Structures : Part 2. Design Inputs : Chapter 2. Material characterization. – ARA, Inc., ERES Consultants Division, Final Report: 83 S.; Champaign, Illinois/ USA.
- BATH, A. & PEARSON, F.J. (2003): Chapter 3: Geochemical Investigations. – In: Pearson, F.J., Arcos, D., Bath, A., Boisson, J.-Y., Fernández, A.M., Gäbler, H.-E., Gaucher, E., Gautschi, A., Griffault, L., Hernán, P. & Waber, H.N. (Hrsg.): Mont Terri Project – Geochemistry of Water in the Opalinus Clay Formation at the Mont Terri Rock Laboratory. Berichte des BWG 5: 36-53; Bern (Bundesamt für Wasser und Geologie).

- BAUER-PLAINDOUX, C., TESSIER, D. & GHOREYCHI, M. (1998): Propriétés mécaniques des roches argileuses carbonatées: importance de la relation calcite-argile. – C. R. Acad. Sci. Paris, Sciences de la Terre et des planètes, 326: 231-237; Paris.
- BLÄSI, H.R., HARTMANN, B., RAMSEYER, K., JUHASZ, A., HAAS, H., BURNS, S. & MATTER, A. (1996): Fazies, Diagenese und wasserführende Systeme in den kalkigen und sandigen Sedimentkörpern von Schilfsandstein bis Dogger  $\beta$ . Teil 2: Diagenese. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Unpubl. Nagra Int. Ber.; Wettingen/Schweiz.
- BLÄSI, H.R., RAMSEYER, K., HAAS, H. & MATTER, A. (2002): Die Paläofluid-Entwicklung in mesozoischen Formationen der Bohrungen Benken, Weiach und Siblingen aufgrund von Porenraum-, Ader- und Drusen-Mineralien mit einem Vergleich zu den Daten von Berlingen, Kreuzlingen, Herdern und Meersburg. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Unpubl. Nagra Int. Ber.; Wettingen/Schweiz.
- BLÄSI, H.R., DEPLAZES, G., SCHNELLMANN, M. & TRABER, D. (2013): Sedimentologie und Stratigraphie des ‚Braunen Doggers‘ und seiner westlichen Äquivalente. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Arbeitsbericht NAB 12-51: 83 S.; Wettingen/Schweiz.
- BOCK, H. (2001): RA Experiment Rock Mechanics Analyses and Synthesis: Data Report on Rock Mechanics. – Mont Terri Project, Technical Report, TR 2000-02: 52 S.; Wabern/Schweiz.
- BOCK, H. (2009): RA Experiment: Updated Review of the Rock Mechanics Properties of the Opalinus Clay of the Mont Terri URL based on Laboratory and Field Testing. – Mont Terri Project, Technical Report, TR 2008-04: 66 S.; Wabern/Schweiz.
- BOIGK, H. (1981): Erdöl und Erdgas in der Bundesrepublik Deutschland – Erdölprovinzen, Felder, Förderung, Vorräte, Lagerstättentechnik. – 330 S.; Stuttgart (Enke).
- BOISSON, J.-Y. (2005): Clay Club Catalogue of Characteristics of Argillaceous Rocks. – NEA, No. 4436: 71; Paris.
- BÖNSCH, C. (2006): Auswirkungen der Saugspannung auf physikalische und mechanische Eigenschaften von überkonsolidierten Tonen und Tonsteinen im Verwitterungsprozess. – 115 + XVII S., Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg; Halle/S.



- BOSSART, P. (2008): Annex 4: Characteristics of the Opalinus Clay at Mont Terri. – In: Bossart, P. & Thury, M. (Hrsg.): Mont Terri Rock Laboratory Project, Programme 1996 to 2007 and Results. Reports of the Swiss Geological Survey 3: Annex 4-1 bis Annex 4-12; Wabern/Schweiz (Swiss Geological Survey).
- BOSSART, P. & THURY, M.E. (2008): Mont Terri Rock Laboratory Project, Programme 1996 to 2007 and Results. Reports of the Swiss Geological Survey 3. – 194 S.; Wabern/Schweiz (Swiss Geological Survey).
- BRADBURY, M.H. & BAEYENS, B. (1998):  $N_2$ -bet Surface Area Measurements on crushed and intact Minerals and Rocks: a Proposal for estimating Sorption Transfer Factors. – Nuclear Technology, 122: 250-253; Arizona.
- BRADBURY, M.H. & BAEYENS, B. (2003): Far-Field Sorption Data Bases for Performance Assessment of a High-Level Radioactive Waste Repository in an Undisturbed Opalinus Clay Host Rock. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Techn. Ber., NTB 02-19: 134 S.; Wettingen/Schweiz.
- BROCH, E. (1974): The influence of water on some rock properties. – In: U.S. National Committee for Rock Mechanics (Hrsg.): Advances in rock mechanics : reports of current research vol. II part A ; proceedings of the third congress of the International Society for Rock Mechanics Themes 1-2, 1-7 September 1974, Denver/Colorado: 33-38; Washington D.C. (National Academy of Sciences).
- BRUNAUER, S., EMMETT, P.H. & TELLER, E. (1938): Adsorption of gases in multimolecular layers. – J. Amer. Chem. Soc., 60: 309-319; Washington.
- BUNTEBARTH, G. (2004): Bestimmung thermophysikalischer Eigenschaften an Opalinustonproben. Laboratory investigations on opalinus clay samples. – 30 S.; Clausthal-Zellerfeld (Geophysikalisch-Technisches Büro).
- ČERMÁK, V. & RYBACH, L. (1982): Thermal properties: Thermal conductivity and specific heat of minerals and rocks. – In: Angenheister, G. (Hrsg.): Landolt-Börnstein - Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik, Neue Serie - Gruppe V: Geophysik und Weltraumforschung, Bd. 1 Physikalische Eigenschaften der Gesteine, Teilband a: 305-343; Berlin (Springer).
- CHIFFOLEAU, S. & ROBINET, J.C. (1999): HE Experiment: Determination of the Hydro-mechanical Characteristics of the Opalinus Clay. – Mont Terri Project, Technical Note, TN 98-36: 39 S.; Wabern/Schweiz.

- CLAUSER, C., HÖHNE, F., HARTMANN, A., RATH, V., DEETJEN, H., RÜHAAK, W., SCHELLSCHMIDT, R. & ZSCHOCKE, A. (2002): Erkennen und Quantifizieren von Strömung: Eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des tiefen Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe. – RWTH Aachen & GGA Hannover, Endbericht zum Auftrag 9X0009-8390-0: 159 S.; Aachen und Hannover.
- CZAIKOWSKI, O., WOLTERS, R., DÜSTERLOH, U. & LUX, K.-H. (2006): Laborative und numerische Grundlagenuntersuchungen zur Übertragbarkeit von Stoffmodellansätzen und EDV-Software für Endlager im Salzgestein auf Endlager im Tongestein. – Lehrstuhl für Deponietechnik und Geomechanik, Technische Universität Clausthal, Germany, Abschlussbericht: 270 S.; Clausthal-Zellerfeld.
- D'ANS, J. & LAX, E. (1998): Taschenbuch für Chemiker und Physiker (hrsg. von R. Blachnik). – Bd. 3, 4. Aufl.: 1463 S.; Berlin (Springer).
- DACHROTH, W.R. (2002): Handbuch der Baugeologie und Geotechnik. – 681 S.; Berlin (Springer).
- DEGUELDRE, C., SCHOLTIS, A., LAUBE, A., TURRERO, M.J. & THOMAS, B. (2003): Study of pore water chemistry through an argillaceous formation: A hydropaleochemical approach. – Appl. Geochem., 18: 55-73; Oxford.
- DEURER, R. (1974): Mikrostrukturelle Untersuchungen an Opalinustonproben aus SW-Deutschland. – 58 S., Diplomarbeit, Ruprecht-Karls-Universität; Heidelberg.
- DILL, H.G., SACHSENHOFER, R.F., GRECUA, P., SASVARI, T., PALINKAS, L.A., BOROJEVIC-SOSTAROC, S., STRMIC-PALINKAS, S., PROCHASKA, W., GARUTI, G., ZACCARINI, F., ARBOUILLE, D. & SCHULZ, H.-M. (2008): Fossil fuels, ore and industrial minerals. – In: McCann, T. (Hrsg.): The Geology of Central Europe – Volume 2: Mesozoic and Cenozoic: 1341-1449; London (The Geological Society).
- EINSELE, G. & WALLRAUCH, E. (1964): Verwitterungsgrade bei mesozoischen Schiefertönen und Tonsteinen und ihr Einfluss bei Standsicherheitsproblemen. – In: DGEG (Hrsg.): Vorträge der Baugrundtagung 1964, Berlin: 59-89; Essen (Deutsche Gesellschaft für Erd- und Grundbau).
- ELIE, M. & MAZUREK, M. (2008): Biomarker transformations as constraints for the depositional environment and for maximum temperatures during burial of Opalinus Clay and Posidonia Shale in northern Switzerland. – Appl. Geochem., 23: 3337-3354; Oxford.

- ESPITALIÉ, J., LAPORTE, J.L., MADEC, M., MARQUIS, F., LEPLAT, P., PAULET, J. & BOUTEFÉU, A. (1977): Méthode rapide de caractérisation des roches mères, de leur potentiel pétrolier et de leur degré d'évolution. – Rev. Inst. franç. Pétrole 32: 23-42; Paris.
- FABRE, D. & GUSTKIEWICZ, J. (1997): Poroelastic Properties of Limestones and Sandstones under Hydrostatic Conditions. – Int. J. Rock Mech. Min. Sci., 34: 127-134; Oxford.
- FEHN, C., WIRSING, G. & ENGESSER, W. (2010): Informationssystem Speichergesteine für den Standort Deutschland – eine Grundlage zur klimafreundlichen geotechnischen und energetischen Nutzung des tieferen Untergrundes (Speicher-Kataster Deutschland). – Baden-Württemberg, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau, Endbericht (Erstellung von Potenzialkarten in Baden-Württemberg): 114 S.; Freiburg i. Br.
- FERNÁNDEZ, A.M., BATH, A., WABER, H.N. & OYAMA, T. (2003): Annex 2: Water Sampling by Squeezing Drillcores. – In: Pearson, F.J., Arcos, D., Bath, A., Boisson, J.-Y., Fernández, A.M., Gäbler, H.-E., Gaucher, E., Gautschi, A., Griffault, L., Hernán, P. & Waber, H.N. (Hrsg.): Mont Terri Project – Geochemistry of Water in the Opalinus Clay Formation at the Mont Terri Rock Laboratory. Berichte des BWG, Serie Geologie 5: 171-199; Bern/Schweiz (Bundesamt für Wasser und Geologie).
- FERRARI, A., FAVERO, V., MANCA, D. & LALOU, L. (2012): Geotechnical characterization of core samples from the geothermal well Schlattingen SLA-1 by LMS/EPFL (EPFL-REPORT-186579). – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Arbeitsbericht NAB 12-50: 69 S.; Wettingen/Schweiz.
- FHWA (2011): Coefficient of Thermal Expansion in Concrete Pavement Design. – <http://www.fhwa.dot.gov/pavement/concrete/pubs/hif09015/>. (Zugriff: 16.07.2015).
- FJAER, E., HOLT, R.M., HORSRUD, P., RAAEN, A.M. & RISNES, R. (2008): Petroleum related rock mechanics. – 2. Aufl.: 491 S.; Amsterdam (Elsevier).
- GAUCHER, E.C., FERNÁNDEZ, A.M. & WABER, H.N. (2003): Annex 9: Rock and Mineral Characterisation of the Opalinus Clay Formation. – In: Pearson, F.J., Arcos, D., Bath, A., Boisson, J.-Y., Fernández, A.M., Gäbler, H.-E., Gaucher, E., Gautschi, A., Griffault, L., Hernán, P. & Waber, H.N. (Hrsg.): Mont Terri Project – Geochemistry of Water in the Opalinus Clay Formation at the Mont Terri Rock Laboratory. Berichte des BWG, Serie Geologie 5: 281-303; Bern/Schweiz (Bundesamt für Wasser und Energie).

- GAUTSCHI, A., ROSS, C. & SCHOLTIS, A. (1993): Pore water–groundwater relationships in Jurassic shales and limestones of Northern Switzerland. – In: Manning, D., Hall, P., Hughes, C. (Hrsg.): *Geochemistry of Clay-Pore Fluid Interactions*: 412-422; London (Chapman & Hall).
- GEBRANDE, H. (1982a): Elasticity and inelasticity: Elastic wave velocities and constants of elasticity of rocks at room temperature and pressures up to 1 GPa. – In: Angenheister, G. (Hrsg.): *Landolt-Börnstein - Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik, Neue Serie - Gruppe V: Geophysik und Weltraumforschung, Bd. 1 Physikalische Eigenschaften der Gesteine, Teilband b*: 35-99; Berlin (Springer).
- GEBRANDE, H. (1982b): Elasticity and inelasticity: Elastic wave velocities and constants of elasticity at normal conditions. – In: Angenheister, G. (Hrsg.): *Landolt-Börnstein - Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik, Neue Serie - Gruppe V: Geophysik und Weltraumforschung, Bd. 1 Physikalische Eigenschaften der Gesteine, Teilband b*: 8-35; Berlin (Springer).
- GENS, A. (2000): HE Experiment: Complementary Rock Laboratory Tests. Laboratory Interim Report Phase 3. – Mont Terri Project, Technical Note, TN 2000-47: 13 S.; Wabern/Schweiz.
- GENS, A., VAUNAT, J., GARITTE, B. & WILEVEAU, Y. (2007): In situ behaviour of a stiff layered clay subject to thermal loading: observations and interpretation. – *Geotechnique*, 57(2): 207-228; London.
- GERARDI, J. (2005): Barrierewirksame Eigenschaften von Ton und Tonstein: Fachinformationssystem BETTON – Version 5.1\_U (27.01.2011). – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Bereich: Geotechnik/Endlagerung, Projektlaufzeit 01/2002–12/2007, [www.bgr.bund.de](http://www.bgr.bund.de); Hannover.
- GIMMI, T. (2003): Porosity, pore structure, and energy state of porewater of Opalinus Clay from Benken. – Nagra, Unpubl. Nagra Int. Ber.; Baden/Schweiz.
- GOLDSTEIN, R.H. & REYNOLDS, T.J. (1994): Systematics of fluid inclusions in diagenetic minerals (SEPM short course 31). – 199 S.; Tulsa (Society for Sedimentary Geology).
- GRÄSLE, W. & PLISCHKE, I. (2009): Laboratory Testing of Opalinus Clay (LT) Experiment: Strength and Deformation of Opalinus Clay: Data report from Phase 13. – Mont Terri Project, Technical Note, TN 2008-81: 47 S.; Wabern/Schweiz.

- GRÄSLE, W. & PLISCHKE, I. (2010): Laboratory Testing (LT) Experiment: Mechanical Behavior of Opalinus Clay, Final report from Phases 6–14. – Mont Terri Project, Technical Report, TR 2009-07: 63 S.; Wabern/Schweiz.
- GRIMMELMANN, W., HANNEMANN, M., HECHT, G., MUELLER, A., PLUM, H., PRETSCHOLD, H.-H., SCHARPFF, H.-J. & SCHLIMM, W. (1997): Hydrogeologische Kartieranleitung - AD-HOC-Arbeitsgruppe Hydrogeologie. – Geol. Jb., G2: 3-157; Hannover.
- GROB, H. (1972): Schwelldruck im Belchentunnel. – In: Kovari, K. & Grob, H. (Hrsg.): Berichte Internationales Symposium für Untertagbau, 11.-14. September 1972, Luzern: 99-109; Zürich (Schweizerische Gesellschaft für Boden- und Felsmechanik).
- GRUNENBERG, T. (2004): Sedimentpetrographische Aspekte eines Riffkalkes am Beispiel des Kelheimer Auerkalks. – Erlanger Beitr. Petr. Min., 14: 25-34; Erlangen.
- HART, D.J. & WANG, H.F. (1995): Laboratory measurements of a complete set of poroelastic moduli for Berea sandstone and Indiana limestone. – Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 100(B9): 17741-17751; Hoboken, New Jersey/USA.
- HARVEY, R.D. (1967): Thermal expansion of certain Illinois limestones and dolomites (Circular 415 // Illinois State Geological Survey). – 33 S.; Urbana, Illinois/USA (Illinois State Geological Survey).
- HEKEL, U. (1992): Forschungsprojekt „Gebirgseigenschaften mächtiger Tonsteinserien“ (FGmT). – GLA Baden-Württemberg, Forschungsbericht: 190 S.; Freiburg i. Br.
- HEKEL, U. (1994): Hydrogeologische Erkundung toniger Festgesteine am Beispiel des Opalinustons (Unteres Aalenium). – Tübinger Geowissenschaftliche Arbeiten, C18: 170 S.; Tübingen.
- HOMAND, F., PEPA, S. & HENRY, J.P. (1996): Laboratory measurements on Opalinus Clay samples. – Mont Terri Project, Technical Report, TR 96-22: 16 S.; Wabern/Schweiz.
- HOTH, P., WIRTH, H., REINHOLD, K., BRÄUER, V., KRULL, P. & FELDRAPPE, H. (2007): Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen Deutschlands. Untersuchung und Bewertung von Tongesteinsformationen. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe: 118 S. (Berlin/Hannover).

- HOU, M.Z., KRACKE, T., GOU, Y., LUO, X. & XING, W. (2014): Konzepte zur Begrenzung der mikroseismischen Aktivität bei der energetischen Nutzung geothermischer Systeme im tiefen Untergrund. Einzelprojekt 6: THM:C gekoppelte Untersuchungen zu Mechanismen und freigesetzten Deformationsenergien der seismischen Ereignisse in der Reservoirstimulations- und Betriebsphase. – Energie-Forschungszentrum Niedersachsen, Technische Universität Clausthal, Abschlussbericht zum Verbundprojekt MAGS (Förderkennzeichen 0325191E): 97 S.; Goslar.
- HOUBEN, M.E. (2013): In situ characterization of the microstructure and porosity of Opalinus Clay (Mont Terri Rock Laboratory, Switzerland). – 192 S., Dissertation, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule; Aachen.
- HOXHA, D., JIANG, Z., HOMAND, F., GIRAUD, A., SU, K. & WILEVEAU, Y. (2006): Impact of THM constitutive behavior on the rock-mass response: case of HE-D experiment in Mont Terri Underground Rock Laboratory. – In: Cotthem, A.v., Charlier, R., Thimus, J.-F. & Tshibangu, J.-P. (Hrsg.): Eurock 2006 - Multiphysics Coupling and Long Term Behaviour in Rock Mechanics: Proc. Intern. Symp. Intern. Soc. Rock Mechanics, Eurock 2006, 9-12 May 2006, Liège/Belgium: 199-206; Hoboken (Taylor & Francis).
- JACKSON, M.L. (1964): Specific surface measurements by glycerol sorption. – In: Rich, C.I. & Kunze, G.W. (Hrsg.): Soil clay mineralogy – a symposium: 263-269; Chapel Hill (The University of North Carolina Press).
- JAHN, S. & SÖNNKE, J. (2013): Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT). – Endlagerstandortmodell Nord (AnSichT) - Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Zwischenbericht: 72 S.; Hannover.
- JOBMANN, M., POLSTER, M. & SCHONEBECK, M. (2007a): Investigation on Thermal Expansion Effects in Clay Formations (TEE - Final Report). – DBE TECHNOLOGY GmbH, Abschlussbericht (FKZ 02E9531): 131 S.; Peine.
- JOBMANN, M., AMELUNG, P., BILLAUX, D., POLSTER, M., SCHMIDT, H. & UHLIG, L. (2007b): Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Auslegung eines generischen Endlagers im Tonstein (F+E-Vorhaben GENESIS). – DBE TECHNOLOGY GmbH, Abschlussbericht: 84 S.; Peine.



- JODOCY, M. & STOBER, I. (2011): Porositäten und Permeabilitäten im Oberrheingraben und Südwestdeutschen Molassebecken. – Erdöl Erdgas Kohle, 127: 20-27; Hamburg.
- KAUFHOLD, A., GRÄSLE, W., PLISCHKE, I., DOHRMANN, R. & SIEGISMUND, S. (2013): Influence of carbonate content and micro fabrics on the failure strength of the sandy facies of the Opalinus Clay from Mont Terri (Underground Rock Laboratory). – Engineering Geology, 156: 111-118; Amsterdam.
- KEELING, P.S., KIRBY, E.C. & ROBERTSON, R.H.S. (1980): Moisture adsorption and specific surface area. – J. Brit. Ceram. Soc., 79: 36-40; Stoke-on-Trent.
- KERN, H. (1982): Elastic wave velocities and constants of elasticity of rocks at elevated pressures and room temperatures. – In: Angenheister, G. (Hrsg.): Landolt-Börnstein - Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik, Neue Serie - Gruppe V: Geophysik und Weltraumforschung, Bd. 1 Physikalische Eigenschaften der Gesteine, Teilband b: 99-140; Berlin (Springer).
- KESSLER, D.W. & SLIGH, W.H. (1927): Physical properties of the principal commercial limestones used for building construction in the United States. – Technologic Papers of the Bureau of Standards, No. 349: 497-590; Washington.
- KLINKENBERG, M., KAUFHOLD, S., DOHRMANN, R. & SIEGISMUND, S. (2009): Influence of carbonate micro fabric on the failure strength of claystones. – Engineering Geology, 107: 42-54; Amsterdam.
- KOCHER, M. (2005): Quelldruckmessungen und thermische Druckmessungen an ausgewählten Sandsteinen. – 129 S., Dissertation, Ludwig-Maximilians-Universität München; München.
- KOHLRAUSCH, F. (1996): Praktische Physik – Zum Gebrauch für Unterricht, Forschung und Technik. – Bd. 3, 24. Aufl.: 629 S.; Stuttgart (B. G. Teubner).
- KRISCHKE, A. & WEBER, J. (1981): Erfahrungen bei der Erstellung großer Tunnelquerschnitte. – In: Müller, L. (Hrsg.): Rock Mechanics, Suppl. 11: Ingenieurgeologie und Geomechanik im Talsperren- und Tunnelbau – Vorträge des 29. Geomechanik-Kolloquiums der Österreichischen Gesellschaft für Geomechanik, 9. und 10. Oktober 1980, Salzburg: 107-126; Wien (Springer).
- LANGER, V.W., BLÄSI, H.R., MAZUREK, M. & WABER, H.N. (2001): Geological and mineralogical investigations at Benken. – NAGRA, Unpubl. Nagra Int. Ber.; Wettingen/Schweiz.



- LANGKUTSCH, U., KÄBEL, H., MARGANE, A. & SCHWAMM, G. (1998): Projekt ERA Morsleben, Hydrogeologische Standortbeschreibung und Modellgrundlagen. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Abschlussbericht: 344 S.; Berlin.
- LARUE, J. (2010): Entwicklung eines synthetischen Tonsteinstandortes Teil 2: Standortcharakterisierung (Projekt VerSi Endlagerung im Tonstein Abschlussbericht zum Vorhaben 3607R02538 „Untersuchung aktueller planerischer Grundsatzfragen zur Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen“). – GRS Abschlussbericht: 107 S.; Köln.
- LBEG (2007): Bei der Erforschung der Kohlenwasserstoff-Potenziale Süddeutschlands gewonnenen Erkenntnisse über den tieferen Untergrund. Eine erdölgeologische Spurensicherung. Teil 1: Alpen und Alpenvorland („Alpenvorlandsstudie“). – 690 S., 2 CDs; Hannover (LBEG).
- LEHMANN, B.E. & LOOSLI, H.H. (1991): Isotopes formed by underground production. – In: Pearson, F.J., Balderer, W., Loosli, H.H., Lehmann, B.E., Matier, A., Peter, T., Schmassmann, H. & Gautschi, A. (Hrsg.): Applied isotope hydrogeology – a case study in Northern Switzerland (Studies in Environmental Science 43): 239-296; Amsterdam (Elsevier).
- LEYTHAEUSER, D., SCHAEFER, R.G., CORNFORD, C. & WEINER, B. (1979): Generation and migration of light hydrocarbons (C<sub>2</sub>–C<sub>7</sub>) in sedimentary basins. – Org. Geochem., 1(4): 191-204; London.
- LEYTHAEUSER, D., SCHAEFER, R.G. & YÜKLER, A. (1980): Diffusion of light hydrocarbons through near-surface rocks. – Nature, 284: 522-525; London.
- LEYTHAEUSER, D., SCHAEFER, R.G. & POOCH, H. (1983): Diffusion of light hydrocarbons in subsurface sedimentary rocks. – Bull. amer. Assoc. Petroleum Geol., 67: 889-895; Tulsa.
- MADSEN, F.T. (1976): Quelldruckmessung an Tongesteinen und Berechnung des Quelldruckes nach der DLVO-Theorie. – Mitt. Institut für Grundbau und Bodenmechanik ETH Zürich, 108: 65 S.; Zürich.
- MADSEN, F.T. & MÜLLER-VONMOOS, M. (1985): Swelling pressure calculated from mineralogical properties of a Jurassic opalinum shale, Switzerland. – Clays and Clay Minerals, 33: 501-509; Oxford.

- MADSEN, F.T. & MÜLLER-VONMOOS, M. (1989): The swelling behaviour of clays. – Applied Clay Science, 4: 143-156; Amsterdam.
- MADSEN, F.T. & NÜESCH, R. (1990): Langzeitquellenverhalten von Tongesteinen und tonigen Sulfatgesteinen. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Techn. Ber., NTB 90-17: 51 S.; Baden/Schweiz.
- MADSEN, F.T. & NÜESCH, R. (1991): The Swelling Behaviour of Clay-Sulfate Rocks. – In: Wittke, W. (Hrsg.): Proc. 7th International Congress on Rock Mechanics, 16-20 September 1991, Aachen: 285-288; Rotterdam (A.A. Balkema).
- MARSCHALL, P., CROISÉ, J., SCHLICKENRIEDER, L., BOISSON, J.Y., VOGEL, P. & YAMAMOTO, S. (2003): Synthesis of hydrogeological investigations at the Mont Terri site (Phases 1-5). – Mont Terri Project, Technical Report, TR 2001-02: 116 S.; Wabern/Schweiz.
- MASSMANN, J. (2016): Projekt AnSichT – Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein. – Endlagerstandortmodell SÜD. Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Modellberechnungen im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises am Endlagermodellstandort SÜD. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Ergebnisbericht: 20 S.; Hannover.
- MATTER, A. (1984): 3. Sedimentologische Untersuchungen an Bohrkernen. – In: NAGRA (Hrsg.): Die Kernbohrung Beznau. Nagra Techn. Ber., NTB 84-34: 16-34; Baden/Schweiz (Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle).
- MATTHESS, G. & UBELL, K. (1983): Allgemeine Hydrogeologie - Grundwasserhaushalt (Lehrbuch der Hydrogeologie Bd. 1). – 438 S.; Berlin (Gebr. Bornträger).
- MAZUREK, M. (1998): Mineralogical composition of Opalinus Clay at Mont Terri - a laboratory intercomparison. – Mont Terri Project, Technical Note, TN 98-41: 14 S.; Wabern/Schweiz.
- MAZUREK, M. (1999): Mineralogy of the Opalinus Clay. – In: Thury, M., Bossart, P. (Hrsg.): Results of the hydrogeological, geochemical and geotechnical experiments performed in 1996 and 1997 (Geologische Berichte Landeshydrologie und -geologie Nr. 23): 15-18; Bern (Swiss National Hydrological and Geological Survey).

- MAZUREK, M. (2001): Sprödstrukturen und potentielle Migrationspfade im Opalinuston und seinen Rahmengesteinen. – Mont Terri Project, Unpubl. Nagra Int. Ber.; Wettingen/Schweiz.
- MAZUREK, M. (2011): Aufbau und Auswertung der Gesteinsparameter-Datenbank für Opalinuston, den ‚Braunen Dogger‘, Effinger Schichten und Mergel-Formationen des Helvetikums. – NAGRA, Nagra Arbeitsbericht, NAB 11-20: 50 S.; Wettingen/Schweiz.
- MESRI, G., ADACHI, K. & ULLRICH, C.R. (1976): Pore-pressure response in rock to undrained change in all-round stress. – Geotechnique, 26(2): 317-330; London.
- MÖLLER, U. (1993): Thermo-hygrische Formänderungen und Eigenspannungen von natürlichen und künstlichen Mauersteinen. – 85 S., Dissertation, Universität Stuttgart; Stuttgart.
- MUALEM, Y. (1976): A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. – Water Resources Res., 12(6): 513-522; Washington.
- MUKHOPADHYAY, P.K. & LEYTHAEUSER, D. (1984): 6. Art und Reife des organischen Materials in Bohrkernen der mesozoischen Sedimente. – In: NAGRA (Hrsg.): Die Kernbohrung Beznau. Nagra Techn. Ber., NTB 84-34: 54-64; Baden/Schweiz (Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle).
- NAGRA (1984): Die Kernbohrung Beznau. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Techn. Ber., NTB 84-34: 111 S.; Baden/Schweiz.
- NAGRA (1988a): Sondierbohrung Weiach. Geologie. Textband. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Techn. Ber., NTB 86-01: 438 S.; Wettingen/Schweiz.
- NAGRA (1988b): Sedimentstudie - Zwischenbericht 1988: Möglichkeiten zur Endlagerung langlebiger radioaktiver Abfälle in den Sedimenten der Schweiz. Textband. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Techn. Bericht, NTB 88-25: 456 S.; Basel/Schweiz.
- NAGRA (2001): Sondierbohrung Benken - Untersuchungsbericht (Text- und Beilagenband). – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Techn. Ber., NTB 00-01: 288 S.; Wettingen/Schweiz.

- NAGRA (2002): Projekt Opalinuston: Synthese der geowissenschaftlichen Untersuchungsergebnisse. Entsorgungsnachweis für abgebrannte Brennelemente, verglaste hochaktive sowie langlebige mittelaktive Abfälle. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Techn. Ber., NTB 02-03: 659 S.; Wettingen/Schweiz.
- NEUERBURG, R. (2005): Bericht zu ingenieurgeologischen Erhebungen und geotechnischen Untersuchungen Vorbegutachtung im Rahmen des ROV. – Obermeyer Planen und Beraten GmbH, 45 S.; München.
- NIPP, H.-K. & HEUSERMANN, S. (2000): Erkundungsbergwerk Gorleben: Gebirgsmechanische Beurteilung der Integrität der Salzbarriere im Erkundungsbereich EB1 für das technische Endlagerkonzept 1 (Bohrlochlagerung BSK3). – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Ergebnisbericht: 45 S.; Hannover.
- NÜESCH, R. (1991): Das mechanische Verhalten von Opalinuston. – Mitteilungen aus dem Geologischen Institut der Eidg. Technischen Hochschule und der Universität Zürich Neue Folge: 1-244; Zürich.
- PASQUIOU, A. & ROBINET, J.C. (1997): Hydrodynamic characterization of the Opalinus Clay. – Mont Terri Project, Technical Note, TN 97-38: 21 S.; Wabern/Schweiz.
- Paterson, M.S. & Wong, T.-F. (2005): Experimental Rock Deformation – The Brittle Field. – 348 S.; Berlin (Springer).
- PAUL, A. (1981): Empfehlung Nr. 11 des Arbeitskreises 19 - Versuchstechnik Fels - der Deutschen Gesellschaft für Erd- und Grundbau e.V. Quellversuche an Gesteinsproben. – Bautechnik, 63: 100-104; Berlin.
- PEARSON, F.J. (Hrsg.) (1998): Geochemical and other porosity types in clay-rich rocks. – 259-262 S.; Rotterdam.
- PEARSON, F.J. (1999): What is the porosity of a mudrock? – In: Aplin, A.C., Fleet, A.J. & Macquaker, J.H.S. (Hrsg.): Muds and Mudstones: Physical and Fluid Flow Properties (Geol. Soc. Spec. Publ. 158): 9-21; London (Geological Society).
- PEARSON, F.J., ARCOS, D., BATH, A., BOISSON, J.-Y., FERNÁNDEZ, A.M., GÄBLER, H.-E., GAUCHER, E., GAUTSCHI, A., GRIFFAULT, L., HERNÁN, P. & WABER, H.N. (Hrsg.) (2003a): Mont Terri Project – Geochemistry of Water in the Opalinus Clay Formation at the Mont Terri Rock Laboratory (Berichte des BWG, Serie Geologie 5). – 319 S.; Bern/Schweiz (Bundesamt für Wasser und Geologie).

- PEARSON, F.J., ARCOS, D., GAUCHER, E. & WABER, H.N. (2003b): Chapter 5: Pore Water Chemistry and Geochemical Modelling. – In: Pearson, F.J., Arcos, D., Bath, A., Boisson, J.-Y., Fernández, A.M., Gäbler, H.-E., Gaucher, E., Gautschi, A., Griffault, L., Hernán, P. & Waber, H.N. (Hrsg.): Mont Terri Project – Geochemistry of Water in the Opalinus Clay Formation at the Mont Terri Rock Laboratory. Berichte des BWG, Serie Geologie 5: 67-104; Bern/Schweiz (Bundesamt für Wasser und Geologie).
- PEARSON, F.J., FERNÁNDEZ, A.M., GABORIAU, H., WABER, H.N. & BATH, A. (2003c): Annex 10: Porosity and Water Content of Mont Terri Claystones. – In: Pearson, F.J., Arcos, D., Bath, A., Boisson, J.-Y., Fernández, A.M., Gäbler, H.-E., Gaucher, E., Gautschi, A., Griffault, L., Hernán, P. & Waber, H.N. (Hrsg.): Mont Terri Project – Geochemistry of Water in the Opalinus Clay Formation at the Mont Terri Rock Laboratory. Berichte des BWG, Serie Geologie 5: 304-315; Bern/Schweiz (Bundesamt für Wasser und Geologie).
- PETERS, T. (1984a): 4. Mineralogische Untersuchungen an Bohrkernen. – In: NAGRA (Hrsg.): Die Kernbohrung Beznau. Nagra Techn. Ber. NTB 84-34: 35-41; Baden/Schweiz (Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle).
- PETERS, T. (1984b): 5. Anorganisch-geochemische Untersuchungen an Bohrkernen. – In: Abfälle, N.G.f.d.L.r. (Hrsg.): Die Kernbohrung Beznau. Nagra Techn. Ber., NTB 84-34: 41-42; Baden/Schweiz (Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle).
- PLUM, H., ONDREKA, J. & ARMBRUSTER, V. (2008): Hydrogeologische Einheiten in Baden Württemberg. – LGRB-Informationen, 20: 1-106; Freiburg i. Br.
- PRINZ, H. (1991): Abriß der Ingenieurgeologie – mit Grundlagen der Boden- und Felsmechanik, des Erd-, Grund- und Tunnelbaus sowie der Abfalldeponien. – 2. Aufl.: 466 S.; Stuttgart (Enke).
- RATH, V. & CLAUSER, C. (2005): Erkennen und Quantifizieren von Strömung : eine geothermische Rasteranalyse zur Klassifizierung des tiefen Untergrundes in Deutschland hinsichtlich seiner Eignung zur Endlagerung radioaktiver Stoffe. – Geophysica Beratungsges., Endbericht der Geophysica Beratungsgesellschaft mbH Fortsetzung (9WS 0009-8497-2 : Auftrag Nr.: 9X0009-8497-2): 209 S.; Stolberg.

- REINHOLD, K. & SÖNNKE, J. (2012): Geologische Referenzprofile in Süd- und Norddeutschland als Grundlage für Endlagerstandortmodelle im Tongestein. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Zwischenbericht: 20 S.; Berlin/Hannover.
- REINHOLD, K., STARK, L., KÜHNLENZ, T. & PTOCK, L. (2016): Projekt AnSichT – Methodentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein. – Endlagerstandortmodell SÜD. Teil I: Beschreibung des geologischen Endlagerstandortmodells. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Ergebnisbericht: 71 S.; Berlin/Hannover.
- RICE, J.R. & CLEARY, M.P. (1976): Some Basic Stress Diffusion Solutions for Fluid-Saturated Elastic Porous Media With Compressible Constituents. – Reviews of Geophysics and Space Physics, 14(2): 227-241; Hoboken, New Jersey/USA.
- RICHTER, D. (1989): Ingenieur- und Hydrogeologie. – 605 S.; Berlin (Walter de Gruyter).
- ROBINET, J.C. (2005): 8.3 The effect of high-pH cement pore waters on the hydrolic and hydromechanical properties of Callovo-Oxfordian Clay. – In: European Commission (Hrsg.): ECOCLAY II - Effects of Cement on Clay Barrier Performance - Phase II (Final Report): 179-188; Luxembourg (Off. for Off. Publ. of the Europ. Communities).
- RÖHL, H.-J. & SCHMID-RÖHL, A. (2005): Lower Toarcian (upper Liassic) black shales of the Central European epicontinental basin: a sequence stratigraphic case study from the SW German Posidonia Shale. – In: Harris, N.B. (Hrsg.): The Deposition of Organic-Carbon-Rich Sediments: Models, Mechanisms, and Consequences: 165-189; Tulsa/Oklahoma (SEPM Special Publication).
- ROSENHOLTZ, J.L. & SMITH, D.T. (1949): Linear thermal expansion of calcite, var. Iceland spar, and Yule marble. – American Mineralogist, 34: 846-854; Washington D.C.
- RÜBEL, A. & LEHMANN, B.E. (2003): Annex 5: Extraction and Analyses of Noble Gases in Pore Waters and Minerals. – In: Pearson, F.J., Arcos, D., Bath, A., Boisson, J.-Y., Fernández, A.M., Gäbler, H.-E., Gaucher, E., Gautschi, A., Griffault, L., Hernán, P. & Waber, H.N. (Hrsg.): Mont Terri Project – Geochemistry of Water in the Opalinus Clay Formation at the Mont Terri Rock Laboratory. Berichte des BWG, Serie Geologie 5: 245-254; Bern/Schweiz (Bundesamt für Wasser und Geologie).



- RÜBEL, A.P., SONNTAG, C., LIPPMANN, J., PEARSON, F.J. & GAUTSCHI, A. (2002): Solute transport in formations of very low permeability: Profiles of stable isotope and dissolved noble gas contents of pore water in the Opalinus Clay, Mont Terri, Switzerland. – *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 66: 1311-1321; New York.
- RUMMEL, F. (1982): 3.2 Fracture and flow of rocks and minerals. – In: Angenheister, G. (Hrsg.): *Landolt-Börnstein - Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik, Neue Serie - Gruppe V: Geophysik und Weltraumforschung, Bd. 1 Physikalische Eigenschaften der Gesteine, Teilband b*: 141-238; Berlin (Springer).
- RUST, S. & ZIEGLER, H.-J. (2014): Formationsspezifische Baugrundmodelle für das geologische Standortgebiet Nördlich Lägern als Proxi für den Faziesraum Ost. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Arbeitsbericht NAB 13-30: 89 S.; Wettingen/Schweiz.
- RVBO/LGRB (2005): Regionalverband Bodensee – Oberschwaben / Regierungspräsidium Freiburg, Landesamt für Geologie, Rohstoffe und Bergbau: Die Nutzung der Erdwärme in der Region Bodensee-Oberschwaben. Oberflächennahe Geothermie und Tiefe Geothermie/Hydrogeothermie.
- RYBACH, L. (1984a): Wärmeleitfähigkeit. – In: NAGRA (Hrsg.): Die Kernbohrung Beznau. Nagra Techn. Ber., NTB 84-34: 39-41; Baden/Schweiz (Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle).
- RYBACH, L. (1984b): Radiometrische Bestimmung der Uran-, Thorium- und Kalium-Gehalte. – In: NAGRA (Hrsg.): Die Kernbohrung Beznau. Nagra Techn. Ber., NTB 84-34: 43-53; Baden/Schweiz (Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle).
- SCHAEFER, R.G., LEYTHAEUSER, D. & VON DER DICK, H. (1983): Generation and migration of low-molecular-weight hydrocarbons in sediments from Site 511 of DSDP / IPOD Leg 71, Falkland Plateau, South Atlantic. – In: Bioroy, M., Albrecht, C., Cornford, C., de Groot, K., Eglinton, G., Galimov, E., Leythaeuser, D., Pelet, R., Rullkötter, J. & Speers, G. (Hrsg.): *Advances in Organic Geochemistry 1981*: 164-174; Chichester (Wiley & Sons).
- SCHAEFER, R.G. & LEYTHAEUSER, D. (1984): 7. Genese von Kohlenwasserstoffen in den Lias- und Dogger-Sedimenten. – In: NAGRA (Hrsg.): Die Kernbohrung Beznau. Nagra Techn. Ber., NTB 84-34: 65-77; Baden/Schweiz (Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle).



- SCHNIER, H. (2004): Documentation of laboratory triaxial strength tests. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Bericht (Contract N° FIKW-CT-2001-00132, Project N° FIS5-2001-00024): 14 S. (ohne App.) S.; Hannover.
- SCHNIER, H. & STÜHRENBERG, D. (2006): LT Experiment: Strength tests on cylindrical specimens, documentation and evaluation (phases 8 & 9). – Mont Terri Project, Technical Note, TN 2004-87: 124 S.; Wabern/Schweiz.
- SCHOLTIS, A., JONES, M., SCHWARK, L. & VLIEX, M. (1999): Organic Matter Characterisation of Rocks and Porewaters. – In: Thury, M. & Bossart, P. (Hrsg.): Mont Terri Rock Laboratory – Results of the hydrogeological, geochemical and geotechnical experiments performed in 1996 and 1997 (Geol. Ber. Landeshydrol. u. -geol. 23): 152-156; Bern (Bundesamt für Wasser und Geologie).
- Schweizerische Geotechnische Kommission (Hrsg.) (1997): Die mineralischen Rohstoffe der Schweiz. – 522 S.; Zürich (Schweizerische Geotechnische Kommission).
- SIEGESMUND, S., POPP, T., KAUFHOLD, A., DOHRMANN, R., GRÄSLE, W., HINKES, R. & SCHULTE-KORTNACK, D. (2014): Seismic and mechanical properties of Opalinus Clay: comparison between sandy and shaly facies from Mont Terri (Switzerland). – Environ. Earth Sci., 71: 3737-3749; Berlin.
- STARK, L. (2014): Projekt AnSichT – Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Geowissenschaftliche Langzeitprognose für Süddeutschland – ohne Endlagereinfluss. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Ergebnisbericht: 152 S.; Hannover.
- STIEGELER, R., HEYER, D. & BAUMGÄRTEL, T. (2006): Aufbereitung und Einbau veränderlich fester Gesteine. – Forschung Straßenbau und Straßenverkehrstechnik, Heft 931: 1-83; Bonn.
- STRAYLE, G., STÖBER, I. & SCHLOZ, W. (1994): Ergiebigkeitsuntersuchungen in Festgesteinsaquiferen. – GLA-Informationen, 6/94: 114 S.; Freiburg i. Br.
- SU, K. (2007): Development of Hydro-mechanical Models of the Callovo-Oxfordian Argillites for the Geological Disposal of Radioactive Waste (MODEX-REP). – EURATOM, Final Report (Contract N° FIKW-CT-2000-00029): 63 S.; Luxembourg.

- TE KAMP, L. & KONIETZKY, H. (2009): Numerical Modelling of the Thermo-Hydro-Mechanical Loading in a geological repository for HLW and SF. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Arbeitsbericht, NAB 09-25: 41 S.; Wettingen/Schweiz.
- TEVISSSEN, E. & SOLER, J.M. (2003): In Situ Diffusion Experiment (DI): Synthesis Report. – Mont Terri Project, Technical Report, TR 2001-05: 55 S.; Wabern/Schweiz.
- THOMPSON, K.F.M. (1979): Light hydrocarbons in subsurface sediments. – *Geochim. et Cosmochim. Acta*, 43: 657-672; London.
- TISSOT, B., CALIFET-DEBYSER, Y., DEROO, G. & OUDIN, J.L. (1971): Origin and evolution of hydrocarbons in Early Toarcian shales, Paris Basin, France. – *Bull. amer. Assoc. Petroleum Geol.*, 55: 2177-2193; Tulsa.
- TISSOT, B., DURAND, B., ESPITALIÉ, J. & COMBAZ, A. (1974): Influence of nature and diagenesis of organic matter in formation of petroleum. – *Bull. amer. Assoc. Petroleum Geol.*, 58: 499-506; Tulsa.
- TISSOT, B.P. & WELTE, D.H. (1984): Petroleum formation and occurrence. A new approach to oil and gas exploration. – 699 S.; Berlin (Springer).
- TOLSTIKHIN, L., LEHMANN, B.E., LOOSLI, H.H. & GAUTSCHI, A. (1996): Helium and argon isotopes in rocks, minerals and related groundwaters: A case study in northern Switzerland. – *Geochim. et Cosmochim. Acta*, 60: 1497-1514; London.
- TRABER, D. & BLASER, P. (2013): Gesteinsparameter der Wirtgesteine Opalinuston, ‚Brauner Dogger‘, Effinger Schichten und Helvetische Mergel als Grundlage für die Sorptionsdatenbank. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Arbeitsbericht, NAB 12-39: 108 S.; Wettingen/Schweiz.
- TRAUTWEIN, U. (2005): Poroelastische Verformung und petrophysikalische Eigenschaften von Rotliegend Sandsteinen. – 140 S., Dissertation, Technische Universität Berlin, Fakultät VI; Berlin.
- VAN GENUCHTEN, M.T. (1980): A close-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. – *Soil Science of America*, 44(5): 892-898; Madison, Wisconsin/USA.

- VAN LOON, L.R., JAKOB, A., MÜLLER, W., LAUBE, A., GLAUS, M. & BRADBURY, M.H. (2002): Diffusion processes (Waste Management Laboratory (LES) Progress Rep. September 2001 to August 2002). – Paul Scherrer Institut, PSI Int. Rep., AN-44-02-14: 79-90 S.; Villigen.
- VAN LOON, L.R. & SOLER, J.M. (2003): Diffusion of HTO,  $^{36}\text{Cl}^-$ ,  $^{125}\text{I}^-$  and  $^{22}\text{Na}^+$  in Opalinus Clay: Effect of confining pressure, sample orientation, sample depth and temperature. – Nationale Gesellschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle, Nagra Techn. Ber., NTB 03-07: 119 S.; Wettingen/Schweiz.
- VAN LOON, L.R., SOLER, J.M. & BRADBURY, M.H. (2003): Diffusion of HTO,  $^{36}\text{Cl}^-$  and  $^{125}\text{I}^-$  in Opalinus Clay samples from Mont Terri: Effect of confining pressure. – Journal of Contaminant Hydrology, 61: 73-83; Amsterdam.
- VÖGTLI, B. & BOSSART, P. (1998): DT Experiment: Swelling Experiment on Opalinus Clay Drillcores (revised version). – Mont Terri Project, Technical Note, TN 97-06: 13 S.; Wabern/Schweiz.
- WABER, H.N. (2003): Annex 8: Gases in Borehole Headspaces. – In: Pearson, F.J., Arcos, D., Bath, A., Boisson, J.-Y., Fernández, A.M., Gäbler, H.-E., Gaucher, E., Gautschi, A., Griffault, L., Hernán, P. & Waber, H.N. (Hrsg.): Mont Terri Project – Geochemistry of Water in the Opalinus Clay Formation at the Mont Terri Rock Laboratory. Berichte des BWG, Serie Geologie 5: 269-280; Bern/Schweiz (Bundesamt für Wasser und Geologie).
- WABER, H.N., GAUCHER, E.C., FERNÁNDEZ, A.M. & BATH, A. (2003): Annex 3: Aqueous Leachates and Cation Exchange Properties of Mont Terri Claystones. Berichte des BWG, Serie Geologie 5. – In: Pearson, F.J., Arcos, D., Bath, A., Boisson, J.-Y., Fernández, A.M., Gäbler, H.-E., Gaucher, E., Gautschi, A., Griffault, L., Hernán, P. & Waber, H.N. (Hrsg.): Mont Terri Project – Geochemistry of Water in the Opalinus Clay Formation at the Mont Terri Rock Laboratory. Berichte des BWG, Serie Geologie 5: 200-237; Bern/Schweiz (Bundesamt für Wasser und Geologie).
- WALLRAUCH, E. (1969): Verwitterung und Entspannung bei überkonsolidierten tonig-schluffigen Gesteinen Südwestdeutschlands. – 184 S., Dissertation, Eberhard Karls Universität; Tübingen.
- WEHNER, H., HUFNAGEL, H., KUCKELKORN, K., SCHOELL, M. & TESCHNER, M. (1983): Zur Kohlenwasserstoffgenese im deutschen Alpenvorland. – Bundesmin. Forsch. u. Techn., Forschungsbericht: 164 S.; Eggenstein-Leopoldshafen.

- WILEVEAU, Y. (2005): THM behaviour of host rock: (HE-D experiment): Progress Report September 2003 – October 2004 Part 1. – Mont Terri Project, Technical Report, TR 2005-03: 129 S.; Wabern/Schweiz.
- WILEVEAU, Y. & ROTHFUCHS, T. (2007): THM behaviour of host rock (HE-D) Experiment: Study of Thermal effects on Opalinus Clay. Synthesis. – Mont Terri Project, Technical Report, TR 2006-01: 111 S.; Wabern/Schweiz.
- WITTKKE, W. (1984): Felsmechanik – Grundlagen für wirtschaftliches Bauen im Fels. – 1050 S.; Berlin (Springer).
- WOHLENBERG, J. (1982): Dichte. – In: Angenheister, G. (Hrsg.): Landolt-Börnstein - Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik, Neue Serie - Gruppe V: Geophysik und Weltraumforschung, Bd. 1 Physikalische Eigenschaften der Gesteine, Teilband a: 66-119; Berlin (Springer).
- ZHANG, C.-L., ROTHFUCHS, T., MOOG, H., DITTRICH, J. & MÜLLER, J. (2004): Thermo-Hydro-Mechanical and Geomechanical Behavior of the Callovo-Oxfordian Argillite and the Opalinus Clay (Final Report). – Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 149 S.; Köln.

## Abkürzungsverzeichnis

1 $\sigma$	einfache Standardabweichung der Grundgesamtheit
AF	Anisotropiefaktor
AkEnd	Arbeitskreis Auswahlverfahren Endlagerstandorte
ANDRA	Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs“, Organisation, die in Frankreich für die Entsorgung und Endlagerung der dort anfallenden radioaktiven Abfälle zuständig ist
AnSichT	F&E-Projekt „Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein“
AVM	Anfangsverformungsmodul
BE	Best Estimate (bester Schätzwert)
Betton	Datenbank „Barrierewirksame Eigenschaften von Ton und Tonstein“
Corg	organischer Kohlenstoff
CPI	Carbon Preference Index, Kohlenstoff-Präferenz-Index (Größe zur Charakterisierung der Reife von Erdöl)
DI-Experiment	Experiment in Mont Terri: „Diffusion in rock“, Diffusion im Gestein
DT-Experiment	Experiment in Mont Terri: „Drilling Techniques“, Bohrtechniken
DM-Experiment	Experiment in Mont Terri: „Long-term deformation measurement“, Langzeitdeformationsmessungen
ED-B-Experiment	Experiment in Mont Terri: „EDZ Evolution around gallery 98 (‘mine- by test’)\“, Entwicklung der Auflockerungszone um den Stollen 98
EDX	Elementanalyse in der Elektronenmikroskopie
EDZ	„Excavation disturbed zone“, identisch mit ALZ = Auflockerungszone
Fm.	Formation

GENESIS	F&E-Projekt „Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Auslegung eines generischen Endlagers im Tonstein in Deutschland“
GOK	Geländeoberkante
GWL	Grundwasserleiter
GGL	Grundwassergeringleiter
HE-Experiment	Experiment in Mont Terri: „In-situ heater test“, In-situ-Aufheizexperiment
HI	Wasserstoff-Index (Äquivalent des atomaren H/C-Verhältnisses)
HTS	hydraulic tensile strength, hydraulische Zugfestigkeit
KAK	Kationenaustauschkapazität
$k_f$	Durchlässigkeitsbeiwert
KW	Kohlenwasserstoff(e)
LT-Experiment	Experiment in Mont Terri: „Properties analysis in lab tests“, Analyse von Eigenschaften in Labortests
ME	Modelleinheit
Min	Minimumwert eines Datenkollektives
Max	Maximumwert eines Datenkollektives
MW	Mittelwert eines Datenkollektives
n	Werteanzahl eines Datenkollektives
NAGRA	„Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle“, verantwortlich für die sichere Endlagerung der in der Schweiz anfallenden radioaktiven Abfälle und die damit verbundenen Forschungs- und Projektierungsarbeiten
OPA	Opalinuston

OI	Sauerstoff-Index (Äquivalent des atomaren O/C-Verhältnisses)
POS	Posidonienschiefer
RA-Experiment	Experiment in Mont Terri: „Rock mechanics analysis“, Gesteinsmechanische Analysen
$R_m$	mittleres Vitritreflexionsvermögen des Vitrits (Inkohlungsparameter)
$R_r, R_{max}$	Zufallsreflexion (random reflectance) und maximale Reflexion des Vitrits
$R_o$	Vitritreflexionsvermögen, gemessen mit Ölimmersionsobjektiv
REM	Rasterelektronenmikroskopie
RVM	Restverformungsmodul
$T_{max}$	Temperatur des maximalen thermischen Kerogenabbaus
TOC	Total Organic Carbon (gesamter organischer Kohlenstoff)
UTS	Ultimate tensile strength, Zugfestigkeit
XRD	X-Ray-diffraction, Röntgenbeugungsanalyse (RBA)
⊥	senkrecht zur Schichtung
	parallel zur Schichtung
∠	im Winkel von 45° zur Schichtung



Tabellenverzeichnis	Seite
Tab. 1: Modelleinheiten (ME) im Endlagerstandortmodell SÜD, ihre Äquivalente sowie Zusammenstellung ihrer lithologischen Eigenschaften.....	13
Tab. 2: Korngrößenverteilung im Opalinuston aus der Kernbohrung Bözberg AG. Angegeben sind die Verteilung in der Gesamtfraktion sowie in bestimmten Einzelfraktionen (aus: NÜESCH 1991).....	16
Tab. 3: Anteile der Ton-, Schluff- und Sandfraktionen ausgewählter Opalinuston-Proben der Bohrung Schlattingen SLA-1 und entsprechende Ansprache nach Schweizer Norm zur Klassifizierung von Böden SN 670 004-2a (aus: FERRARI et al. 2012).....	16
Tab. 4: Äußere, innere und totale spezifische Oberflächen von Opalinuston-Proben aus Lokaltäten in der Nordschweiz und Baden-Württemberg und daraus abgeleitet die Abschätzung für das Referenzprofil SÜD.....	18
Tab. 5: Vergleich von toniger und sandiger Fazies des Opalinustons von Mont Terri hinsichtlich Makro- und Mikrogefüge und weiterer Parameter unter Verwendung der Resultate von KLINKENBERG et al. (2009) und KAUFHOLD et al. (2013).....	19
Tab. 6: Qualitative mineralogische Zusammensetzung des Opalinustons.....	22
Tab. 7: Bandbreiten und Mittelwerte der mineralogischen Zusammensetzung des Opalinustons (tonige Fazies) aus süddeutschen und schweizerischen Lokaltäten .....	24
Tab. 8: Bandbreiten und Mittelwerte [Gew.-%] der mineralogischen Zusammensetzung des Opalinustons aus Proben der Bohrung Benken (aus: NAGRA 2001) und Übertragung auf das Referenzprofil SÜD.....	25
Tab. 9: Bei 105 – 110 °C ermittelte Wassergehalte des Opalinustons aus dem Felslabor Mont Terri und zugehörige statistische Parameter.....	26
Tab. 10: Haupt- und Nebenelementgehalte [Gew.-%] im Opalinuston der Bohrung Benken (NAGRA 2001) und aus Mont Terri (GAUCHER et al. 2003).....	27
Tab. 11: Am Opalinuston aus der Bohrung Benken (NAGRA 2001) und aus dem Felslabor Mont Terri (GAUCHER et al. 2003, BATH & PEARSON 2003) ermittelte Spurenelementgehalte (alle Werte in ppm).....	28
Tab. 12: Ergebnisse gammaspektrometrischer Messungen an Kernproben aus der Bohrung Beznau/Schweiz (aus: RYBACH 1984b).....	29
Tab. 13: Isotopengeochemische Zusammensetzung des Opalinustons der Bohrung Benken (NAGRA 2001) und aus Mont Terri (aus: GAUCHER et al. 2003).....	31
Tab. 14: KAK von Proben aus der Bohrung Benken, der Bohrung Beznau und dem Felslabor Mont Terri mit austauschbaren Kationen und Gesamtionenbelegung (Werte in meq/kg Gestein).....	32

Tab. 15:	Hydrochemische Parameter von Wasserproben aus verschiedenen Versuchsfeldern (VF) im Südwestdeutschen Molassebecken und ausgepresster Porenwässer aus dem Opalinuston der Bohrung Benken und von Mont Terri.....	35
Tab. 16:	Chemische und Isotopen-Zusammensetzung von Dampfraumgasen aus abgepackten Intervallen der Bohrlöcher BWS-A1, -A2, -A3 und -A6 im Untertagelabor Mont Terri. Alle Angaben in Vol.-% (aus: WABER 2003).....	38
Tab. 17:	Geochemische Daten aus Rock-Eval-Pyrolyse-Messungen von Kernproben aus der Bohrung Beznau zur Kerogen-Charakterisierung (Daten aus: MUKHOPADHYAY & LEYTHAEUSER 1984: 57).....	41
Tab. 18:	Rock-Eval-Parameter und Daten aus GC-MS-Analysen der aliphatischen KW-Fraktion aus Proben aus dem Opalinuston (OPA) und dem Posidonienschiefer (POS) von Mont Terri und der Bohrung Benken (Daten aus: GAUCHER et al. 2003 und ELIE & MAZUREK 2008).....	43
Tab. 19:	Mazeralzusammensetzung der Kerogenkonzentrate aus Kernproben der Bohrung Beznau/Schweiz (aus: MUKHOPADHYAY & LEYTHAEUSER 1984).....	44
Tab. 20:	Reflexionsmikroskopisch ermittelte Reifeparameter für Kernproben der Bohrung Beznau/Schweiz (aus: NAGRA 1984).....	45
Tab. 21:	Zusammenstellung von Vitrinit-Reflexionswerten für den Opalinuston aus nordschweizerischen Bohrungen/Aufschlüssen.....	46
Tab. 22:	Lösliches organisches Material (in [mg/g TOC]) und geochemische Daten aus GS-MS-Analysen der aliphatischen KW-Fraktion von Opalinuston (OPA) und Posidonienschiefer (POS) (Daten aus: NAGRA 1984, GAUCHER et al. 2003 und ELIE & MAZUREK 2008).....	48
Tab. 23:	Ausbeute leichtflüchtiger KW in Opalinuston- und Posidonienschieferproben (POS) aus der Bohrung Beznau/Schweiz (Daten aus: NAGRA 1984).....	50
Tab. 24:	Chemische Zusammensetzung von Erdöl- und Gaskappengasen aus dem westlichen Teils des Süddeutschen Molassebeckens (aus: BOIGK 1981).....	52
Tab. 25:	Gehalt und Zusammensetzung des löslichen organischen Materials (C <sub>15+</sub> ) ausgewählter Kernproben der Bohrung Beznau/Schweiz (aus: NAGRA 1984).....	53
Tab. 26:	Überblick über an Proben aus der Nordschweiz gemessene Dichtewerte [kg·m <sup>-3</sup> ] des Opalinustons.....	54
Tab. 27:	Referenz- und Eckwerte zur Gesteinsdichte des Opalinustons inklusive des Opalinustons aus dem Felslabor Mont Terri (Werte aus: Traber & Blaser 2013).....	55
Tab. 28:	Korndichten der Modelleinheiten des Nebengebirges aus verschiedenen Quellen.....	56
Tab. 29:	Gesteinsdichtewerte der Modelleinheiten des Nebengebirges aus verschiedenen Quellen.....	57

Tab. 30:	Bandbreiten von Porositäten des Opalinustons aus Mont Terri, ermittelt mit verschiedenen Methoden in unterschiedlichen Laboren (aus: MAZUREK 1999)	59
Tab. 31:	Mit unterschiedlichen Methoden und in Laboren der Universitäten Newcastle und Leeds ermittelte Porositätswerte der Gesteine aus der Bohrung Benken (Daten aus: NAGRA 2001)	60
Tab. 32:	Aus verschiedenen Quellen übertragene effektive Porositäten für das Nebengebirge	61
Tab. 33:	Effektive Porositäten verschiedener Sedimentgesteine	62
Tab. 34:	Hydraulische Durchlässigkeiten und Transmissivitäten für den Opalinuston, ermittelt über Packertests. Zur Lage der Packertest-Intervalle in der Bohrung Benken vgl. NAGRA (2001: 203)	63
Tab. 35:	Zusammenstellung der hydraulischen Eigenschaften mit $k_f$ -Werten der Modelleinheiten im Referenzprofil SÜD (nach: REINHOLD et al. 2016)	64
Tab. 36:	Zweiphasenflussparameter für den Opalinuston aus nordschweizerischen Lokalisationen (aus: NAGRA 2002)	67
Tab. 37:	Spezifische Wärmekapazitäten [ $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ ] für den Opalinuston der Bohrung Benken und aus Mont Terri	68
Tab. 38:	Bandbreiten und Mittelwerte für die spezifische Wärmekapazität der Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD	69
Tab. 39:	Statistische Parameter zu den Wärmeleitfähigkeiten $\lambda$ (parallel und senkrecht zur Schichtung) des Opalinustons in der Bohrung Beznau (aus: RYBACH 1984a)	71
Tab. 40:	Mittelwerte der linearen Wärmeleitfähigkeiten von verschiedenen Opalinuston-Proben aus der Bohrung Benken und Mont Terri	72
Tab. 41:	Bandbreiten und Mittelwerte für die lineare Wärmeleitfähigkeit der Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD	73
Tab. 42:	Am Opalinuston von Mont Terri durch Labortests und numerische Analysen bestimmte Mittelwerte für den linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten	75
Tab. 43:	Lineare thermische Ausdehnungskoeffizienten $\alpha$ für verschiedene Gesteine und Minerale	76
Tab. 44:	Bandbreiten und Mittelwerte für die linearen Wärmeausdehnungskoeffizienten der Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD	77
Tab. 45:	Am Opalinuston aus der Bohrung Benken sowie aus Mont Terri gemessene Ultraschallgeschwindigkeiten und zugehörige Parameter	78
Tab. 46:	Seismische Geschwindigkeiten (P- und S-Welle) verschiedener Sedimentgesteine bei Normaldruck/Zimmertemperatur. Angegeben sind auch die Gesteinsdichte und die zugehörigen 80-%-Vertrauensintervalle (aus: GEBRANDE 1982a)	79
Tab. 47:	Übertragene Werte für die Geschwindigkeiten der P- und S-Welle	79

Tab. 48:	Über Labor- und In-situ-Tests am Opalinuston von Mont Terri ermittelte Diffusionsparameter für Anionen und Kationen (aus: BOSSART 2008) und aus der Bohrung Benken (aus: VAN LOON et al. 2003, VAN LOON et al. 2002 und VAN LOON & SOLER 2003).....	82
Tab. 49:	Zusammenstellung von in situ ermittelten Verteilungskoeffizienten $K_d$ für den Opalinuston (Benken / Mont Terri) bei unterschiedlichen pH-Werten und dem entsprechenden Gesamt-Unsicherheitsfaktor (aus: BRADBURY & BAEYENS 2003).....	84
Tab. 50:	Zusammenstellung der Elastizitätsparameter für den Opalinuston, betrachtet als isotrop-elastisches Gestein.....	86
Tab. 51:	Zusammenstellung der Elastizitätsparameter (Elastizitätsmoduln, Poissonzahlen und Schubmodul) für Opalinuston aus der Bohrung Benken und Mont Terri .....	87
Tab. 52:	Zusammenstellung der Deformationsparameter Anfangsverformungsmodul, statischer E-Modul und Restverformungsmodul aus den Arbeiten von SCHNIER & STÜHRENBERG (2006) bzw. der Kompilation von BOCK (2009).....	90
Tab. 53:	E-Moduln und Poissonzahlen von Sedimentgesteinen für die Modelleinheiten des Nebengebirges im Referenzprofil SÜD.....	92
Tab. 54:	Elastische Parameter für Sedimentgesteine (isotrop).....	94
Tab. 55:	Elastische Parameter für Sedimentgesteine (transversal-isotrop).....	95
Tab. 56:	Über Kurzzeittests im Labor ermittelte Zugfestigkeiten für Opalinuston-Proben aus Benken und Mont Terri (tonige Fazies).....	97
Tab. 57:	Uniaxiale und triaxiale Druckfestigkeiten für den Opalinuston aus der Bohrung Benken und aus Mont Terri (tonige Fazies).....	98
Tab. 58:	Triaxiale Druckfestigkeiten sowie Restfestigkeiten für den Opalinuston aus der Bohrung Benken (aus: NAGRA 2001).....	99
Tab. 59:	Allgemeine Werte für Zugfestigkeiten verschiedener Sedimentgesteine aus weltweiten Vorkommen.....	100
Tab. 60:	Auf die Modelleinheiten des Nebengebirges übertragene Zugfestigkeiten.....	101
Tab. 61:	Einachsige (uniaxiale) Druckfestigkeit von Sedimentgesteinen aus weltweiten Vorkommen.....	102
Tab. 62:	Auf die Modelleinheiten des Nebengebirges übertragene Druckfestigkeiten .....	104
Tab. 63:	Uniaxiale Druckfestigkeiten aus dem Süddeutschen Molassebecken (aus: KRISCHKE & WEBER 1981).....	105
Tab. 64:	Mohr-Coulomb-Festigkeitsparameter für den Opalinuston aus Mont Terri.....	105
Tab. 65:	Abgeleitete Festigkeitsparameter des Opalinustons (Datensatz Bohrung Benken) für ein bilineares und ein lineares Mohr-Coulomb-Modell bei geringer bzw. hoher Normalspannung (Werte aus: NAGRA 2002 und JOBMANN et al. 2007b).....	106

Tab. 66:	Übersicht über Schichtabfolgen aus dem Referenzprofil SÜD mit quellfähigen Mineralen. Die Modelleinheiten mit quellfähigen Mineralen sind farbig hervorgehoben.....	108
Tab. 67:	Literaturangaben für am schweizerischen Opalinuston ermittelte Quelldrücke.....	109
Tab. 68:	An Bohrkernen im Rahmen des DT-Experiments im Labor mit verschiedenen Bewässerungs-Fluiden ermittelte Quelldrücke der tonigen Fazies aus Mont Terri (aus: VÖGTLI & BOSSART 1998).....	110
Tab. 69:	An Bohrkernen im Rahmen des DT-Experiments im Labor ermittelte Quellhebungen der tonigen Fazies aus Mont Terri (aus: VÖGTLI & BOSSART 1998).....	111
Tab. 70:	Ergebnisse von Quelldruck- und Quellmaßversuchen an tonigen Sulfatgesteinen (aus: MADSEN & NÜESCH 1990).....	112
Tab. 71:	Biot-Koeffizienten für Opalinuston aus verschiedenen Loationen sowie für Tonsteine des Collovium-Oxfordium aus Bure sowie Tonsteine aus Tournemire.....	114
Tab. 72:	Übertragene Biot-Koeffizienten und Biot-Moduln.....	115

Abbildungsverzeichnis	Seite
Abb. 1: Vereinfachte Darstellung des Aufbaus des Opalinustons in verschiedenen Maßstäben (a – Dekameter- bis e – Nanometerbereich) (aus: NAGRA 2002: 223).....	11
Abb. 2: Gliederung und Korrelation des Opalinustons aus den Sondierbohrungen Benken und Weiach im Vergleich mit dem Opalinuston des Felslabor Mont Terri aufgrund seiner jeweiligen Lithologie und mineralogischen Zusammensetzung (nach: NAGRA 2002).....	21
Abb. 3: Mineralogische Zusammensetzung des Opalinustons in der Nordschweiz (linkes Dreieck, graue Punktsignatur) im Vergleich mit anderen gut untersuchten tonreichen Formationen weltweit (nach: NAGRA 2002a). Im rechten Dreieck sind die Proben aus den schweizerischen Opalinuston-Aufschlüssen farblich differenziert dargestellt (nach: MAZUREK 2011).....	23
Abb. 4: Kapillardruck-Sättigungsbeziehung (Bohrung Benken und Felslabor Mont Terri). Die Kapillardruck-Sättigungsbeziehung wurde aus Hg-Porosimetrie sowie aus Ad- und Desorptionsisothermen von Wasser an einer Probe aus 590,3 m Tiefe der Bohrung Benken (GIMMI 2003) abgeleitet. Die Saugspannungsmessungen erfolgten an Gesteinsproben aus dem Felslabor Mont Terri (GENS 2000). In grauer Farbe unterlegt ist die Bandbreite der für das schweizerische Wirtsgestein im Zürcher Weinland empfohlenen Kapillardruck-Sättigungsbeziehung auf der Basis des van-Genuchten-Parametermodells (aus: NAGRA 2002: 348).....	66
Abb. 5: Vergleich der einaxialen Druckfestigkeiten verschiedener Tonsteine und Tone in Beziehung zum Wassergehalt (nach: NAGRA 2002: 290, verändert).....	85