

**Berechnungen von Paläotemperaturen
und Vitrinitreflexionen
im Niedersächsischen Becken
und die Anwendung dieser Methodik auf
generische Endlager**

DBE-TEC
DBE TECHNOLOGY GmbH

TECHNISCHER BERICHT

Erstellt im Rahmen des FuE-Vorhabens „TEMTON“
(FKZ: 02E10086)

Autoren:

M. Jobmann

P. Amelung

L. Uhlig

November 2007

Die diesem Bericht zu Grunde liegenden Arbeiten wurden im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi), vertreten durch den Projektträger für Wassertechnologie und Entsorgung im Forschungszentrum Karlsruhe, durchgeführt (FKZ 02 E 10086). Die Verantwortung für den Inhalt liegt jedoch allein bei den Autoren.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Vitrinitreflexionen im Niedersächsischen Becken	5
3	Numerische Berechnungen	13
4	Auswertung und Zusammenfassung	22
	Literatur	23

1 Einleitung

Derzeit wird eine Eignung verschiedener Tonsteine zur Endlagerung von radioaktivem Abfall untersucht. Nach der Einlagerung von hochradioaktivem wärmeentwickelnden Abfall erfolgt ein zeitlich beschränkter Temperaturimpuls in das Wirtsgestein. An der Grenzfläche Abfallcontainer und Verfüllmaterial (z.B. Bentonit) mit dem Wirtsgestein wird eine Maximaltemperatur von ca. 90 °C erwartet. Je nach Versenkungs- und Temperaturgeschichte der Tonsteine gibt es Bereiche welche diese Temperatur bereits erfahren haben oder dieser Temperatur noch nicht ausgesetzt waren. Die Konsequenzen des künstlichen Wärmeeintrags auf die Umwandlung organischer Bestandteile wird in diesem Vorhaben näher untersucht.

Der Umwandlungsgrad von organischem Material zu Erdöl bzw. Erdgas wird beeinflusst durch die Temperaturgeschichte des Muttergesteins. Hohe Temperaturen bewirken höhere Umwandlungsraten, wobei hier die Umwandlung in einem gewissen Temperaturfenster maßgeblich erfolgt. Je länger organisches Material einer gewissen Temperatur ausgesetzt ist, umso vollständiger ist die Umwandlung zu Erdöl bzw. Erdgas. Die Bestimmung des Inkohlungsgrades des organischen Materials ist eine Möglichkeit, um Anhaltspunkte über die thermische Geschichte von Sedimentgesteinen zu erhalten. Der Inkohlungsgrad wird mit Hilfe mikroskopischer Reflexionsmessungen unter Ölmission (R_o , R_m in % = mittlere Vitrinitreflexion unter Öl) an Vitriniten ermittelt. Vitrinitreflexionen können vereinfacht auf Basis der Temperaturgeschichte berechnet werden. Dies bietet die Möglichkeit einer Berechnung der Beeinflussung des Inkohlungsgrades aufgrund der künstlichen Wärmeeinbringung durch ein Endlager.

2 Vitritreflexionen im Niedersächsischen Becken

Abbildung 1 zeigt eine Isolinien-Darstellung der Vitritreflexionen in der Grenzschicht Rhät/Lias im Niedersächsischen Becken. Die Maximalwert der dargestellten Vitritreflexionen ist 4,8. Die Ursache hierfür sind basaltische Intrusionen welche in der Zeit zwischen Apt und Obercampan (vor 70 – 100 Ma) aufstiegen und sich der Erdoberfläche bis auf etwa 5 km näherten (MANN 1987). Nach den nächstgelegenen Ortschaften wurden die Basaltintrusionen Vlotho, Brahmische und Uchte genannt.

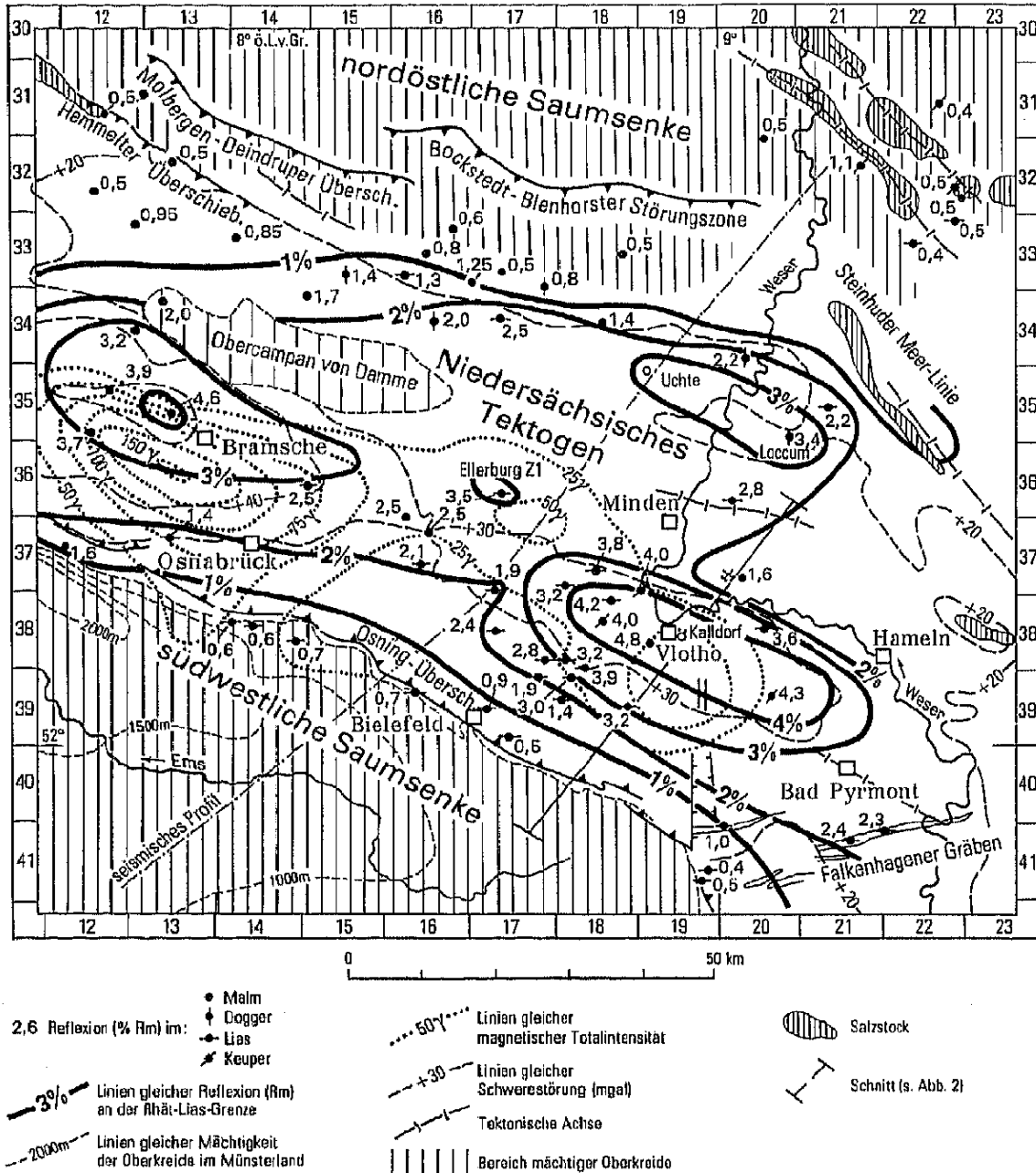


Abbildung 1: Inkohlungskarte der Grenzschichten Rhät/Lias (aus DEUTLOFF et al. 1980) im Bereich des östlichen und zentralen Niedersächsischen Beckens

Zusätzliche Informationen können aus der Inkohlungskarte des Karbon im Niedersächsischen Becken (Abbildung 2) gewonnen werden. Es wird deutlich, dass sich im Bereich Lauenau und Hameln wahrscheinlich ein weiterer Intrusionskörper befindet. Die Bohrungen Lauenau Z1 und Hameln 2 weisen Vitritreflexionen größer 4,9 aus. Zusätzlich sind in Abbildung 2 die Lage der Bohrungen Haddessen, Harderode, Dielmissen und Wenzen ausgewiesen. Auf diese Flachbohrungen im Lias wird später Bezug genommen.

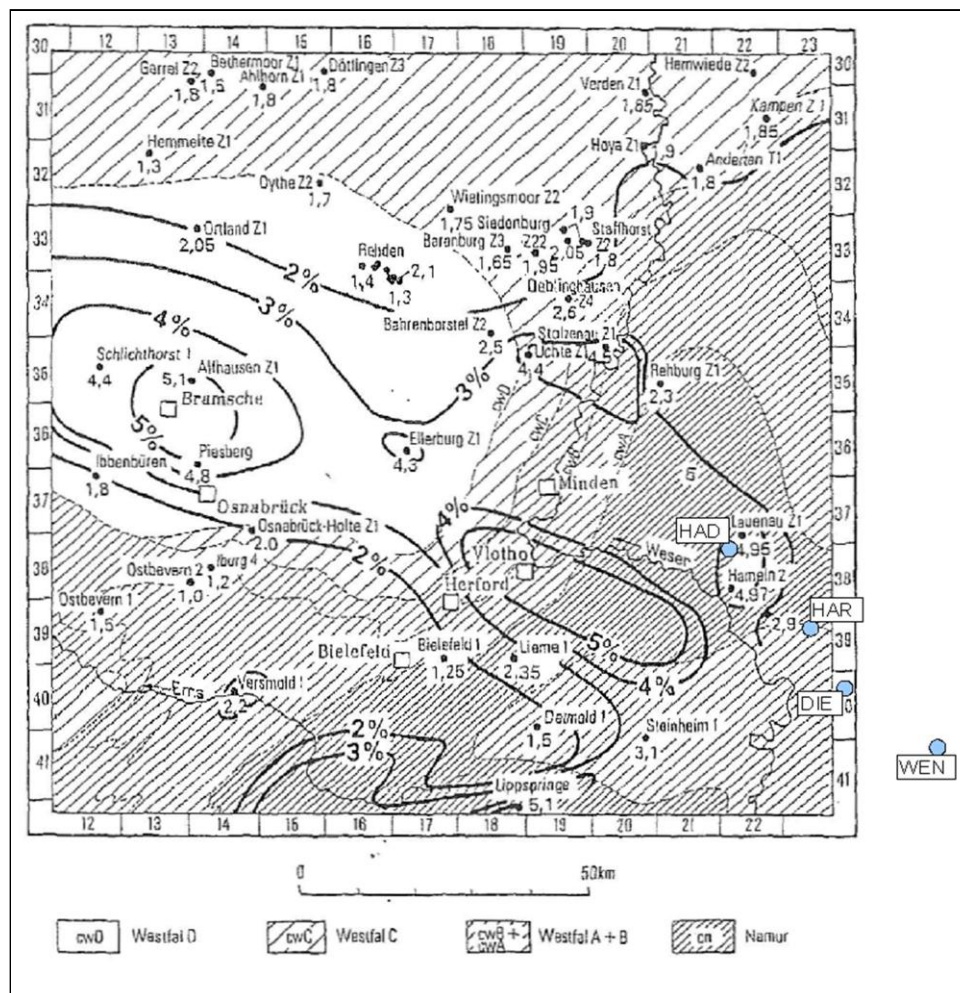


Abbildung 2: Inkohlungskarte des abgedeckten Karbons im Niedersächsischen Becken (DEUTLOFF et al. 1980) und Lage der Bohrungen Haddessen, Harderode, Dielmissen, Wenzen

Eine Schnittdarstellung des Intrusionskörpers Vlotho zeigt Abbildung 3. Die Breite dieser basaltischen Intrusion beträgt bis zu 25 km und die Länge kann aus Abbildung 1 mit bis zu 40 km abgeschätzt werden.

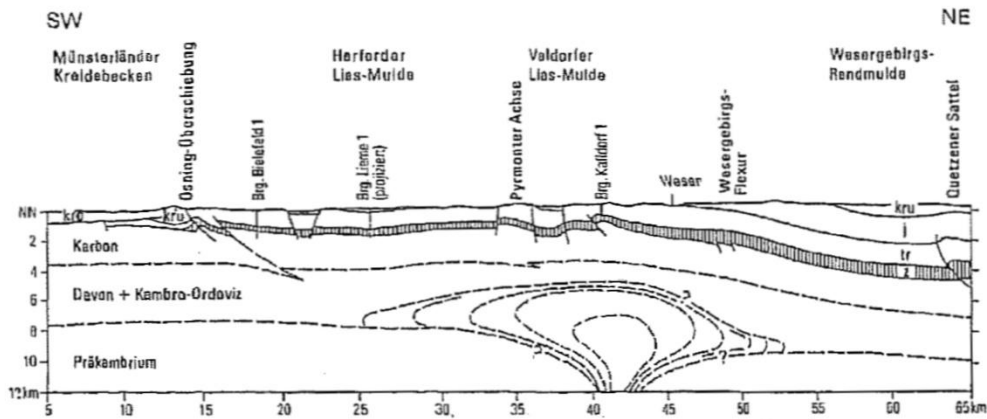


Abbildung 3: Schnitt durch das Massiv von Vlotho aufgrund von Inkohlung, Gravimetrie und Magnetik, DEUTLOFF et al. 1980

Die chemischen Auswirkungen der Intrusionen wurden beispielsweise anhand von Kernmaterial aus umliegenden Bohrungen untersucht (RULLKÖTTER et al. 1988). Die Flachbohrungen mit einer Tiefe bis zu 82 m befinden sich im mittleren Jura (Lias epsilon), dem bedeutendsten mitteleuropäischen Muttergestein für Erdöl. Die Abstände von einem Erdoberflächenpunkt über der Mitte der Vlotho-Intrusion bis zu den Bohrungen betragen zwischen 28 km (Bohrung Haddessen) und 64 km (Bohrung Wenzen), siehe Abbildung 4.

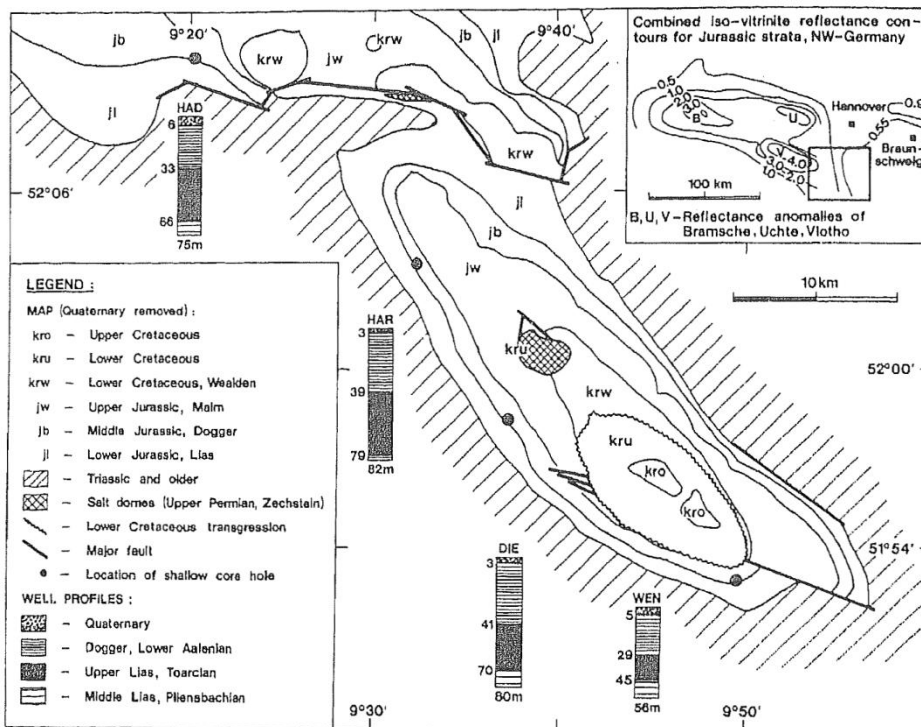


Abbildung 4: Lage von 4 Flachbohrungen in der Hilsmulde im Niedersächsischen Becken (RULLKÖTTER et al. 1988), Orte: HAD=Haddessen, HAR=Harderode, DIE=Dielmissen, WEN=Wenzen

Abbildung 5 zeigt, dass mit Annäherung an die Vlotho-Intrusion höhere Vitritreflexionen in den einzelnen Bohrungen gemessen wurden. Die nächstgelegene Bohrung zur Vlotho-Intrusion Haddessen weist Vitritreflexionswerte von 1,45 auf während die am weitesten entfernte der hier genannten Bohrungen Wenzel nur einen Vitritreflexionswert von 0,48 aufweist. Zum Vergleich: Direkt über der Vlotho-Intrusion wurden im Übergang Rhät/Lias maximale Vitritreflexionen bis 4,8 gemessen (siehe Abbildung 1).

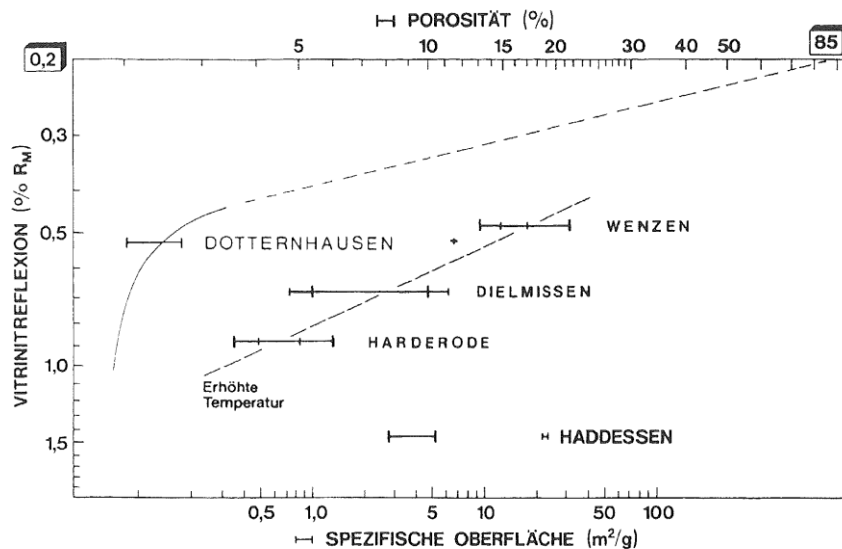


Abbildung 5: Wertebereiche für Porosität und spezifische Oberfläche, aufgetragen gegen Vitritreflexion für Sedimentgesteine des Lias epsilon 2+3 der Hilsmulde (MANN 1987)

In JOBMANN et al. (2007a) wird ein generisches Endlagermodell in Norddeutschland nord-östlich von Hannover beschrieben (Tiefe ca. 300 m in den Schichten der Unterkreide). Abbildung 6 zeigt die Lage dieses generischen Endlagermodells in der Isolinienkarte der Vitritreflexionen des Karbons. Eine Inkohlungskarte für die Unterkreide-Schichten des Niedersächsischen Beckens existiert nicht. Die Oberfläche des Karbon fällt in Richtung Nordosten ein. Im Bereich des generischen Endlagers liegt das Karbon in einer Tiefe größer 5000 m (siehe Abbildung 7, Rotliegendes in ca. 5000 m Tiefe). Dies erklärt die relativ hohen Vitritreflexionswerte von 3 % im Karbon in der Nähe des generischen Endlagers.

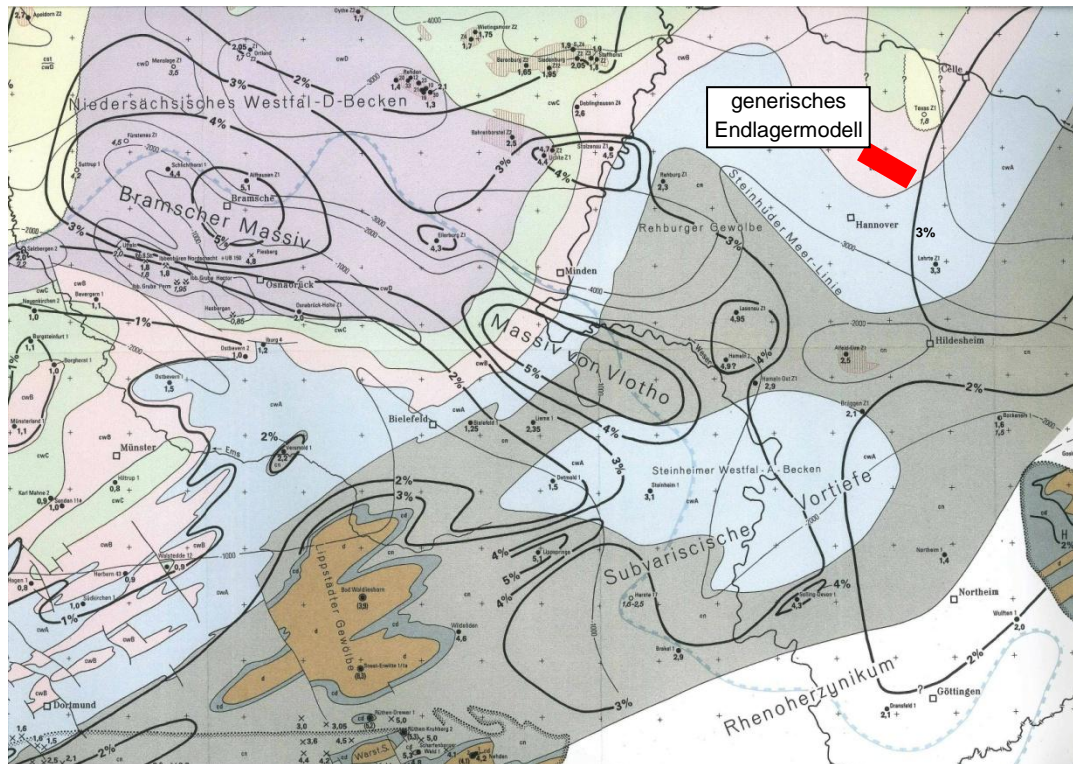


Abbildung 6: Inkohlungskarte der Karbonoberfläche Nordwestdeutschlands (Ausschnitt, TEICHMÜLLER et al. 1984)

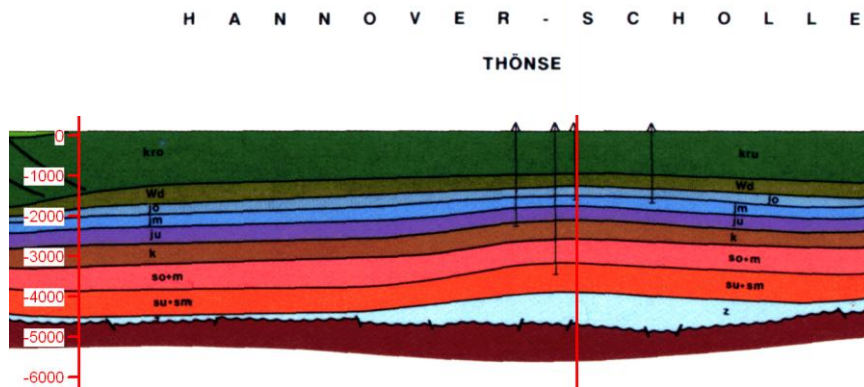


Abbildung 7: Profilschnitt im Gebiet des generischen Endlagers (BGR 2001)

In UHLIG et al. (2006) wurden Unterkreide-Vitritwerte im östlichen Niedersächsischen Becken zusammengestellt. Für die Schichten der Unterkreide werden Temperaturen kleiner 60 °C bzw. Vitritwerte kleiner 0,4 ausgewiesen (Werte aus Schacht Konrad 1). Zur Abschätzung der Beziehung Temperatur und Inkohlungsgrad wurde in BARKER & PAWLEWICZ (1994) folgende Formel zur groben Abschätzung genannt:

$$T = (\ln(R_0)+1,68) / 0,0124 \quad (1)$$

Der Beginn der Ölbildung liegt bei ungefähr 90 °C. Ausgehend von der Tiefenlage der Unterkreideschichten in Abbildung 7 und der Vitrinitwerte der Unterkreide in Abbildung 8 wird geschlussfolgert, dass die Unterkreideschichten in der Umgebung des generischen Endlagers in Norddeutschland keine Temperaturen oberhalb von 90 °C erreicht haben. Gemäß den gemessenen Vitrinitwerten im Niedersächsischen Becken und den Ergebnissen der numerischen Berechnungen (Kapitel 3) wurden Temperaturen größer 90 °C nur in Gebieten mit basaltischen Intrusionen in den Unterkreide-Schichten des Niedersächsischen Beckens erreicht. Daraus ergibt sich eine Bestätigung der Standortwahl des generischen Endlagers in Norddeutschland (Abbildung 6), welches fernab basaltischer Intrusionen in den Unterkreide-Schichten nahe Hannover entwickelt wurde.

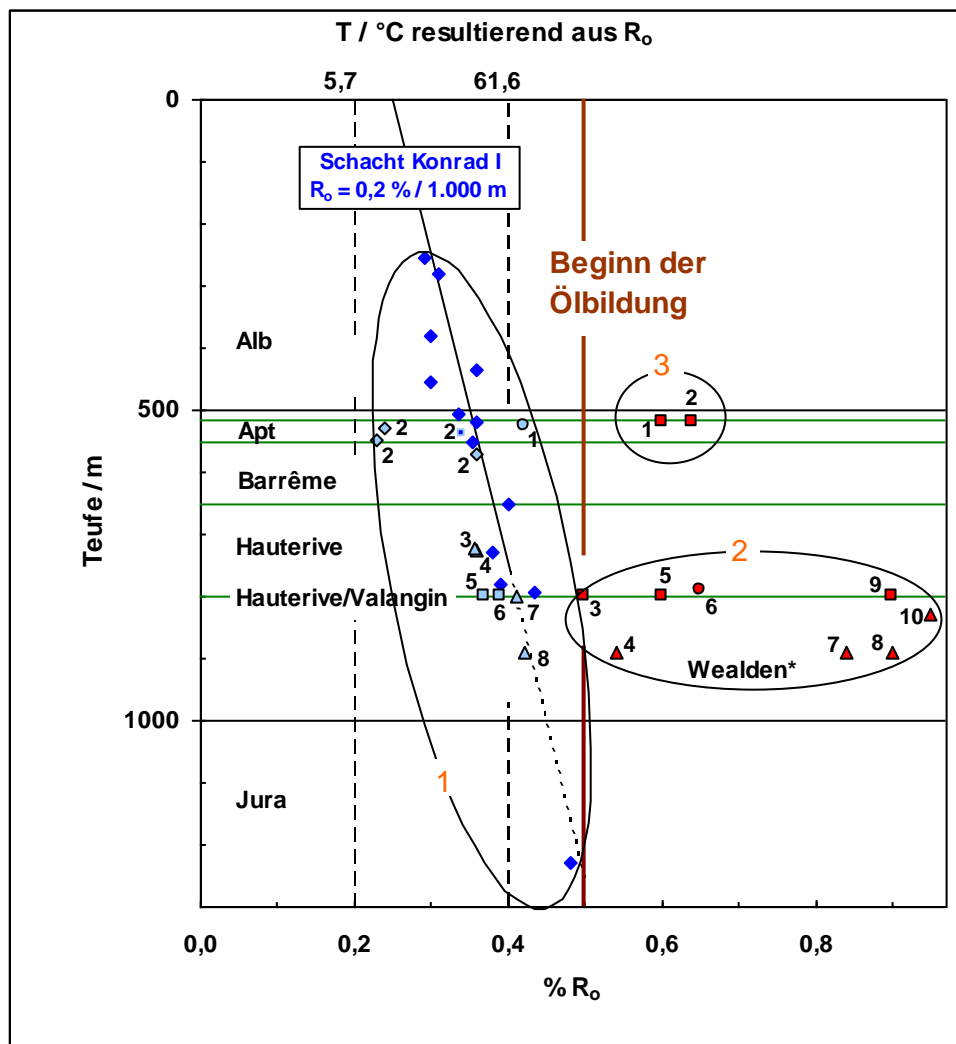


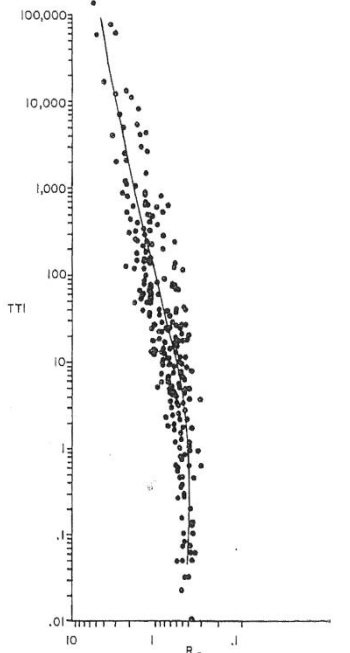
Abbildung 8: Zusammenstellung von Unterkreide-Vitrinitwerten im östlichen Niedersächsischen Becken. Das Wealden* ist im Schachtprofil Konrad nicht aufgeschlossen. Die Vitrinitwerte von 2,55 und 2,97 % Ro für hoch inkohltes Wealden, die in der Nachbarschaft der Bohrung Ellerburg Z1 bestimmt wurden, sind in der Abbildung nicht enthalten. (aus UHLIG et al . 2006)

Grundlagen für die Modellierung

Die oben genannten Daten zu den Vitritreflexionen liefern die Grundlage für eine Modellierung dieses thermisch induzierten Vorganges. Eine einfache aber brauchbare Möglichkeit zur Berechnung von Vitritreflexionen anhand einer Temperaturgeschichte bietet die Lopatin-Methode (Variante beschrieben in WAPLES 1980). Diese Methode geht davon aus, dass zwischen Zeit und Reifegrad ein linearer Zusammenhang besteht und zwischen Temperatur und Reifegrad ein exponentieller Zusammenhang. Durch Aufsummierung ergibt sich ein Zeit-Temperatur Index (Time Temperature Index, TTI). Die allgemeine Regel einer Reaktionsverdopplung mit 10 K Temperaturerhöhung gilt auch hier und wurde beispielsweise durch WAPLES (1980) belegt. Dadurch ergibt sich eine Basis für die Exponentialfunktion von $r=2$. Die Formel zur Berechnung des TTI, Temperaturfaktoren und eine Darstellung des TTI über Vitritreflexionen (Kurve für $r=2$) aus 402 Proben und 31 Bohrungen weltweit befinden sich in Tabelle 1.

Tabelle 1: Faktoren für unterschiedliche Temperaturintervalle zur Berechnung des Time Temperature Index, TTI (WAPLES 1980)

Time Temperature Index $TTI = \sum_{nmin}^{nmax} \Delta T_n \cdot r^n$	Temperatur-Intervall °C	Index-Wert n	Temperatur-Faktor
	30-40	-7	r^{-7}
	40-50	-6	r^{-6}
	50-60	-5	r^{-5}
	60-70	-4	r^{-4}
	70-80	-3	r^{-3}
	80-90	-2	r^{-2}
	90-100	-1	r^{-1}
	100-110	0	1
	110-120	1	r
	120-130	2	r^2
	130-140	3	r^3
	140-150	4	r^4
	150-160	5	r^5
	... ¹	m	r^m



¹ keine Datengrundlage

Eine Berechnung der Vitritreflexionswerte aus dem TTI (Kurve in Tabelle 1) ist über eine Logarithmusfunktion möglich:

$$R_0 = -1,805 + 0,520 \cdot \ln(TTI + 74,527) \quad \text{Bestimmtheit}=0,997 \quad (2)$$

Ein chemisch kinetisches Modell namens Easy-R₀ zur Berechnung der Erdölbildung und von Vitritreflexionen wurde in BURNHAM et al. (1989,1990) vorgestellt. Hierbei werden Arrhenius-Gleichungen zur Berechnung der Vitrit-Bildung in Abhängigkeit von Temperatur und Zeit genutzt. Exemplarisch ist die Arrhenius-Gleichung in (3) dargestellt.

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot T}} \quad \text{mit} \quad \begin{array}{ll} E_a & \text{Aktivierungsenergie} \\ R & \text{allgemeine Gaskonstante} \\ T & \text{Temperatur} \\ A & \text{Faktor} \end{array} \quad (3)$$

Im Modell ist eine Aufteilung der Aktivierungsenergien für vier verschiedene Reaktionen implementiert - Abspaltung von Wasser, Kohlendioxid, Methan und höherwertigen Kohlenwasserstoffen. Aufgrund der detaillierten Betrachtung der Reaktionskinetik ist mit dieser Methode eine genauere Ermittlung eines Vitrinitreflexionswertes möglich. Das Modell nach BURNHAM et al. (1989) ist validiert für Vitrinitwerte zwischen 0,3 bis ca. 4,5.

3 Numerische Berechnungen

Ziel ist es, mit Hilfe numerischer Berechnungen die Temperaturgeschichte und Vitrinitbildung in der Umgebung von Vlotho, Uchte und Lauenau im Niedersächsischen Becken zu reproduzieren. Diese Vorgehensweise erlaubt eine Einordnung von Bereichen, welche Temperaturen größer 90°C erfahren haben. Die Berechnungsergebnisse werden anhand gemessener Daten verifiziert. Ein weiterer Schritt ist daraufhin die Berechnung von Vitrinitreflexionen und Temperaturverläufen im Umfeld eines generischen Endlagers nach der gleichen Methodik. Der Vergleich der Vitrinitwerte von Gebieten mit natürlichen Intrusionskörpern und von einem generischen Endlager soll das jeweilige chemische Umwandlungspotential verdeutlichen.

Numerisches Modell

Für thermische Berechnungen wurde ein ausreichend großes Modell mit den Abmessungen 450x400x100 km gewählt zur Vermeidung von Randeffekten. Das Modell ist in Abbildung 9 dargestellt. Die Intrusionskörper Vlotho, Uchte und Lauenau wurden in einer Blockstruktur nachgebildet. Aufgrund der größeren Entfernung des Intrusionskörpers Brahmsche zu den betrachteten Bohrungen wurde dieser nicht im Modell berücksichtigt.

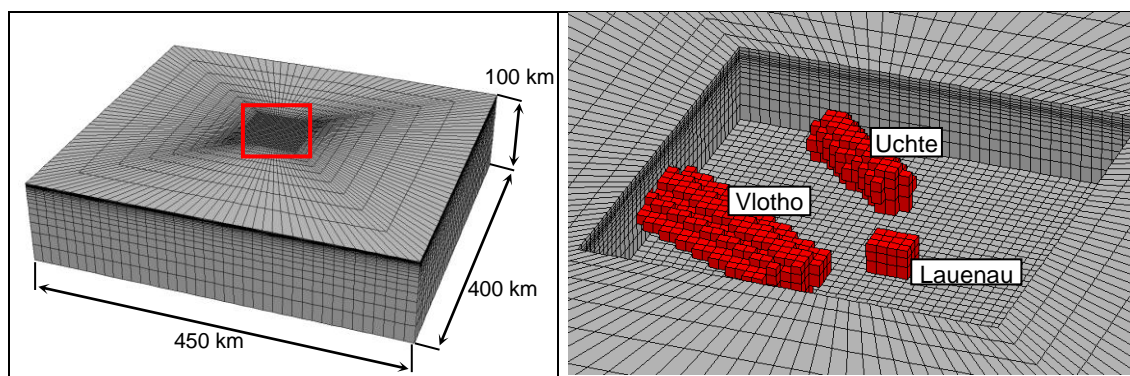


Abbildung 9: Darstellung des numerischen Modells, links im Überblick, rechts Detaildarstellung der Intrusionskörper Vlotho, Uchte und Lauenau (Teile des umgebenden Gebirges ausgeblendet)

Versenkungs- und Temperaturgeschichte

Für die Bildung der Vitrinite ist die gesamte Temperaturgeschichte entscheidend und damit auch die Versenkungsgeschichte. RULLKÖTTER et al. (1988) beschreibt eine Versenkung der Lias-Sedimente (Abbildung 4) bis in die späte Kreidezeit. Im Bereich der Intrusionen Vlotho, Brahmsche und Uchte wird eine maximale Versenkung zwischen 700 m und 3000 m in Abhängigkeit der Lage im Becken genannt (ALTEBÄUMER 1982). Nach Abschätzungen von HERRMANN (1971) anhand der Sedimentmächtigkeiten in der Mitte des Hilsmulde ergaben sich maximale Versenkungstiefen von 1500-2000 m Tiefe für die Lias epsilon Sedimente. Im Modell wird vereinfachend von einer 2000 m Überdeckung zur Zeit der Platznahme der Intrusionskörper vor 100 Ma angenommen. Dabei werden die Intrusionsvolumen nach Abbildung 1 und 2 abgeschätzt und im Modell zeitunabhängig betrachtet. Ein Abtrag der Erdoberfläche im Zeitraum von vor 100 Ma bis heute ist nicht im Modell enthalten. Bei der Simulation wird nur Wert auf thermischen Impuls der Intrusionskörper gelegt. Nur der

Differenzbetrag an Vitritinreflexionen der vier genannten Bohrungen wird nachgebildet und die Annäherung an die gemessenen Vitritinreflexionswerte ist später durch einen Offset möglich.

Berechnungsgrundlagen

Die numerischen Berechnungen zur Wärmeleitung wurden mit dem Programm FLAC 3D (ITASCA 2005) durchgeführt. Der Wärmefluss wird über den Energieerhaltungssatz gelöst. Die instationäre Wärmeleitungsgleichung wird über die Fourier-Differentialgleichung gelöst.

$$-q_i^t + q_v^t = \rho \cdot c_v \frac{\partial T}{\partial t} \quad (4)$$

$$q_i = -\lambda \cdot T_{,i} \quad (5)$$

mit

- q_i^t Wärmefluss-Vektor [W / m²]
- q_v^t Wärmequelle [W / m³]
- ρ Dichte [kg / m³]
- c_v Spezifische Wärmekapazität [J / kg·K]
- T Temperatur [°C]
- t Zeit [s]
- Index t = thermal; index i = 3 Komponenten des Vektors , i = 1,3
- λ Wärmeleitfähigkeit [W / m·K]
- $T_{,i}$ Temperaturgradient [K / m]

Die gewählten Materialparameter für die thermischen Berechnungen sind in Tabelle 2 aufgeführt. Die spezifische Wärmekapazität von Basalt wurde aufgrund des größeren Temperaturspektrums in Abhängigkeit der Temperatur implementiert (Abbildung 10).

Tabelle 2: Thermische Parameter

Eigenschaft		Sedimentgestein	Basaltintrusion
Dichte	kg m ⁻³	2400	3000
Wärmeleitfähigkeit	W m ⁻¹ K ⁻¹	2,5	3,0
Spezifische Wärmekapazität	J kg ⁻¹ K ⁻¹	1000	f(T)

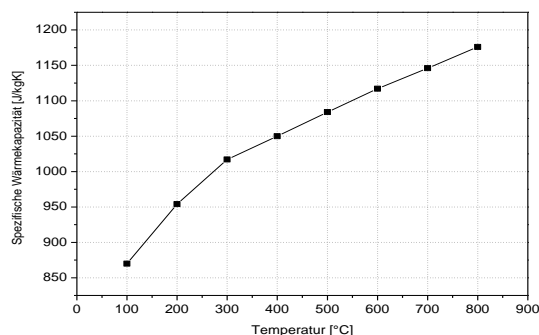


Abbildung 10: Spezifische Wärmekapazität von Basalt in Abhängigkeit von der Temperatur

(LEONIDOR 1967)

Die Schmelztemperatur von basischem Magma beträgt mindestens 900-1000 °C (BAILEY 1976). Zusätzlich wird der Anteil der latenten Wärme (Kristallisationswärme) betrachtet. Nach WHITE et al. (2003) beträgt die Kristallisationsenthalpie H von basischen Magmen zwischen 250 und 400 kJ kg^{-1} . Nach LACHENBRUCH et al. (1976) beträgt die spezifische Wärmekapazität von Basalt bei 1000 °C ca. $c=1,25 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ (siehe auch Abbildung 10, Extrapolation auf 1000 °C). Näherungsweise kann die latente Wärme durch eine fiktive Temperatur berücksichtigt werden mit $\Delta T=H/c$. Mit $H=400 \text{ kJ kg}^{-1}$ und $c=1,25 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ erhält man $\Delta T=320 \text{ K}$. In Summe mit einer Schmelztemperatur von 1000 °C wird im Modell eine Anfangstemperatur des flüssigen Basalts von 1320 °C angenommen.

Im Modell wird eine Oberflächentemperatur von 8 °C und ein Temperaturgradient von $0,038 \text{ K m}^{-1}$ angenommen. Dies entspricht einer Temperaturanfangsbedingung von ca. 84 °C in 2000 m Tiefe im Modell. Im Modell wurde die Versenkungsgeschichte nicht berücksichtigt und eine Tiefe von 2000 m im Modell entspricht der heutigen Erdoberfläche in der Realität (2000 m Abtrag ab dem Lias bis in die heutige Zeit). Die Berechnungszeit ist 100 Ma.

Ergebnisse der numerischen Berechnungen

Mit den getroffenen Annahmen wurden numerische Berechnungen zur Temperaturentwicklung an den Beobachtungsbohrungen durchgeführt. Abbildung 11 zeigt die berechneten Temperaturverläufe der Bohrungen Haddessen, Harderode, Dielmissen und Wenzel in einer Berechnungszeit von 100 Ma (von der Platznahme der Basaltintrusionen bis heute). Der Wärmeeintrag bewirkt eine maximale Temperaturänderung im Bereich der Bohrung Haddessen von ca. 80 K. Die Temperaturerhöhung der von den Basaltintrusionen weiter entfernten Bohrung Wenzel beträgt nur 5 K.

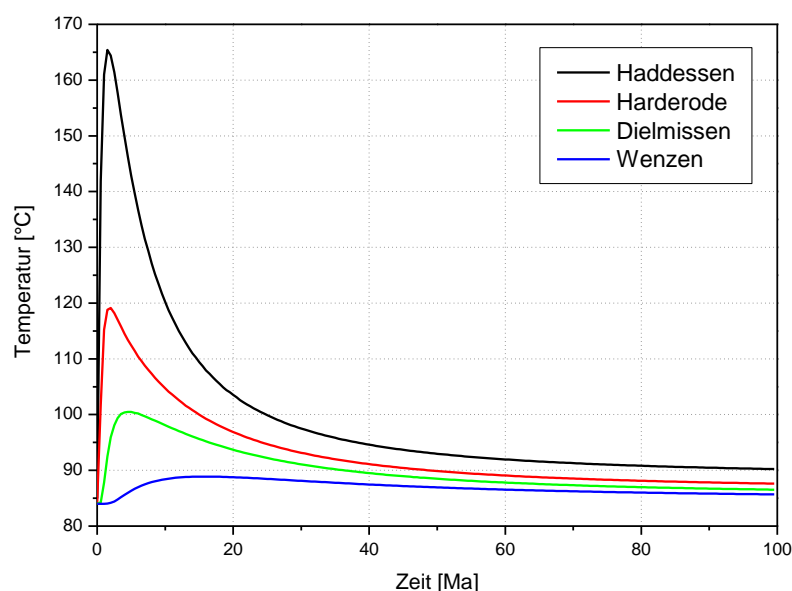


Abbildung 11: Berechneter Temperaturverlauf der 4 Flachbohrungen im Lias

Diesen Temperaturverläufen entsprechen folgende TTI- bzw. Vitritreflexionswerte (R_0 , Berechnung nach Tabelle 1 und Gleichung 2):

Tabelle 3: Berechnete TTI- und R_0 -Werte für 4 betrachtete Bohrungen

Bohrung	TTI-Wert	R_0 -Werte
Haddessen	252	1,20
Harderode	37	0,65
Dielmissen	23	0,57
Wenzen	12	0,52

Die Messungen in den vier betrachteten Bohrungen ergaben Vitritreflexionswerte zwischen 0,5 und 1,5. Diese Spannweite an Reflexionswerten wird durch die Simulation nicht abgedeckt. In den Berechnungen wurde zum Zeitpunkt -100 Ma eine Tiefe von -2000 m für die Bohrungen angenommen. Diese Tiefe entspricht einem bestimmten Temperatur-Grundniveau, welches die Größe der Vitritreflexionen maßgeblich beeinflusst. Durch Einfügen eines gewissen Offsets zu den Temperaturdaten in Abbildung 11 ist es möglich entweder die obere oder die untere Grenze der gemessenen Vitritreflexionen (4 Bohrungen) anzugleichen.

Tabelle 4: Berechnete Vitritreflexionswerte mit einem bestimmten Offset zu den berechneten Temperaturkurven und die Abweichung zur Messung

Bohrung	Angleichung an oberen Vitritreflexionswert (Haddessen)		Angleichung an unteren Vitritreflexionswert (Wenzen)	
	Berechnung R_0	Abweichung zur Messung	Berechnung R_0	Abweichung zur Messung
Haddessen	1,45	0 %	0,97	-33 %
Harderode	0,76	-13 %	0,56	-33 %
Dielmissen	0,64	-6 %	0,52	-24 %
Wenzen	0,57	+18 %	0,48	0 %
T-Offset	+8 K		-8 K	

Es wird deutlich in Tabelle 4 welchen enormen Einfluss kleine Temperaturänderungen auf den Vitritreflexionswert besitzen. Der Temperatur-Offset von +8 K bzw. -8 K bedeutet bei dem angenommenen Temperaturgradient von $0,038 \text{ K m}^{-1}$ einen Offset in der Tiefe von ca. -200 m bzw. +200 m. Ein genaues geologisches Profil des betrachteten Gebiets und speziell ein geologischer Schnitt von Bohrung Haddessen bis Bohrung Wenzen liegt nicht vor. Die größte Entfernung der vier Bohrungen untereinander beträgt ca. 50 km. Der Profilschnitt in Abbildung 12 (mit Bohrung Lauenau Z1) zeigt, dass sich auf Grund der Tektonik innerhalb kurzer Entfernungen die Tiefenlage geologischer Schichten stark verändern kann. Es wird einerseits vermutet, dass sich die Vitritreflexionswerte im Modell nicht genau abbilden lassen auf Grund unterschiedlicher Tiefenlagen (im Modell haben alle 4 Bohrungen die gleiche Tiefenlage). Andererseits können die chemischen Randbedingungen der vier betrachteten Bohrungen unterschiedlich sein und dadurch ist keine genaue Abbildung der

Vitrinitreflexionswerte im Modell möglich. Am Beispiel des geologischen Profilschnitts im Niedersächsischen Becken in Abbildung 12 (mit Bohrung Lauenau Z1, siehe Abbildung 2) wird deutlich, dass eine Änderung der Tiefenlage einer geologischen Schicht um ca. 200 m innerhalb weniger Kilometer möglich ist. Die Annäherung an die gemessenen Vitrinitreflexionen in Tabelle 4 wird als ausreichend angesehen.

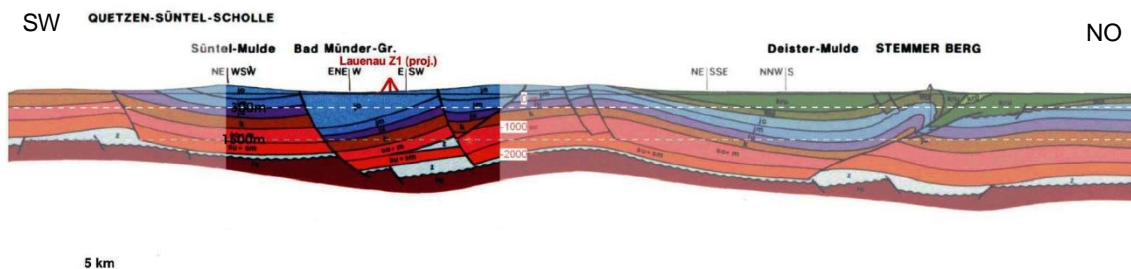


Abbildung 12: Profilschnitt durch den NW-Abschnitt des Untersuchungsgebietes. Die Schichten der Unterkreide sind grün, der Jura blau und der Trias braun eingefärbt (in JOBMANN et al. 2007b, aus BGR 2001).

Aufgrund der relativ geringen durchschnittlichen Abweichung der berechneten von den gemessenen Vitrinitreflexionswerten bei der Angleichung der oberen Grenze vorgegebener Vitrinitreflexionen wurde eine zusätzliche Berechnung mit dem Temperatur-Offset von +8 K durchgeführt (siehe Ergebnisse in Tabelle 4). Die Abbildung 13 zeigt eine Darstellung der berechneten heutigen Vitrinitreflexionen (im Modell 100 Ma Berechnungszeit) im Bereich der Intrusionen Vlotho und Uchte im Niedersächsischen Becken. Eine hinreichend genaue Übereinstimmung mit Messungen im Lias epsilon in Abbildung 1 ist gegeben.

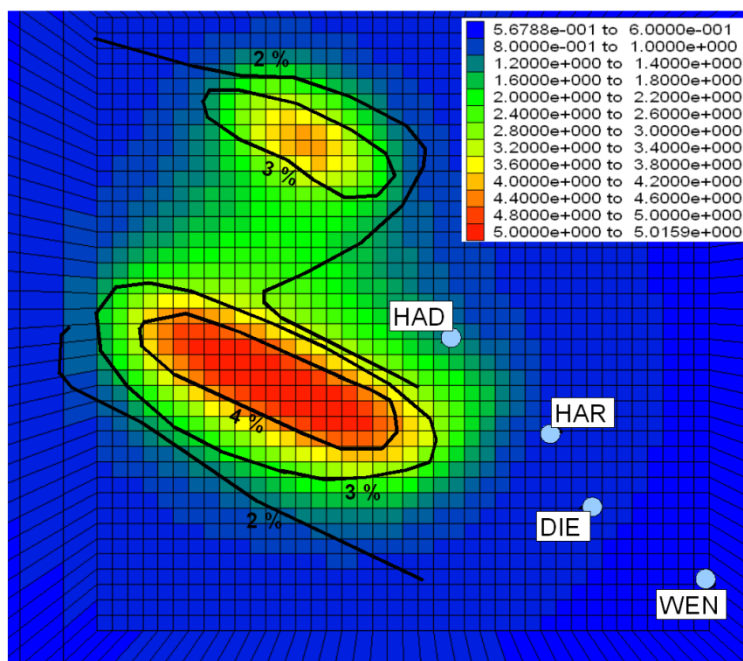


Abbildung 13: Berechnete heutige Vitrinitreflexionen des Lias epsilon im Niedersächsischen Becken und Darstellung der Isolinien nach Abbildung 1

Das Temperaturmaximum aufgrund des Wärmeeintrags durch die Basaltintrusionen im Modell wird für die Bohrungen Haddessen und Harderode nach ca. 1 Ma erreicht (Abbildung 11). Abbildung 14 zeigt die Temperaturverteilung nach 1 Ma Berechnungszeit und die gemessenen Vitrinireflexionswerte im Lias-epsilon.

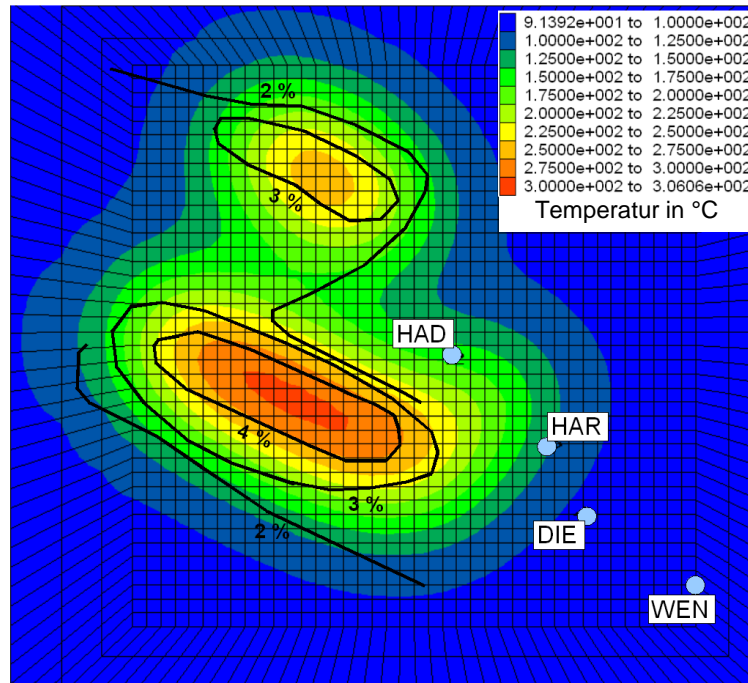


Abbildung 14: Berechnete Temperaturverteilung nach 1 Ma Berechnungszeit im Lias epsilon des Niedersächsischen Beckens

Zum Vergleich wurden Berechnungen der Vitrinireflexionen aus den Temperaturverläufen (Abbildung 11) mit Hilfe des Easy- R_0 -Verfahrens durchgeführt. Tabelle 5 zeigt die Vitrinireflexionswerte für die Temperaturkurven gemäß Abbildung 11 mit 8 K Temperatur-Offset nach den Berechnungsverfahren mit TTI und Easy- R_0 -Verfahren. Für die gegebenen Temperaturkurven betragen die Unterschiede zwischen den beiden Verfahren maximal 19 %.

Tabelle 5: Vergleich der berechneten Vitrinireflexionen basierend auf dem TTI und dem Easy- R_0 -Algorithmus, Unterschied beider Verfahren

Bohrung	R_0 -Werte aus numerischen Berechnungen (basierend auf TTI), angeglichen an Haddessen mit +8 K Offset (Unterschied zur Messung)	R_0 -Werte mit Easy- R_0 aus Temperaturkurven in Abbildung 11 mit +8 K Offset (Unterschied zur Messung)	Unterschied von R_0 (TTI) und R_0 (Easy)
Haddessen	1,45 (0 %)	1,37 (-6 %)	6 %
Harderode	0,76 (-13 %)	0,79 (-10 %)	4 %
Dielmissen	0,64 (-6 %)	0,72 (+6 %)	12 %
Wenzen	0,57 (+18 %)	0,68 (+42 %)	19 %

Vitrinit-Berechnungen zu einem generischen Endlager

In SCHONEBECK et al. (2004) und JOBMANN et al. (2007a) wurden Untersuchungen zu generischen Endlagern im Tonstein in Deutschland vorgestellt. Unter anderem wurde ein generisches Endlager-Modellgebiet in Süddeutschland in 790 m Teufe untersucht. Anhand dieses generischen Endlagers werden Berechnungen zu Vitrinitreflexionswerten aufgrund des Wärmeeintrags durch HAW-Abfall durchgeführt. Abbildung 15 zeigt das generische Endlagermodell.

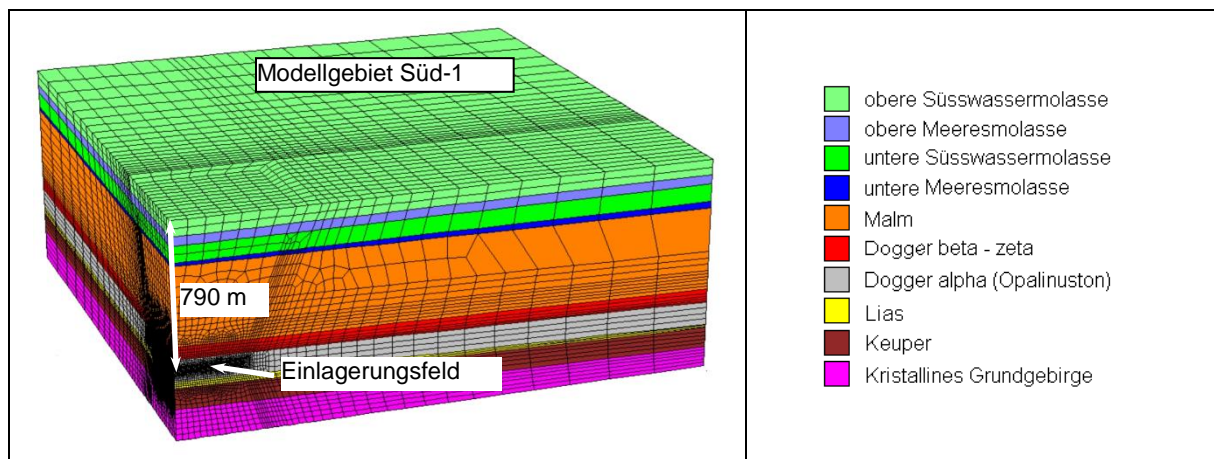


Abbildung 15: Generisches Endlagermodellgebiet Süd-1 (JOBMANN et al. 2007a)

Gemäß den Angaben in SCHONEBECK et al. (2004) wurde der Wärmeeintrag durch 1212 HAW-Wärmequellen in einem Endlagerfeld für Bohrlochlagerung angenommen. Die Materialparameter der umgebenden Gesteinsschichten wurden übernommen. Die Parameter des Einlagerungsfeldes sind in Tabelle 6 aufgeführt.

Tabelle 6: Parameter des HAW-Einlagerungsfeldes in einem generischen Endlagermodellgebiet (SCHONEBECK et al. 2004)

Variante	Zwischenlagerzeit [a]	Behälter pro Bohrloch	Bohrlochabstand [m]	Größe des Einlagerungsfeldes [km ²]
Modellgebiet in Süddeutschland HAW gB	38	6	30	0,63

Abbildung 16 zeigt die Wärmeleistung einer HAW-Kokille nach 38 Jahren Zwischenlagerzeit. Bereits nach 200 Jahren ist eine starke Verringerung der Wärmeleistung einer HAW-Kokille ersichtlich.

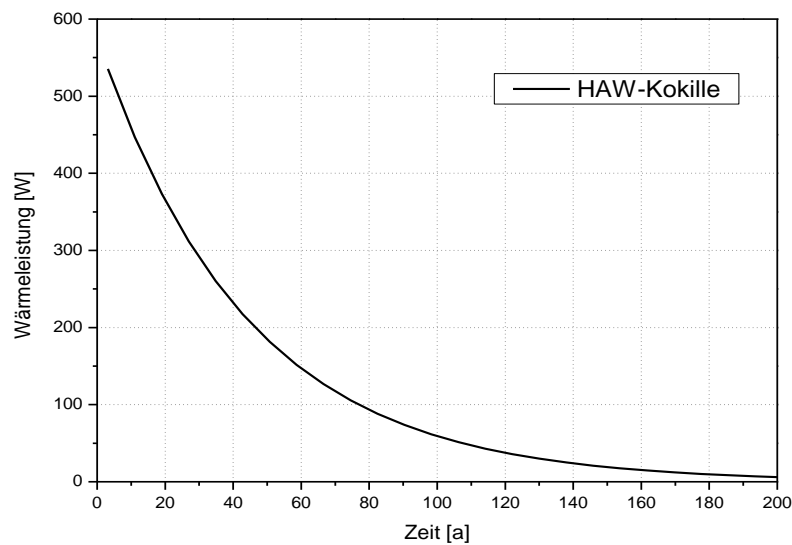


Abbildung 16: Wärmeleistung einer HAW-Kokille nach 38 Jahren Zwischenlagerzeit

Abbildung 17 zeigt die berechneten Temperaturverläufe in der Umgebung des Einlagerungsfeldes nach SCHONEBECK et al. (2004). Aufgrund des Wärmeeintrags durch die HAW-Kokillen wurde am Rand des Einlagerungsfeldes eine Temperaturerhöhung von ca. 23 K ausgewiesen.

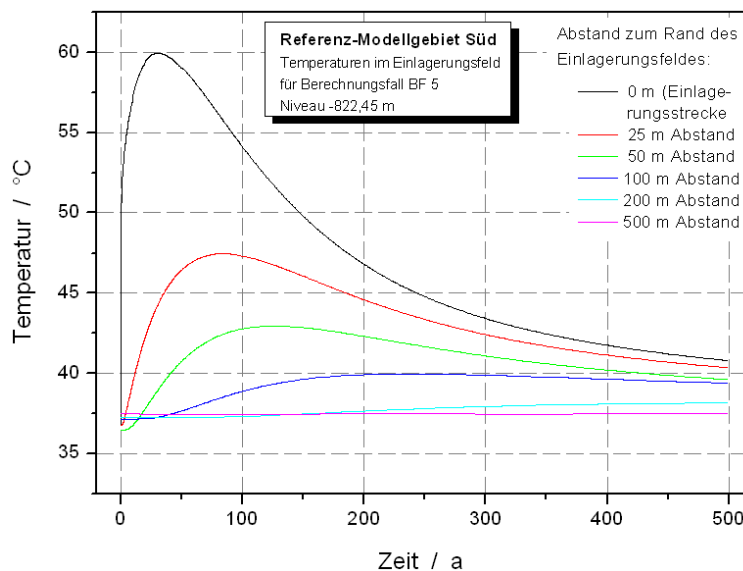


Abbildung 17: Temperaturverläufe für verschiedene Untersuchungspunkte im Niveau -822 m NN (SCHONEBECK et al. 2004)

Der Temperaturimpuls durch die HAW-Kokillen ist nach ca. 500 Jahren größtenteils abgeklungen (Abbildung 17). In Abbildung 18 wird ersichtlich, dass innerhalb von 500 Jahren nur eine vernachlässigbare Vitritbildung stattfindet. Es wurden Werte für den TTI zwischen 10^{-5}

und 10^{-6} , welche nach Tabelle 1 eine äußerst geringe Erhöhung der Vitrinitreflexionswerte darstellen. Unterhalb einer Temperatur von 30 °C ist der TTI gleich 0.

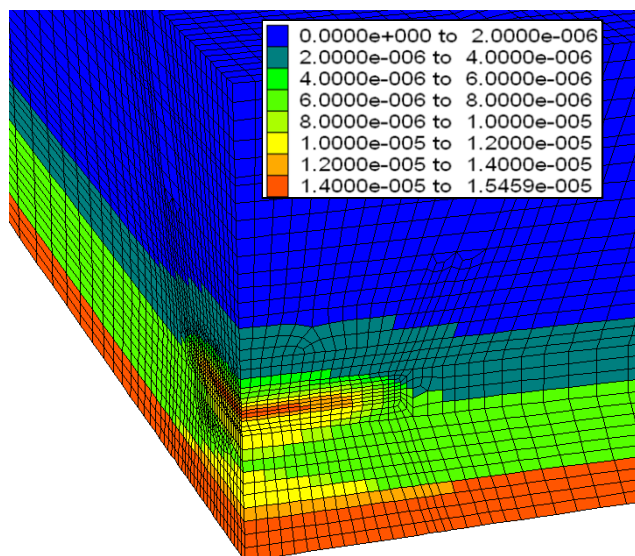


Abbildung 18: Berechneter TTI im Modellgebiet in Süddeutschland, Berechnungszeit 500 Jahre

Neben der Einlagerung von HAW-Kokillen besteht der Bedarf der Einlagerung von Brennstabkokillen in potentielle Endlager. Ein Vergleich der Wärmeleistungskurven beider Behälter ist in Abbildung 19 zeigt, dass eine BSK-3-Kokille (hier angenommene Mischbeladung mit 90% Uran und 10% MOX) zwar eine geringere Anfangsleistung als eine HAW-Kokille besitzt, aber dafür über längere Zeit Wärme freisetzt. Dennoch ist der Leistungsunterschied beider Kokillen so gering, dass sich daraus keine signifikante Änderung für eine TTI-Berechnung ergeben würde.

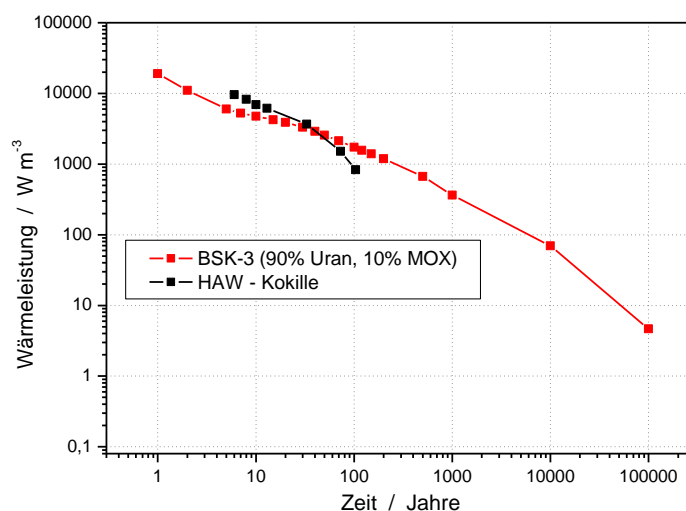


Abbildung 19: Wärmeleistung von HAW-Kokille und Brennstabkokille(BSK-3, Mischbeladung)

4 Auswertung und Zusammenfassung

Es wurden Berechnungen zur Umwandlung von organischen Material zu Erdöl bzw. Erdgas durchgeführt. Ein Index für diese Umwandlung ist die Vitritreflexion. Mit Hilfe numerischer Berechnungen wurden Temperaturfelder und daraus Vitritreflexionswerte in der Umgebung basaltischer Intrusionen im Niedersächsischen Becken simuliert. Für die Modellkalibrierung wurden Vitrit-Isoliniendiagramme und Vitritreflexionswerte von vier Bohrungen im Niedersächsischen Becken genutzt. Die Lage und Größe der basaltischen Intrusionen wurden anhand der Vitrit-Isoliniendiagramme und anhand von Gravimetrie- und Magnetikmessungen abgeschätzt. Die Berechnungszeit war 100 Ma (Zeitalter Apt bis heute). Die Vitritreflexionswerte der Bohrungen konnten im Modell mit Einzelabweichungen von 18 % nachgebildet werden. Chemische Umwandlungsprozesse und explizit die Erdölbildung werden in der Nähe basaltischer Intrusionen (Einflussbereich im 10er Kilometer Bereich) stark begünstigt. Temperaturen größer 90 °C wurden noch in 40 km Entfernung im betrachteten Beispiel (in -2000 m Tiefe) erreicht. Der thermische Einfluss der basaltischen Intrusionen ist über bis zu 100 Ma Jahre vorhanden.

Es wurden weitere numerische Berechnungen zur Wärmeentwicklung eines generischen Endlagers in Süddeutschland durchgeführt. Der thermische Impuls von HAW-Abfällen eines Endlagers ist im Vergleich zum Wärmeimpuls einer Basaltintrusion mit mehreren 10er Kilometer Ausdehnung und ca. 1200 °C Anfangstemperatur äußerst gering. Dies zeigte sich in den Berechnungsergebnissen zu Vitritreflexionen. Die Vitritreflexionen aufgrund des Wärmeimpulses eines HAW-Endlagers sind äußerst gering und vernachlässigbar. Daraus wird geschlussfolgert, dass eine bedeutsame chemische Umwandlung von organischem Material zu Erdöl bzw. Erdgas aufgrund des Wärmeeintrags der wärmeentwickelnden HAW-Abfälle eines Endlagers ausgeschlossen werden kann. Die Temperaturänderung aufgrund des Wärmeeintrags ist zu gering und die Zeitdauer des Wärmeeintrags bei weitem zu kurz. Für ein Endlager mit BSK-3-Abfällen gilt diese Aussage ebenso, da trotz der Wärmeentwicklung der BSK-3 über längere Zeiträume das Wärmeleistungspotential nicht ausreicht, um signifikante Umwandlungen von organischen Material zu bewirken.

Einerseits bestehen Vorteile, wenn das Wirtsgestein im Verlaufe seiner Versenkungsgeschichte Temperaturen größer 90 °C bereits erfahren hätte. Wurden beispielsweise die Tone bereits im Verlauf ihrer geologischen Geschichte Temperaturen oberhalb 90 °C ausgesetzt, so sollte ein erneuter Temperaturanstieg von weniger als 90 °C nur eine geringe Auswirkung haben. Andererseits hat die Temperatur ebenso nachteiligen Einfluss auf das potentielle Wirtsgestein hinsichtlich der spezifischen Oberfläche (siehe Abbildung 5) und der Permeabilität. Weiterhin wird ein Einfluss der Temperatur auf die Versprödung, Rissbildung und Permeabilität von Tonsteinen vermutet. Dies wird in Rahmen dieses Vorhabens noch untersucht und diskutiert.

Literatur

- Altebäumer, F.J. (1982): Untersuchungen zur Kohlenwasserstoff-Genese an Tonsteinen des Lias delta im Nordwestdeutschen Becken unter besonderer Berücksichtigung des Einflusses der Intrusionen der Massive von Brahmische und Vlotho, Ph.D. thesis, RWZH Aachen.
- Bailey, D.K. (1976): Application of experiments to alkaline rocks. In Beyley, D. K. & McDonald, R. [Hrsg.]: The evolution of the crystalline rocks, 419-469, 15 Abb., 4 Taf.; London, New York, San Francisco (Acad. Press).
- BGR - Koordinatoren Baldschuhn, R., Binot, F., Fleig, S., Kockel, F. (2001): Geotektonischer Atlas von Nordwest-Deutschland und dem deutschen Nordsee-Sektor - Strukturen, Strukturentwicklung, Paläogeographie, Geol. Jb, A 153, Hannover.
- Barker, C.E. & Pawlewicz, M.J. (1994): Calculation of vitrinite reflectance from thermal histories and peak temperatures. A comparison of methods. – P.K. Mukhopadhyay & W.G. Dow (Eds.); Vitrinite reflectance as a maturity parameter: applications and limitations. – ACS Symposium Series 570: 216-229.
- Burnham, A.K., Sweeney, J.J. (1989): A chemical kinetic model of vitrinite maturation and reflectance, Lawrence Livermore National Laboratory, in Geochimica et Cosmochimica Acta Vol. 53 pp. 2649-2657, Livermore.
- Burnham, A.K., Sweeney, J.J. (1990): Evaluation of a simple model of vitrinite reflectance based on chemical kinetics, The American Association of Petroleum Geologists Bulletin, V.74, No.10, Livermore.
- Deutloff, O., Teichmüller, M., Teichmüller, R., Wolf, M. (1980): Inkohlungsuntersuchungen im Mesozoikum des Massivs von Vlotho im Niedersächsischen Tektogen, N. Jb. Geol. Paläont. Mh., 1980 (6): 321-341, Stuttgart.
- Herrmann, A. (1971): Die Asphaltkalk-Lagerstätte bei Holzen/Tih auf der Südwestflanke der Hilsmulde, Beih. Geol. Jahrb. 95, 125pp.
- Itasca Consultants (2005): FLAC 3D 3.0 Handbücher, Minnesota USA
- Jobmann, M., Amelung, P., Uhlig, L. (2007a): Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Auslegung eines generischen Endlagers im Tonstein in Deutschland, GENESIS, Abschlussbericht, DBE Technology, Peine.
- Jobmann, M., Amelung, P., Uhlig, L. (2007b): Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Auslegung eines generischen Endlagers im Tonstein in Deutschland, GENESIS, Anlagenband Geologie der Referenzregionen in Deutschland, DBE Technology, Peine.

- Lachenbruch, A.H., Sass, J.H., Munroe, R.J., Moses, T.H. Jr. (1976): Geothermal setting and simple heat conduction models for the Long Valley caldera, J. Geophys. Res., 81: 769-784, 10 Abb., 2 Taf.; Washington.
- Leonidor, Y. (1967): Heat capacity of rocks at high temperatures, Trans. from Geokimiya Nr. 4 pp 470-472, Vernadskiy Institute of Geochemistry and Analytical Chemistry of Science, Moskau.
- Mann, J. (1987): Veränderung der Mineralmatrix und Porosität eines Erdölmuttergesteins durch einen Intrusivkörper (Lias epsilon 2-3: Hilsmulde, NW-Deutschland), 2. Tagung deutschsprachiger Sedimentologen, Heidelberg.
- Rullkötter, J., Leythaeuser, D., Horsfield, B., Littke, R., Mann, U., Müller, P.J., Radke, M., Schaefer, R.G., Schenk, H.-J., Schwochau, K., Witte, E.G., Welte, D.H. (1988): Organic matter maturation under the influence of a deep intrusive heat source: A natural experiment for quantification of hydrocarbon generation and expulsion from a petroleum source rock (Toarcian shale, northern Germany), Institute of Petroleum and Organic Geochemistry at the Nuclear Research Centre Jülich.
- Schonebeck, M., Jobmann, M., Polster, M. (2004): Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Auslegung eines generischen Endlagers im Tonstein, GENESIS, Jahresbericht 2004, DBE Technology, Peine.
- Teichmüller, M., Teichmüller, R., Bartenstein, H. (1984): Inkohlung und Erdgas – eine neue Inkohlungskarte der Karbonoberfläche in Nordwestdeutschland, Geologisches Landesamt Nordrhein-Westfalen, Krefeld.
- Uhlig, L., Amelung, P., Jobmann, M., Schmidt, H. (2006): Untersuchungen zur sicherheitstechnischen Auslegung eines generischen Endlagers im Tonstein, GENESIS Jahresbericht 2005, DBE Technology, Peine.
- Waples, D. (1980): Time and Temperature in Petroleum Formation: Application of Lopatin's Method to Petroleum Exploration, The American Association of Petroleum Geologists Bulletin V. 64, No. 6.
- White, S. M., Spera, F. J., Crisp, J. A. (2003): Long-term rates of mafic magma emplacement and implications for heat advection, American Geophysical Union, Fall Meeting, abstract.