

Arbeitsbericht NAB 11-20

**Aufbau und Auswertung der
Gesteinsparameter-Datenbank
für Opalinuston, den 'Braunen
Dogger', Effinger Schichten und
Mergel-Formationen des
Helvetikums**

August 2011

M. Mazurek

Rock-Water Interaction,
Institut für Geologie,
Universität Bern

Nationale Genossenschaft
für die Lagerung
radioaktiver Abfälle

Hardstrasse 73
CH-5430 Wettingen
Telefon 056-437 11 11

www.nagra.ch

Arbeitsbericht NAB 11-20

**Aufbau und Auswertung der
Gesteinsparameter-Datenbank
für Opalinuston, den 'Braunen
Dogger', Effinger Schichten und
Mergel-Formationen des
Helvetikums**

August 2011

M. Mazurek

Rock-Water Interaction,
Institut für Geologie,
Universität Bern

KEYWORDS

Opalinuston, 'Brauner Dogger', Effinger Schichten,
Helvetische Mergel, Mineralogie, Dichte, Porosität,
Kationenaustausch, Oberfläche

Nationale Genossenschaft
für die Lagerung
radioaktiver Abfälle

Hardstrasse 73
CH-5430 Wettingen
Telefon 056-437 11 11

www.nagra.ch

Nagra Arbeitsberichte stellen Ergebnisse aus laufenden Forschungsaktivitäten dar, welche nicht zwingend einem vollumfänglichen Review unterzogen wurden. Diese Berichtsreihe dient dem Zweck der zügigen Verteilung aktueller Fachinformationen. Die Autoren haben ihre eigenen Ansichten und Schlussfolgerungen dargestellt. Diese müssen nicht zwingend mit denjenigen der Nagra übereinstimmen.

"Copyright © 2011 by Nagra, Wettingen (Schweiz) / Alle Rechte vorbehalten.

Das Werk einschliesslich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung ausserhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung der Nagra unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Übersetzungen, Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen und Programmen, für Mikroverfilmungen, Vervielfältigungen usw."

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis.....	I
Tabellenverzeichnis.....	II
Figurenverzeichnis.....	III
1 Zielsetzung und Arbeitsumfang.....	1
2 Verfügbare Datenbasis für die Nordschweiz.....	3
3 Konsistenzprüfung abhängiger Parameter (Nordschweizer Daten).....	13
4 Screening der Nordschweizer Daten.....	14
5 Repräsentativität der Nordschweizer Daten.....	17
5.1 Mineralogie.....	17
5.2 Dichten und physikalische Porosität.....	18
6 Resultate (Nordschweizer Daten).....	20
6.1 Übersicht.....	20
6.2 Opalinuston.....	23
6.3 "Brauner Dogger".....	27
6.4 Effinger Schichten.....	29
7 Korrelation zwischen Mineralogie und Porosität in Opalinuston, "Braunem Dogger" und Effinger Schichten.....	32
7.1 Übersicht.....	32
7.2 Opalinuston.....	34
7.3 "Brauner Dogger".....	35
7.4 Effinger Schichten.....	35
8 Korrelation zwischen Mineralogie, Mineraloberflächen und Kationenaustausch-Kapazität in Opalinuston, "Braunem Dogger" und Effinger Schichten.....	38
8.1 Korrelation zwischen äusserer Oberfläche (BET) und Tonmineralgehalt.....	38
8.2 Korrelation zwischen totaler Oberfläche und Tonmineralgehalt.....	41
8.3 Korrelationen zwischen Kationenaustausch-Kapazität, Tonmineralgehalt und äusserer Oberfläche (BET).....	43
9 Daten für helvetische Mergel des Wellenbergs.....	45
Literatur.....	48
Anhang: Gesteinsparameter-Datenbank (Version 1, 8. August 2011) in elektronischer Form (CD)	

Tabellenverzeichnis

Tab. 1:	Lokalitäten und Datenquellen in der Nordschweiz.....	3
Tab. 2:	Struktur der Datenbank zu Gesteinsparametern der Sedimentgesteine der Nordschweiz.....	5
Tab. 3:	Vergleich von Laboranalysen des Tonmineralgehalts mit aus geophysikalischen Logs von Albert (2011) abgeleiteten Daten.....	17
Tab. 4:	Mineralogie des Opalinustons, des "Braunen Doggers" und der Effinger Schichten: Zusammenfassung aller verfügbaren Daten.....	21
Tab. 5:	Dichten, Porositäten, Kationenaustausch-Eigenschaften und Oberflächen des Opalinustons, des "Braunen Doggers" und der Effinger Schichten: Zusammenfassung aller verfügbaren Daten.....	22
Tab. 6:	Mineralogie des Opalinustons: Lokaltätsspezifische Daten.....	24
Tab. 7:	Dichten, Porositäten, Kationenaustausch-Eigenschaften und Oberflächen des Opalinustons: Lokaltätsspezifische Daten.....	25
Tab. 8:	Mineralogie des "Braunen Doggers": Lokaltätsspezifische Daten.....	28
Tab. 9:	Dichten, Porositäten, Kationenaustausch-Eigenschaften und Oberflächen des "Braunen Doggers": Lokaltätsspezifische Daten.....	28
Tab. 10:	Mineralogie der Effinger Schichten: Lokaltätsspezifische Daten.....	30
Tab. 11:	Dichten, Porositäten, Kationenaustausch-Eigenschaften und Oberflächen der Effinger Schichten: Lokaltätsspezifische Daten.....	31
Tab. 12:	Relative und absolute Gehalte an Tonmineralen im Opalinuston und in den Effinger Schichten.....	40
Tab. 13:	Mineralogie der Palfris-Formation und der tertiären Mergel am Wellenberg (Mittelwerte aller Einzelanalysen): Zusammenfassung aller verfügbaren Daten.....	46
Tab. 14:	Dichte, Porosität, Kationenaustausch-Eigenschaften und Oberfläche der Palfris-Formation und der tertiären Mergel am Wellenberg: Zusammenfassung aller verfügbaren Daten.....	47

Figurenverzeichnis

Fig. 1:	Potenzielle Standortgebiete und Wirtgesteine für die geologische Tiefenlagerung hochaktiver (HAA) und schwach- bis mittelaktiver (SMA) Abfälle.....	1
Fig. 2:	Übersicht über die vorhandene Datengrundlage an den betrachteten Lokalitäten in der Nordschweiz und der für die Charakterisierung der Wirtgesteine verwendeten Datensätze.....	4
Fig. 3:	Vereinfachte tektonische Karte mit Lokalitäten, von welchen Daten verwendet wurden.....	4
Fig. 4:	Vergleich von Gesteinsdichte (trocken) und physikalischer Porosität von Opalinuston aus den Bohrungen Riniken und Schafisheim.....	16
Fig. 5:	Verteilung aller im Labor gemessenen Tonmineralgehalte der Effinger Schichten	23
Fig. 6:	Zusammenfassende Darstellung der mineralogischen Zusammensetzung von Opalinuston im Diagramm von Füchtbauer (1988).....	26
Fig. 7:	Zusammenfassende Darstellung der mineralogischen Zusammensetzung des "Braunen Doggers" im Diagramm von Füchtbauer (1988).....	27
Fig. 8:	Zusammenfassende Darstellung der mineralogischen Zusammensetzung der Effinger Schichten im Diagramm von Füchtbauer (1988).....	29
Fig. 9:	Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und Tonmineralgehalt im Opalinuston, im "Braunem Dogger" und in den Effinger Schichten.....	32
Fig. 10:	Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und Karbonatgehalt im Opalinuston, im "Braunem Dogger" und in den Effinger Schichten.....	33
Fig. 11:	Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und dem Gehalt an Quarz/Feldspat im Opalinuston, im "Braunem Dogger" und in den Effinger Schichten.....	34
Fig. 12:	Physikalische Porosität des Opalinustons als Funktion der heutigen Tiefenlage.....	35
Fig. 13:	Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und Tonmineralgehalt im Opalinuston.....	36
Fig. 14:	Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und Tonmineralgehalt im "Braunen Dogger".....	36
Fig. 15:	Physikalische Porosität der Effinger Schichten als Funktion der heutigen Tiefenlage.....	37
Fig. 16:	Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und Tonmineralgehalt in den Effinger Schichten.....	37
Fig. 17:	Zusammenhang zwischen äusserer Oberfläche und Tonmineralgehalt im Opalinuston.....	38
Fig. 18:	Zusammenhang zwischen äusserer Oberfläche und Tonmineralgehalt im "Braunen Dogger".....	39
Fig. 19:	Zusammenhang zwischen äusserer Oberfläche und Tonmineralgehalt in den Effinger Schichten.....	39

Fig. 20:	Zusammenhang zwischen äusserer Oberfläche und dem Gehalt an Illit und Illit/Smektit-Wechselagerungen in Opalinuston und Effinger Schichten.....	40
Fig. 21:	Zusammenhang zwischen totaler Oberfläche und Tonmineralgehalt im Opalinuston.....	41
Fig. 22:	Zusammenhang zwischen totaler Oberfläche und Tonmineralgehalt im "Braunen Dogger"	42
Fig. 23:	Zusammenhang zwischen Kationenaustausch-Kapazität und Tonmineralgehalt in Opalinuston, "Braunem Dogger" und Effinger Schichten.....	43
Fig. 24:	Zusammenhang zwischen Ni-Verbrauch und äusserer Oberfläche in Opalinuston und Effinger Schichten.....	44

1 Zielsetzung und Arbeitsumfang

Im Rahmen des Sachplanverfahrens wurden verschiedene potenzielle Standortgebiete für die Lagerung radioaktiver Abfälle ausgewählt (Fig. 1). Die dabei betrachteten Gesteinseinheiten umfassen

- Opalinuston¹ (Nordschweiz)
- "Brauner Dogger"² (östliche Nordschweiz)
- Effinger Schichten (Jura-Südfuss)
- Mergel-Formationen des Helvetikums; diese umfassen Palfris-Formation und Vitznau-Mergel der Drusberg-Decke sowie tertiäre Mergel der Axendecke und werden zusammenfassend als "helvetische Mergel" bezeichnet (Standortgebiet Wellenberg).

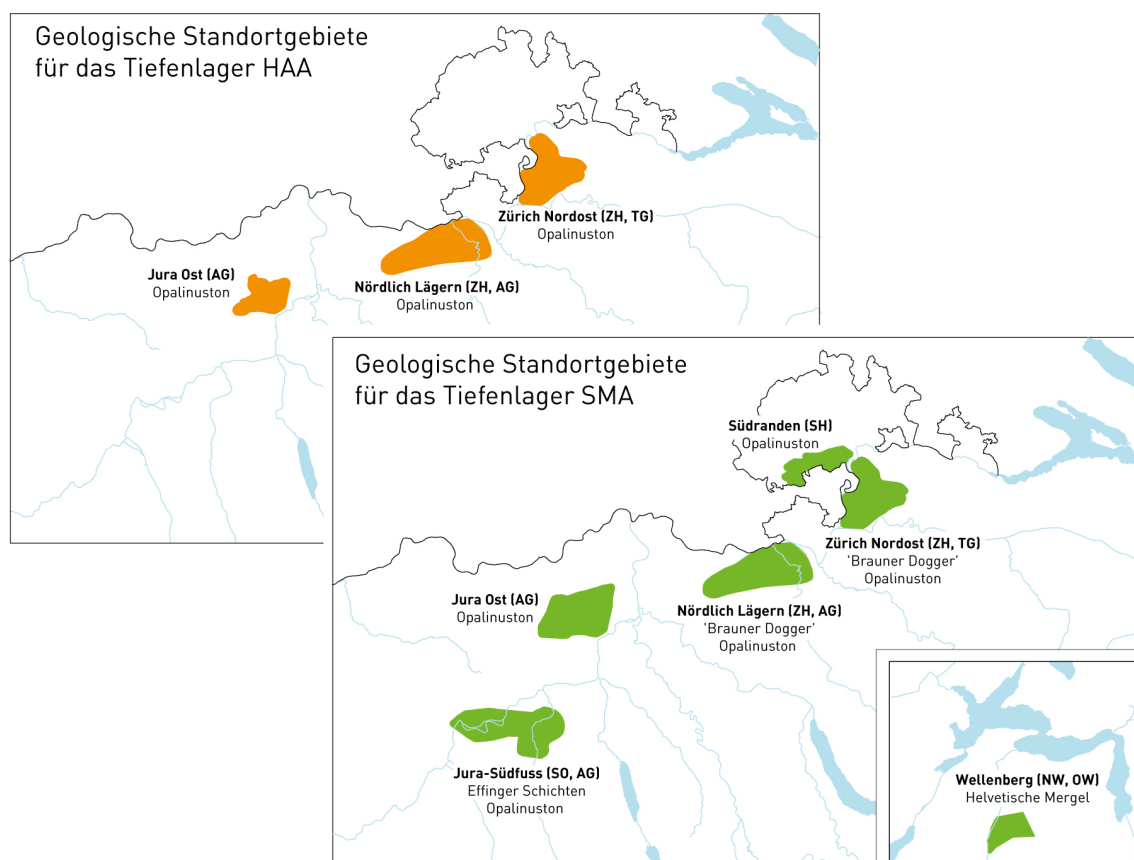


Fig. 1: Potenzielle Standortgebiete und Wirtgesteine für die geologische Tiefenlagerung hochaktiver (HAA) und schwach- und mittelaktiver (SMA) Abfälle (nach Nagra 2008, modifiziert³)

¹ Im Fall von Benken wurden die sog. 'Murchisonae-Schichten in Opalinuston-Fazies' (Nagra 2002) bzw die neu definierte Achdorf-Formation (Franz & Nitsch 2009) mitgezählt.

² Definition gemäss Nagra (2008): "Mit dem informellen Begriff Tongesteinsabfolge 'Brauner Dogger' wird eine Abfolge von tonreichen Gesteinseinheiten zusammengefasst, welche stratigraphisch zwischen dem Opalinuston und dem Malm liegen, im Geologischen Atlas der Schweiz mit braunen Farbtönen dargestellt sind und vom Tafeljura östlich der Aare bis ins Gebiet Zürcher Weinland-Schaffhausen vorkommen."

³ Im Lauf des Sachplanverfahrens wurde die Bezeichnung einzelner Standortgebiete auf Wunsch der betroffenen Bevölkerung geändert: Zürcher Weinland → **Zürich Nordost**, Nördlich Lägeren → **Nördlich Lägern**, Bözberg → **Jura Ost**

Für die Charakterisierung der Sorptions- und Transporteigenschaften dieser Einheiten wird eine Vielzahl von Daten und Attributen benötigt. Dieser Bericht steuert dazu die folgenden Daten bei:

- Mineralogische Zusammensetzung
- Dichten und Porositäten
- Kationenaustausch-Kapazität und Ionenbelegung
- Oberflächen.

Diese Daten dienen u.a. zur Abschätzung von Sorptionskoeffizienten von Radionukliden. Dazu wird nebst den Gesteinseigenschaften auch die chemische Zusammensetzung des Porenwassers gebraucht, welche in Mäder (2009a,b,c) dokumentiert ist. Die potenziellen Fließpfade, einschliesslich der Lithologien, welche möglicherweise mit fliessendem Wasser in Kontakt kommen könnten, werden derzeit auf Grund von Feldarbeiten vertieft untersucht und in einem separaten Bericht dokumentiert.

2 Verfügbare Datenbasis für die Nordschweiz

Als Grundlage wurde eine Datenbank erstellt, welche die verfügbaren Daten über das gesamte Sedimentpaket zwischen Karbon und Tertiär der Nordschweiz enthält. Die verwendeten Daten wurden an Gesteinsmaterial einer Anzahl von Tiefbohrungen (Nagra-Bohrungen und Bohrungen mit Nagra-Beteiligung) erhoben, dazu kommen ausgewählte Daten aus dem Felslabor Mont Terri. Die spärlichen Daten aus Bohrungen Dritter wurden nicht berücksichtigt, weil diese Datensätze hinsichtlich Vollständigkeit der Parameter und Beschreibung der Analysenmethodik nicht den hier gestellten Anforderungen entsprechen. Die Datenbank, hier im Anhang beigelegt, umfasst 2202 akzeptierte Datensätze (Proben) mit über 40 Parametern. Davon wurde nur ein kleinerer Teil für die eigentliche Datenanalyse der interessierenden mesozoischen Einheiten verwendet. Tab. 1 gibt eine Übersicht über Lokalitäten und Datenquellen, und Fig. 2 schlüsselt auf, für welche stratigraphischen Grosseinheiten eine Lokalität Daten geliefert hat. Fig. 3 schliesslich zeigt alle Lokalitäten auf einer generalisierten tektonischen Karte.

Die Struktur der Datenbank ist in Tab. 2 dokumentiert. Dort ist auch erläutert, ob ein Parameter einen gemessenen oder einen aus anderen Parametern berechneten Wert darstellt. Ebenso sind die analytischen Methoden tabelliert. Weitere Details hierzu finden sich in den Originalberichten, aus welchen die Daten stammen (s. Zitate in Tab. 1).

Für die helvetischen Mergel am Wellenberg besteht bereits eine Datenbasis und deren Analyse (Mazurek *et al.* 1994, Nagra 1997). Zumal seit Abschluss der Untersuchungskampagne im Jahr 1996 keine neuen Daten erhoben worden sind, wurde auf eine Aktualisierung der Datenanalyse verzichtet, und es werden die bereits publizierten Daten wiedergegeben.

Tab. 1: Lokalitäten und Datenquellen in der Nordschweiz

Lokalität	Datenquellen
Benken	Langer <i>et al.</i> (2001), Waber <i>et al.</i> (2003), Meier & Mazurek (2011)
Beznau	Peters & Matter (1981)
Böttstein	Peters <i>et al.</i> (1986)
Gösgen KB5a	Waber <i>et al.</i> (2011)
Kaisten	Peters <i>et al.</i> (1989a)
Leuggern	Peters <i>et al.</i> (1989b)
Mont Terri	Bläsi <i>et al.</i> (1991), Pearson <i>et al.</i> (2003)
Oftringen	Albert & Bläsi (2008), Waber (2008)
Riniken	Matter <i>et al.</i> (1987), Meier & Mazurek (2011)
Schafisheim	Matter <i>et al.</i> (1988b), Meier & Mazurek (2011)
Siblingen	Nagra (1992)
Weiach	Matter <i>et al.</i> (1988a), Meier & Mazurek (2011), Waber (pers. Mitt., dokumentiert in Meier & Mazurek 2011)

Standort	Benken	Beznau	Böttstein	Gösgen KB5a	Kaisten	Leuggern	Mont Terri	Oftringen	Riniken	Schafisheim	Siblingen	Weiach
Kürzel	BEN	BEZ	BOE	GOS	KAI	LEU	MT	OFT	RIN	SHA	SIB	WEI
Tertiär												
Malm												
Dogger												
Lias												
Keuper												
Muschelkalk												
Buntsandstein												
Perm												
Karbon												
Effinger Schichten												
Brauner Dogger												
Opalinuston												

Fig. 2: Übersicht über die vorhandene Datengrundlage an den betrachteten Lokalitäten in der Nordschweiz (oben) und der für die Charakterisierung der Wirtgesteine verwendeten Datensätze aus Bohrkernmaterial (unten; Kriterien zur Auswahl dieser Datensätze s. Kapitel 4)

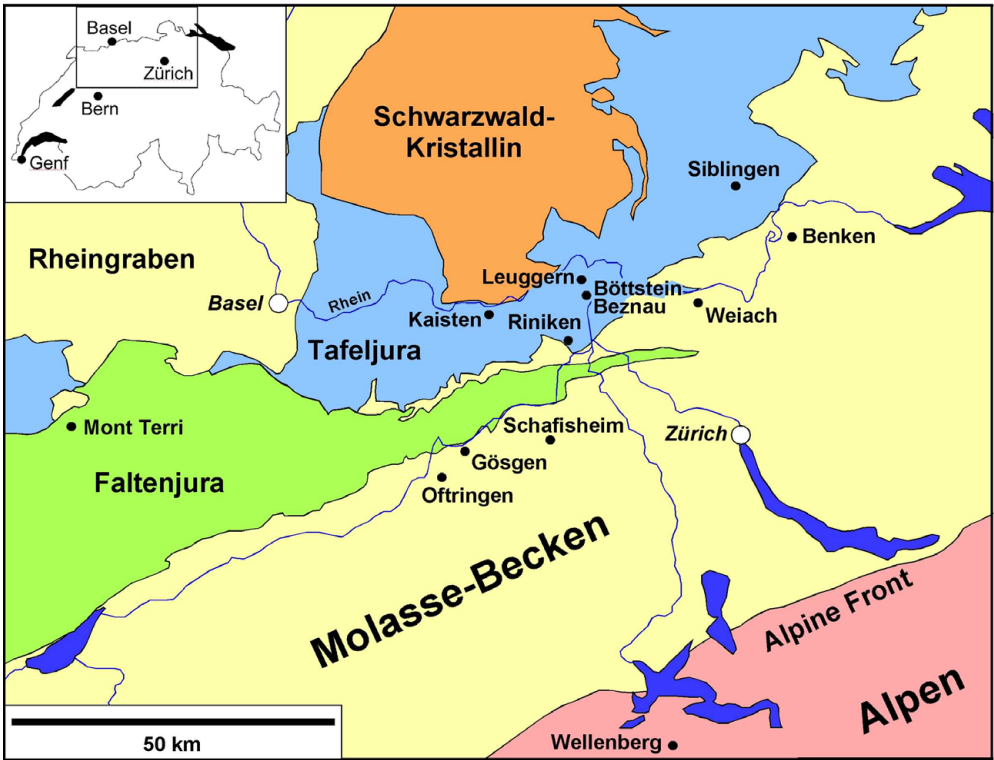


Fig. 3: Vereinfachte tektonische Karte mit Lokalitäten, von welchen Daten verwendet wurden

Tab. 2: Struktur der Datenbank zu Gesteinsparametern der Sedimentgesteine der Nordschweiz (8 Seiten)

Kol.	Parameter	Einheit	Bemerkungen	Methode	Einschränkungen zur Verwendbarkeit
A	Referenz		Dokumentation der Datenquelle		
B	Bohrung		BEN = Benken, BEZ = Beznau, BOE = Böttstein, GOS = Gösgen KB5a, KAI = Kaisten, LEU = Leuggern, MT = Felslabor Mont Terri, OFT = Oftringen, RIN = Riniken, SHA = Schafisheim, SIB = Siblingen, WEI = Weiach		
C	Teufe	m unter Gelände	Im Fall des Felslabors Mont Terri anstatt der Teufe: Name der Bohrung im Fall von Kernmaterial bzw. Tunnelmeter in der Galerie de reconnaissance im Fall von Handstücken		
D	Stratigraphie		Stratigraphische Grosseinheit		
E	Art der Probe		K = Kern, C = Cuttings, H = Handstück		
F	Formation		Lose Verwendung des Begriffs; Nomenklatur wie in den Originalberichten. Orthographie teilweise homogenisiert, um Sortierung zu vereinfachen		
G	Gesteinstyp		Makroskopische Ansprache des Materials gem. Originalquelle, unabhängig von der mineralogischen Analyse		
H	Gesteinscode		Vereinfachte Bezeichnung der Lithologie, basierend auf der Codierung der BEDAG-Datenbank, in welcher die Daten der Bohrungen Böttstein, Kaisten, Leuggern, Riniken, Schafisheim und Weiach seinerzeit abgelegt wurden. Mont Terri: Untereinheit des Opalinustons gem. Bläsi <i>et al.</i> (1991)		

Tab. 2: Struktur der Datenbank zu Gesteinsparametern der Sedimentgesteine der Nordschweiz (8 Seiten)

Kol.	Parameter	Einheit	Bemerkungen	Methode	Einschränkungen zur Verwendbarkeit
I	C(tot)	Gew.-% des Gesteins	Totaler Gehalt an Kohlenstoff	Coulomat oder CS-Mat	Einträge fehlen je nach Quelle und wurden in der Datenbank nicht konsequent berechnet und nachgeführt. Zur Weiterverwendung eignen sich die vollständigen Kolonnen J und K besser, und aus deren Summe kann C(tot) bei Bedarf berechnet werden
J	C(anorg)	Gew.-% des Gesteins	Gehalt an anorganischem Kohlenstoff (stammend v.a. aus Karbonatmineralen)	Coulomat oder CS-Mat	
K	C(org)	Gew.-% des Gesteins	Gehalt an organischem Kohlenstoff	Coulomat oder CS-Mat; berechnet aus der Differenz von gemessenen C(tot) und C(anorg)	
L	S	Gew.-% des Gesteins	Totaler Gehalt an Schwefel	Coulomat oder CS-Mat	
M	Quarz	Gew.-% des Gesteins	Quarz-Gehalt	Pulver-Röntgendiffraktometrie	
N	Kalifeldspat	Gew.-% des Gesteins	Kalifeldspat-Gehalt	Pulver-Röntgendiffraktometrie	
O	Plagioklas	Gew.-% des Gesteins	Plagioklas-Gehalt	Pulver-Röntgendiffraktometrie	
P	Calcit	Gew.-% des Gesteins	Calcit-Gehalt	Relative Verhältnisse der Karbonatminerale aus Pulver-Röntgendiffraktometrie, absoluter Gehalt berechnet mithilfe von C(anorg)	
Q	Dolomit	Gew.-% des Gesteins	Dolomit-Gehalt	Relative Verhältnisse der Karbonatminerale aus Pulver-Röntgendiffraktometrie, absoluter Gehalt berechnet mithilfe C(anorg)	Je nach Quelle werden Dolomit und Ankerit unterschieden oder als Summe angegeben (röntgenographische Unterscheidung ist z.T. schwierig). Die Information in Kolonne Y ist daher u.U. nützlicher

Tab. 2: Struktur der Datenbank zu Gesteinsparametern der Sedimentgesteine der Nordschweiz (8 Seiten)

Kol.	Parameter	Einheit	Bemerkungen	Methode	Einschränkungen zur Verwendbarkeit
R	Siderit	Gew.-% des Gesteins	Siderit-Gehalt	Relative Verhältnisse der Karbonatminerale aus Pulver-Röntgendiffraktometrie, absoluter Gehalt berechnet mithilfe C(anorg)	
S	Magnesit	Gew.-% des Gesteins	Magnesit-Gehalt	Relative Verhältnisse der Karbonatminerale aus Pulver-Röntgendiffraktometrie, absoluter Gehalt berechnet mithilfe C(anorg)	
T	Ankerit	Gew.-% des Gesteins	Ankerit-Gehalt	Relative Verhältnisse der Karbonatminerale aus Pulver-Röntgendiffraktometrie, absoluter Gehalt berechnet mithilfe C(anorg)	Je nach Quelle werden Dolomit und Ankerit unterschieden oder als Summe angegeben (röntgenographische Unterscheidung ist z.T. schwierig). Die Information in Kolonne Y ist daher u.U. nützlicher
U	Anhydrit	Gew.-% des Gesteins	Anhydrit-Gehalt	Relative Verhältnisse der Sulfatminerale aus Pulver-Röntgendiffraktometrie, absoluter Gehalt berechnet mithilfe S-Bestimmung	
V	Gips	Gew.-% des Gesteins	Gips-Gehalt	Relative Verhältnisse der Sulfatminerale aus Pulver-Röntgendiffraktometrie, absoluter Gehalt berechnet mithilfe S-Bestimmung	
W	Pyrit	Gew.-% des Gesteins	Pyrit-Gehalt	Berechnet aus dem S-Gehalt, unter der Annahme, Pyrit sei die einzige S-haltige Phase. Für Proben mit röntgenographisch identifizierten Sulfatmineralen (Gips, Anhydrit) können allfällige Pyritgehalte nicht angegeben werden	
X	Tonminerale	Gew.-% des Gesteins	Gehalt an Tonmineralen	Berechnet aus der Differenz der Summe aller anderen Mineralgehalte zu 100 %: 100 - Kolonne K - M - N - O - P - Q - R - S - T - U - V - W. Dabei wird die Annahme gemacht, dass keine weiteren Minerale im Gestein vorkommen als diejenigen, welche röntgenographisch oder coulometrisch quantifiziert wurden	

Tab. 2: Struktur der Datenbank zu Gesteinsparametern der Sedimentgesteine der Nordschweiz (8 Seiten)

Kol.	Parameter	Einheit	Bemerkungen	Methode	Einschränkungen zur Verwendbarkeit
Y	Summe Dolomit + Ankerit	Gew.-% des Gesteins	Gehalt an Dolomit + Ankerit	Berechnet aus der Summe der jeweiligen Gehalte	
Z	Summe Karbonate	Gew.-% des Gesteins	Calcit + Dolomit + Ankerit + Siderit + Magnesit	Berechnet aus den jeweiligen Mineralgehalten	
AA	Summe Quarz + Feldspäte	Gew.-% des Gesteins	Quarz + Kalifeldspat + Plagioklas	Berechnet aus den jeweiligen Mineralgehalten	
AB	Illit (Tonfraktion)	Gew.-% der Schichtsilikate in der Fraktion <2 µm	Illit-Anteil innerhalb der Schichtsilikate der Fraktion <2 µm	Röntgen-Diffraktometrie an orientierten Proben der Fraktion <2 µm	
AC	Kaolinit (Tonfraktion)	Gew.-% der Schichtsilikate in der Fraktion <2 µm	Kaolinit-Anteil innerhalb der Schichtsilikate der Fraktion <2 µm	Röntgen-Diffraktometrie an orientierten Proben der Fraktion <2 µm	
AD	Smektit (Tonfraktion)	Gew.-% der Schichtsilikate in der Fraktion <2 µm	Smektit-Anteil innerhalb der Schichtsilikate der Fraktion <2 µm	Röntgen-Diffraktometrie an orientierten Proben der Fraktion <2 µm	
AE	Chlorit (Tonfraktion)	Gew.-% der Schichtsilikate in der Fraktion <2 µm	Chlorit-Anteil innerhalb der Schichtsilikate der Fraktion <2 µm	Röntgen-Diffraktometrie an orientierten Proben der Fraktion <2 µm	
AF	Chlorit/Smektit-Wechselagerungen (Tonfraktion)	Gew.-% der Schichtsilikate in der Fraktion <2 µm	Anteil von Chlorit/Smektit-Wechselagerungen innerhalb der Schichtsilikate der Fraktion <2 µm	Röntgen-Diffraktometrie an orientierten Proben der Fraktion <2 µm	
AG	Corrensit (Tonfraktion)	Gew.-% der Schichtsilikate in der Fraktion <2 µm	Corrensit-Anteil innerhalb der Schichtsilikate der Fraktion <2 µm	Röntgen-Diffraktometrie an orientierten Proben der Fraktion <2 µm	

Tab. 2: Struktur der Datenbank zu Gesteinsparametern der Sedimentgesteine der Nordschweiz (8 Seiten)

Kol.	Parameter	Einheit	Bemerkungen	Methode	Einschränkungen zur Verwendbarkeit
AH	Illit/Smektit-Wechselagerungen (Tonfraktion)	Gew.-% der Schichtsilikate in der Fraktion <2 µm	Anteil von Illit/Smektit-Wechselagerungen innerhalb der Schichtsilikate der Fraktion <2 µm	Röntgen-Diffraktometrie an orientierten Proben der Fraktion <2 µm	
AI	Summe Illit + Illit/Smektit-Wechselagerungen (Tonfraktion)	Gew.-% der Schichtsilikate in der Fraktion <2 µm	Anteil der Summe von Illit + Illit/Smektit-Wechselagerungen innerhalb der Schichtsilikate der Fraktion <2 µm	Berechnet aus den jeweiligen Gehalten	
AJ	Illit	Gew.-% des Gesteins	Illit-Anteil innerhalb des Gesamtgesteins	Berechnet aus dem Gehalt in der Fraktion <2 µm und dem Tonmineralgehalt: Kolonne AB * Kolonne X / 100	
AK	Kaolinit	Gew.-% des Gesteins	Kaolinit-Anteil innerhalb des Gesamtgesteins	Berechnet aus dem Gehalt in der Fraktion <2 µm und dem Tonmineralgehalt: Kolonne AC * Kolonne X / 100	
AL	Smektit	Gew.-% des Gesteins	Smektit-Anteil innerhalb des Gesamtgesteins	Berechnet aus dem Gehalt in der Fraktion <2 µm und dem Tonmineralgehalt: Kolonne AD * Kolonne X / 100	
AM	Chlorit	Gew.-% des Gesteins	Chlorit-Anteil innerhalb des Gesamtgesteins	Berechnet aus dem Gehalt in der Fraktion <2 µm und dem Tonmineralgehalt: Kolonne AE * Kolonne X / 100	
AN	Chlorit/Smektit-Wechselagerungen	Gew.-% des Gesteins	Anteil von Chlorit/Smektit-Wechselagerungen innerhalb des Gesamtgesteins	Berechnet aus dem Gehalt in der Fraktion <2 µm und dem Tonmineralgehalt: Kolonne AF * Kolonne X / 100	
AO	Corrensit	Gew.-% des Gesteins	Corrensit-Anteil innerhalb des Gesamtgesteins	Berechnet aus dem Gehalt in der Fraktion <2 µm und dem Tonmineralgehalt: Kolonne AG * Kolonne X / 100	
AP	Illit/Smektit-Wechselagerungen	Gew.-% des Gesteins	Anteil von Illit/Smektit-Wechselagerungen innerhalb des Gesamtgesteins	Berechnet aus dem Gehalt in der Fraktion <2 µm und dem Tonmineralgehalt: Kolonne AH * Kolonne X / 100	

Tab. 2: Struktur der Datenbank zu Gesteinsparametern der Sedimentgesteine der Nordschweiz (8 Seiten)

Kol.	Parameter	Einheit	Bemerkungen	Methode	Einschränkungen zur Verwendbarkeit
AQ	Summe Illit + Illit/Smektit-Wechselagerungen	Gew.-% des Gesteins	Anteil der Summe von Illit + Illit/Smektit-Wechselagerungen innerhalb des Gesamtgesteins	Berechnet aus dem Gehalt in der Fraktion <2 µm und dem Tonmineralgehalt: Kolonne AI * Kolonne X / 100	
AR	Gesteinsdichte (trocken)	g/cm ³	Gesteinsdichte der trockenen Probe (bulk dry density, $\rho_{\text{bulk, dry}}$)	<p>Oftingen: Auftrieb der bergfeuchten Probe in Paraffin (dies liefert die Feuchtdichte $\rho_{\text{bulk, wet}}$) und Berechnung der Gesteinsdichte (trocken) gemäss</p> $\rho_{\text{bulk, dry}} = \frac{\rho_{\text{bulk, wet}}}{1 + \text{WC}_{\text{dry}}}, \text{ mit } \text{WC}_{\text{dry}} = \frac{m_{\text{water}}}{m_{\text{dry rock}}}$ <p>(WC = gravimetrischer Wasserverlust bei Trocknung auf 105 °C); Gösgen KB5a: Auftrieb der trockenen Probe in Paraffin; alle anderen Lokalitäten: Auftrieb der trockenen Probe in Hg</p>	
AS	Korndichte	g/cm ³	Dichte der Minerale (grain density ρ_{grain})	Kerosin-Pyknometrie (Bohrungen Oftingen, Gösgen KB5a), He-Pyknometrie (alle anderen Lokalitäten)	
AT	Physikalische Porosität	Vol.-%	Nicht von Mineralen eingenommener Volumenanteil des Gesteins (Φ)	$\Phi = 100 \left(1 - \frac{\rho_{\text{bulk, dry}}}{\rho_{\text{grain}}} \right)$	
AU	Wasserverlust-Porosität	Vol.-%	Volumetrischer Anteil von Porenwasser im Gestein	Berechnet aus dem gemessenen gravimetrischen Wassergehalt (Wägen der bergfeuchten Probe vor und nach Heizen auf 105 °C) und der Korndichte	
AV	K (BaCl)	meq/100 g Gestein	Konzentration von austauschbarem K auf Tonmineral-Oberflächen	BaCl-Methode	Methode heute veraltet, nicht verwendbar für karbonathaltige Gesteine
AW	Na (BaCl)	meq/100 g Gestein	Konzentration von austauschbarem Na auf Tonmineral-Oberflächen	BaCl-Methode	Methode heute veraltet, nicht verwendbar für karbonathaltige Gesteine

Tab. 2: Struktur der Datenbank zu Gesteinsparametern der Sedimentgesteine der Nordschweiz (8 Seiten)

Kol.	Parameter	Einheit	Bemerkungen	Methode	Einschränkungen zur Verwendbarkeit
AX	Mg (BaCl)	meq/100 g Gestein	Konzentration von austauschbarem Mg auf Tonmineral-Oberflächen	BaCl-Methode	Methode heute veraltet, nicht verwendbar für karbonathaltige Gesteine
AY	Ca (BaCl)	meq/100 g Gestein	Konzentration von austauschbarem Ca auf Tonmineral-Oberflächen	BaCl-Methode	Methode heute veraltet, nicht verwendbar für karbonathaltige Gesteine
AZ	Summe Kationen (BaCl)	meq/100 g Gestein	Summe der Konzentrationen von austauschbarem K, Na, Mg und Ca auf Tonmineral-Oberflächen	Summe von Kolonnen AV + AW + AX + AY	Methode heute veraltet, nicht verwendbar für karbonathaltige Gesteine
BA	K (Ni-en)	meq/kg Gestein	Konzentration von austauschbarem K auf Tonmineral-Oberflächen	Ni-en-Methode; angegeben werden die <i>in-situ</i> -Populationen nach Korrektur für den Beitrag der Kationen aus dem Porenwasser	
BB	Na (Ni-en)	meq/kg Gestein	Konzentration von austauschbarem Na auf Tonmineral-Oberflächen	Ni-en-Methode; angegeben werden die <i>in-situ</i> -Populationen nach Korrektur für den Beitrag der Kationen aus dem Porenwasser	
BC	Mg (Ni-en)	meq/kg Gestein	Konzentration von austauschbarem Mg auf Tonmineral-Oberflächen	Ni-en-Methode; angegeben werden die <i>in-situ</i> -Populationen nach Korrektur für den Beitrag der Kationen aus dem Porenwasser	
BD	Ca (Ni-en)	meq/kg Gestein	Konzentration von austauschbarem Ca auf Tonmineral-Oberflächen	Ni-en-Methode; angegeben werden die <i>in-situ</i> -Populationen nach Korrektur für den Beitrag der Kationen aus dem Porenwasser	
BE	Sr (Ni-en)	meq/kg Gestein	Konzentration von austauschbarem Sr auf Tonmineral-Oberflächen	Ni-en-Methode; angegeben werden die <i>in-situ</i> -Populationen nach Korrektur für den Beitrag der Kationen aus dem Porenwasser	
BF	Summe Kationen (Ni-en)	meq/kg Gestein	Summe der Konzentrationen von austauschbarem K, Na, Mg, Ca und Sr auf Tonmineral-Oberflächen	Summe von Kolonnen BA + BB + BC + BD + BE	
BG	Ni-Verbrauch (Ni-en)	meq/kg Gestein	Verbrauch des Index-Kations	Ni-en-Methode	
BH	Äussere Oberfläche	m ² /g Gestein	Äussere Mineraloberfläche	BET	

Tab. 2: Struktur der Datenbank zu Gesteinsparametern der Sedimentgesteine der Nordschweiz (8 Seiten)

Kol.	Parameter	Einheit	Bemerkungen	Methode	Einschränkungen zur Verwendbarkeit
BI	Innere Oberfläche	m ² /g Gestein	Innere Mineraloberfläche	Berechnet aus Differenz von Kolonnen BJ und BH	
BJ	Totale Oberfläche	m ² /g Gestein	Totale Oberfläche	Äthylen-Ethyl-Monoethyl-Äther-Methode (EGME; Benken), Glycerin-Methode (alle anderen Lokalitäten)	

Titelzeile:

Blauer Hintergrund: Verwendbarer Parameter

Grauer Hintergrund: Parameter wenig nützlich oder redundant mit anderen, oder behaftet mit methodischen Einschränkungen

Datenbankeinträge:

Gelber Hintergrund: Originaldaten wurden korrigiert (Begründung im Kommentarfeld)

Oranger Hintergrund: Daten wurden entfernt, da inkonsistent oder Artefakte (Begründung im Kommentarfeld)

Violetter Hintergrund: Markierung für Dichten und physikalische Porosität der Bohrungen Riniken und Schafisheim nach Matter *et al.* (1987, 1988b). In Opalinuston sind die Dichte- und Porositätswerte aus diesen Quellen nicht plausibel (s. Text) und wurden aus der Kern-Datenbank entfernt. Für alle anderen Einheiten wurden die Daten in der Datenbank belassen, sind aber violett markiert.

Rote Schrift: Einträge, welche bei der Screening-Prozedur (Kap. 4) nicht akzeptiert wurden. Diese Einträge gehen in die Auswertungen und Berechnungen nicht ein

3 Konsistenzprüfung abhängiger Parameter (Nordschweizer Daten)

Zwischen verschiedenen Parametern bestehen Abhängigkeiten, d.h. gewisse Parameter können aus anderen Parametern berechnet werden. Die gesamte Datenbasis wurde einer internen Konsistenzprüfung unterzogen, und bei Inkonsistenzen zwischen abhängigen Parametern wurden die Daten nach Plausibilitätskriterien korrigiert. Bei Fehlen plausibler Korrekturkriterien wurden die fraglichen Daten aus der Kern-Datenbank entfernt. Im Fall von Korrekturen erhält der entsprechende Zahlenwert in der Kern-Datenbank einen gelben Hintergrund (z.B. 3.75). Falls Daten entfernt wurden, erhält die leere Zelle einen orangen Hintergrund (). Der grösste Teil der Korrekturen bezieht sich auf Daten der älteren Bohrungen (Peters & Matter 1981 sowie das Kristallin-Programm: Peters *et al.* 1986, 1989a,b, Matter *et al.* 1987, 1988a,b und Nagra 1992). Alle Korrekturen sind in der Datenbank markiert.

- Gehalte an Karbonatmineralen wurden bei Diskrepanzen mit coulometrisch bestimmten Gehalten an anorganischem Kohlenstoff entsprechend angepasst (Toleranz: ± 0.2 Gew.-% C).
- Gehalte an S-haltigen Mineralen wurden bei Diskrepanzen mit coulometrisch bestimmten Gehalten an Schwefel angepasst (Toleranz: ± 0.2 Gew.-% S). Bei Proben ohne röntgenographisch identifizierte Sulfatminerale wurden die S-Gehalte Pyrit zugeordnet. Für Proben mit Sulfatmineralen (Anhydrit, Gips) wurden die gemessenen S-Gehalte diesen zugeordnet, und für Pyrit wurde kein Eintrag gemacht.
- Abweichungen der Summe aller Minerale von 100 % wurden bei Abweichungen kleiner als ± 10 % durch Normierung korrigiert. Bei grösseren Abweichungen wurden die Daten entfernt.
- Die Konsistenz von Angaben über Dichten und physikalische Porosität wurde geprüft, war aber stets gegeben, so dass keine Korrekturen notwendig wurden.

Des Weiteren wurde die Unterscheidung zwischen "nicht gemessen" und "Gehalt unterhalb der Nachweisgrenze" systematisch vollzogen. Um rechnerisch weiterverwendbare Angaben zu erhalten, wurden sämtliche Einträge "unterhalb der Nachweisgrenze" durch "0" ersetzt.

4 Screening der Nordschweizer Daten

Im nächsten Arbeitsschritt wurde die intern konsistente Datenbank im Hinblick auf die weitere Auswertung einer Screening-Prozedur unterzogen. Dabei wurden verschiedene Daten aus der Kern-Datenbank entfernt und nicht für weitergehende Auswertungen und Berechnungen verwendet. Sie sind aber in abgetrennter Form am Schluss der Datenbank für allfällige andere Anwendungen sowie zu Dokumentationszwecken vorhanden. Sie sind durch **rote Schrift** markiert, und in Kolonne BQ ("Screening-Kriterium") ist der Ausschluss begründet. Zusätzlich wurden Daten für einige Parameter gar nie in die Datenbank aufgenommen, d.h. *a priori* gescreent (Begründung s. unten). Folgende Datensätze waren von der Screening-Prozedur betroffen:

- Insgesamt beziehen sich 213 Datensätze auf Cuttings-Proben. Sie sind mit Ungewissheiten behaftet, da Cuttings nicht repräsentativ für die *in situ*-Lithologie sein müssen, insbesondere in lithologisch heterogenen Einheiten.
- In der Bohrung Riniken wurden 4 Analysen an Kalk- oder Sideritlinsen im Opalinuston durchgeführt. Da sich diese Daten auf volumetrisch vernachlässigbare Heterogenitäten im Gestein beziehen, würde ihr Einbezug die Repräsentativität des Datensatzes für die Formation beeinträchtigen.
- Aus den Effinger Schichten der Bohrung Weiach ist eine einzige Analyse von Oberflächen vorhanden. Wegen der beschränkten Aussagekraft einer Einzelanalyse aus einer heterogenen Formation ist die Repräsentativität nicht gegeben.
- Die 2 Analysen der sandig-kalkigen Fazies des Opalinustons am Mont Terri wurden aus der Kern-Datenbank entfernt, da diese Fazies in den potenziellen Standortgebieten in dieser Form nicht bekannt ist.
- Die im Opalinuston der Bohrungen Riniken und Schafisheim durch Matter *et al.* (1987, 1988b) bestimmten Gesteinsdichten liefern durchwegs unerklärlich hohe Werte von meist $>2.5 \text{ g/cm}^3$, welche zu unplausibel kleinen physikalischen Porositäten führen. Diese sind teilweise kleiner als die mit Hg-Injektion bestimmte Porosität. Nachmessungen an Proben dieser Bohrungen durch Meier & Mazurek (2011) haben deutlich tiefere, plausiblere Werte geliefert (Fig. 4). Obwohl der tiefere Grund für die hohen Werte in Matter *et al.* (1987, 1988b) nicht bekannt ist, wurden sämtliche alten Dichte- und Porositätsdaten des Opalinustons dieser Bohrungen aus der Kern-Datenbank entfernt (Riniken: 7 Proben, Schafisheim: 9 Proben). Die neueren Daten von Meier & Mazurek (2011) werden hingegen als plausibel betrachtet und weiter verwendet.

Es stellt sich auch die Frage, wie mit den Dichtedaten aller anderen Einheiten dieser Bohrungen zu verfahren sei. Da für diese keine direkten Vergleichsdaten zur Plausibilitätsprüfung vorhanden sind, wurden diese Daten in der Kern-Datenbank belassen, aber durch **violetten Hintergrund** als unsicher markiert. Für die hier ausgewerteten Daten ist dies ohne Konsequenz, da keines der anderen Wirtgesteine in den Bohrungen Riniken und Schafisheim vorhanden ist bzw. nicht gekernt wurde.
- An einer 22 Proben umfassenden Probenserie aus dem Mesozoikum der Bohrung Weiach hat Waber (pers. Mitt., dokumentiert in Meier & Mazurek 2011) im Jahr 2000 Untersuchungen zu Mineralogie und Porenwasserchemie durchgeführt. Seit dieser Zeit wurden die Restmaterialien dieser Proben in Plastiksäcken, aber ohne weitere Schutzmassnahmen, am Institut für Geologie der Universität Bern gelagert. Meier & Mazurek (2011) haben an diesen Restproben im Jahr 2010 Dichtebestimmungen

durchgeführt und daraus physikalische Porositäten berechnet. Insbesondere die tonreichen Proben waren stark fragmentiert und wiesen von Auge sichtbare Oxidationsphänomene auf, z.B. aufgequollene, vergipste Pyritframboide. Zahlreiche dieser Proben lieferten hohe Korndichten bis 2.96 g/cm^3 , welche mit der *in situ*-Mineralogie des Gesteins nicht kompatibel sind. Die resultierenden Porositäten waren denn auch anomal hoch (bis 18 %). Da die Dichtedaten dieser Probenserie offensichtlich von Artefakten beeinflusst sind, wurden sie aus der Kern-Datenbank entfernt.⁴

- Die Kationen-Austauschkapazität wurde in den älteren Kampagnen mit der Ba-Cl-Methode bestimmt. Hierbei belegt zugegebenes Ba die Ionentauscher-Plätze an den Tonmineraloberflächen, womit die *in-situ*-Kationenpopulation desorbiert wird. Diese Methode wurde ursprünglich für karbonatfreie Gesteine entwickelt. Es wurde später gezeigt, dass die Resultate für karbonathaltige Gesteine unzuverlässig sind, u.a. wegen der Bildung von BaCO_3 (z.B. Pearson *et al.* 2003, Annex 3). Die Ba-Cl-Daten befinden sich zu Dokumentationszwecken zwar weiterhin in der Kern-Datenbank, sind aber durch **rote Schrift** markiert. Die Daten, welche auf der Ni-en-Methode basieren, werden hingegen als zeitgemäss betrachtet und bilden die alleinige Basis für die Parametrisierung des Kationenaustauschs.
- Für die Berechnung der *in-situ*-Population der austauschbaren Kationen auf Tonmineraloberflächen muss von den Analysen der Ni-en-Auszüge der Beitrag von Kationen subtrahiert werden, welche aus dem Porenwasser stammen. Dieser Schritt bedingt gewisse Annahmen, welche auch von der Zusammensetzung des Porenwassers abhängen (s. z.B. Pearson *et al.* 2003). Waber (2008) und Waber *et al.* (2010) stellen für die Effinger Schichten der Bohrungen Oftringen und Gösgen fest, dass für diese Lokalitäten die entsprechenden Annahmen nicht genügend fundiert werden können und dass also keine klaren Rückschlüsse auf die *in situ*-Kationenpopulation auf dem Austauscher möglich sind. Aus diesem Grund wurden die entsprechenden Daten gar nicht in die Datenbank aufgenommen (obwohl in den Originalberichten tabelliert, wenn auch mit einem klaren Disclaimer). Der Verbrauch des Index-Kations Ni hängt hingegen nicht von diesen Annahmen ab und liefert eine realistische Abschätzung der Kationenaustausch-Kapazität für die Effinger Schichten der Bohrungen Oftringen und Gösgen.
- In den älteren Kampagnen wurde die Porosität auch mit Hg-Druckporosimetrie bestimmt. Es ist bekannt, dass diese Methode in feinkörnigen Sedimentgesteinen nur einen Teil des vorhandenen Porenraums erfasst. Da seinerzeit die Injektionsdrucke geringer waren als in heutigen Geräten, lassen die erhobenen Daten wenig Schlussfolgerungen auf die diffusionszugängliche Porosität zu und wurden nicht in die Datenbank aufgenommen⁵.
- Für die helvetischen Mergel am Wellenberg haben Mazurek *et al.* (1994) einen Datensatz für Kationenaustausch-Parameter dokumentiert. Die Summe der Kationen in den Ni-en-Auszügen ist gemäss diesen Daten mehr als doppelt so hoch wie der Verbrauch des Index-Kations Ni. Weil der mögliche Beitrag des Porenwassers oder der Lösung von Mineralen während der Experimente zu diesen Kationenkonzentrationen nicht

⁴ Meier & Mazurek (2011) haben an zahlreichen weiteren Proben der Bohrungen Weiach, Riniken und Schafisheim, welche direkt im Kernlager der Nagra entnommen wurden, Dichtebestimmungen durchgeführt. Dort werden die Bohrkerne in geschlossenen, dicken Plastikschläuchen gelagert und sind in der Regel in besserem Zustand (weniger fragmentiert und oxidiert) als die über 8 Jahre in Bern gelagerten und bei der Probenahme zerteilten Proben. Sie werden daher weniger stark von Alterungseffekten beeinflusst, wobei auch hier Ungewissheiten bei der Extrapolation auf *in situ*-Bedingungen bestehen.

⁵ In jüngerer Zeit haben methodische Verbesserungen die Hg-Druckporosimetrie zu einer aussagekräftigeren Methode auch für tonreiche Gesteine werden lassen, und sie wird inzwischen erfolgreich angewandt.

quantifiziert werden konnte, bestehen Ungewissheiten in Bezug auf deren Repräsentativität für *in situ*-Verhältnisse. Daher werden diese Daten hier nicht verwendet. Hingegen wird der Ni-Verbrauch als gutes Mass der totalen Austauschkapazität betrachtet. Zudem haben Baeyens & Bradbury (1994) an einer einzelnen tonmergeligen Probe einen Ni-Verbrauch erhalten, welcher recht gut zu den Messungen von Mazurek *et al.* (1994) passt.

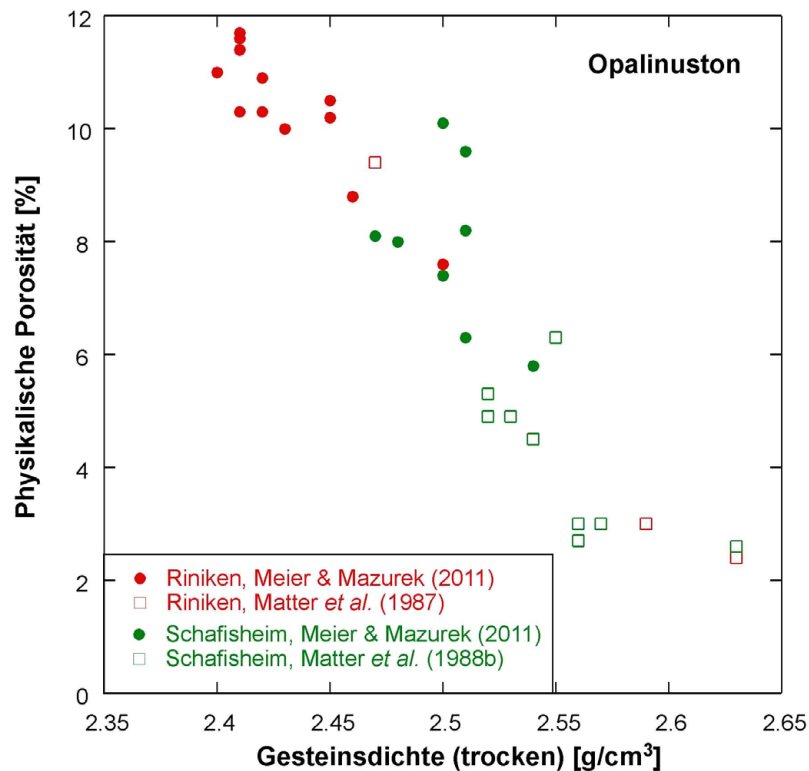


Fig. 4: Vergleich von Gesteinsdichte (trocken) und physikalischer Porosität von Opalinuston aus den Bohrungen Riniken und Schafisheim gemäss Daten von Matter *et al.* (1987, 1988b) und Meier & Mazurek (2011)

5 Repräsentativität der Nordschweizer Daten

5.1 Mineralogie

Die Beprobung war in der Regel auf eine möglichst repräsentative Erfassung der Formationen ausgelegt. Die typische Probengrösse lag im Bereich von 200 - 1000 g. In gewissen Beprobungskampagnen, insbesondere solchen, die auf Porenwasseruntersuchungen ausgelegt waren, wurden aus methodischen Gründen (grössere Porosität, höherer Wassergehalt) eher tonreiche Lithologien beprobt. Dies war z.B. der Fall für die Effinger Schichten der Bohrung Oftringen (Waber 2008), die Weiach-Kampagne von Waber (pers. Mitt., dokumentiert in Meier & Mazurek 2011) sowie für die Zusatzbeprobung der Bohrungen Benken, Weiach, Riniken und Schafisheim (Meier & Mazurek 2011). Dies könnte zu einer gewissen Überschätzung der mittleren Tonmineralgehalte führen.

Eine gewisse Prüfung der Repräsentativität der Mineralogie-Daten kann durch einen Vergleich mit den aus geophysikalischen Logs abgeleiteten mineralogischen Parametern erfolgen (s. Albert 2011). Die Log-Information ist nicht ganz unabhängig, da die Labordaten zu deren Kalibrierung verwendet wurden. Weil die Logs aber jeweils lückenlos die ganzen Einheiten erfassen, erlauben sie eine Beurteilung, ob sich die Punktmessungen (Labordaten) gut ins Gesamtbild einfügen oder ob die Beprobung für Laboranalysen systematisch auf bestimmte mineralogische Zusammensetzungen fokussiert war. Tab. 3 liefert hierzu einen direkten Vergleich der aus Labor- und Logdaten erhaltenen Tonmineralgehalte für alle Bohrungen, für welche beide Datensätze zur Verfügung stehen. Die Übereinstimmung der Mittelwerte ist gut, die Differenzen im mittleren Tonmineralgehalt sind (mit Ausnahme von Opalinuston in Weiach) immer <3 % und somit wesentlich kleiner als die Variabilität des Tonmineralgehalts in der betrachteten Einheit. Daraus wird gefolgert, dass nach heutigem Kenntnisstand die mineralogischen Laboranalysen als repräsentativ betrachtet werden können.

Tab. 3: Vergleich von Laboranalysen des Tonmineralgehalts (aus Tab. 6, 8 und 10) mit aus geophysikalischen Logs von Albert (2011) abgeleiteten Daten

Einheit	Bohrung	Tonmineralgehalt gemäss Labordaten (Mittelwert $\pm 1\sigma$, Gew.-%)	Tonmineralgehalt gemäss Geophysik-Logs (Mittelwert $\pm 1\sigma$, Gew.-%)
Effinger Schichten	Benken	27.0 \pm 13.8	24.1 \pm 9.4
	Gösigen KB5a	23.4 \pm 6.8	25.0 \pm 6.6
	Oftringen	22.7 \pm 8.0	23.0 \pm 7.5
	Weiach	26.3 \pm 11.1	29.1 \pm 10.2
"Brauner Dogger"	Benken	38.2 \pm 17.2	39.3 \pm 11.6
	Weiach	50.8 \pm 12.3	53.7 \pm 14.8
Opalinuston	Benken	54.4 \pm 10.3	52.3 \pm 6.1
	Riniken	59.9 \pm 10.8	62.3 \pm 5.6
	Schafisheim	59.4 \pm 4.2	58.4 \pm 3.9
	Weiach	61.1 \pm 14.3	66.1 \pm 9.3

In Benken werden die Murchisonae-Schichten (bzw. die Achdorf-Formation) zum Opalinuston gezählt

Die Unterscheidung von Illit und Illit/Smektit-Wechselagerungen in der Tonfraktion erfolgte aufgrund der röntgenographischen Daten. Da sich die Peaks für diese beiden Tonmineraltypen teilweise überlappen, ist die Unterscheidung mit Ungewissheiten behaftet. Hingegen wird die Summe Illit + Illit/Smektit-Wechselagerungen als belastbar und repräsentativ betrachtet.

5.2 Dichten und physikalische Porosität

Da die Porosität stark vom Tonmineralgehalt abhängt, gelten sinngemäss dieselben Aussagen wie für die Mineralogie.

Im Falle der Trockendichte des Gesteins ($\rho_{\text{bulk dry}}$) ist es im Verlauf der Zeit zu methodischen Weiterentwicklungen gekommen. Typischerweise wurde dieser Parameter an vorgängig getrockneten Proben mittels Eintauchen in Quecksilber oder Paraffin bestimmt ($\rho_{\text{bulk dry, measured}}$). In jüngster Zeit, d.h. für die Bohrung Oftringen und einige Proben der Bohrung Gösigen, wurde die Dichte der bergfeuchten Proben gemessen ($\rho_{\text{bulk wet}}$) und daraus mittels des gemessenen Wassergehalts die Trockendichte berechnet ($\rho_{\text{bulk dry, calculated}}$) gemäss

$$\rho_{\text{bulk dry, calculated}} = \frac{\rho_{\text{bulk wet}}}{1 + \text{WC}_{\text{dry}}},$$

mit WC_{dry} = Wassergehalt bezogen auf die Trockenmasse. Die Methodik ist in Waber (2008) dokumentiert. Ein direkter Vergleich der beiden Methoden besteht für Proben der tonigen Fazies am Mont Terri (WS-H-Experiment, Mazurek *et al.* 2010) sowie für Gesteine des Paläozoikums von Süd-Ontario (Hobbs *et al.* 2010). In diesen Studien wurde die Trockendichte jeweils am selben Material einerseits direkt gemessen und andererseits aus der gemessenen Feuchtdichte und dem Wassergehalt berechnet. Es hat sich gezeigt, dass die gemessene und berechnete Trockendichte für tonarme Lithologien innerhalb des Fehlers identisch sind. Bei tonreichen Proben gibt es hingegen systematische Diskrepanzen, wobei die gemessene Trockendichte jeweils grösser ist als die aus der Feuchtdichte berechnete:

$$\rho_{\text{bulk dry, measured}} > \rho_{\text{bulk dry, calculated}}.$$

Im Falle der Opalinuston-Proben vom Mont Terri beträgt der Unterschied *ca.* 0.1 g/cm³. Aus folgenden Gründen wird die aus gemessener Feuchtdichte und Wassergehalt berechnete Trockendichte ($\rho_{\text{bulk dry, calculated}}$) als repräsentativ für *in situ*-Bedingungen betrachtet:

- Qualitativ betrachtet ist es plausibel, dass tonreiche Proben bei der Trocknung schrumpfen. Diese Volumenänderung führt zu einer erhöhten gemessenen Trockendichte $\rho_{\text{bulk dry, measured}}$, die nicht die *in situ*-Verhältnisse repräsentiert.
- Die physikalische Porosität Φ_{phys} berechnet sich nach

$$\Phi_{\text{phys}} = 1 - \left(\frac{\rho_{\text{bulk dry}}}{\rho_{\text{grain}}} \right)$$

mit ρ_{grain} = Korndichte. Wird im Falle der Opalinuston-Proben vom Mont Terri (Mazurek *et al.* 2010) für $\rho_{\text{bulk dry}}$ der gemessene Wert $\rho_{\text{bulk dry, measured}}$ eingesetzt, ergeben sich physikalische Porositäten (Mittelwert: 15.6 %), welche kleiner sind als die Wasserverlustporosität (18.5 %), was nicht plausibel ist. Unter Verwendung von $\rho_{\text{bulk dry, calculated}}$ im Zähler obiger Gleichung ergeben sich hingegen Porositäten, welche der

Wasserverlustporosität entsprechen oder leicht höher sind (Mittelwert: 19.9 %). Analoge Resultate erhält man für tonreiche Proben aus Süd-Ontario.

Aus diesen Argumenten werden folgende Schlüsse gezogen:

- Aus einem bisher kleinen Datensatz vom Mont Terri und von Gesteinen aus Süd-Ontario wird gefolgert, dass für tonreiche Proben die Trockendichte aus der Messung der Feuchtdichte abgeleitet werden sollte, währenddem eine direkte Messung wegen Schrumpfungseffekten eher zu hohe Werte ergibt. Die unter Verwendung von $\rho_{\text{bulk dry, measured}}$ berechnete physikalische Porosität ergibt für tonreiche Proben eher zu tiefe Werte. Die oben für die tonreichen Opalinuston-Proben vom Mont Terri angegebene Abweichung kann als Maximalwert betrachtet werden, da die Schrumpfungseffekte mit abnehmendem Tonmineralgehalt kleiner werden.
- Mit Ausnahme der Effinger Schichten der Bohrung Oftringen sowie einigen Proben aus Gösgen beruhen sämtliche Trockendichten in der hier zusammengetragenen Datenbank auf Messungen von $\rho_{\text{bulk dry, measured}}$. Für tonreiche Proben bestehen somit Ungewissheiten bezüglich der für *in situ*-Bedingungen repräsentativen Dichte- und Porositätswerte tonreicher Lithologien. Die physikalische Porosität wird eher unterschätzt.
- In Zukunft werden sowohl Feucht- als auch Trockendichten gemessen werden, um die Datenbasis für einen direkten Vergleich zu erweitern. Ziel wäre die Ableitung einer Korrekturfunktion, welche gemessene Trockendichten als Funktion des Tonmineralgehalts auf *in situ*-Werte korrigiert.

6 Resultate (Nordschweizer Daten)

6.1 Übersicht

Die Resultate werden jeweils mit folgenden Parametern angegeben:

- Arithmetisches Mittel
- Standardabweichung (1σ)
- Minimalwert
- Maximalwert
- Anzahl Datenpunkte.

Tab. 4 - 5 fassen diese Parameter für alle Wirtgesteinseinheiten zusammen. Mittelwert und Standardabweichung wurden aus den Mittelwerten der einzelnen Lokaltäten berechnet und beziehen sich also nicht auf die Mittelung aller einzelnen Datenpunkte. Damit wird sichergestellt, dass jede Lokaltät mit demselben Gewicht in die Daten einfließt, unabhängig von der jeweiligen Datendichte. Es zeigt sich jedoch, dass die derart berechneten Mittelwerte nur geringfügig von den Mittelwerten sämtlicher Einzelanalysen abweichen.

Insbesondere in den älteren Kampagnen wurden teilweise heterogene Datensätze erhoben. So stehen z.B. mehr Analysen der Karbonatgehalte als solche der anderen Minerale zur Verfügung. Tonmineralanalysen wurden nur teilweise durchgeführt, wogegen der totale Tonmineralgehalt (Summe aller Tonminerale) für eine grössere Anzahl Proben bestimmt wurde. Für alle Berechnungen wurden jeweils sämtliche verfügbaren Daten für ein bestimmtes Mineral verwendet, d.h. die gemittelten Werte beruhen teilweise auf verschiedenen vielen Datenpunkten. Dies führt auch dazu, dass die Summen der gemittelten Werte nicht notwendigerweise 100 % ergeben, obwohl das für alle Einzelanalysen zutrifft. Ebenso ergeben sich daraus geringfügige Unterschiede zwischen dem mittleren Tonmineralgehalt und der Summe der Mittel der einzelnen Tonmineral-Spezies. Die Abweichungen sind allerdings gering (max. einige %), und die Daten können bei Bedarf auf 100 % normiert werden.

Für den "Braunen Dogger" und die Effinger Schichten wurden nebst Mittelwerten des gesamten Datensatzes auch solche für Proben mit $<25\%$ und $\geq 25\%$ Tonmineralgehalt angegeben. Diese Trennung entspricht der Grenze zwischen tonigem Kalk und Kalkmergel gemäss Füchtbauer (1988), ist ansonsten aber arbiträr, zumal die Datensätze keine Bimodalität des Tonmineralgehalts erkennen lassen (Fig. 5). Eine Bimodalität ist auch aufgrund der geophysikalisch abgeleiteten Tonmineralgehalte in den Bohrungen Benken und Gösigen nicht auszumachen. Die Trennung bei 25% Tonmineralgehalt hat nur illustrativen Charakter. Die laufenden Feld- und Laboruntersuchungen zu Strukturen und zur Wasserführung im "Braunen Dogger" und in den Effinger Schichten werden dieser Frage weiter nachgehen.

Einheit		Mineralogie																
		Quarz [Gew. %]	Kalifeldspat [Gew. %]	Plagioklas [Gew. %]	Calcit [Gew. %]	Dolomit + Ankerit [Gew. %]	Siderit [Gew. %]	Anhydrit [Gew. %]	Gips [Gew. %]	Pyrit [Gew. %]	C(org) [Gew. %]	Illit [Gew. % des Gesteins]	II/Sm WL [Gew. % des Gesteins]	Smektit [Gew. % des Gesteins]	Kaolinit [Gew. % des Gesteins]	Chlorit [Gew. % des Gesteins]	Chl/Sm WL [Gew. % des Gesteins]	Summe Tonmin. [Gew. % des Gesteins]
Opalinuston	Mittelwert (Mittel der Mittelwerte jedes Standorts)	19.4	1.7	0.9	13.3	0.5	3.1	0.1	0.0	1.1	0.7	24.8	10.5	0.0	19.0	8.1	0.0	60.4
	1 sigma (Variabilität der Mittelwerte der Standorte)	2.3	0.7	0.4	3.5	0.3	1.7	0.3	0.0	0.2	0.1	4.7	2.9	0.0	3.2	2.0	0.0	4.3
	Anzahl Standorte	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6
	1 sigma aller Einzelanalysen	5.4	1.4	0.8	9.6	0.7	5.1	0.6	0.1	0.8	0.4	6.4	5.1	0.0	5.3	2.9	0.0	11.5
	Minimalwert (Einzelanalyse)	6.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	7.0	2.8	0.0	7.9	2.5	0.0	17.4
	Maximalwert (Einzelanalyse)	33.1	7.5	5.0	67.0	6.0	40.0	5.0	1.0	3.7	2.7	35.6	28.8	0.2	30.7	14.3	0.0	81.8
	Anzahl Einzelanalysen	109	109	109	207	207	207	104	104	105	205	68	66	68	68	68	68	109
	Datenherkunft	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI
Brauner Dogger	Mittelwert (Mittel der Mittelwerte jedes Standorts)	20.0	2.8	0.9	30.5	1.8	0.7	0.0	0.0	1.3	0.4	14.6	11.5	0.0	12.5	4.6	0.0	44.5
	1 sigma (Variabilität der Mittelwerte der Standorte)	4.0	0.7	0.1	0.6	0.5	0.1	0.0	0.0	0.1	0.1	7.7	0.4	0.0	0.5	2.0	0.1	8.9
	Anzahl Standorte	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
	1 sigma aller Einzelanalysen	10.0	2.2	1.1	17.3	2.9	1.7	0.0	0.0	0.8	0.3	8.3	6.4	0.0	6.8	4.9	0.2	16.7
	Minimalwert (Einzelanalyse)	1.7	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	1.3	0.0	0.0	0.5	1.0	0.0	6.2
	Maximalwert (Einzelanalyse)	48.8	9.1	4.0	72.0	19.9	8.0	0.0	0.0	3.2	1.8	34.3	24.6	0.2	23.7	27.6	1.0	70.1
	Anzahl Einzelanalysen	39	39	39	71	71	71	40	40	44	72	28	28	28	28	28	28	39
	Mittelwert Proben <25% Ton	31.2	5.1	2.0	41.9	3.4	0.0	0.0	0.0	0.6	0.3	3.7	4.8	0.0	4.2	2.0	0.0	15.5
	Anzahl Proben <25% Ton	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	5	5	5	5	5	5	7
	Mittelwert Proben ≥25% Ton	18.7	2.5	0.7	25.7	1.5	0.6	0.0	0.0	1.7	0.4	16.5	13.0	0.0	14.3	5.1	0.0	48.3
	Anzahl Proben ≥25% Ton	32	32	32	32	32	32	28	28	32	32	23	23	23	23	23	23	32
	Datenherkunft	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI
Effinger Schichten	Mittelwert (Mittel der Mittelwerte jedes Standorts)	8.1	0.5	0.1	61.5	3.4	0.0	0.0	0.0	0.9	0.2	12.3	7.8	0.1	4.8	1.1	0.0	24.9
	1 sigma (Variabilität der Mittelwerte der Standorte)	1.5	0.2	0.2	0.9	1.5	0.0	0.0	0.0	0.2	0.1	6.0	1.3	0.2	2.0	0.9	0.0	2.1
	Anzahl Standorte	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4
	1 sigma aller Einzelanalysen	3.1	0.5	0.1	12.9	3.1	0.1	0.0	0.0	0.4	0.3	6.6	3.2	0.7	4.3	0.9	0.0	8.9
	Minimalwert (Einzelanalyse)	3.0	0.0	0.0	32.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	5.0
	Maximalwert (Einzelanalyse)	17.0	2.0	1.0	91.0	15.0	1.0	0.0	0.0	1.9	1.1	29.2	13.0	3.0	14.0	3.8	0.0	48.3
	Anzahl Einzelanalysen	57	57	57	88	88	88	59	59	63	88	36	36	36	36	36	36	57
	Mittelwert Proben <25% Ton	7.1	0.3	0.0	70.5	3.4	0.0	0.0	0.0	0.9	0.2	6.9	6.1	0.4	3.4	0.3	0.0	17.5
	Anzahl Proben <25% Ton	31	31	31	31	31	31	29	29	31	31	19	19	19	19	19	19	31
	Mittelwert Proben ≥25% Ton	10.2	0.6	0.0	52.5	3.8	0.0	0.0	0.0	0.9	0.3	13.0	10.4	0.1	8.0	0.8	0.0	31.7
	Anzahl Proben ≥25% Ton	26	26	26	26	26	26	23	23	25	26	17	17	17	17	17	17	26
	Datenherkunft	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI

Tab. 4:
Mineralogie
des
Opalinustons,
des "Braunen
Doggers" und
der Effinger
Schichten:
Zusammen-
fassung aller
verfügbaren
Daten

Einheit		Dichten und Porositäten				Kationen-Austausch							Oberflächen		
		Gesteinsdichte trocken [g/cm³]	Korndichte [g/cm³]	Physikalische Porosität [%]	Wasserverlustporosität (105 °C) [%]	K (Ni-en) [meq/kg rock]	Na (Ni-en) [meq/kg rock]	Mg (Ni-en) [meq/kg rock]	Ca (Ni-en) [meq/kg rock]	Sr (Ni-en) [meq/kg rock]	Summe Kationen (Ni-en) [meq/kg rock]	Ni-Verbrauch (Ni-en) [meq/kg rock]	Äussere Oberfläche BET [m²/g]	Innere Oberfläche [m²/g]	Totale Oberfläche [m²/g]
Opalinuston	Mittelwert (Mittel der Mittelwerte jedes Standorts)	2.41	2.71	11.1	13.4	8.2	44.3	16.6	30.1	1.4	103.7	114.3	29.4	149.3	178.8
	1 sigma (Variabilität der Mittelwerte der Standorte)	0.07	0.02	2.8	3.4	1.5	1.6	7.8	7.1	0.5	19.8		3.5	66.9	69.5
	Anzahl Standorte	6	6	6	2	2	2	2	2	2	2	1	5	5	5
	1 sigma aller Einzelanalysen	0.07	0.03	2.9	2.5	3.2	14.6	6.7	11.9	1.1	33.2	5.5	5.4	65.8	68.0
	Minimalwert (Einzelanalyse)	2.28	2.63	3.5	5.5	4.6	19.0	5.1	12.7	0.4	41.8	109.0	9.8	19.2	29.0
	Maximalwert (Einzelanalyse)	2.61	2.78	17.0	19.1	15.7	63.7	28.9	59.1	3.6	175.2	120.0	36.0	316.0	346.0
	Anzahl Einzelanalysen	65	71	65	69	14	14	14	14	10	14	3	25	25	25
	Datenherkunft	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, MT, RIN, SHA, WEI	BEN, MT	BEN, MT	BEN, MT	BEN, MT	BEN, MT	BEN, MT	BEN, MT	BEN	BEN, BEZ, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, RIN, SHA, WEI	BEN, BEZ, RIN, SHA, WEI
Brauner Dogger	Mittelwert (Mittel der Mittelwerte jedes Standorts)	2.48	2.73	9.2	11.7	10.2	22.8	10.8	18.5	0.8	63.0	100.1	33.5	202.0	235.5
	1 sigma (Variabilität der Mittelwerte der Standorte)	0.09	0.01	2.9											
	Anzahl Standorte	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	1 sigma aller Einzelanalysen	0.08	0.06	3.2	0.6	7.4	4.2	4.0	14.2	0.6	30.4		4.9	2.8	2.1
	Minimalwert (Einzelanalyse)	2.33	2.64	2.6	10.8	5.0	19.8	8.0	8.4	0.3	41.5		30.0	200.0	234.0
	Maximalwert (Einzelanalyse)	2.63	2.90	14.3	12.4	15.4	25.8	13.6	28.5	1.2	84.5		37.0	204.0	237.0
	Anzahl Einzelanalysen	19	19	19	5	2	2	2	2	2	2	1	2	2	2
	Mittelwert Proben <25% Ton	2.47	2.72	8.9	11.5	5.0	19.8	8.0	8.4	0.3	41.5				
	Anzahl Proben <25% Ton	5	5	5	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0
	Mittelwert Proben ≥25% Ton	2.40	2.74	12.5	11.6	15.4	25.8	13.6	28.5	1.2	84.5	100.1	33.5	202.0	235.5
Anzahl Proben ≥25% Ton	10	10	10	3	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	
Datenherkunft	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN, WEI	BEN	BEN	BEN	BEN	BEN	BEN	BEN	BEN	WEI	WEI	WEI	
Effinger Schichten	Mittelwert (Mittel der Mittelwerte jedes Standorts)	2.53	2.75	7.9	8.9							53.1	15.6		
	1 sigma (Variabilität der Mittelwerte der Standorte)	0.02	0.02	0.9	4.3							4.1	1.4		
	Anzahl Standorte	4	4	4	3	0	0	0	0	0	0	2	2	0	0
	1 sigma aller Einzelanalysen	0.06	0.03	2.3	2.6							26.4	6.6		
	Minimalwert (Einzelanalyse)	2.37	2.68	1.7	1.9							8.6	2.1		
	Maximalwert (Einzelanalyse)	2.65	2.81	12.8	13.8							99.0	29.7		
	Anzahl Einzelanalysen	40	40	40	22	0	0	0	0	0	0	11	29	0	0
	Mittelwert Proben <25% Ton	2.56	2.75	6.8	5.1							44.9	11.1		
	Anzahl Proben <25% Ton	24	24	24	12	0	0	0	0	0	0	7	16	0	0
	Mittelwert Proben ≥25% Ton	2.49	2.75	9.4	8.7							72.6	20.4		
	Anzahl Proben ≥25% Ton	15	15	15	10	0	0	0	0	0	0	4	13	0	0
	Datenherkunft	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT, WEI	BEN, GOS, OFT							GOS, OFT	GOS, OFT		

Tab. 5:
Dichten, Porositäten,
Kationenaustausch-
Eigenschaften und
Oberflächen des
Opalinustons, des
"Braunen Doggers" und
der Effinger Schichten:
Zusammenfassung aller
verfügbaren Daten

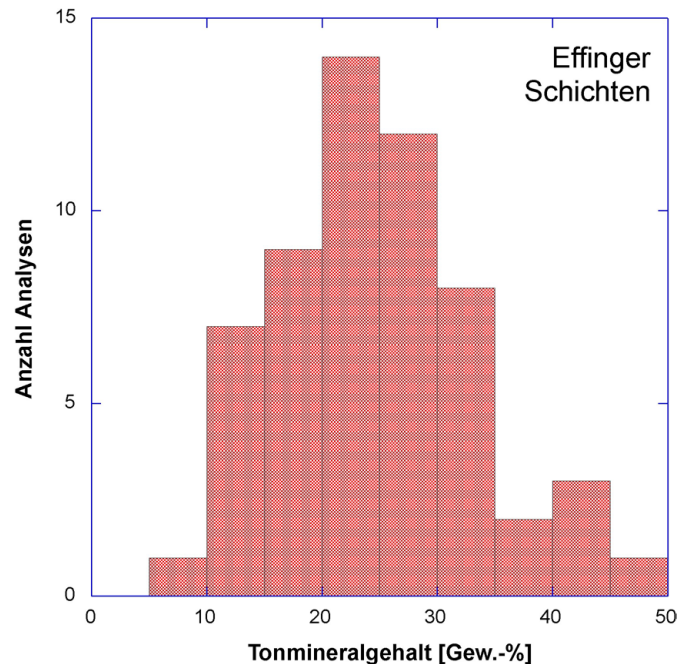


Fig. 5: Verteilung aller im Labor gemessenen Tonmineralgehalte der Effinger Schichten (Bohrungen Benken, Gösigen, Oftringen, Weiach)

6.2 Opalinuston

Die lokalitätsspezifischen Daten für Opalinuston sind in Tab. 6 - 7 zusammengefasst. Die mineralogischen Daten sind in Fig. 6 im Dreieck Tonminerale - Karbonate - Quarz/Feldspäte (Füchtbauer 1988) dargestellt. Die grosse Mehrheit der Analysen fällt in die Felder der Tonsteine, mit einigen Punkten im Feld der Mergel bzw. Kalke. Die Felder für verschiedene Lokalitäten überlappen in Fig. 6 weitgehend. Im Mittel ist der Opalinuston in Benken etwas weniger tonreich als an den anderen Lokalitäten.

Die Kationenaustausch-Kapazität mit der Ni-en-Methode wurde in Benken und am Mont Terri untersucht. Am Mont Terri besteht ein Datensatz für desorbierte Kationen, und in Benken wurde zusätzlich der Verbrauch des Index-Kations Ni bestimmt. Letzterer ist im Vergleich zur Summe der desorbierten Kationen etwas höher (Tab. 7). Dies ist am ehesten auf Protonenaustausch und/oder nicht analysierte Kationen zurückzuführen (Nagra 2002, Gaucher *et al.* 2001).

Totale Oberflächen sind im Opalinuston der Bohrung Benken deutlich tiefer als an allen anderen Lokalitäten (Tab. 7). Ob dies mit dem tieferen Gehalt an Tonmineralen zusammenhängt oder methodisch bedingt ist (in Benken wurde zur Bestimmung die Äthylen-Ethyl-Monoethyl-Äther-Methode (EGME) verwendet, an allen anderen Lokalitäten die Glycerin-Methode), bleibt derzeit unklar.

Tab. 6: Mineralogie des Opalinustons: Lokaltätsspezifische Daten

Lokalität		Mineralogie																
		Quarz [Gew. %]	Kalifeldspat [Gew. %]	Plagioklas [Gew. %]	Calcit [Gew. %]	Dolomit + Ankerit [Gew. %]	Siderit [Gew. %]	Anhydrit [Gew. %]	Gips [Gew. %]	Pyrit [Gew. %]	C(org) [Gew. %]	Illit [Gew. % des Gesteins]	Ill/Sm WL [Gew. % des Gesteins]	Smektit [Gew. % des Gesteins]	Kaolinit [Gew. % des Gesteins]	Chlorit [Gew. % des Gesteins]	Chl/Sm WL [Gew. % des Gesteins]	Summe Tonmin. [Gew. % des Gesteins]
Benken	Mittelwert	20.3	2.2	0.9	15.3	0.7	4.6	0.0	0.0	1.1	0.6	18.0	13.9	0.0	17.8	4.8	0.0	54.4
	1 sigma	4.7	1.0	0.3	9.4	0.4	2.4	0.0	0.0	0.9	0.3	5.3	3.9	0.0	5.3	1.7	0.0	10.3
	Minimalwert	12.2	0.5	0.5	8.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.1	7.0	5.4	0.0	7.9	2.5	0.0	22.9
	Maximalwert	27.2	5.4	1.8	52.2	1.3	9.8	0.0	0.0	3.7	0.9	22.0	17.0	0.0	23.0	7.1	0.0	67.6
	Anzahl Analysen	22	22	22	22	22	22	22	22	22	22	7	7	7	7	7	7	22
Beznau	Mittelwert	18.3	0.6	1.5	9.8	0.4	0.0	0.0	0.0	0.8	0.7	27.5	8.4	0.0	23.2	8.7	0.0	67.9
	1 sigma	5.5	1.4	1.3	1.5	0.5	0.0	0.0	0.0	0.5	0.2	4.5	2.8	0.0	2.9	1.3	0.0	9.0
	Minimalwert	10.0	0.0	0.0	8.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.3	0.5	17.3	3.5	0.0	18.6	5.8	0.0	46.0
	Maximalwert	28.0	5.0	5.0	13.0	1.0	0.0	0.0	0.0	1.9	1.0	32.8	12.3	0.0	27.2	10.8	0.0	77.9
	Anzahl Analysen	12	12	12	12	12	12	12	12	12	12	12	12	12	12	12	12	12
Mont Terri	Mittelwert	15.7	1.7	1.1	19.2	0.3	2.2	0.0	0.0	1.3	0.7	21.8	10.0	0.0	21.0	8.4	0.0	59.8
	1 sigma	6.3	1.6	1.1	12.5	0.6	2.6	0.0	0.0	0.9	0.5	6.1	3.7	0.0	6.6	3.1	0.0	13.4
	Minimalwert	6.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.2	7.6	2.8	0.0	10.4	2.8	0.0	23.6
	Maximalwert	28.0	5.0	4.0	67.0	2.0	14.0	0.0	0.0	3.2	2.5	35.0	16.3	0.0	30.7	14.3	0.0	81.8
	Anzahl Analysen	17	17	17	41	41	41	17	17	17	39	17	15	17	17	17	17	17
Riniken	Mittelwert	20.7	1.6	0.8	12.4	0.3	3.8	0.0	0.0	1.3	0.8	30.3	8.1	0.0	16.3	9.9	0.0	59.9
	1 sigma	4.3	0.5	0.6	9.0	0.6	6.8	0.0	0.0	0.8	0.3	2.8	1.5	0.0	4.7	2.0	0.0	10.8
	Minimalwert	13.0	1.0	0.0	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.4	0.3	25.6	5.1	0.0	12.1	5.1	0.0	24.6
	Maximalwert	30.1	2.5	2.0	43.0	3.0	40.0	0.0	0.0	3.4	1.7	34.8	10.9	0.0	28.8	11.6	0.0	70.7
	Anzahl Analysen	24	24	24	41	41	41	18	18	18	41	10	10	10	10	10	10	24
Schafisheim	Mittelwert	22.3	2.5	0.9	10.5	1.1	3.8	0.7	0.1	1.3	0.5	28.2	8.2	0.0	15.1	10.2	0.0	59.4
	1 sigma	3.5	1.8	1.0	3.8	0.9	5.6	1.5	0.3	0.7	0.2	5.3	1.1	0.0	4.1	2.8	0.0	4.2
	Minimalwert	15.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	21.0	7.0	0.0	8.9	4.6	0.0	51.2
	Maximalwert	29.5	7.5	3.0	24.0	6.0	29.0	5.0	1.0	2.2	1.0	35.6	9.7	0.0	18.2	12.6	0.0	66.6
	Anzahl Analysen	14	14	14	36	36	36	14	14	10	36	6	6	6	6	6	6	14
Weiach	Mittelwert	18.8	1.7	0.4	12.5	0.3	4.8	0.0	0.0	1.0	0.8	22.9	14.3	0.0	20.9	6.8	0.0	61.1
	1 sigma	5.8	1.3	0.5	9.9	0.6	5.8	0.0	0.0	0.8	0.4	6.0	7.5	0.1	3.6	3.1	0.0	14.3
	Minimalwert	10.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.4	0.0	14.7	5.0	0.0	15.5	2.6	0.0	17.4
	Maximalwert	33.1	4.2	1.0	54.0	2.0	34.0	0.0	0.0	3.7	2.7	32.0	28.8	0.2	25.9	11.3	0.0	75.4
	Anzahl Analysen	20	20	20	55	55	55	21	21	26	55	16	16	16	16	16	16	20

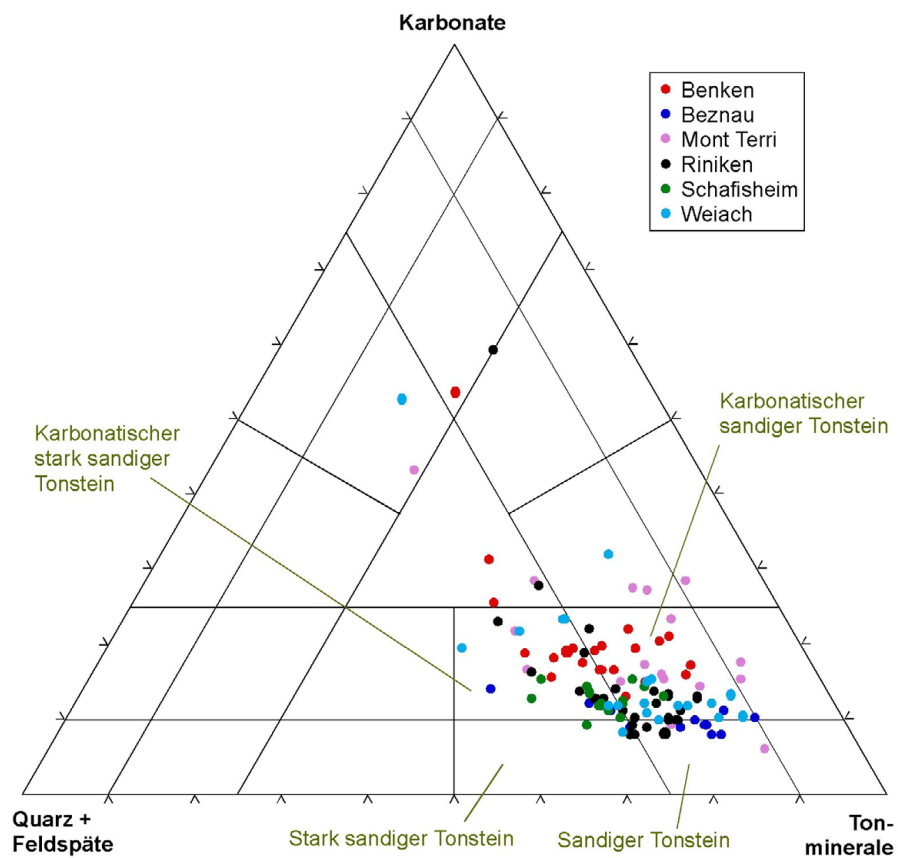


Fig. 6: Zusammenfassende Darstellung der mineralogischen Zusammensetzung von Opalinuston im Diagramm von Füchtbauer (1988)

6.3 "Brauner Dogger"

Die Daten für den "Braunen Dogger" der Bohrungen Benken und Weiach sind in Tab. 8 - 9 zusammengefasst. Die mineralogischen Daten sind in Fig. 7 im Dreieck Tonminerale - Karbonate - Quarz/Feldspäte (Füchtbauer 1988) dargestellt. Im Vergleich zum Opalinuston ist die mineralogische Variabilität deutlich grösser. In Weiach fallen alle Datenpunkte in die Felder von Tonsteinen und Mergeln, während in Benken Analysen auch in die Felder für Kalke oder Sandsteine fallen können.

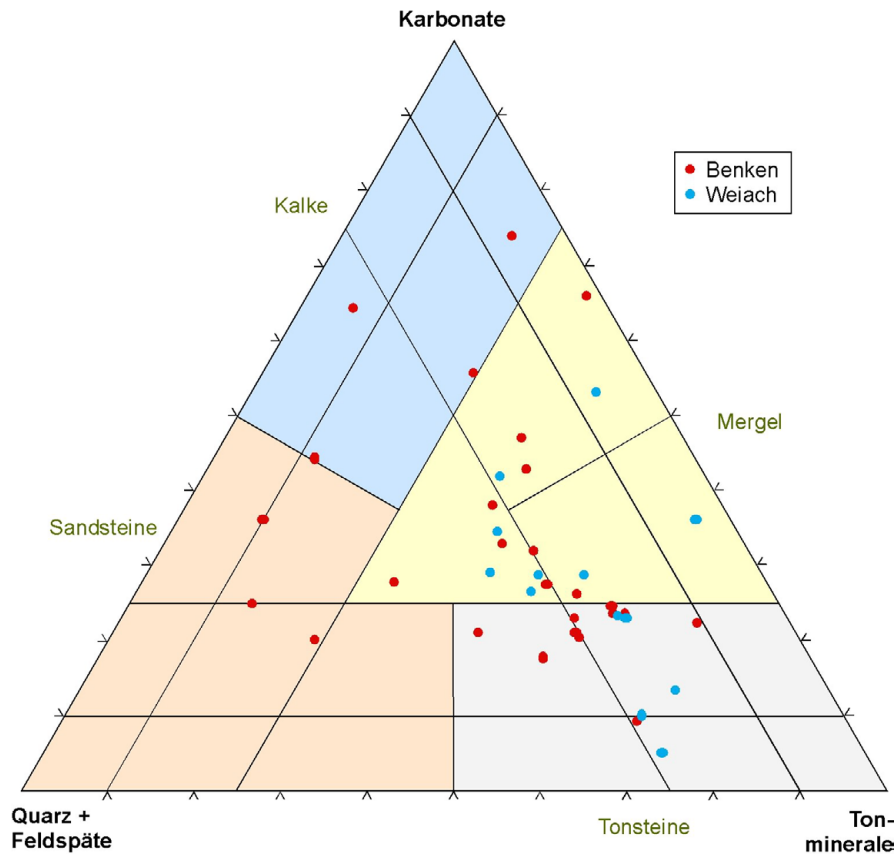


Fig. 7: Zusammenfassende Darstellung der mineralogischen Zusammensetzung des "Braunen Doggers" im Diagramm von Füchtbauer (1988)

Lokalität		Mineralogie																
		Quarz [Gew. %]	Kalifeldspat [Gew. %]	Plagioklas [Gew. %]	Calcit [Gew. %]	Dolomit + Ankerit [Gew. %]	Siderit [Gew. %]	Anhydrit [Gew. %]	Gips [Gew. %]	Pyrit [Gew. %]	C(org) [Gew. %]	Illit [Gew. % des Gesteins]	Il/Sm WL [Gew. % des Gesteins]	Smektit [Gew. % des Gesteins]	Kaolinit [Gew. % des Gesteins]	Chlorit [Gew. % des Gesteins]	Chl/Sm WL [Gew. % des Gesteins]	Summe Tonmin. [Gew. % des Gesteins]
Benken	Mittelwert	22.9	3.3	1.0	30.1	2.2	0.7	0.0	0.0	1.4	0.3	9.1	11.3	0.0	12.2	3.2	0.1	38.2
	1 sigma	11.1	2.2	1.1	14.8	4.2	1.7	0.0	0.0	0.7	0.1	6.1	5.4	0.0	7.4	1.5	0.3	17.2
	Minimalwert	1.7	0.0	0.0	8.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.1	1.3	1.9	0.0	0.5	1.0	0.0	6.2
	Maximalwert	48.8	9.1	4.0	64.2	19.9	6.0	0.0	0.0	2.6	0.8	22.0	18.2	0.0	23.0	5.4	1.0	66.0
	Anzahl Analysen	26	26	26	26	26	26	26	26	26	26	15	15	15	15	15	15	26
Weiach	Mittelwert	17.2	2.3	0.8	30.9	1.4	0.6	0.0	0.0	1.3	0.5	20.1	11.8	0.0	12.9	6.0	0.0	50.8
	1 sigma	6.1	1.5	0.8	18.7	1.7	1.7	0.0	0.0	1.0	0.4	6.5	7.5	0.0	6.2	6.9	0.0	12.3
	Minimalwert	4.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	9.4	0.0	0.0	4.1	1.1	0.0	33.2
	Maximalwert	27.0	5.0	2.0	72.0	8.0	8.0	0.0	0.0	3.2	1.8	34.3	24.6	0.2	23.7	27.6	0.0	70.1
	Anzahl Analysen	13	13	13	45	45	45	14	14	18	46	13	13	13	13	13	13	13

[illegible]

6.4 Effinger Schichten

Die lokalitätsspezifischen Daten für Opalinuston sind in Tab. 10 - 11 zusammengefasst. Die mineralogischen Daten sind in Fig. 8 im Dreieck Tonminerale - Karbonate - Quarz/Feldspäte (Füchtbauer 1988) dargestellt. Die meisten Proben fallen in die Felder der (z.T. sandigen) Kalkmergel bis (z.T. sandigen) tonigen Kalke. Systematische Unterschiede zwischen verschiedenen Lokalitäten sind nicht auszumachen.

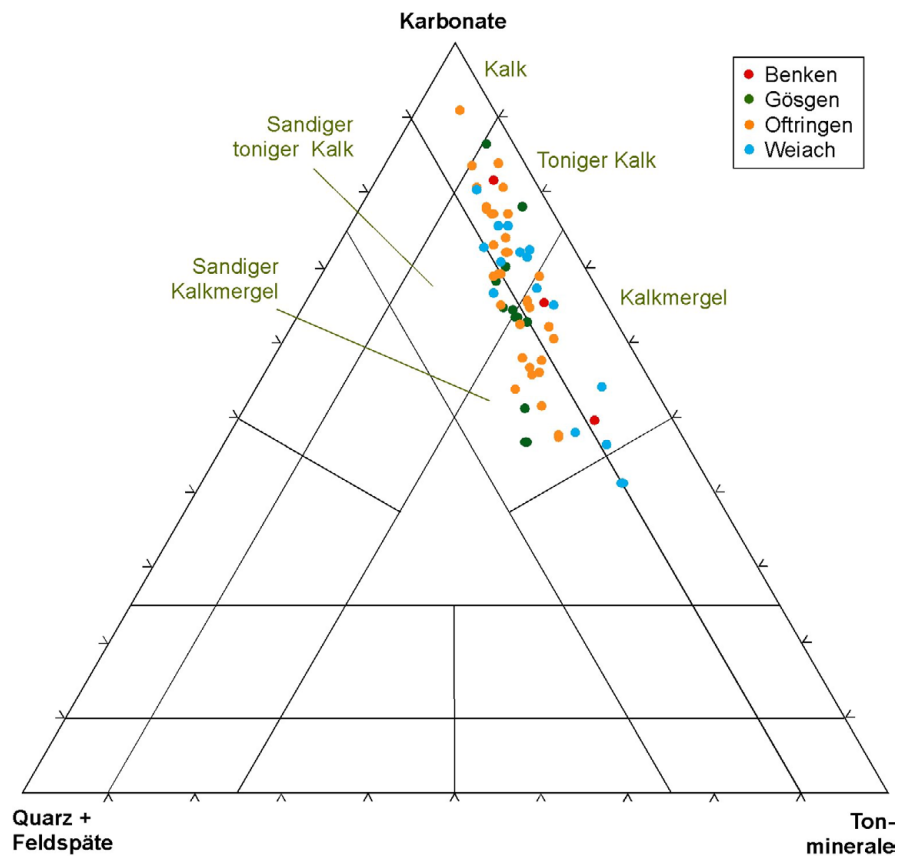


Fig. 8: Zusammenfassende Darstellung der mineralogischen Zusammensetzung der Effinger Schichten im Diagramm von Füchtbauer (1988)

Tab. 10: Mineralogie der Effinger Schichten: Lokaltätsspezifische Daten

Lokalität		Mineralogie																
		Quarz [Gew. %]	Kalifeldspat [Gew. %]	Plagioklas [Gew. %]	Calcit [Gew. %]	Dolomit + Ankerit [Gew. %]	Siderit [Gew. %]	Anhydrit [Gew. %]	Gips [Gew. %]	Pyrit [Gew. %]	C(org) [Gew. %]	Illit [Gew. % des Gesteins]	Il/Sm WL [Gew. % des Gesteins]	Smektit [Gew. % des Gesteins]	Kaolinit [Gew. % des Gesteins]	Chlorit [Gew. % des Gesteins]	Chl/Sm WL [Gew. % des Gesteins]	Summe Tonmin. [Gew. % des Gesteins]
Benken	Mittelwert	6.3	0.3	0.3	62.0	2.8	0.0	0.0	0.0	1.0	0.2	11.2	8.6	0.0	4.9	1.9	0.0	27.0
	1 sigma	1.3	0.6	0.6	16.6	1.0	0.0	0.0	0.0	0.3	0.1	11.0	4.8	0.0	1.5	1.6	0.0	13.8
	Minimalwert	4.7	0.0	0.0	45.0	2.1	0.0	0.0	0.0	0.7	0.1	3.5	5.2	0.0	3.8	0.8	0.0	13.2
	Maximalwert	7.0	1.0	1.0	78.2	4.0	0.0	0.0	0.0	1.3	0.3	19.0	12.0	0.0	6.0	3.0	0.0	40.8
	Anzahl Analysen	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	2	2	2	2	2	2	3
Gösgen	Mittelwert	9.6	0.8	0.0	60.3	4.8	0.0	0.0	0.0	0.8	0.3	11.7	8.3	0.0	2.7	0.7	0.0	23.4
	1 sigma	4.3	0.6	0.0	14.7	3.9	0.0	0.0	0.0	0.4	0.3	4.0	2.8	0.0	2.1	0.7	0.0	6.8
	Minimalwert	3.0	0.0	0.0	32.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	4.7	3.7	0.0	0.0	0.0	0.0	10.3
	Maximalwert	17.0	2.0	0.0	85.0	14.0	0.0	0.0	0.0	1.9	0.7	18.1	12.4	0.0	5.2	2.0	0.0	34.0
	Anzahl Analysen	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
Oftringen	Mittelwert	8.8	0.4	0.0	62.4	4.4	0.0	0.0	0.0	1.0	0.3	5.8	8.5	0.5	7.5	0.0	0.0	22.7
	1 sigma	3.1	0.4	0.0	12.0	3.6	0.0	0.0	0.0	0.4	0.1	2.7	3.4	0.9	4.9	0.0	0.0	8.0
	Minimalwert	3.0	0.0	0.0	40.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	2.0	0.0	1.0	0.0	0.0	5.0
	Maximalwert	15.2	1.0	0.0	91.0	15.0	0.0	0.0	0.0	1.9	0.5	12.0	13.0	3.0	14.0	0.0	0.0	37.6
	Anzahl Analysen	29	29	29	29	29	29	29	29	29	29	19	19	19	19	19	19	29
Weiach	Mittelwert	7.6	0.4	0.0	61.5	1.5	0.0	0.0	0.0	0.5	0.2	20.2	5.9	0.0	4.1	1.9	0.0	26.3
	1 sigma	2.0	0.5	0.0	13.2	1.9	0.1	0.0	0.0	0.3	0.3	7.9	3.0	0.0	1.9	1.3	0.0	11.1
	Minimalwert	5.0	0.0	0.0	34.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	0.0	12.3	2.4	0.0	1.4	0.5	0.0	12.1
	Maximalwert	11.0	1.3	0.0	91.0	9.0	1.0	0.0	0.0	0.9	1.1	29.2	9.4	0.0	6.3	3.8	0.0	48.3
	Anzahl Analysen	15	15	15	46	46	46	17	17	21	46	5	5	5	5	5	5	15

Tab. 11: Dichten, Porositäten, Kationenaustausch-Eigenschaften und Oberflächen der Effinger Schichten: Lokaltätsspezifische Daten

[illegible]

7 Korrelation zwischen Mineralogie und Porosität in Opalinuston, "Braunem Dogger" und Effinger Schichten

7.1 Übersicht

Die Korrelation zwischen physikalischer Porosität einerseits und den Gehalten an Tonmineralen, Karbonaten und Quarz/Feldspat andererseits ist in Fig. 9 - 11 dargestellt. Hierbei fällt Folgendes auf:

- Die 3 betrachteten Gesteinseinheiten besetzen in den Diagrammen mehrheitlich verschiedene Bereiche und liegen nicht auf gemeinsamen Trendlinien.
- Für Opalinuston und "Braunen Dogger" lassen sich keine klar definierten Korrelationen zwischen Porosität und Mineralogie ausmachen.
- Für die Effinger Schichten hingegen korreliert die Porosität positiv mit den Gehalten an Tonmineralen und Quarz/Feldspat, sowie negativ mit dem Karbonatgehalt.

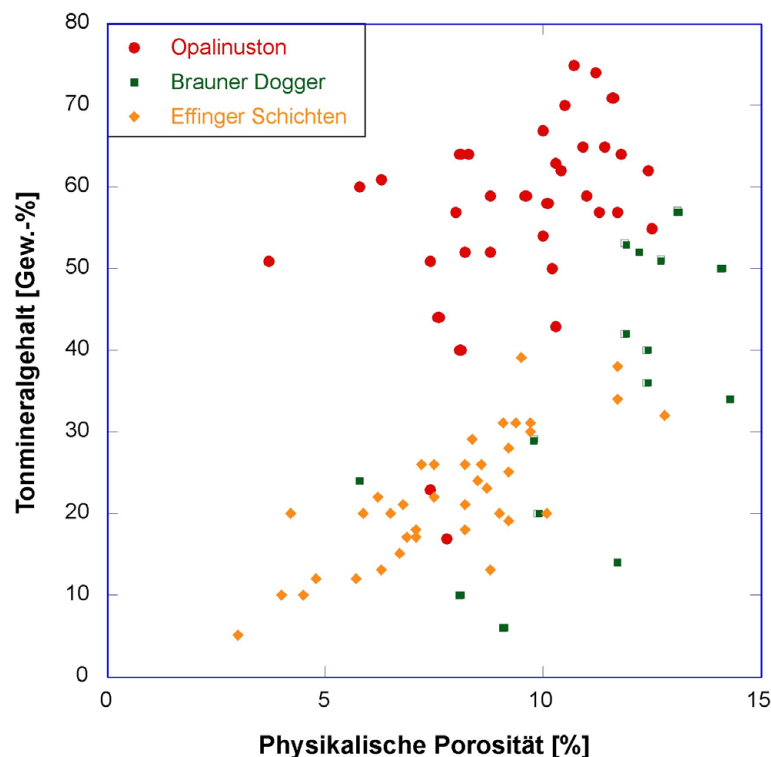


Fig. 9: Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und Tonmineralgehalt im Opalinuston, im "Braunem Dogger" und in den Effinger Schichten

Der Datensatz für Opalinuston umfasst Messungen aus Benken, Riniken, Schafisheim und Weiach. Für Mont Terri besteht ein einziger Datenpunkt (physikalische Porosität 17.0 %, Tonmineralgehalt 62 %; nicht dargestellt), und für Beznau gibt es überhaupt keine Proben, an welchen sowohl Porosität wie auch Tonmineralgehalt bestimmt wurden

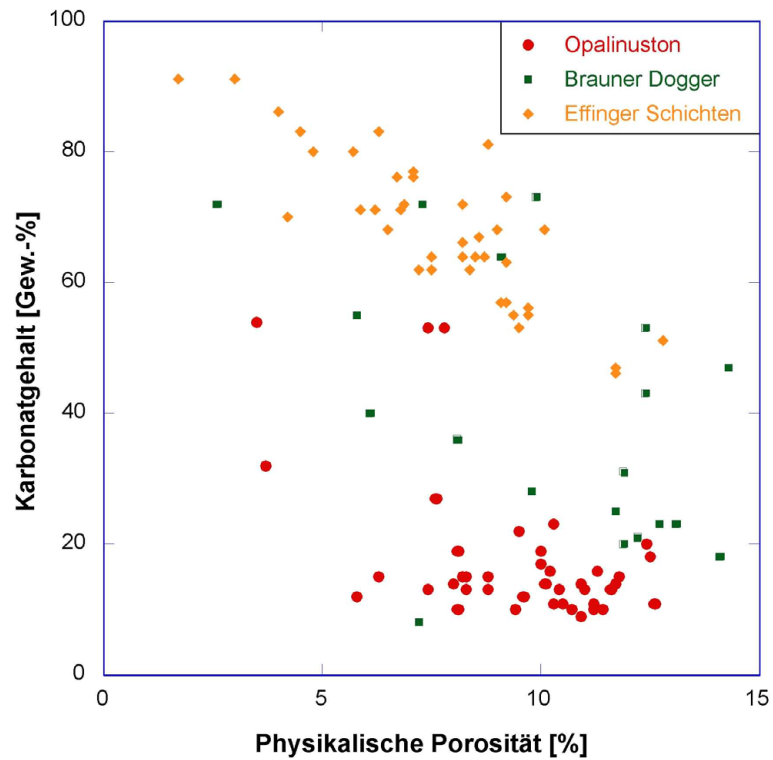


Fig. 10: Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und Karbonatgehalt im Opalinuston, im "Braunem Dogger" und in den Effinger Schichten

Der Datensatz für Opalinuston umfasst Messungen aus Benken, Riniken, Schafisheim und Weiach. Für Mont Terri besteht ein einziger Datenpunkt (physikalische Porosität 17.0 %, Karbonatgehalt 17 %; nicht dargestellt), und für Beznau gibt es überhaupt keine Proben, an welchen sowohl Porosität wie auch Karbonatgehalt bestimmt wurden

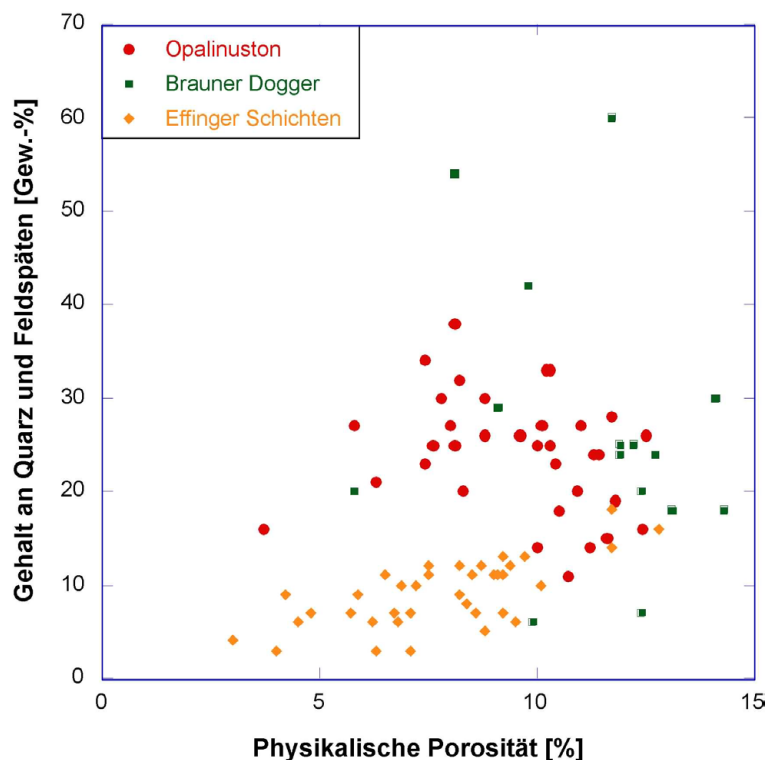


Fig. 11: Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und dem Gehalt an Quarz/Feldspat im Opalinuston, im "Braunem Dogger" und in den Effinger Schichten

Der Datensatz für Opalinuston umfasst Messungen aus Benken, Riniken, Schafisheim und Weiach. Für Mont Terri besteht ein einziger Datenpunkt (physikalische Porosität 17.0 %, Gehalt an Quarz und Feldspäten 19 %; nicht dargestellt), und für Beznau gibt es überhaupt keine Proben, an welchen sowohl Porosität wie auch Gehalt an Quarz und Feldspäten bestimmt wurden

7.2 Opalinuston

Es besteht eine systematische Korrelation zwischen physikalischer Porosität und der heutigen Teufe (Fig. 12). Diese wiederum ist eine Funktion der Distanz zur alpinen Front, zu welcher hin das Mesozoikum unterhalb des Molassekeils abtaucht. Seit der maximalen Versenkung im Miozän, welche den Kompaktionsgrad und somit die Porosität des Opalinustons bestimmt hat, wurden im ganzen Gebiet *ca.* 1000 m Gesteinssäule erodiert (Mazurek *et al.* 2006). Dies erklärt, warum die Porosität in der relativ alpennahen Bohrung Schafisheim (*ca.* 41 km zur alpinen Front) kleiner ist als in Weiach (46 km), Benken (53 km), Riniken (51 km) und Beznau (55 km). Nicht ins Bild passt der Mont Terri - erklärbar durch die Tatsache, dass die maximale Versenkung hier kretazischen Alters ist, d.h. die miozäne Versenkung im Gegensatz zu den alpennäheren Bohrungen nicht zu einer zusätzlichen Kompaktion geführt hat (Mazurek *et al.* 2006).

Die Abhängigkeit der Porosität von der Lokalität bzw. deren Versenkungsgeschichte (die regional variiert) hat Konsequenzen auf die Aussagekraft der Korrelation von Porosität und Mineralogie. Angesichts der regional variablen Versenkung beeinflusst neben dem Tonmineralgehalt auch die geographische Lage jeder Bohrung die Porosität. Fig. 13 zeigt denn auch keine klare Systematik in der Beziehung Tonmineralgehalt-Porosität. Eine solche mag zwar in einer einzelnen Bohrung vorhanden sein, doch für eine klare Definition ist der jeweilige

Datensatz zu beschränkt. Es wird gefolgert, dass aufgrund der heute verfügbaren Daten für den Opalinuston keine einfache Abhängigkeit zwischen Mineralogie (Ton- Karbonat- oder Quarzgehalt) und Porosität definiert werden kann bzw. dass die Porosität nicht ausschliesslich von der Mineralogie abhängt. Für die Ableitung von gut definierten Regressionskurven ist ausserdem die mineralogische Variabilität in der Formation zu gering.

7.3 "Brauner Dogger"

Der Datensatz ist dominiert von Messungen an Material der Bohrung Benken (Fig. 14). Eine Korrelation zwischen Porosität und Tonmineralgehalt ist höchstens schwach erkennbar.

7.4 Effinger Schichten

Eine Abhängigkeit der Porosität von der heutigen Teufe ist nicht erkennbar (Fig. 15). Fig. 16 zeigt hingegen eine gute Korrelation zwischen Porosität und Tonmineralgehalt, welche v.a. auf Daten der Bohrungen Oftringen und Gösgen basiert.

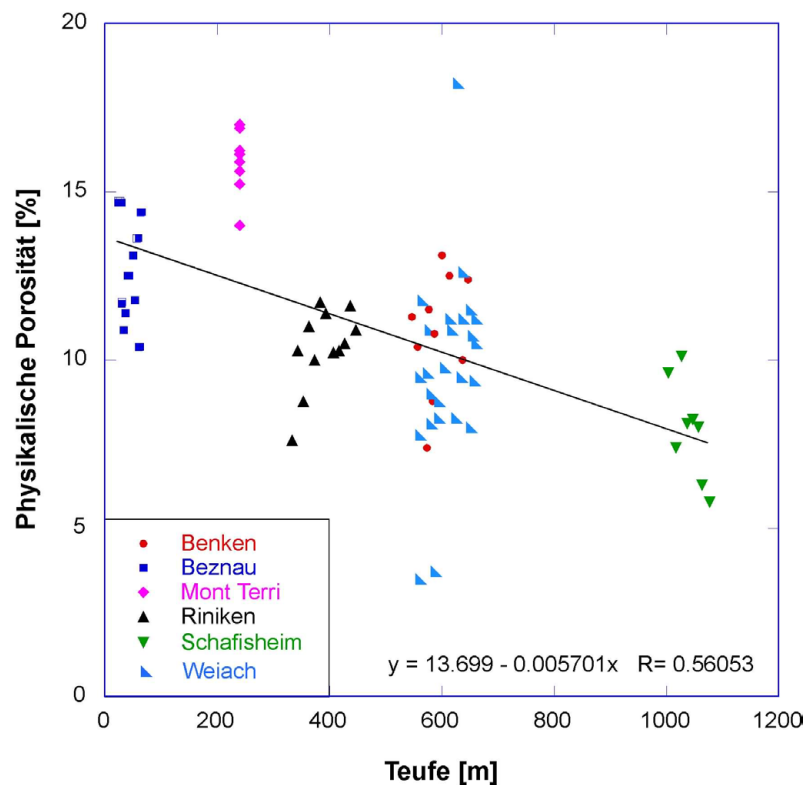


Fig. 12: Physikalische Porosität des Opalinustons als Funktion der heutigen Tiefenlage

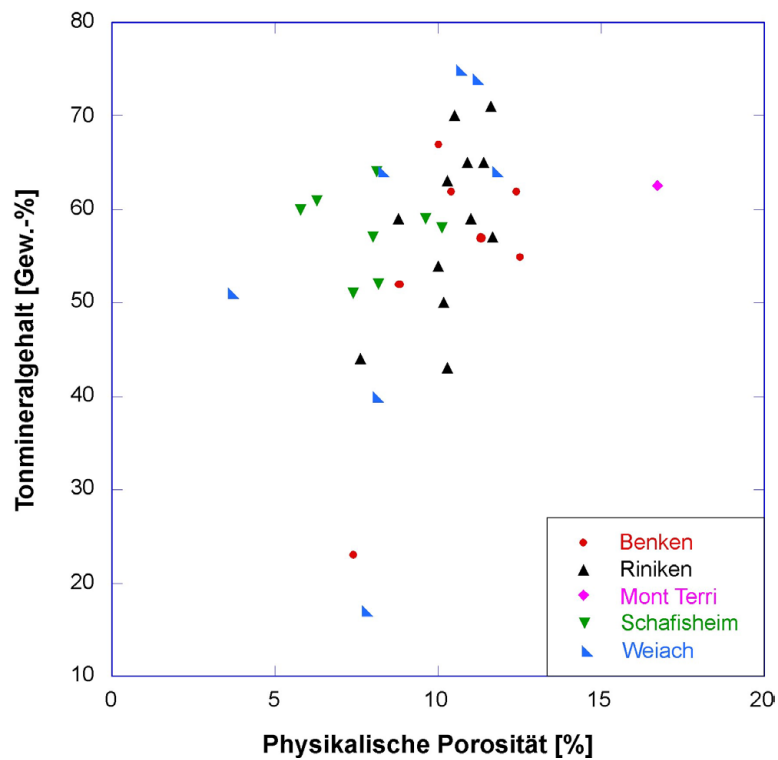


Fig. 13: Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und Tonmineralgehalt im Opalinuston

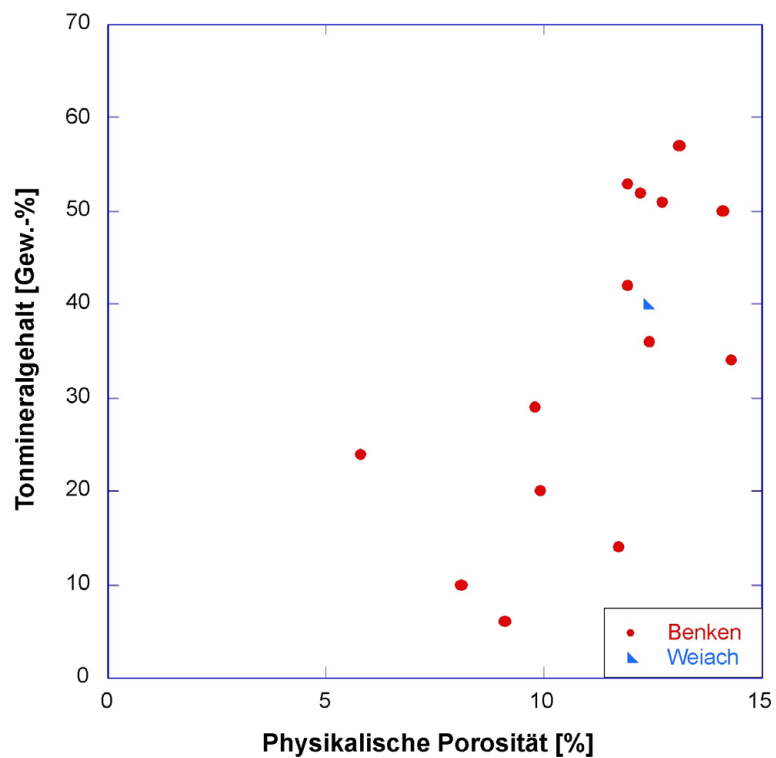


Fig. 14: Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und Tonmineralgehalt im "Braunen Dogger"

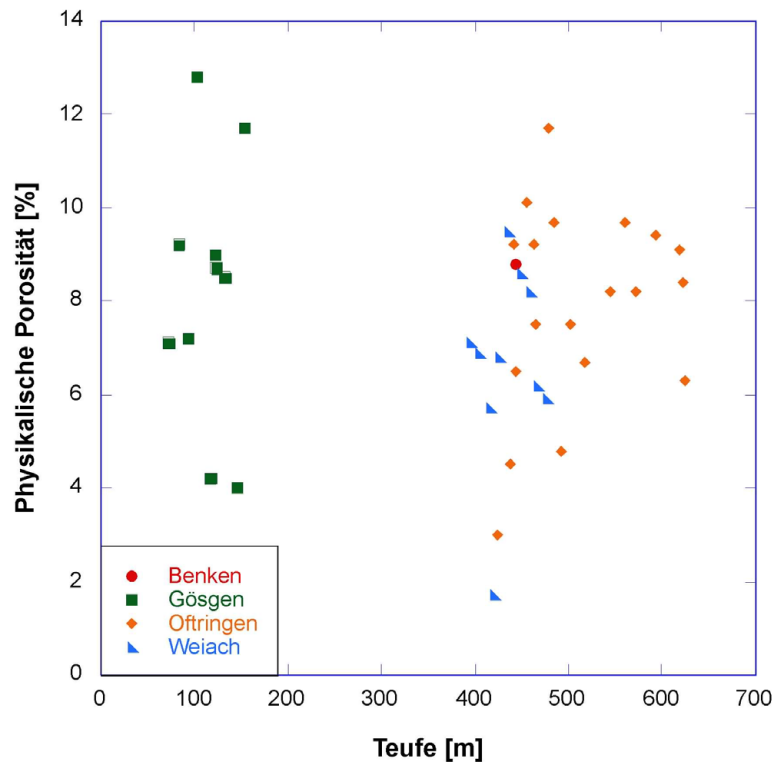


Fig. 15: Physikalische Porosität der Effinger Schichten als Funktion der heutigen Tiefenlage

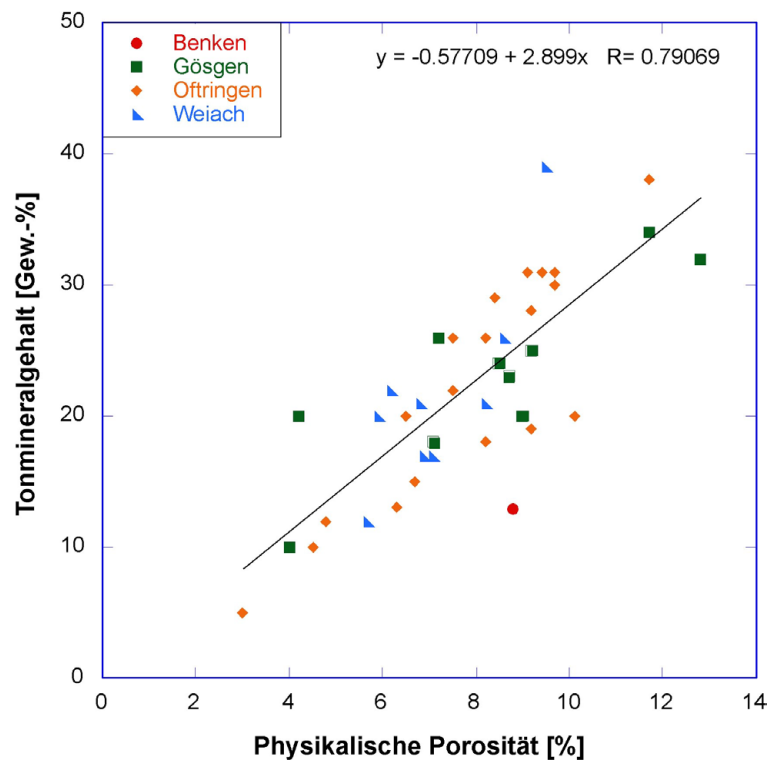


Fig. 16: Zusammenhang zwischen physikalischer Porosität und Tonmineralgehalt in den Effinger Schichten

8 Korrelation zwischen Mineralogie, Mineraloberflächen und Kationenaustausch-Kapazität in Opalinuston, "Braunem Dogger" und Effinger Schichten

8.1 Korrelation zwischen äusserer Oberfläche (BET) und Tonmineralgehalt

Die äussere Oberfläche wurde durch N₂-Adsorption (BET-Methode) gemessen. Im Gegensatz zu N₂ erfassen polare Moleküle wie Äthylen-Ethyl-Monoethyl-Äther (EGME) oder Glycerin auch die Zwischenschichten quellbarer Tonminerale, liefern also die Summe von äusserer und innerer Oberfläche.

Fig. 17 - 19 zeigen eine systematische Abhängigkeit der BET-Oberfläche von Tonmineralgehalt. Allerdings sind die Steigungen der Regressionsgeraden für Opalinuston und für die Effinger Schichten deutlich verschieden (für den "Braunen Dogger" kann auf der Basis von nur 2 Datenpunkten keine verlässliche Aussage gemacht werden). Der Grund liegt vermutlich in den verschiedenen Zusammensetzungen und/oder Korngrössen der Tonfraktion. Der relative Anteil von Illit/Smektit-Wechsellagerungen ist in den Effinger Schichten grösser als im Opalinuston, dementsprechend sind die Anteile von Kaolinit und Chlorit deutlich kleiner (Tab. 12). Fig. 20 zeigt eine gut definierte Abhängigkeit der äusseren Oberfläche vom Gehalt an Illit-Mineralen (Summe Illit + Illit/Smektit-Wechsellagerungen), wobei Opalinuston und Effinger Schichten nun auf derselben Trendlinie liegen. Daher wird vermutet, dass der Beitrag von Illit-Mineralen zur äusseren Oberfläche dominiert.

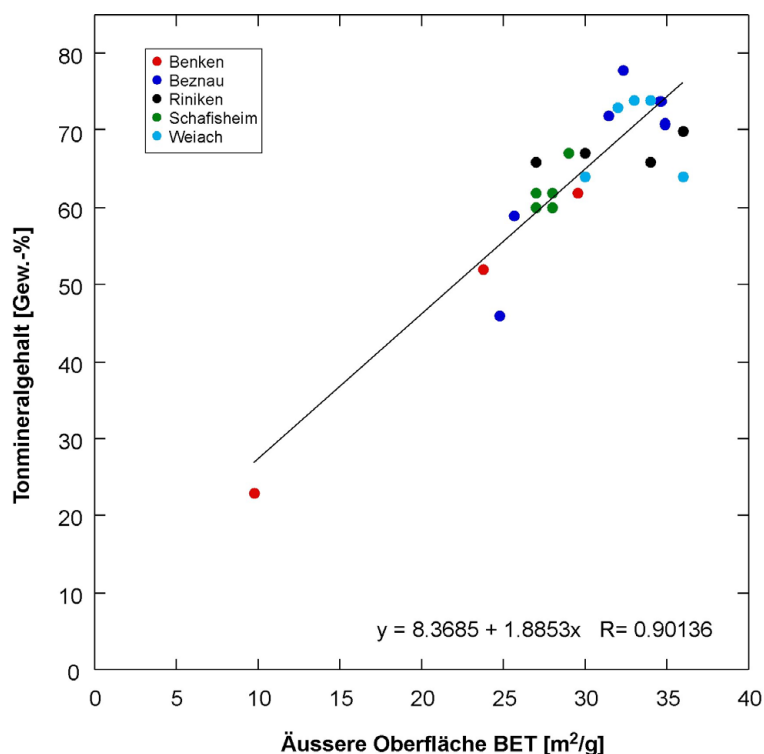


Fig. 17: Zusammenhang zwischen äusserer Oberfläche und Tonmineralgehalt im Opalinuston

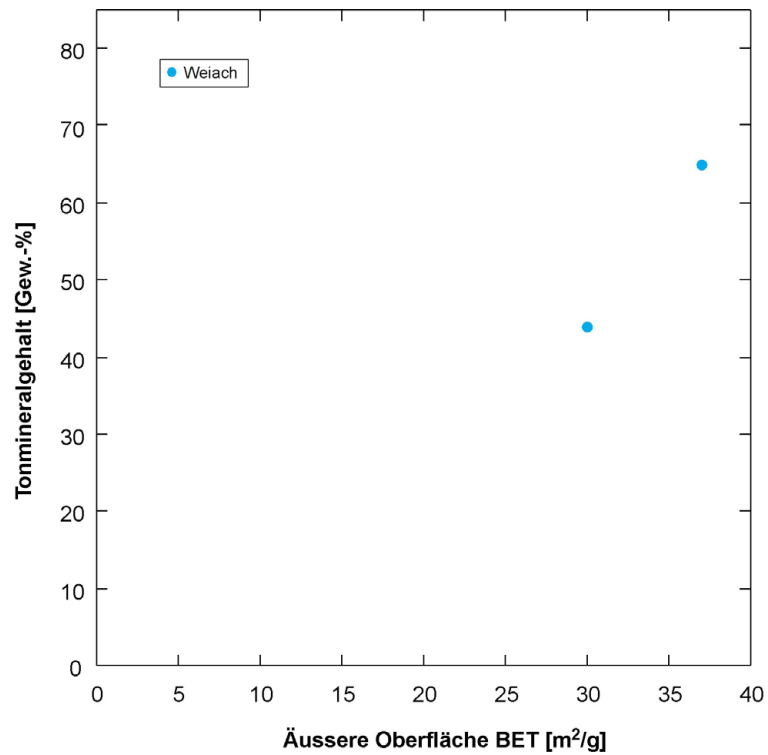


Fig. 18: Zusammenhang zwischen äusserer Oberfläche und Tonmineralgehalt im "Braunen Dogger"

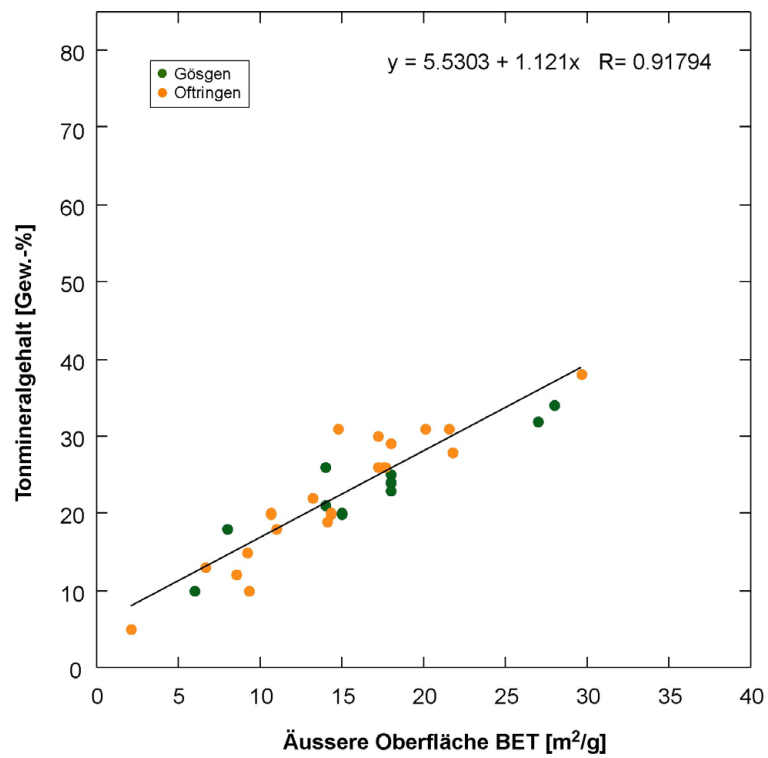


Fig. 19: Zusammenhang zwischen äusserer Oberfläche und Tonmineralgehalt in den Effinger Schichten

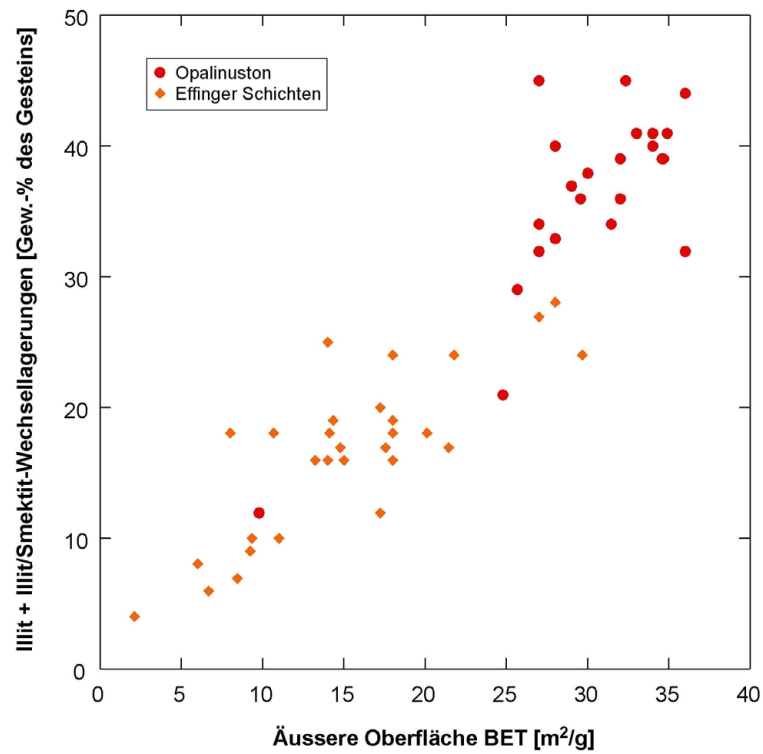


Fig. 20: Zusammenhang zwischen äusserer Oberfläche und dem Gehalt an Illit und Illit/Smektit-Wechsellagerungen in Opalinuston und Effinger Schichten

Tab. 12: Relative und absolute Gehalte an Tonmineralen im Opalinuston und in den Effinger Schichten

	Relative Anteile der Tonminerale (Gew.-% der Summe aller Tonminerale)				
	Illit	Illit/Smektit-WL	Smektit	Kaolinit	Chlorit
Opalinuston	39	17	0	31	13
Effinger Schichten	39	35	1	23	2
	Absolute Anteile der Tonminerale (Gew.-% des Gesteins)				
	Illit	Illit/Smektit-WL	Smektit	Kaolinit	Chlorit
Opalinuston	25	11	0	19	8
Effinger Schichten	10	8	0.3	6	1

Tabelliert sind Mittelwerte aller analysierten Proben (und nicht wie in Tab. 4 Mittelwerte der Mittel jeder Lokalität)

8.2 Korrelation zwischen totaler Oberfläche und Tonmineralgehalt

Fig. 21 - 22 zeigen die Abhängigkeit der totalen Oberfläche vom Tonmineralgehalt für Opalinuston und "Braunen Dogger" (für die Effinger Schichten bestehen keine Daten). Es besteht eine gewisse Korrelation, die aber aufgrund der Datenlage nicht gut zu definieren ist. Die Korrelation mit der Summe Illit + Illit/Smektit-Wechsellagerungen (nicht dargestellt) ist von ähnlicher Güte.

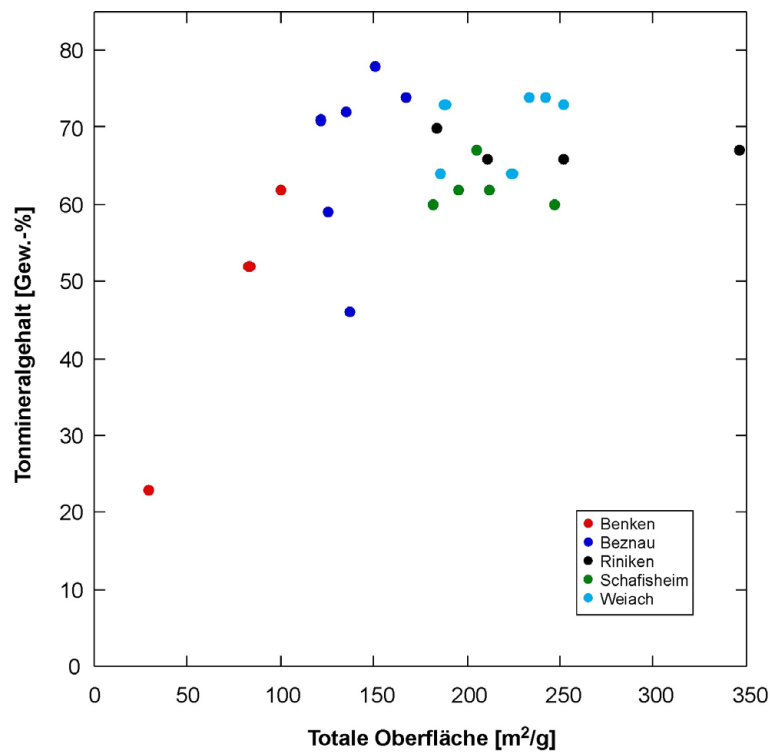


Fig. 21: Zusammenhang zwischen totaler Oberfläche und Tonmineralgehalt im Opalinuston

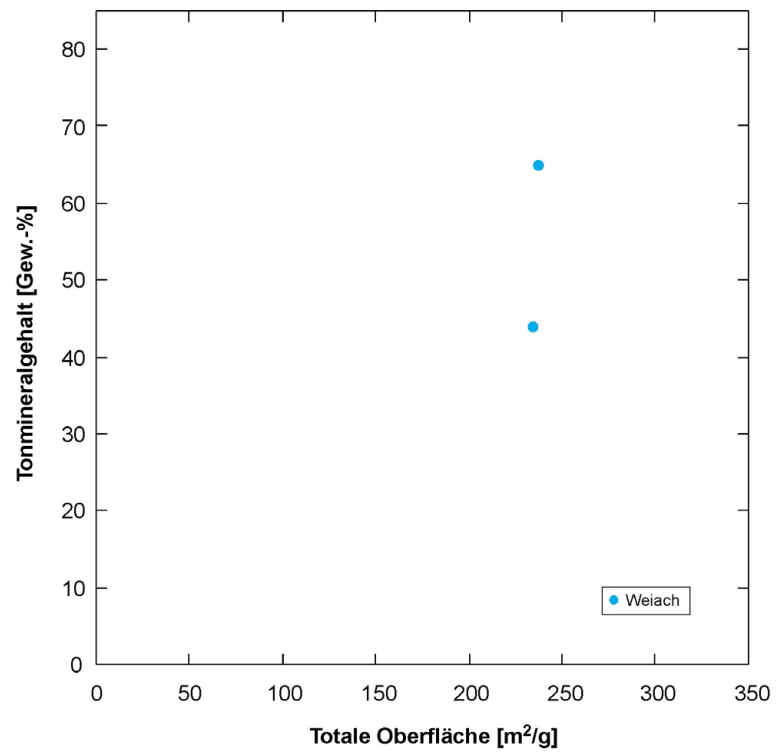


Fig. 22: Zusammenhang zwischen totaler Oberfläche und Tonmineralgehalt im "Braunen Dogger"

8.3 Korrelationen zwischen Kationenaustausch-Kapazität, Tonmineralgehalt und äusserer Oberfläche (BET)

Die Kationenaustausch-Kapazität wird, je nach Verfügbarkeit von Daten, durch die Summe der austauschbaren Kationen oder durch den Verbrauch des Index-Kations Ni repräsentiert. Erwartungsgemäss korreliert sie positiv mit dem Tonmineralgehalt (Fig. 23), und dasselbe gilt für die Korrelation mit der äusseren Oberfläche (Fig. 24).

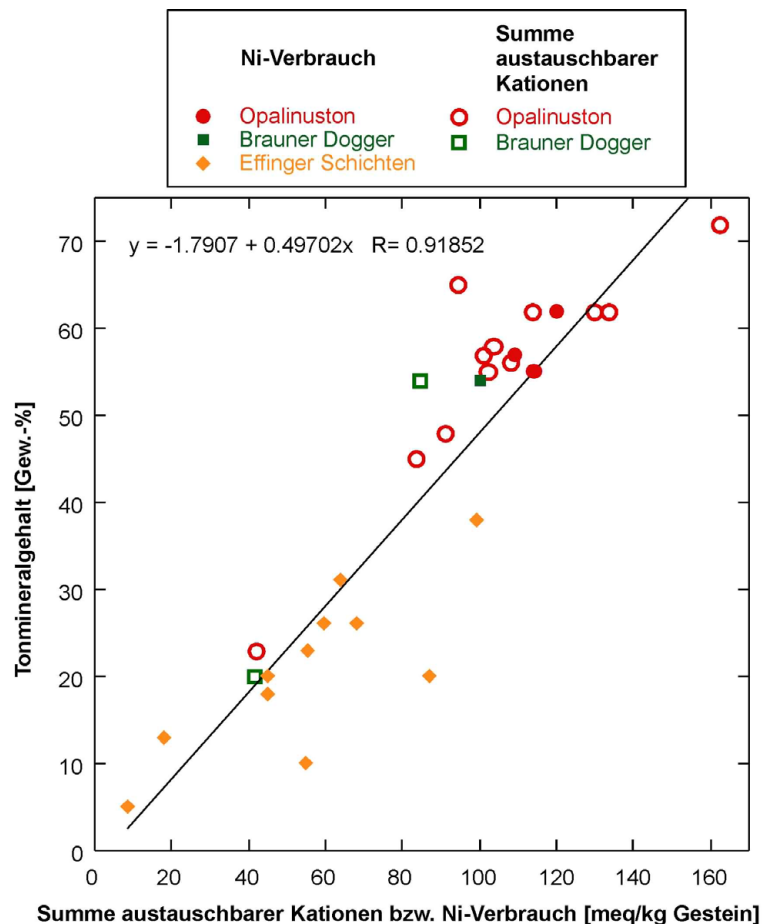


Fig. 23: Zusammenhang zwischen Kationenaustausch-Kapazität und Tonmineralgehalt in Opalinuston, "Braunem Dogger" und Effinger Schichten

Die lineare Regression berücksichtigt Kationenaustausch-Daten sowohl auf der Basis des Ni-Verbrauchs als auch der Summe der austauschbaren Kationen. Falls für dieselbe Probe Angaben für beide bestehen, wurde nur ersterer für die Regression berücksichtigt. Datenherkunft: Opalinuston - Benken und Mont Terri; Brauner Dogger - Benken; Effinger Schichten - Gösigen und Oftringen

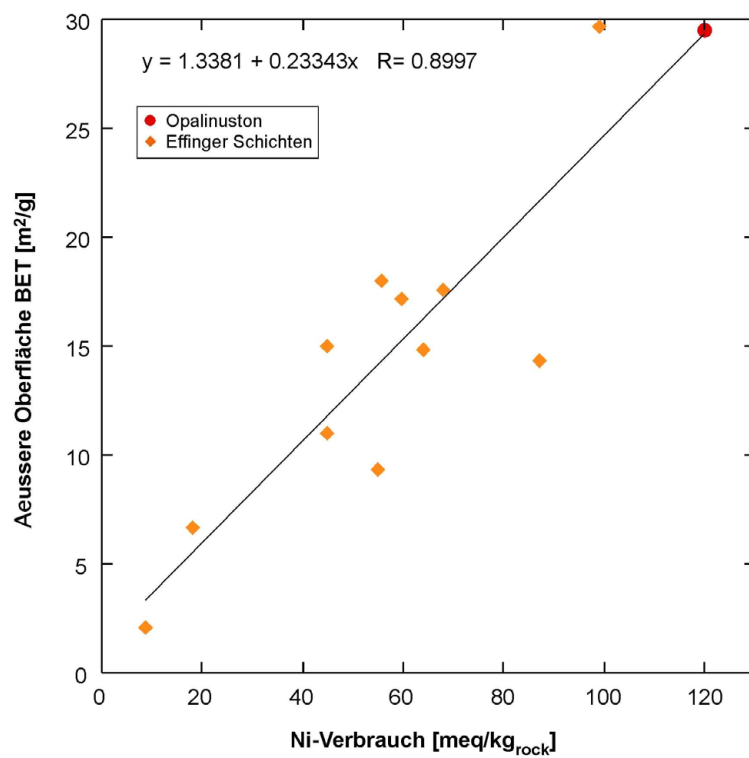


Fig. 24: Zusammenhang zwischen Ni-Verbrauch und äusserer Oberfläche in Opalinuston und Effinger Schichten

9 **Daten für helvetische Mergel des Wellenbergs⁶**

Der Datensatz für die relevanten Gesteinseinheiten des Wellenbergs wurde im Zeitraum 1991 - 1996 erhoben und verarbeitet. Angesichts dieser im Vergleich zu den für die Nordschweiz erhobenen Daten kurzen Zeitspanne ist die Datenbasis homogener. Die hier relevanten Daten wurden in Nagra (1997) sowie Mazurek *et al.* (1994) bereits in nachvollziehbarer Weise aufbereitet und dokumentiert, und seitdem sind keine neuen Daten hinzugekommen. Daher wird auf eine Neuberechnung der Mittelwerte aus der Datenbasis weitgehend verzichtet, und es werden direkt die Literaturdaten verwendet. Diese sind in Tab. 13 - 14 zusammengestellt.

⁶ Zum Wirtgestein 'helvetische Mergel' werden folgende Einheiten gezählt (Nagra 1997, Kap. 4.2): Palfris-Formation, Vitznau-Mergel, Globigerinenmergel, Schimberg-Schiefer und Interhelvetische Mélanges.

Tab. 13: Mineralogie der Palfris-Formation und der tertiären Mergel am Wellenberg (Mittelwerte aller Einzelanalysen): Zusammenfassung aller verfügbaren Daten (aus Nagra 1997, Kap. 4.3 sowie Mazurek *et al.* 1994)

Einheit	Mineralogie															
	Quarz [Gew. %]	Kalifeldspat [Gew. %]	Plagioklas [Gew. %]	Calcit [Gew. %]	Dolomit + Ankerit [Gew. %]	Siderit [Gew. %]	Anhydrit [Gew. %]	Gips [Gew. %]	Pyrit [Gew. %]	C(org) [Gew. %]	Illit [Gew. % des Gesteins]	11/Sm WL [Gew. % des Gesteins]	Smektit [Gew. % des Gesteins]	Kaolinit [Gew. % des Gesteins]	Chlorit [Gew. % des Gesteins]	Chl/Sm WL [Gew. % des Gesteins]
Palfris-Formation (repräsentativer Mittelwert)	15	1		39	9	0	0	0	1.4	0.7	14	12	0	0	8	0
Palfris-Formation Tonmergel, Mergel	16	1		32	10	0	0	0	1.5	0.7	16	14	0	1	9	0
Palfris-Formation Kalkmergel, Kalk	10	1		67	4	0	0	0	0.8	0.5	7	5	0	1	4	0
Palfris-Formation Fault gouge	15	1		35	7	0	0	0	0.9	0.7	14	12	1	3	11	0
Vitznau-Mergel	17	2		58	5	0	0	0	1.1	0.7	6	6	0	1	4	0
Globigerinenmergel & Schimberg-Schiefer	24	1		40	2	0	0	0	0.6	0.5	11	12	0	0	9	0
Interhelvetische Mélanges	28	2		25	4	0	0	0	0.7	0.5	14	12	0	0	13	0
Alle Proben aus Wirtgesteins-Einheiten	16	1		45	7	0	0	0	1.1	0.6	12	10	0	0	7	0

Die Daten beziehen sich auf nicht oder schwach deformiertes Gestein (mit Ausnahme der Angaben für Fault gouges)

Tab. 14: Dichte, Porosität, Kationenaustausch-Eigenschaften und Oberfläche der Palfris-Formation und der tertiären Mergel am Wellenberg: Zusammenfassung aller verfügbaren Daten

Einheit		Dichten und Porositäten		Kationen-Austausch							Oberflächen
		Gesteinsdichte trocken [g/cm ³]	Hg-Injektions-Porosität [%]	K (Ni-en) [meq/kg rock]	Na (Ni-en) [meq/kg rock]	Mg (Ni-en) [meq/kg rock]	Ca (Ni-en) [meq/kg rock]	Sr (Ni-en) [meq/kg rock]	Summe Kationen (Ni-en) [meq/kg rock]	Ni-Verbrauch (Ni-en) [meq/kg rock]	Äussere Oberfläche BET [m ² /g]
Palfris-Formation und Vitznau-Mergel (repräsentativer Mittelwert)	Mittelwert aller Einzelanalysen	2.68	1.4							34.3	6.1
	1 sigma	0.04	1.2							19.4	2.6
	Minimalwert (Einzelanalyse)									4.6	2.0
	Maximalwert (Einzelanalyse)									59.7	11.5
	Anzahl Einzelanalysen			0	0	0	0	0	0	13	13
	Datenherkunft	Alle Bohrungen								SB1, SB3	SB1, SB3
	Referenz	Nagra (1997, Tab. 4.3-2)		Mazurek et al. (1994, Tab. 13-2)							
Palfris-Formation Tonmergel, Mergel	Mittelwert aller Einzelanalysen	2.69	2.9							48.5	7.5
	1 sigma	0.02	1.0							8.9	2.2
	Minimalwert (Einzelanalyse)									37.5	5.1
	Maximalwert (Einzelanalyse)									59.7	11.5
	Anzahl Einzelanalysen			0	0	0	0	0	0	7	7
	Datenherkunft	Alle Bohrungen								SB1, SB3	SB1, SB3
	Referenz	Nagra (1997, Tab. 4.3-2)		Mazurek et al. (1994, Tab. 13-2)							
Palfris-Formation Kalkmergel, Kalk	Mittelwert aller Einzelanalysen	2.67	0.9							17.7	4.5
	1 sigma	0.03	0.7							13.8	2.0
	Minimalwert (Einzelanalyse)									4.6	2.0
	Maximalwert (Einzelanalyse)									37.8	7.0
	Anzahl Einzelanalysen			0	0	0	0	0	0	6	6
	Datenherkunft	Alle Bohrungen								SB1, SB3	SB1, SB3
	Referenz	Nagra (1997, Tab. 4.3-2)		Mazurek et al. (1994, Tab. 13-2)							
Palfris-Formation Fault gouge	Mittelwert aller Einzelanalysen	2.10	10.0							55.6	9.0
	1 sigma	0.32	5.0							9.6	3.3
	Minimalwert (Einzelanalyse)									48.2	4.6
	Maximalwert (Einzelanalyse)									71.8	12.3
	Anzahl Einzelanalysen			0	0	0	0	0	0	5	5
	Datenherkunft	Alle Bohrungen								SB1, SB3	SB1, SB3
	Referenz	Nagra (1997, Tab. 4.3-2)		Mazurek et al. (1994, Tab. 13-2)							
Globigerinenmergel & Schimberg-Schiefer	Mittelwert aller Einzelanalysen	2.69	1.3								
	1 sigma	0.03	0.8								
	Anzahl Einzelanalysen			0	0	0	0	0	0	0	0
	Datenherkunft	Alle Bohrungen									
Interhelvetische Mélanges	Mittelwert aller Einzelanalysen	2.66	0.8								
	1 sigma	0.04	0.4								
	Anzahl Einzelanalysen	4	4	0	0	0	0	0	0	0	0
	Datenherkunft	SB1									
Alle Proben aus Wirtgesteins-Einheiten	Mittelwert aller Einzelanalysen	2.68	1.4							34.3	6.1
	1 sigma	0.03	1.1							19.4	2.6
	Anzahl Einzelanalysen	54	52	0	0	0	0	0	0	13	13
	Datenherkunft	Alle Bohrungen								SB1, SB3	SB1, SB3
	Referenz	Mazurek et al. (1994)		Mazurek et al. (1994, Tab. 13-2)							

Dichten und Porositäten beziehen sich auf spröde undeformierte Proben (mit Ausnahme der Angaben für Fault gouges). Kationenaustausch- und Oberflächendaten beinhalten angesichts der geringen Anzahl Proben alle Deformationsgrade (ausser Fault gouges, welche separat angegeben werden)

Literatur

- Albert, W. 2011. Analyse des Tonmineralgehalts im Mesozoikum anhand von Bohrlochmessungen. Nagra Arbeitsbericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Albert, W. & Bläsi, H.R. 2008. NOK EWS-Bohrung Oftringen: Geologische, mineralogische und bohrlochgeophysikalische Untersuchungen (Rohdatenbericht). Nagra Arbeitsbericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Baeyens, B. & Bradbury, M. H. 1994. Physico-chemical characterisation and calculated in situ porewater chemistries for a low permeability Palfris marl sample from Wellenberg. Nagra Technischer Bericht NTB 94-22, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Bläsi, H.R., Peters, T. & Mazurek, M. 1991. Der Opalinus-Ton des Mt. Terri (Kanton Jura): Lithologie, Mineralogie und physiko-chemische Gesteinsparameter. Nagra Interner Bericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Franz, M. & Nitsch, E. 2009. Zur lithostratigraphischen Gliederung des Aalenium in Baden-Württemberg. LGRB-Informationen 22, 123 – 146, Freiburg i. Br.
- Füchtbauer, H. 1988. Sedimente und Sedimentgesteine. Schweizerbart Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, 1141 p.
- Gaucher, E., Cailleau, A. & Griffault, L. 2001. Specific determination of ion exchange constants: the Opalinus Clay example. *In*: Cidu, R. (Ed.): Water-Rock Interaction: Proc. 10th Internat. Symp. Water-Rock Interaction – WRI-10, Villasimius, Italy, Balkema, Lisse, The Netherlands, 1331-1334
- Hobbs, M.Y., De Haller, A., Mäder, U., Meier, D. & Koroleva, M. 2010. Borehole DGR-3 and DGR-4 porewater investigations. Intera Technical Report, Intera, Ottawa, Canada
- Langer, V. W., Bläsi, H.R., Mazurek, M. & Waber, H.N. 2001. Sondierbohrung Benken: Geological and mineralogical investigations. Nagra Interner Bericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Mäder, U. 2009a. Reference pore water for the Effingen Member (Standortregion Südjura) for the provisional safety-analysis in the framework of sectoral plan - interim results (SGT-ZE). Nagra Arbeitsbericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Mäder, U. 2009b. Reference pore water for the Opalinus Clay and "Brown Dogger" for the provisional safety-analysis in the framework of sectoral plan - interim results (SGT-ZE). Nagra Arbeitsbericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Mäder, U. 2009c. Reference pore water for the Helvetic marls for the provisional safety-analysis in the framework of sectoral plan - interim results (SGT-ZE). Nagra Arbeitsbericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Matter, A., Peters, T., Isenschmid, C., Bläsi, H.R. & Ziegler, H.J. 1987. Sondierbohrung Riniken – Geologie. Nagra Technischer Bericht NTB 86-02, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Matter, A., Peters, T., Bläsi, H.R., Meyer, J., Ischi, H. & Meyer, C. 1988a. Sondierbohrung Weiach – Geologie. Nagra Technischer Bericht NTB 86-01, Nagra, Wettingen, Schweiz

- Matter, A., Peters, T., Bläsi, H.R., Weiss, H.P. & Schenker, F. 1988b. Sondierbohrung Schafisheim – Geologie. Nagra Technischer Bericht NTB 86-03, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Mazurek, M., Meier, D. & Müller, H. 2010. WS-H experiment: Geological, petrophysical and geochemical characterisation of drillcores from borehole BHG-B11. Mont Terri Technical note
- Mazurek, M., Waber, H.N. & Bläsi, H.R. 1994. Geology, mineralogy and geochemistry of the Wellenberg. Nagra Interner Bericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Mazurek, M., Hurford, A.J. & Leu, W. 2006. Unravelling the multi-stage burial history of the Swiss Molasse Basin: Integration of apatite fission track, vitrinite reflectance and biomarker isomerisation analysis. Basin Research 18, 27-50
- Meier, D. & Mazurek, M. 2011. Ancillary rock and pore-water studies on drillcores from northern Switzerland. Nagra Arbeitsbericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Nagra 1992. Sondierbohrung Siblingen – Untersuchungsbericht. Nagra Technischer Bericht NTB 90-34, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Nagra 1997. Geosynthese Wellenberg 1996 - Ergebnisse der Untersuchungsphasen I und II. Nagra Technischer Bericht NTB 96-01, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Nagra 2002. Projekt Opalinuston – Synthese der geowissenschaftlichen Untersuchungsergebnisse. Entsorgungsnachweis für abgebrannte Brennelemente, verglaste hochaktive sowie langlebige mittelaktive Abfälle. Nagra Technischer Bericht NTB 02-03, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Nagra 2008. Vorschlag geologischer Standortgebiete für das SMA- und das HAA-Lager – Geologische Grundlagen. Nagra Technischer Bericht NTB 08-04, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Pearson, F.J., Arcos, D., Bath, A., Boisson, J.-Y., Fernández, A.M., Gäbler, H.E., Gaucher, E., Gautschi, A., Griffault, L., Hernan, P. & Waber, H.N. 2003. Geochemistry of water in the Opalinus Clay formation at the Mont Terri Rock Laboratory – Synthesis Report. Bern, Switzerland, Berichte des Bundesamtes für Geologie und Wasser – Serie Geologie, Nr. 5
- Peters, T. & Matter, A. 1981. Sedimentologische, mineralogische und geochemische Untersuchungen an Bohrkernen der Bohrung Nr. 7904 der NOK beim KKW Beznau. Nagra Interner Bericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Peters, T., Matter, A., Bläsi, H.R. & Gautschi, A. 1986: Sondierbohrung Böttstein - Geologie. Nagra Technischer Bericht NTB 85-02, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Peters, T., Matter, A., Meyer, J., Isenschmid, C. & Ziegler, H.J. 1989a: Sondierbohrung Kaisten - Geologie. Nagra Technischer Bericht NTB 86-04, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Peters, T., Matter, A., Bläsi, H.R., Isenschmid, C., Kleboth, P., Meyer, C. & Meyer, J. 1989b: Sondierbohrung Leuggern - Geologie. Nagra Technischer Bericht NTB 86-05, Nagra, Wettingen, Schweiz

- Waber, H.N. (ed.) 2008. Borehole Oftringen: Mineralogy, porosimetry, geochemistry, pore water chemistry. Nagra Arbeitsbericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Waber H.N., Pearson F.J., Hobbs M.Y., Oyama T. 2003. Sondierbohrung Benken: Characterisation of pore water from argillaceous rocks. Nagra Internr Bericht, Nagra, Wettingen, Schweiz
- Waber, H. N., Mäder, U., Mazurek, M. & Koroleva, M. 2011. Borehole Gösgen: Mineralogy, porosimetry, pore water chemistry. Nagra Arbeitsbericht, Nagra, Wettingen, Switzerland