

Inhaltsverzeichnis

1.	EINLEITUNG	1
1.1	Zielsetzung	2
2.	GEOLOGISCHER RAHMEN UND PROBENNAHME	5
2.1	Das Westkanadische Sedimentbecken	5
2.1.1	Die Duvernay Formation	7
2.1.2	Postdevonische Entwicklung	9
2.1.3	Probennahme	12
2.2	Das Niedersächsische Becken	14
2.2.1	Der Posidonienschiefer	17
2.2.2	Probennahme	18
3.	UNTERSUCHUNGSMETHODEN	21
3.1	„Screening“-Analysen	22
3.2	Natürlich gereiftes Probenmaterial	23
3.3	Künstliche Reifung organischen Materials	30
4.	CHARAKTERISIERUNG DES ORGANISCHEN MATERIALS	33
4.1	Zuordnung der thermischen Reife	33
4.2	Organischer und karbonatischer Kohlenstoff	37
4.3	Gesamt-Kerogen-Klassifikation	39
4.3.1	Organische Petrologie	41
4.4	Molekulare Kerogen-Charakterisierung (Pyrolyse-GC)	42
4.5	Natürliche Geneseprodukte in Muttergesteinen	49
4.5.1	Thermische Muttergesteinsextrakte	49
4.5.2	Thermische Rohölextrakte	55
4.5.3	Lösliches organisches Material in Muttergesteinen	59
4.5.4	Zusammensetzung der Rohölen	72
5.	VORHERSAGE DER KOHLENWASSERSTOFFGENESE	77
5.1	Simulation der Gesamt-KW-Genese durch Pyrolyse im offenen System	80
5.1.1	Produktgenese aus natürlicher Reifesequenz	82
5.1.2	Kinetische Auswertung und Extrapolation auf geologische Heizraten	84
5.1.3	Berücksichtigung der molekularen Zusammensetzung	90
5.2	Veränderung der Produktzusammensetzung während der simulierten Reifung	93
5.2.1	Kohlenwasserstoffgenese unter künstlichen Bedingungen (MSSV-Pyrolyse)	93

5.2.2	Abgrenzung primärer und sekundärer Geneseprozesse	102
5.2.3	Chromatographisch nicht-erfaßbare Geneseprodukte	107
5.2.4	Quantifizierung primärer und sekundärer Bildung von Stoffgruppen	121
5.3	Kinetik der Produktzusammensetzung	129
5.3.1	Kinetik der Bildung von Gas und Öl in Muttergesteinen	129
5.3.2	Öl- und Gasgenese unter geologischen Bedingungen	137
5.3.2.1	Primäre KW-Genese aus der Duvernay Formation	137
5.3.2.2	Primäre KW-Genese aus dem Posidonienschiefer	139
5.3.2.3	Gasbildung aus überreifen Muttergesteinen	140
5.4	Labor vs. Natur - molekulare Zusammensetzung der Geneseprodukte	145
5.4.1	Heizratenabhängigkeit der Erdölzusammensetzung	145
5.4.2	Komponentenspezifische Isotopenzusammensetzung	163
5.4.3	Massenbilanzierung zur Abschätzung der Produktzusammensetzung	173
5.4.3.1	Zuordnung des Genesefortschrittes und Quantifizierung der Geneseprodukte	175
5.4.3.2	Quantitativer Vergleich natürlicher und künstlicher Geneseprozesse	181
5.5	Phasenverhalten	187
5.5.1	Hintergrund	188
5.5.2	Charakterisierung der künstlichen Produkte	192
5.5.3	Phasenverhalten künstlicher Geneseprodukte	201
5.5.4	P-T-Einfluß auf Produktzusammensetzung	206
6.	SCHLUBFOLGERUNGEN	211
7.	LITERATURVERZEICHNIS	215
	APPENDIX	