

GEOCHEMICKÁ CHARAKTERISTIKA PROCESŮ A MINERALOGICKÝCH ZMĚN MIOCENNÍCH PÍSKOVců VÍDEŇSKÉ PÁNVE PŘI SIMULOVANÉM UKLÁDÁNÍ CO₂: PŘÍPADOVÉ STUDIE LOKALIT BRODSKÉ A DOLNÍ BOJANOVICE

GEOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF PROCESSES AND MINERALOGICAL CHANGES IN MIOCENE SANDSTONES OF THE VIENNA BASIN DURING SIMULATED CO₂ STORAGE: CASE STUDIES OF THE BRODSKÉ AND DOLNÍ BOJANOVICE SITES

Martina Molková¹, Monika Ličbinská¹

¹ *Katedra geologického inženýrství, Hornicko-geologická fakulta, Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, Ostrava, 708 00, e-mail: martina.molkova@vsb.cz (M. Molková), monika.licbinska@vsb.cz (M. Ličbinská)*

Abstrakt: Předložený příspěvek srovnává dvě studie zaměřené na laboratorní experimenty injektáže CO₂ do miocenních pískovců Labského horizontu ve Vídeňské pánvi na lokalitách Brodské a Dolní Bojanovice. Obě studie využívají vzorky hornin z vytěžených ložisek uhlovodíků a simulují podmínky hlubinného úložiště. Zatímco u lokality Dolní Bojanovice jsou výsledky založeny na laboratorních experimentech, u lokality Brodské je aplikován integrovaný přístup laboratorních experimentů a geochemického modelování. Termodynamické podmínky v reakční komoře byly pro každou lokalitu nastaveny individuálně tak, aby odpovídaly specifickým podmínkám daného rezervoáru a zároveň zajistily nadkritický stav CO₂. Zásadní rozdíl spočívá v použitém reakčním roztoku, který definuje odlišné geochemické scénáře interakce hornina–voda–plyn. Zatímco studie lokality Brodské pracuje s ložiskovou vodou (solankou), která je v chemické rovnováze s původním prostředím, demineralizovaná voda použita u studie v Dolních Bojanovicích vytváří prostředí s vysokým reakčním potenciálem, které vede k mnohem rychlejšímu a výraznějšímu mineralogickému přeměně. Hlavní shoda obou studií spočívá v pozorovaném rozpouštění draselných živců a plagioklasů, stejně jako v probíhající rekrystalizaci dolomitu. Klíčové rozdíly se naopak projevují v dynamice jílových minerálů a kalcitového tmelu. Zatímco u lokality Dolní Bojanovice dochází k jejich rozpouštění, pro lokalitu Brodské geochemický model predikuje srážení sekundárních jílových minerálů. Tento modelový předpoklad však nebyl v případě kaolinitu experimentálně potvrzen rentgenovou difrakční analýzou. V obou případech tyto procesy vedou k počátečnímu zvýšení pórovitosti a následnému strukturnímu rozvolnění horniny, což je u demineralizované vody doprovázeno výraznou korozí a zaoblováním zrn. Srovnání potvrzuje, že volba reakčního roztoku zásadně mění kinetiku geochemických procesů, především mineralogických změn a typů výsledných sekundárních fází, což je rozhodující pro hodnocení dlouhodobé stability a sekvestrační kapacity úložišť v rámci Vídeňské pánve.

Abstract: The presented paper compares two studies focusing on laboratory experiments involving the injection of CO₂ into Miocene sandstones of the Elbe Horizon in the Vienna Basin at the Brodské and Dolní Bojanovice sites. Both studies use rock samples from depleted hydrocarbon reservoirs and simulate deep geological storage. While the results for the Dolní Bojanovice site are based on laboratory experiments, an integrated approach of laboratory experiments and geochemical modeling is applied to the Brodské site. Thermodynamic conditions in the reaction chamber were set individually for each locality to correspond to the specific conditions of the given reservoir while ensuring a supercritical state of CO₂. A key difference lies in the reaction solution used, which defines different geochemical scenarios of rock-water-gas interaction.

While the study of the Brodské site uses reservoir water (brine), which is in chemical equilibrium with the original environment, the demineralized water used in the Dolní Bojanovice study creates an environment with high reaction potential, leading to much faster and more pronounced mineralogical changes. The main similarity between the two studies lies in the observed dissolution of potassium feldspars and plagioclases, as well as the ongoing recrystallization of dolomite. Conversely, key differences manifest in the dynamics of clay minerals and calcite cement. While dissolution of these phases occurs at the Dolní Bojanovice site, the geochemical model for the Brodské site predicts the precipitation of secondary clay minerals. However, in the case of kaolinite, this model prediction was not experimentally confirmed by X-ray diffraction analysis. In both cases, these processes lead to an initial increase in porosity and subsequent structural loosening of the rock, which, in the case of demineralized water, is accompanied by significant corrosion and grain rounding. The comparison confirms that the choice of reaction solution significantly alters the kinetics of geochemical processes, particularly mineralogical changes and the types of resulting secondary phases, which is crucial for assessing the long-term stability and sequestration capacity of storage sites within the Vienna Basin.

Klíčová slova: reakční komora, interakce hornina–voda–CO₂, pískovcový rezervoár, Labský horizont, vstřikování CO₂.

Key words: reaction chamber, rock-water-CO₂ interactions, sandstone reservoir, Elbe horizon, CO₂ injection.

1. Úvod

Geologické ukládání oxidu uhličitého (CCS – Carbon Capture and Storage) představuje v současnosti jednu z klíčových technologických strategií pro globální i národní zmírňování dopadů klimatických změn a efektivní snižování emisí skleníkových plynů z průmyslových zdrojů (Gaus, 2010; Izeg et al., 2008). V České republice je tomuto tématu věnována dlouhodobá a systematická pozornost. Domácí výzkum se zaměřuje především na identifikaci a charakteristiku vhodných hlubinných geologických struktur, které vykazují vysoký potenciál pro bezpečné uložení CO₂. Mezi nejperspektivnější oblasti v rámci ČR patří vytěžená ložiska uhlovodíků v jihovýchodní části republiky. Klíčovou rolí zde hraje sedimentární výplň české části vídeňské pánve, která disponuje jak vhodnými porézními rezervoáry, tak spolehlivými nepropustnými nadložními formacemi.

Zásadním okamžikem v hodnocení geologického ukládání v tuzemských podmínkách byl česko-norský výzkumný projekt REPP-CO₂. V rámci něho byly zformovány první komplexní metodické postupy a vytvořeny predikční geochemické modely, které položily teoretický základ pro studium interakcí v systému hornina-voda-CO₂. Na tyto úspěšné aktivity následně přímo navázal projekt CO₂-SPICER, jehož ambicí bylo posunout výzkum blíže k realizaci reálného pilotního vtláčení oxidu uhličitého do vytěženého ropného ložiska (Bujok et al, 2015).

Při injektáži CO₂ do hlubinných struktur se spouští řada komplexních, vzájemně propojených fyzikálně-chemických procesů. Z hlediska dlouhodobé bezpečnosti je nejžádanějším mechanismem tzv. minerální zachycování (mineral trapping). Tento proces spočívá v tom, že oxid uhličitý rozpuštěný v ložiskové vodě reaguje s primárními horninotvornými minerály, stimuluje jejich rozpouštění a následně vede k vysrážení nových sekundárních karbonátových fází, čímž se plyn permanentně fixuje v pevném stavu (Saeedi et al. 2011; Sayegh et al. 1990). Přesná predikce těchto dějů se však neobejde bez neustálého porovnávání teoretických modelů s reálnými daty. Tato studie proto geochemicky charakterizuje miocenní pískovce vídeňské pánve a porovnává dosavadní modelové výstupy a krátkodobé laboratorní experimenty z lokality Brodské s novými, navazujícími výsledky laboratorních experimentů z lokality Dolní Bojanovice, které trvaly od 14 do 180 dnů.

2. Geologická charakteristika lokalit a termodynamické podmínky

Zájmovou oblastí prezentovaného výzkumu je sedimentární struktura Vídeňské pánve, která z geologického i ložiskového hlediska představuje jednu z nejperspektivnějších oblastí pro podzemní uskladňování oxidu uhličitého. Cílovou stratigrafickou jednotkou pro obě případové studie – Brodské i Dolní Bojanovice – je miocenní Labský horizont. Stratigraficky spadá tato formace do období neogénu a vyznačuje se specifickým střídáním propustných pískovcových kolektorů a nepropustných pelitických izolátorů v nadloží, jež fungují jako přirozená strukturní past (Nehyba, 2015).

Z litologického hlediska se jedná o středně až jemně zrnité pískovce s variabilním podílem prachové a jílové příměsi, které vykazují dostatečnou primární pórovitost i propustnost. Vzorky zkoumaných hornin pocházejí v obou případech z hlubinných rezervoárů ležících v hloubkách přesahujících 1 000 metrů. Vzorky hornin z lokality Brodské byly odebrány z vrtu Br-52 (z hloubky přibližně 1 150 m), zatímco vzorky pro případovou studii z lokality Dolní Bojanovice pocházejí z vrtu P-106 (z hloubky kolem 1 660 m) (Mendoza et al., 2015; Ličbinská et al, 2023; Molková et al., 2025). Takto hluboké uložení je pro účely ukládání CO₂ naprosto klíčové. Zajišťuje totiž specifické termodynamické podmínky překračující kritický bod oxidu uhličitého, což zaručuje, že injektovaný plyn bude v pórovém prostředí pískovců přítomen výhradně v superkritickém stavu. Superkritický CO₂ se vyznačuje vyšší hustotou a nižší viskozitou, což umožňuje efektivnější využití pórového prostoru a výrazně minimalizuje riziko jeho zpětné migrace k povrchu.

I přes litologickou a stratigrafickou příbuznost pískovců Labského horizontu byly simulace pro jednotlivé lokality nastaveny tak, aby reflektovaly odlišné hloubkové uložení obou vrtů a s ním spojené specifické termodynamické podmínky:

- Lokalita Brodské (vrt Br-52) - termodynamické podmínky odpovídající hloubce 1 150 m byly v rámci laboratorních experimentů nastaveny na teplotu 43 °C a tlak 116 bar.
- Lokalita Dolní Bojanovice (vrt P-106) – laboratorní experimenty v reakční komoře probíhaly při teplotě 53 °C a tlaku 160 bar. Tyto vyšší hodnoty odpovídají reálným podmínkám hlubšího uložení rezervoáru na této lokalitě a umožňují sledovat kinetiku geochemických a mineralogických reakcí za zvýšené energetické bilance systému (Mendoza et al., 2015; Ličbinská et al, 2023; Molková et al., 2025).

Ačkoliv jsou obě zkoumané lokality geograficky oddělené, vykazují díky příslušnosti ke stejnému geologickému horizontu značnou strukturní, mineralogickou i sedimentární příbuznost. Tato skutečnost poskytuje ideální základ pro bezprostřední srovnání vlivu různých injektážních podmínek na obdobný typ horniny.

3. Metodika

Metodické přístupy u obou hodnocených lokalit vykazují zásadní odlišnosti, které primárně vyplývají z odlišného zaměření obou studií. Výzkum lokality Brodské představuje integrovaný přístup, který kombinuje laboratorní experimenty v trvání 60 dnů s geochemickým modelováním. Výzkum lokality Dolní Bojanovice je zaměřen na detailní laboratorní experimenty v reakční komoře s délkou trvání v rozmezí 14 až 180 dnů.

3.1 Lokalita Brodské

Pro účely laboratorních experimentů a následně i geochemického modelování interakcí plyn-roztok-hornina na lokalitě Brodské byla jako výchozí roztok zvolena syntetická solanka, jejíž chemické složení přesně odpovídalo původní formační vodě v rezervoáru odebrané z vrtu Br-45. Laboratorní experimenty probíhaly v aparatuře pro statické měření v ÚJV Řež, a.s.. Experimentální sestava sestávala ze dvou vertikálně orientovaných autoklávů, v nichž byly vzorky horniny umístěny ve dvou úrovních v ampulích nasycených syntetickou solankou. Dno tlakové nádoby bylo vybaveno fritou zalitou roztokem solanky, připravené dle chemického složení vod z vrtu Br-45. Systém byl vybaven kontinuálním měřením tlaku a regulací teploty. Po vstříknutí CO₂ byly v aparatuře udržovány podmínky 116 bar a 43 °C, čímž bylo zajištěno dosažení nadkritického stavu CO₂. Experiment probíhal ve statickém režimu po dobu 60 dnů s minimální potřebou dotlačování systému (Mendoza et al., 2015). Pro simulaci chemických interakcí v systému CO₂-hornina-solanka bylo využito rovnovážné geochemické modelování v programu PHREEQC, které bylo zaměřeno na predikci stavu termodynamické rovnováhy. Modelování bylo nastaveno pro termodynamické podmínky odpovídající reálné hloubce rezervoárového obzoru (teplota 43 °C, tlak 116 bar), obdobně jako u laboratorních experimentů. (Ličbinská et al, 2023).

Vstupní data pro sestavení těchto predikčních modelů byla získána ze vzorků hornin, které byly součástí vrtného jádra a pocházely z hloubek 1 150-1 155 m. Tato data byla zpracována výzkumnými pracovišti ÚJV Řež a Centrem výzkumu Řež přímo pro účely projektu REPP-CO₂. Mineralogické složení vzorků bylo stanoveno rentgenovou difrakcí (XRD). Mineralogické složení horniny bylo měřeno při pokojové teplotě na práškovém difraktometru Bruker AXS D8 θ - θ (Karlsruhe, Německo) v geometrii Bragg-Brentano s použitím vlnové délky CoK α (λ = 1,7903 Å, U = 34 kV, I = 30 mA). Pórovitost rezervoárových vzorků byla stanovena pomocí rtuťové Hg-porozimetrie a specifický povrch byl zjištěn metodou N₂-BET pomocí adsorpčně-desorpčních izoterm (Mendoza et al., 2015).

3.2 Lokalita Dolní Bojanovice

Případová studie z Dolních Bojanovic vychází z vlastních laboratorních experimentů ve speciálně navržené vysokotlaké reakční komoře, přičemž veškeré analytické práce probíhaly na pracovištích VŠB – Technické univerzity Ostrava. RTG difrakční analýza, SEM analýza a experimenty v reakční komoře byly provedeny na Katedře geologického inženýrství, zatímco chemické analýzy reakčních roztoků zajistila Katedra environmentálního inženýrství. Zásadním metodickým rozdílem bylo záměrné využití demineralizované vody, která cíleně vytváří prostředí s vysokým reakčním potenciálem, což vede k mnohem rychlejšímu a výraznějšímu mineralogickým přeměnám.

Experimentální část výzkumu probíhala ve dvou nezávislých nerezových komorách (vnitřní průměr 141 mm, délka 368 mm), které byly umístěny v tlakové válcové komoře. Systém byl uzavřen uzavěří zevnitř potaženými inertní bariérovou vrstvou pro potlačení chemických reakcí. Ohřev reaktoru zajišťovala vnější cívka a dvakrát denně probíhal řízený oscilační pohyb simulující dynamické geohydrodynamické procesy. Vzorky pískovců zde byly vystaveny superkritickým podmínkám o teplotě 53 °C a tlaku 160 bar po dobu 14, 60, 120 a 180 dnů.

Kvantitativní mineralogické složení bylo stanoveno XRD analýzou na práškovém difraktometru Bruker AXS D8 θ - θ v parafokální geometrii Bragg-Brentano (vlnová délka CoK α , U = 34 kV, I = 30 mA). Pro studium morfologických změn na povrchu zrn byla využita skenovací elektronová mikroskopie na univerzálním mikroskopu FEI Quanta 650 FEG, vybaveném analyzátoři WDX, EDX a EBSD. Měření celkové pórovitosti se provádělo metodou plynové porozimetrie za použití automatického permeamtru Coreval 700 (Vinci Technologies, Francie). Hlavní kationty a anionty ve vodných roztocích byly stanoveny iontovou chromatografií a atomovou absorpční spektrometrií, zatímco stopové prvky byly detekovány pomocí ICP-OES.

4. Výsledky a diskuse

V této kapitole jsou prezentovány a vzájemně porovnávány výsledky analýz z lokalit Brodské (vzorek Br-52) a Dolní Bojanovice (vzorek P-106). Zhodnocení interakcí v systému hornina-voda-CO₂ po 60 dnech simulované injektáže CO₂ je pro naprostou přehlednost rozděleno do dvou hlavních podkapitol.

První podkapitola (4.1 Vývoj minerálního složení během laboratorních experimentů) se zaměřuje výhradně na reálná experimentální data. Porovnává výsledky rentgenové difrakční analýzy (XRD – X-ray diffraction) původních vzorků hornin Br-52 a P-106 se stavem po 60 dnech trvání experimentu v reakční komoře. Změny v chemismu vod v této části záměrně porovnávány nejsou. Důvodem je skutečnost, že u lokality Brodské byla laboratorně analyzována pouze vstupní syntetická solanka, avšak po ukončení experimentu již acidifikovaný roztok na rozbor odeslán nebyl. Neexistuje tedy odpovídající experimentální protějšek pro porovnání s reálnými výsledky chemismu vody po 60 dnech z lokality Dolní Bojanovice.

Druhá podkapitola (4.2 Porovnání experimentálních dat s výsledky geochemického modelování) následně propojuje výsledky z laboratorních experimentů s predikčními geochemickými modely. Experimentální výsledky RTG difrakce z obou vzorků jsou zde porovnávány s výstupy geochemického modelování, a to formou kvalitativního zhodnocení převládajících trendů (srážení vs. rozpouštění minerálních fází). V této části je rovněž začleněno porovnání vývoje chemismu vod. Zatímco u lokality Dolní Bojanovice jsou k dispozici reálná analytická data vstupní demineralizované vody i roztoku po 60 dnech trvání experimentu v reakční komoře, u lokality Brodské je vstupní chemismus syntetické solanky porovnáván s modelovým výstupem, který predikuje složení roztoku po 60 dnech injecktáže CO₂.

Během výzkumu byla získána i další data, která však do přímého porovnání lokalit nebyla zahrnuta, neboť nejsou k dispozici pro obě lokality, případně zachycují pouze počáteční stav bez možnosti zhodnocení změn po okyselení prostředí. Počáteční porozita byla u vzorku Br-52 stanovena na 24,51 % a u vzorku P-106 na 19,8 %. U vzorku Br-52 byl rovněž určen specifický povrch 0,88 m²/g. Data po ukončení experimentu však chybí. Skenovací elektronová mikroskopie byla provedena pouze u vzorku P-106. V původním vzorku potvrdila přítomnost halitu, zatímco po 60 dnech injecktáže CO₂ prokázala rekrystalizaci dolomitu a akumulaci hydroxidů železa. Pro vzorek Br-52 tento typ analýzy chybí.

4.1 Vývoj minerálního složení během laboratorních experimentů

Zhodnocení původního mineralogického složení ukazuje zřetelné rozdíly mezi oběma uvažovanými lokalitami (obr. 1). Křemen tvoří dominantní fázi u obou vzorků, přičemž jeho podíl je mírně vyšší u pískovce z lokality Dolní Bojanovice (P-106). Výrazné odlišnosti jsou patrné v zastoupení fylosilikátů. Vzorek Br-52 z lokality Brodské obsahuje výrazně vyšší podíl muskovitu a jako jediný obsahuje chlorit.

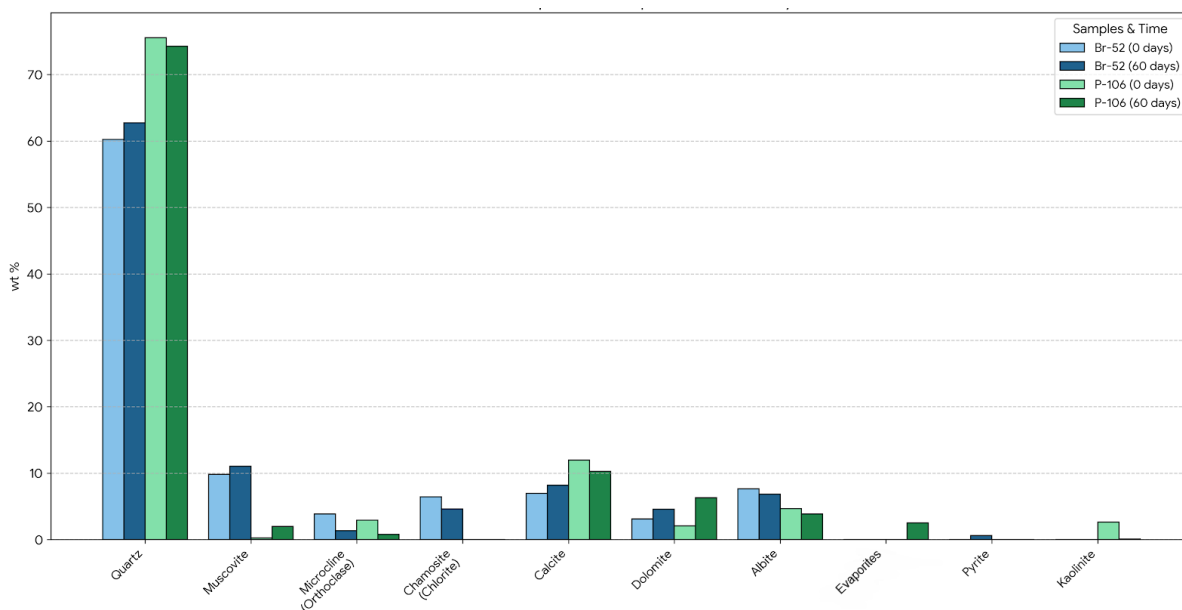
Draselné živce a plagioklasy jsou v původní hornině mírně hojnější u vzorku Br-52. Z hlediska karbonátů obsahuje vzorek P-106 primárně více kalcitu, zatímco dolomit je nepatrně více zastoupen u Br-52. Přítomnost jílových minerálů, specificky kaolinitu, byla rentgenovou difrakcí prokázána pouze u vzorku P-106. U tohoto vzorku navíc doplňková SEM analýza původní horniny odhalila stopovou přítomnost evaporitů, která ve vzorku Br-52 chybí.

Injecktáž oxidu uhličitého a následná acidifikace pórových roztoků vyvolaly v obou vzorcích sérii geochemických reakcí, projevujících se rozpouštěním primárních fází a srážením fází sekundárních (obr. 1). Křemen zůstává vůči těmto změnám z termodynamického hlediska relativně inertní a nadále v systému dominuje.

Nejdynamičtěji na pokles pH reagovaly karbonátové minerály. U vzorku P-106 došlo k intenzivnímu rozpouštění původního kalcitového tmelu. Uvolnění vápníku a hořčíku do roztoku následně vedlo k sekundárnímu vysrážení dolomitu, což je proces zaznamenaný u obou lokalit, avšak u vzorku P-106 probíhá ve větším měřítku. Proces rekrystalizace dolomitu byl zachycen aj SEM analýzou u vzorku horniny P-106. Oproti tomu u vzorku Br-52 se kalcit naopak mírně srážel, což naznačuje rychlé dosažení lokálního přesycení roztoku vzhledem k této fázi.

Změny se nevyhnuly ani alumosilikátům. U obou vzorků je patrné mírné rozpouštění draselných živců a plagioklasů, které do roztoku uvolňují kationty, převážně draslík, hliník a křemík. Tyto ionty jsou následně vázány do novotvořených fází, což vysvětluje experimenty potvrzené srážení sekundárního muskovitu ve vzorcích z obou lokalit. Dynamika ostatních fylosilikátů a jílových minerálů vykazuje určitá specifika. Zatímco v Br-52 podléhá rozpouštění chlorit, v P-106 došlo k téměř úplnému rozpuštění původního kaolinitu.

Experiment rovněž poukázal na formování minoritních sekundárních fází. V pískovci z Brodského (Br-52) se v okyseleném prostředí začal srážet pyrit. Vzorek z Dolních Bojanovic (P-106) naproti tomu zaznamenal vysrážení malého množství evaporitů v podobě halitu. Tento jev s největší pravděpodobností souvisí s původní ložiskovou vodou, která byla přítomná v horninovém prostředí, ze kterého byl odebrán vzorek horniny. Následně, při počátečním vysoušení vzorku vykrytalizoval halit, který se po zaplavení vzorku okyselenou vodou začal opětovně rozpouštět, a interakcí uvolněných iontů s horninovým prostředím došlo k následné rekrystalizaci nových evaporitových fází.



Obr. 1 Porovnání původního mineralogického složení vzorků hornin odebratých z vrtů Br-52 (Brodské) a P-106 (Dolní Bojanovice) a mineralogického složení vzorků hornin z těchto lokalit po 60 dnech injektáže CO₂.

Fig. 1 A comparison of the original mineralogical composition of rock samples collected from the Br-52 (Brodské) and P-106 (Dolní Bojanovice) boreholes and the mineralogical composition of rock samples from these sites after 60 days of CO₂ injection.

4.2 Porovnání experimentálních dat s výsledky geochemického modelování

Chemické interakce v systému CO₂-hornina-solanka na lokalitě Brodské byly modelovány prostřednictvím rovnovážného geochemického modelování v programu PHREEQC. Modelování bylo nastaveno pro termodynamické podmínky odpovídající hloubce 1150–1155 m. Byla aplikována teplota 43 °C a parciální tlak CO₂ byl během simulací udržován na konstantní hodnotě 116 bar.

Do modelu byly definovány vstupní vlastnosti a složení vodné fáze (solanka Br-45), plynná fáze ve formě superkritického CO₂ a přesné látkové množství souboru primárních minerálů, které bylo vypočítáno z hmotnostních zlomků horninových vzorků. Dalším nezbytným parametrem byl definovaný poměr pevné ke kapalně fázi, který se vztahoval na 1 litr solanky. Pro výpočty posloužila termodynamická databáze LLNL_UJV.DAT. Vzhledem k tomu, že tato databáze neobsahovala všechna potřebná data pro sekundární karbonáty, byla doplněna o chybějící údaje z dostupné odborné literatury.

Některé primární fázové složky byly navíc pro potřeby modelu nahrazeny svými termodynamickými ekvivalenty z databáze, například mikroklin byl modelován jako draselný živec a chlorit jako chamosit. Na základě literární rešerše byl do modelu následně vložen seznam potenciálních sekundárních minerálů, jako je dawsonit, ankerit či kaolinit. U těchto fází se předpokládalo, že by se za daných podmínek mohly v systému srážet a stabilně koexistovat.

Tab. 1 Srovnání výsledků rovnovážného modelování a laboratorních experimentů: mineralogické změny. Symbol + značí srážení a – rozpouštění.

Tab. 1 Comparison of results from equilibrium modeling and laboratory experiments: mineralogical changes. The symbol + indicates precipitation and – indicates dissolution

Minerál	Br-52		P-106
	60 dnů	60 dnů	60 dnů
	Model	Experiment	Experiment
Křemen	+	+	–
Muskovit	+	+	+
Mikroklin	–	–	–
Chamosit (Chlorit)	–	–	–
Kalcit	–	+	–
Dolomit	–	+	+

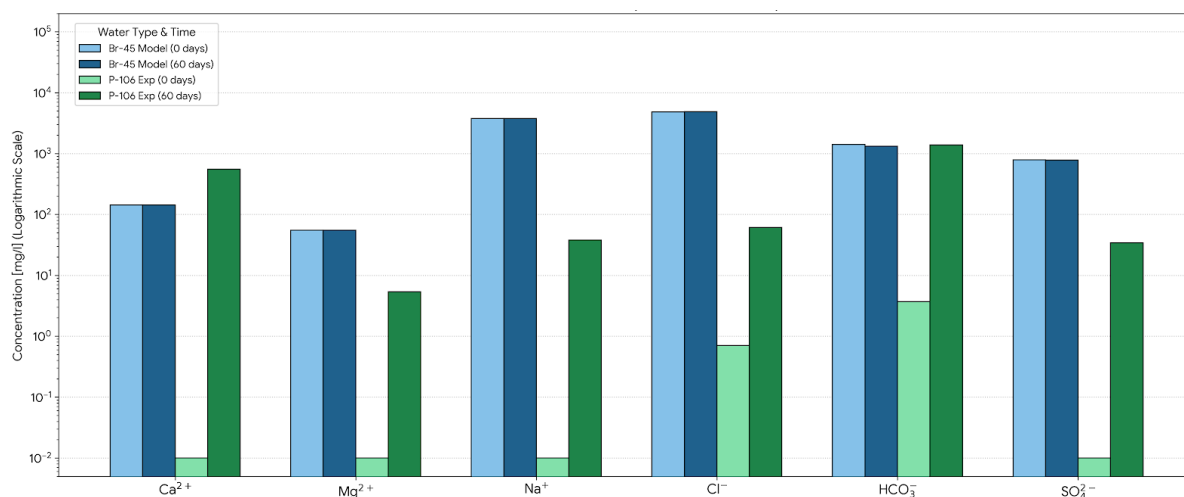
Albit	–	–	–
Evaporitové fáze	–		+
Ankerit	+		
Dawsonit	+		
Kaolinit	+		–
Pyrit		+	

Vzhledem k tomu, že kvantitativní minerální změny po dlouhodobých statických experimentech nebývají obvykle masivní a pohybují se často v oboru hodnot nejistot zvolené analytické metody (1–2 %), je obtížné provádět přímé kvantitativní srovnání s modely. Hodnocení je proto zaměřeno na kvalitativní změny – tedy na shodu v trendech srážení (+) a rozpouštění (–) jednotlivých fází (tab. 1).

Vysoká míra shody mezi rovnovážným modelem a laboratorními experimenty (a to i napříč lokalitami) panuje v dynamice primárních alumosilikátů. Geochemický model pro systém Br-52 správně predikoval rozpouštění draselných živců i plagioklasů, což bylo rentgenovou difrakcí plně potvrzeno jak u vzorku Br-52, tak u P-106. Shoda panuje rovněž v rozpouštění chloritu (chamositu) u lokality Brodské. Toto rozpouštění primárních fází v kyselém prostředí uvolňuje do roztoku ionty, které jsou následně vázány do sekundárních minerálů. Tento provázaný geochemický proces model úspěšně zachytil u muskovitu – jeho srážení bylo modelem předpovězeno a experimenty na obou lokalitách potvrzeno.

Výrazné rozdíly mezi rovnovážným modelem a experimentálními výsledky se projevují v chování karbonátů. Zatímco model pro Br-52 v důsledku okyselení prostředí předpokládá čisté rozpouštění primárního kalcitu a dolomitu, v případě sekundárních fází naopak model predikuje srážení dawsonitu a ankeritu – tedy jiných zástupců karbonátové skupiny. Teoreticky predikovaný dawsonit a ankerit se však v experimentálních datech neobjevily. Zde hraje klíčovou roli fakt, že geochemické modelování disponuje širokou databází minerálních fází, kdežto reálná XRD analýza pracuje s omezenou detekční citlivostí. Absence dawsonitu a ankeritu je přitom prokazatelně způsobena kinetickými limity. Rychlost jeho tvorby je značně omezena a doba trvání experimentu (60 dní) zjevně nedostačuje k vytvoření detekovatelného množství jeho krystalů. Zatímco se tedy v modelu sráží dawsonit a ankerit, v experimentech se tato rekrystalizace projevila srážením kalcitu a dolomitu. Tento rozdíl poukazuje na limity rovnovážného modelování. Model počítá s ideálním termodynamickým stavem, avšak v reálném horninovém vzorku hrají klíčovou roli lokální mikrokrystalizační procesy, lokální přesycení roztoku a kinetické faktory, které vedou ke složitější rekrystalizaci.

Další rozdíly se týkají jílových minerálů. Model predikoval srážení kaolinitu ve vzorku horniny z lokality Brodské, zatímco výsledky rentgenové difrakce vzorku P-106 poukazují na jeho rozpouštění. Na druhé straně experiment odhalil reálné srážení pyritu. Tvorba této sulfidické fáze nebyla v rámci rovnovážných simulací vůbec předpovězena, což může souviset s přítomností lokálních redukčních mikroprostředí ve vzorku, která zjednodušený model nezohledňuje.



Obr. 2 Srovnání výsledků rovnovážného modelování a laboratorních experimentů: změny v koncentracích iontů.

Fig. 2 Comparison of the results of equilibrium modeling and laboratory experiments: changes in ion concentrations.

Výsledky geochemického modelování a laboratorních experimentů poukazují na zásadní rozdíly v reakčním potenciálu použitých roztoků (obr. 2). V případě lokality Brodské predikuje model pouze minimální změny v chemismu solanky po 60 dnech injektáže CO₂, což odráží vysokou mineralizaci a relativní chemickou stabilitu

systému v daných podmínkách. Naopak, u lokality Dolní Bojanovice vyvolalo použití demineralizované vody jako vstupního média výrazné změny v chemickém složení roztoku. Vysoký koncentrační gradient mezi demineralizovanou vodou a horninovým prostředím vytvořil značný reakční potenciál, který vedl k intenzivnímu vyluhování iontů z horniny do kapalné fáze.

Změny v koncentracích iontů v roztocích přímo korespondují s mineralogickými procesy identifikovanými v podkapitole 4.1. Nárůst koncentrace vápníku (Ca^{2+}) a hořčíku (Mg^{2+}) v experimentálním roztoku P-106 (po 60 dnech injektáže CO_2) potvrzuje intenzivní rozpouštění kalcitového tmelu. Tento proces je úzce spjat s výrazným nárůstem koncentrace hydrogenuhličitanových iontů, které vznikají jako přímý produkt karbonátových reakcí při acidifikaci prostředí vlivem rozpuštěného CO_2 . Uvolněné ionty následně v roztoku lokálně dosahují stavu přesycení, což vede k rekrystalizaci dolomitu, což bylo potvrzeno XRD i SEM analýzou.

Rozpouštění draselných živců a plagioklasů se v chemismu vod projevuje nárůstem koncentrací sodíku (Na^+) a draslíku (K^+). Uvolněný hliník a křemík z těchto reakcí následně vstupují do tvorby sekundárních fází, zejména muskovitu.

Pozorovaný nárůst koncentrace chloridových iontů (Cl^-) a následné srážení evaporitových fází u vzorku P-106 přímo souvisí s reaktivitou halitu. Ten byl v původním vzorku identifikován SEM analýzou. Po okyselení prostředí vlivem injektáže CO_2 se halit postupně rozpouštěl, přičemž v konečné fázi experimentu (po 60 dnech) došlo k jeho rekrystalizaci v důsledku změny podmínek v systému.

5. Závěr

Případové studie lokalit Brodské a Dolní Bojanovice se zabývaly geochemickou charakteristikou procesů a mineralogických změn miocenních pískovců Vídeňské pánve při simulovaném ukládání CO_2 . Na základě srovnání výsledků laboratorních experimentů s výstupy geochemického modelování na lokalitách Brodské (vzorek Br-52) a Dolní Bojanovice (vzorek P-106) lze vyvodit následující závěry:

1. Experimenty prokázaly, že pískovcové rezervoáry reagují na injektáž CO_2 dynamickými změnami v mineralogickém složení i chemismu pórových vod. Klíčovým faktorem ovlivňujícím intenzitu těchto reakcí je vstupní chemismus použitého roztoku. Zatímco solanka na lokalitě Brodské vykazuje vysokou stabilitu, demineralizovaná voda použitá u lokality Dolní Bojanovice iniciovala díky vysokému koncentračnímu gradientu intenzivní vyluhování iontů a následnou rekrystalizaci minerálních fází.
2. V obou systémech dochází k rozpouštění primárních karbonátů a aluminosilikátů (zejména draselných živců a plagioklasů). Rozpuštěné kationty vstupují do procesů tvorby sekundárních fází, přičemž nejvýraznějším procesem je rekrystalizace dolomitu a srážení muskovitu. Specifickým rysem lokality Dolní Bojanovice je rozpouštění kaolinitu, zatímco v pískovcích z Brodského bylo zaznamenáno srážení pyritu, indikující přítomnost specifických lokálních mikropodmínek.
3. Srovnání s geochemickým modelováním (PHREEQC) ukázalo dobrou shodu v predikci rozpouštění primárních aluminosilikátů. Rozdíly mezi modelem a experimentem v chování karbonátů a absenci predikovaných fází (např. dawsonitu) však poukazují na dominantní roli kinetických limitů a lokálních mikrokrytalizačních procesů v reálných horninových vzorcích. Rovnovážné modely tak v rámci krátkodobých experimentů (60 dní) nedokáží plně postihnout kineticky zpomalené procesy.
4. Výzkum potvrdil, že interakce mezi superkritickým CO_2 a horninovým prostředím jsou vysoce komplexní a lokálně specifické. Pro přesnější predikci dlouhodobého chování rezervoárů při ukládání CO_2 je nezbytné kombinovat rovnovážné geochemické modelování s kinetickými údaji a detailním strukturním výzkumem, neboť právě kinetika srážení či rozpouštění minerálů zásadně ovlivňuje celkovou integritu a propustnost rezervoáru.

Tato práce poskytuje cenný vhled do reaktivního chování miocenních pískovců a zdůrazňuje nezbytnost individuálního přístupu při hodnocení potenciálních lokalit pro geologické ukládání CO_2 ve Vídeňské pánvi.

Poděkování: Příspěvek byl připraven v rámci projektu SGS No. SP2025/074. Děkujeme panu doc. Ing. Martinu Klemppovi, Ph.D. a panu Miloši Weiperovi za spolupráci při laboratorních experimentech v reakční komoře.

Seznam literatury

- Bujok, P., Klempa, M., Porzer, M. 2015: *Výsledky nových petrofyzikálních měření – dílčí část. Příprava výzkumného pilotního projektu geologického ukládání CO_2 v České republice (REPP- CO_2) č. NF-CZ08-OV-1-006-2015, výstup VI.17.* Ostrava. – MS VŠB-Technická univerzita. Ostrava.
- Gaus, I., 2010: *Role and impact of CO_2 -rock interactions during CO_2 storage in sedimentary rocks.* – Int. J. Greenh. Gas Control 4, 73–89.
- Izeg, O., Demiral, B., Bertin, H., Akin, S. 2008: *CO_2 injection into saline carbonate aquifer formations I: Laboratory investigation.* – Transp. Porous Media 72, 1–24.

- Ličbinská, M., Mertová, L., Rapantová, N., Stejskalová, K., 2023: *Geochemical Modeling of Changes in Storage Rock Environments at CO₂ Injection Sites*. – Minerals 13(2), 298. <https://doi.org/10.3390/min13020298>
- Mendoza, A. M., Vrbová, V., Havlová, V., Mališ, J., Klempa, M., Bujok, P., 2015: *Výsledky stanovení geochemických parametrů v laboratoři. Příprava výzkumného pilotního projektu geologického ukládání CO₂ v České republice (REPP-CO₂) č. NF-CZ08-OV-1-006-2015, výstup V1.24 Ostrava*. – MS VŠB-Technická univerzita. Ostrava.
- Molkova, M., Ličbinská, M., Klempa, M., 2025: *Laboratory Experiments on CO₂–Water–Dolomite Interactions for a Pilot CO₂ Storage Scheme in a Carbonate Reservoir in the Czech Republic*. – Engineering Proceedings 116(1), 1. <https://doi.org/10.3390/engproc2025116001>
- Molková, M., Ličbinská, M., Klempa, M., 2025: *Results of Laboratory Experiments Simulating CO₂ Injection into Miocene Sandstones of the Elbe Horizon in the Vienna Basin (Czech Republic)*. – Geosciences Research Reports 58, 2, 118–123. (in Czech)
- Nehyba, S., 2015: *Litofaciální analýza a sekvenční stratigrafie rezervoáru a jeho nadloží – zpráva a datový soubor uložený v geodatabázi, připravený k využití ve 3D modelu. Příprava výzkumného pilotního projektu geologického ukládání CO₂ v České republice (REPP-CO₂) č. NF-CZ08-OV-1-006-2015, výstup V1.9*. – MS Masarykova univerzita. Brno.
- Saeedi, A., Rezaee, R., Evans, B., Clennell, B. 2011: *Multiphase flow behaviour during CO₂ geo-sequestration: Emphasis on the effect of cyclic CO₂-brine flooding*. – J. Pet. Sci. Eng. 79, 65–85.
- Sayegh, S. G., Krause, F. F., Girard, M. 1990: *Rock/fluid interactions of carbonated brines in a sandstone reservoir Pembina Cardium, Alberta, Canada*. – SPE Form. Eval. 5, 399–405.