

KIT
Karlsruher Institut für Technologie
Die Forschungsuniversität in der
Helmholtz-Gemeinschaft

PTE Nr. 52

BMWi geförderte FuE-Vorhaben zur
„Entsorgung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Juli - 31. Dezember 2016

Projektträger Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung
(PTKA-WTE)

März 2017

PTE-Berichte

Der Projektträger Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE) informiert mit Fortschrittsberichten über den aktuellen Stand der von ihm administrativ und fachlich betreuten FuE.

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

- Entsorgung radioaktiver Abfälle
(PTE Nr. x seit 1991, fortlaufend *)
- Stilllegung und Rückbau kerntechnischer Anlagen
(PTE-S Nr. x seit 2001, fortlaufend)
- Nukleare Sicherheitsforschung
(PTE-N Nr. x seit 2010, fortlaufend)

Die Fortschrittsberichtsreihen sind online verfügbar: www.ptka.kit.edu/wte/287.php

Verantwortlich für den Inhalt sind die Autoren bzw. die entsprechenden Forschungsstellen. Das KIT übernimmt keine Gewähr insbesondere für die Richtigkeit, Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie die Beachtung privater Rechte Dritter.

** Bis Ende des Jahres 2011 wurde in dieser Fortschrittsberichtsreihe auch über die BMBF-geförderte FuE zur untertägigen Entsorgung chemotoxischer Abfälle informiert. Die FuE-Schwerpunkte „Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle“ und „Sicherheitsforschung für Bergbauregionen“ wurden zum 31.12.2011 beendet.*

Vorwort

Im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) arbeitet das KIT seit 1991 als Projektträger auf dem Gebiet „Entsorgung“.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMWi im Rahmen des jeweilig gültigen Förderkonzepts geförderten FuE-Vorhaben. Seit Februar 2015 ist das Förderkonzept „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle – Förderkonzept des BMWi (2015-2018)“ Grundlage der Projektförderung.

Die FuE-Inhalte sind in folgende *sechs FuE-Bereiche* aufgeteilt innerhalb derer Projekte gefördert werden können:

- Bereich 1: Auswirkung verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle und Behälter
(Federführung PT GRS)
- Bereich 2: Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl
- Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik
- Bereich 4: Sicherheitsnachweis
- Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen
- Bereich 6: Kernmaterialüberwachung (Safeguards)

Der vorliegende Fortschrittsbericht dokumentiert Stand und Ergebnisse dieser FuE-Vorhaben. Er wird vom Projektträger *halbjährlich* herausgegeben, um kontinuierlich über die durchgeführten Arbeiten zu informieren.

Der Bericht ist wie folgt gegliedert:

Teil 1 listet die FuE-Vorhaben auf, die dem jeweiligen FuE-Bereich zugeordnet sind.

Teil 2, der Hauptteil, enthält die „formalisierten Zwischenberichte“ zu den FuE-Vorhaben, die nach dem Förderkennzeichen geordnet sind. Im Förderkennzeichen bedeuten die Buchstaben

- E ⇒ „Entsorgung radioaktiver Abfälle“ und
- W ⇒ „Kernmaterialüberwachung“.

Teil 3 listet die FuE-Vorhaben, zugeordnet nach der jeweiligen Forschungsstelle, auf.

Inhaltsverzeichnis

1	Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche	1
1.1	<i>Auswirkung verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle und Behälter</i>	<i>1</i>
1.2	<i>Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl</i>	<i>3</i>
1.3	<i>Endlagerkonzepte und Endlagertechnik.....</i>	<i>5</i>
1.4	<i>Sicherheitsnachweis</i>	<i>7</i>
1.5	<i>Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen.....</i>	<i>13</i>
1.6	<i>Kernmaterialüberwachung.....</i>	<i>15</i>
2	Formalisierte Zwischenberichte	17
2.1	VORHABEN BEREICH 1	17
2.2	VORHABEN BEREICH 2 bis 5	27
2.3	VORHABEN BEREICH 6	165
	Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung	169
3	Verzeichnis der Forschungsstellen	171

1 Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche

1.1 Auswirkung verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle und Behälter

1501509	Langzeitverhalten von Metall- und Elastomerdichtungen sowie Polyethylen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (LaMEP)	Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)	📖 18
1501510	Struktur-Eigenschafts-Funktionsbeziehungen von Elastomerdichtungswerkstoffen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (StrukElast)	TU Dresden	📖 20
1501518A	Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Analysen zu strahlungsbasierten und thermographischen Messverfahren	TU Dresden	📖 22
1501518B	Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Akustische Messverfahren	Hochschule Zittau/Görlitz	📖 24

1.2 Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl

Bisher keine Vorhaben in diesem FuE-Bereich

1.3 Endlagerkonzepte und Endlagertechnik

02 E 11092	Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 46
02 E 11132	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 52
02 E 11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 56
02 E 11193A	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 62
02 E 11193B	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	DBE Technology GmbH, Peine	📖 64
02 E 11243	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Rekompaktionsverhalten der EDZ (LASA-EDZ)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 66
02 E 11263	Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 68
02 E 11294	Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 72
02 E 11385	Entwicklung von Monitoring-Konzepten in Anlehnung an Sicherheits- und Nachweiskonzepte sowie Ableitung von Entscheidungsgrößen und Reaktionsoptionen (MONTANARA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 98
02 E 11395	Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA)	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 100













- | | | | |
|--------------------|--|---|-------|
| 02 E 11405C | Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschnitten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt C | IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig | 📖 106 |
| 02 E 11425 | Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittenblöcken – Bautechnische Realisierung Technikumsprüfstand mit Durchführung und Auswertung erster Versuche (Salzschnittenblöcke) | TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld | 📖 124 |
| 02 E 11435 | MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl ₂ -Lösung (MgO-SEAL) | Technische Universität Bergakademie Freiberg | 📖 126 |
| 02 E 11516 | Entwicklung eines technischen Konzeptes für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle und ausgediente Brennelemente in Kristallingestein in Deutschland (KONEKD) | DBE Technology GmbH, Peine | 📖 158 |
| 02 E 11526A | Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt A | Technische Universität Bergakademie Freiberg | 📖 160 |
| 02 E 11526B | Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt B | DBE Technology GmbH, Peine | 📖 162 |




1.4 Sicherheitsnachweis

02 E 10377	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 28
02 E 10740	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 30
02 E 10810	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)	Dr. Andreas Hampel, Mainz	📖 32
02 E 10941	Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 34
02 E11061A	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 36
02 E11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 38
02 E11061C	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 40
02 E11072A	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K _d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 42
02 E11072B	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K _d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 44
02 E11102	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 48
02 E11122	Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 50


02 E 11142	Performance Assessment of Sealing Systems - Kurztitel: PASS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 54
02 E11182A	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SAnToS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 58
02 E11182B	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SAnToS	DBE Technology GmbH, Peine	📖 60
02 E 11284	Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-Nahfeld (BIGBEN)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 70
02 E 11304	Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 74
02 E 11314	Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen (KORPHA)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 76
02 E 11324	Entwicklung eines chemisch-hydraulischen Modells für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen (LAVA-2)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 78
02 E 11334A	Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 80
02 E 11334B	Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 82
02 E 11334C	Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt C	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 84
02 E 11344A	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 86
02 E 11344B	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.	📖 88
02 E 11344C	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt C	Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald	📖 90

02 E 11344D	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt D	TU München	📖 92
02 E 11365	Lösungsverhalten von Spalt- und Aktivierungsprodukten im Nahfeld eines Endlagers (LÖVE)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 96
02 E 11405A	Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzsichten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt A	DBE Technology GmbH, Peine	📖 102
02 E 11405B	Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzsichten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	📖 104
02 E 11415A	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt A	Johannes-Gutenberg Universität Mainz	📖 108
02 E 11415B	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt B	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 110
02 E 11415C	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt C	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 112
02 E 11415D	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt D	Universität des Saarlandes, Saarbrücken	📖 114
02 E 11415E	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt E	TU München	📖 116
02 E 11415F	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt F	Universität Potsdam	📖 118
02 E 11415G	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt G	TU Dresden	📖 120
02 E 11415H	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt H	Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg	📖 122

02 E 11446A	Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A	Dr. Andreas Hampel, Mainz	 128
02 E 11446B	Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	 130
02 E 11446C	Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C	Leibniz Universität Hannover	 132
02 E 11446D	Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D	TU Carolowilhelmina zu Braunschweig	 134
02 E 11446E	Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	 136
02 E 11456A	Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- e^2), Teilprojekt A	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	 138
02 E 11456B	Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- e^2), Teilprojekt B	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 140
02 E 11466	Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 142
02 E 11476A	Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 144
02 E 11476B	Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt B	Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main	 146
02 E 11486A	Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt A	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln	 148
02 E 11486B	Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt B	DBE Technology GmbH, Peine	 150

- | | | | |
|--------------------|--|--|---|
| 02 E 11496A | Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt A | Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln |  152 |
| 02 E 11496B | Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt B | Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen |  154 |
| 02 E 11506 | Vorprojekt – Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim) | TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld |  156 |

1.5 Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen

02 E 11355 Eine experimentelle Analyse der Verhandlungen um ein Endlager für radioaktive Abfälle (Expander) **Karlsruher Institut für Technologie (KIT)**  94

1.6 Kernmaterialüberwachung

02 W 6263 Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden

**Forschungszentrum
Jülich GmbH**

 166

2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 Vorhaben Bereich 1

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), 12200 Berlin		Förderkennzeichen: 1501509
Vorhabensbezeichnung: Langzeitverhalten von Metall- und Elastomerdichtungen sowie Polyethylen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (LaMEP)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2015 bis 30.09.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 373.351,03 EUR	Projektleiter: Dr. Jaunich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Forschungsvorhabens sollen Prognosemodelle zur Bewertung der Langzeiteignung von Metall- und Elastomerdichtungen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (TLB) entwickelt sowie weiterführende Erkenntnisse zur strahleninduzierten und thermischen Alterung des in TLB eingesetzten Neutronenabsorbers Polyethylen gewonnen werden.

An der TU Dresden werden im Rahmen des Vorhabens 1501510 „StrukElast“ Struktureigenschafts-Funktionsbeziehungen von Elastomerdichtungswerkstoffen zur differenzierten Bewertung in Kooperation mit der BAM erarbeitet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Metалldichtungen (M):

Zur Generierung neuer Erkenntnisse über das Verhalten von Metалldichtungen nach thermischer Belastung sollen experimentelle Untersuchungen an vorgealterten Dichtungen durchgeführt sowie Materialmodelle zur rechnerischen Abschätzung des Langzeitverhaltens der Metалldichtungen entwickelt werden.

Elastomerdichtungen (E):

Die experimentellen und numerischen Untersuchungen zu Elastomerdichtungen beschäftigen sich mit der Alterung von Elastomeren und dem Einfluss der durch diese hervorgerufenen Eigenschaftsänderungen auf die Dichtfunktion.

Polyethylen zur Neutronenabschirmung (P):

Im Rahmen dieses Arbeitspakets soll der Einfluss der Gammastrahlung in Kombination mit Alterung (Zeit und Temperatur) untersucht sowie eine Apparatur im Großmaßstab zur Bestimmung der Ausdehnungskoeffizienten bzw. des Kriechens der verwendeten Polyethylene gebaut und in Betrieb genommen werden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- M: Die Untersuchungen an bei verschiedenen Temperaturen eingelagerten Al- und Ag-Dichtungen wurden fortgeführt. Die bei 150 °C gealterten Al-Dichtungen (Torus-Durchmesser 9,9 bzw. 9,7 mm) unterschritten bei der Messung nach 7,5 Jahren erstmals wieder die spezifizierte Leckagerate von $10E-8 \text{ Pa m}^3/\text{s}$, nachdem diese nach 2 Jahren Alterung überschritten wurde, der Wert seither aber wieder abnahm. Für den Prüfflansch zur kontinuierlichen Messung der Anpresskraft wurde ein Konzept entwickelt und mit den Konstruktionsarbeiten begonnen. Hinsichtlich der Ermittlung von temperaturabhängigen Materialparametern wurden in Vorversuchen erste Spannungs- und Dehnungskurven unter Druckbeanspruchung bestimmt.
- E: Untersuchungen an Elastomerproben, die bei Temperaturen zwischen 60 °C und 150 °C zwischen 2 und 2,5 Jahren gealtert wurden, ergaben u. a., dass mit zunehmender Alterung der Anteil der Spannungsrelaxation als auch die verbleibende Deformation nach Entlastung ansteigen. Mit der breiteren Datenbasis aus längeren Untersuchungszeiten konnte u. a. eine Anpassung der Masterkurve durchgeführt und die Konstanz des Arrhenius-Ansatzes über einen größeren Temperaturbereich nachgewiesen werden. Darüber hinaus wurde ein modifizierter Leckagetest entwickelt.
- P: Die Analyse von bestrahlt-thermisch gelagerten Polyethylen-Proben wurde fortgeführt wobei u. a. die Farbänderung der Proben im Zuge der Alterung untersucht wurde. Mit der Konzeption der Messapparatur für die Bestimmung der Ausdehnungskoeffizienten von Polyethylen wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- M: Die Untersuchung der eingelagerten Metaldichtungen, die Entwicklung des Prüfflansches, die Ermittlung der temperaturabhängigen Materialparameter werden fortgesetzt. Mit der Entwicklung von Materialmodellen wird begonnen.
- E: Die Untersuchung des eingelagerten Probenmaterials, die Überprüfung gängiger Alterungsmodelle sowie die Erstellung von Materialmodellen werden fortgeführt.
- P: Die Charakterisierung der bestrahlten und thermisch gelagerten Proben sowie die Planung der Messapparatur im Großmaßstab werden fortgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Journalartikel:

A. Kömmling, M. Jaunich, D. Wolff: Revealing effects of chain scission during ageing of EPDM rubber using relaxation and recovery experiment; Polym. Test 2016 56 p. 261

Vorträge:

A. Kömmling, E. Chatzigiannakis, V. Wachtendorf, K. von der Ehe, M. Jaunich, D. Wolff: Discoloration effects of high-dose gamma-irradiation and long-term thermal ageing of (U)HMW-PE; Ionizing radiation and polymers symposium (IRaP); Giens, Frankreich

A. Kömmling, M. Jaunich, D. Wolff: Influence of Ageing on Sealability of HNBR, EPDM and FKM O-rings; ISC International Sealing Conference 2016; Stuttgart, Deutschland

A. Kömmling, M. Jaunich, D. Wolff: Ageing and lifetime prediction of O-ring seals made of HNBR, EPDM and FKM; Kautschuk Herbst Kolloquium 2016; Hannover, Deutschland

M. Jaunich, A. Kömmling, K. von der Ehe, H. Völzke, D. Wolff: Long-term Behavior of Elastomer Seals and Polymers for Neutron Shielding; PATRAM 2016; Kobe, Japan

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		Förderkennzeichen: 1501510
Vorhabensbezeichnung: Struktur-Eigenschafts-Funktionsbeziehungen von Elastomerdichtungswerkstoffen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (StrukElast)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2015 bis 30.09.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 208.642,28 EUR	Projektleiter: Jun.-Prof. Dr. Wießner	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Forschungsvorhabens sollen die Struktur-Eigenschafts-Beziehungen für elastomere Dichtungsmaterialien erarbeitet werden, welche in Prognosemodellen zur Bewertung der Langzeiteignung von Elastomerdichtungen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (TLB) einfließen sollen. Als Ziel sollen belastbare Aussagen zur Langzeiteignung von Elastomerdichtungen in TLB in Abhängigkeit struktursensitiver elastomerspezifischer Werkstoffeigenschaften bereitgestellt werden.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um eine Zuarbeit zum Vorhaben 1501509 „LaMEP“ der Bundesanstalt für Materialprüfung (BAM).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Literaturrecherche zur Materialauswahl der Elastormischungen sowie zur Festlegung deren Variation
- AP2: Mischungsherstellung und Vulkanisation mit gezielter Rezepturvariation
- AP3: Charakterisierung von Strukturparametern der erzeugten Modellelastomere
- AP4: Charakterisierung der Modellelastomere hinsichtlich ihrer mechanischen Eigenschaften
- AP5: Charakterisierung des viskoelastischen Deformationsverhaltens
- AP6: Ermittlung charakteristischer Relaxationszeitspektren und Beschreibung des Spannungsrelaxationsverhaltens
- AP7: Erstellung von Modellen zur Beschreibung der Struktur-Eigenschafts-Korrelation
- AP8: Untersuchung gealterter Proben auf deren Struktur- und Eigenschaftsveränderungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Rezepturbasis wurde um Silikonkautschuk (VMQ) erweitert.
- AP2: Es wurden VMQ basierte Modellrezepturen im Labormaßstab compounding, deren Vernetzungsverhalten charakterisiert und Prüfkörper für die Werkstoffcharakterisierung vulkanisiert. Bei der Werkstoffcharakterisierung zeigte sich, dass die Shore-Härte der VMQ-basierten Mischungen nahezu ausschließlich durch den Füllstoffgehalt determiniert wird. In Abstimmung mit der BAM wurde die Geometrie von Modell-O-Ringen als bauteilnahe Prüfkörper für Untersuchungen der Dichtfunktion festgelegt.
- AP3: Die mittlere Vernetzungsdichte der VMQ-basierten Rezepturen wurde mittels Gleichgewichtsquellung charakterisiert. Diese zeigte sich als nahezu unabhängig von der Menge des verwendeten Vernetzungsmittels Dicumylperoxid (DCP). Bei den gefüllten Mischungen bewirkt die Anwesenheit des Kieselsäurefüllstoffes eine Quellungsbehinderung, die zu einer Erhöhung der effektiv wirksamen Vernetzungsdichte führt.
- AP4: Von den VMQ-basierten Rezepturen wurden die grundlegenden mechanischen Eigenschaften bei Raumtemperatur ($RT = 25\text{ °C}$) bestimmt. Aufgrund der starken Abhängigkeit der Shore-Härte vom Füllstoffgehalt wird nur eine VMQ-Mischung mit festgelegter Shore-Härte und Füllstoffgehalt für die Alterungsuntersuchungen ausgewählt. Die Charakterisierung der statischen Druckspannungsrelaxation bei FKM-basierten Modellrezepturen zeigte einen deutlichen Einfluss vom Füllstoffgehalt und der Vernetzungsdichte. Für eine möglichst geringe Spannungsrelaxation erweist sich die Kombination aus mittlerem Füllstoffgehalt und hoher Vernetzungsdichte als zielführend. Eine Untersuchung zur Spannungsrelaxation mit gekoppelter Leitfähigkeitsmessung an Carbonfüllstoff verstärkten Elastomeren unter statischer und dynamischer Zugbeanspruchung ergab, dass der Beitrag des Füllstoffs auf das mechanische Spannungsniveau mit Veränderungen der elektrischen Leitfähigkeit korreliert.
- AP5: Die Temperatursweeps der VMQ-Modellelastomere liefern die Temperaturlage des Glasübergangs (ca. -125 °C). Die Vernetzerkonzentration sowie die Anwesenheit von verstärkungsaktiver Kieselsäure beeinflussen die Temperaturlage nicht. DMA-Messungen an FKM-Elastomeren spiegelten erwartungsgemäß den Einfluss von Füllstoff und Vernetzungsdichte auf die dynamischen Moduln wider.
- AP6: Die in AP5 ermittelten Masterkurven der FKM-basierten Rezepturen wurden durch einen Multiskalenfit angepasst. Dabei wurde u. a. eine Korrektur durch Berücksichtigung einer hydrodynamischen Verstärkungsfunktion vorgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Herstellung von FKM- und VMQ-basierten Modellmischungen (Maßstab 2 kg) sowie von Modell-O-Ringen für Dichtigkeitsuntersuchungen
- AP2: Herstellung von HNBR-basierten Modellelastomeren im Labormaßstab
- AP3: Charakterisierung der Füllstoffdispersion an ausgewählten Elastomeren
- AP4: Weiterführung der Spannungsrelaxationsuntersuchungen an VMQ-Elastomeren
- AP5: Erstellung von Masterkurven für VMQ-Elastomere
- AP6: Durchführung von Multiskalenfits für alle FKM- und VQM-Rezepturen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

„Electrical resistance assisted prediction of stress relaxation in rubber parts“; Paper und Präsentation; 190th Technical Meeting of the Rubber Division of the American Chemical Society; 11.-13.10.2016; Pittsburgh, USA

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		Förderkennzeichen: 1501518A
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Analysen zu strahlungsbasierten und thermographischen Messverfahren		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2016 bis 31.01.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 413.887,23 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Hampel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens besteht in einer Bewertung verschiedener physikalischer Messprinzipien, Verfahren und Methoden zur nichtinvasiven Überwachung des Zustandes des Inventars von Transport- und Lagerbehältern bei verlängerter Zwischenlagerung. Damit sollen Veränderungen der Brennelemente bzw. Behälterstrukturen über Zeiträume von mehreren Jahrzehnten erkannt werden können, ohne die Behälter zu öffnen. Dazu werden in diesem Vorhaben die Messverfahren Strahlungsemissionsmessung (Gammastrahlung, Neutronen), Thermographie und Myonenbildung näher untersucht.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um ein Teilvorhaben des Verbundes „DCS-Monitor“. Verbundpartner ist die Hochschule Zittau/Görlitz (HSZG). Der Arbeitsschwerpunkt der HSZG liegt auf akustischen Messverfahren (FKZ 1501518B).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Allgemeine Analyse des Standes von Wissenschaft und Technik
- AP2: Methodenscreening für Strahlungsemission, Myonen und Thermographie
- AP4: Analyse zum Gamma- und Neutronenstrahlungsfeld mittels Monte-Carlo-Simulation
- AP5: Monte-Carlo-basierte Analysen zur Bewertung der Myonen-Radiographie
- AP6: FEM-Analysen zur Bewertung der Thermographie
- AP10: Entwicklung von Verfahrenskonzepten zur Behälterüberwachung

Die AP3, 7, 8, 9 des Verbundarbeitsplans werden ausschließlich durch den Verbundpartner bearbeitet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Recherchen zu möglichen Messmethoden basierend auf Myonendetektion ergaben, dass sowohl die Myonentransmission als auch die Myonenstreuung als Messprinzip für die nicht-invasive Zustandsüberwachung von TLB in Frage kommen.
- AP2: Es wurden vereinfachte 2D-FEM-Simulationen durchgeführt, um den Einfluss von PE-Stäben und Kühlrippen auf das Temperaturfeld auf der Behälteraußenwand zu untersuchen. Sie ergaben, dass die PE-Stäbe zwar einen Wärmewiderstand darstellen, jedoch nach einer Temperaturumverteilung im Inneren der Wand nur noch einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Temperaturverteilung auf der Außenwand haben. Die Kühlrippen befördern die Wärmeabfuhr enorm. Ihr Einfluss auf die Form des Temperaturfeldes ist jedoch vernachlässigbar.
- Recherchen bezüglich der langzeitlichen thermischen Wärmeleistung von Brennstäben ergaben, dass die Gültigkeit existierender Korrelationen meist nur für einen Zeitraum von wenigen Jahren gesichert ist. Für die anstehenden 3D-Simulationen zur Wärmeleitung und Konvektion wurden damit begonnen, eine Übersicht geeigneter Simulations-Tools zu erstellen. Dabei wurde festgestellt, dass mit ANSYS Fluent bereits erfolgreich Rechnungen zum Temperaturaufbau innerhalb von Behältern durchgeführt wurden.
- Für die Myonenmessung wurde damit begonnen, erste Simulationsmodelle in MCNPX für Transmission und Streuung zu implementieren.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weitere Untersuchungen zu physikalischen Grundlagen der Myonen-Wechselwirkungen im TLB und Recherchen zu existierenden Messsystemen auf Basis der Myonen-Radiographie
- AP2: Abschluss der Recherchen zur langzeitlichen thermischen Wärmeleistung des Inventars sowie Auswahl der geeignetsten Simulationsumgebung für thermische Vorgänge
- AP4: Erstellung eines möglichst detailgetreuen CASTOR-Modells sowie Untersuchungen zur Quellverteilung bezüglich Ort und Energie
- AP5: Erstellung eines repräsentativen Myonenspektrums mit der Software CRY sowie erste Simulationen mit MCNPX zu Myonentrajektorien an vereinfachten Behältergeometrien
- AP6: Erstellung eines CAD-Modells für den realen CASTOR-Behälter sowie Erarbeitung eines Simulationskonzepts für die FEM-Analysen zur Bewertung der Thermographie

5. Berichte, Veröffentlichungen

Hampel, U.: Methoden der Zustandsüberwachung von Transport- und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hoch-radioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung (DCS-Monitor); Vortrag; 12. Projektstatusgespräch zu BMWi-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle; 09.-10.11.2016; Karlsruhe

Zuwendungsempfänger: Hochschule Zittau/Görlitz, Theodor-Körner-Allee 16, 02763 Zittau		Förderkennzeichen: 1501518B
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Akustische Messverfahren		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2016 bis 31.01.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 750.814,95 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kratzsch	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens besteht in einer Bewertung verschiedener physikalischer Messprinzipien, Verfahren und Methoden zur nichtinvasiven Überwachung des Zustandes des Inventars von TLB bei verlängerter Zwischenlagerung. Damit sollen Möglichkeiten eruiert werden, Veränderungen der Brennelemente bzw. der aufnehmenden Behälterstrukturen über sehr lange Zeiträume von mehreren Jahrzehnten erkennen zu können, ohne Behälter zu öffnen. Dazu werden in diesem Vorhaben die Messverfahren aktive und passive Schwingungsspektroskopie näher untersucht sowie experimentelle Analysen aller Messmethoden durchgeführt.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um ein Teilvorhaben des Verbundes „DCS-Monitor“. Verbundpartner ist die Technische Universität Dresden (TUD). Der Arbeitsschwerpunkt der TUD liegt auf der Strahlungsemissionsmessung, der Thermographie und der Myonenbildgebung. (FKZ 1501518A).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Allgemeine Analyse des Standes von Wissenschaft und Technik
- AP3: Methodenscreening für Messmethode Schwingungsspektroskopie
- AP7: Entwicklung von Zustandserkennungsmethoden für multimodale Behälterüberwachungsdaten
- AP8: Experimentelle Analysen für die Messmethoden Gammastrahlungsemission und Thermographie
- AP9: Experimentelle Analysen für die Messmethode Schwingungsspektroskopie
- AP10: Entwicklung von Verfahrenskonzepten zur Behälterüberwachung

Die AP2, 4, 5, 6 des Verbundarbeitsplans werden ausschließlich durch den Verbundpartner bearbeitet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Es wurde eine Literaturrecherche zu möglichen Zuständen und Schädigungen an Brennelementen während des Reaktorbetriebs und der Zwischenlagerung durchgeführt und damit begonnen einen technischen Bericht hierzu zu erstellen.
- AP3: In grundlegenden physikalischen Analysen zur Teilaspekten der akustischen Schwingungsspektroskopie wurde festgestellt, dass eine prinzipielle Anwendbarkeit dieser Messmethode für die Behälterüberwachung gegeben ist, bei herkömmlicher Anwendung jedoch der Nachteil besteht, dass Informationen zu Ort und Größe von Zustandsänderungen und Schädigungen an einer zu überwachenden Struktur schwer zu erhalten sind. Jedoch sind mittlerweile fortschrittliche Ansätze und Methoden (u. a. Soft Computing, Structural Health Monitoring) vorhanden, mit deren Hilfe sich diese Nachteile kompensieren lassen.
- AP8: Für die Nutzung des Versuchstands NiCoLe zur experimentellen Analyse der Messmethode Gammastrahlungsemission wurde der erforderliche Rückbau der Teilsysteme Wasser- und Materialbarriere durchgeführt. Weiterhin wurden die Planungen für den Umbau des Versuchstandes abgeschlossen. Im Rahmen der Planung und Auslegung des Versuchstandes zur experimentelle Analyse der Messmethode Thermographie wurde der Detaillierungsgrad des geplanten, skalierten CASTOR V/19 Modells wesentlich erhöht. Weiterhin wurden in Zusammenarbeit mit dem Verbundpartner Versuchsziele definiert und ein erstes Instrumentierungskonzept erstellt.
- AP9: Zur experimentellen Analyse der Messmethode passive Schwingungsspektroskopie sollen in einem Berstcontainer unterschiedlich vorgeschädigte Brennstabhüllrohre durch Druckbeaufschlagung zum Platzen gebracht sowie die resultierenden Schallspektren gemessen und miteinander verglichen werden. Es wurden Gespräche mit Herstellern zum Aufbau und der Funktionsweise des Berstcontainers durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fertigstellung des technischen Berichts zu möglichen Zuständen und Schädigungen an Brennelementen während des Reaktorbetriebs und der Zwischenlagerung.
- AP7: Entwicklung erster Konzepte für Zustandserkennungsmethoden.
- AP8: Fertigung des CASTOR V/19 Modells und von Hilfseinrichtungen für den Versuchstand zur Gammastrahlungsemission sowie Finalisierung der Instrumentierung und Durchführung der E-Planung und Fertigung aller notwendigen Versuchstandkomponenten für den Versuchstand für die Thermographie.
- AP9: Festlegung des Aufbaus und der endgültigen Funktionsweise des Berstcontainers sowie Festlegung und Fertigung notwendiger peripherer Geräte.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Reinicke, S.: Bewertung von Methoden der nichtinvasiven Zustandsüberwachung des Inventars von Transport- und Lagerbehältern bei verlängerter Zwischenlagerung; Posterpräsentation; Doktorandenseminar Kompetenzerhalt in der Kerntechnik (KOMPOST), Dresden-Rossendorf, 2016

2.2 Vorhaben Bereich 2 bis 5

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10377
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 31.12.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 4.660.685,00 EUR	Projektleiter: Dr. Zhang

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat die Weiterentwicklung des Wissens zum thermisch-hydraulisch-mechanischen Verhalten von Tonstein, insbesondere im Nahfeld eines HAW-Endlagers, zum Ziel. Dieses Ziel lässt sich untergliedern in

- die Erweiterung der Datenbasis zum THM-Verhalten des Tonsteins durch geeignete Experimente im Labor und in situ;
- die Weiterentwicklung vorhandener Modellvorstellungen zur Verbesserung der Beschreibung und Berechenbarkeit des THM-Verhaltens des Tonsteins;
- die Verbesserung bzw. Bereitstellung geeigneter Untersuchungsmethoden.

Diese Ziele werden durch die Beteiligung am ANDRA-Forschungsprogramm für das Untertagelabor (URL) Bure und am im Mont-Terri URL durchzuführenden Mine-By-Experiment erreicht. Neben dem generellen Erkenntniszuwachs sollen die im Rahmen dieses Vorhabens erzielten Ergebnisse bei der Verbesserung von Prozessmodellen sowie bei der Weiterentwicklung des Instrumentariums für die Langzeitsicherheitsanalyse für Endlager in Tongesteinen genutzt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: *In-situ-Untersuchungen* der mechanisch-hydraulischen Auswirkungen einer Tunnelauffahrung im MTRL auf das umgebende Tonsteingebirge. Diese Untersuchungen werden gemeinsam mit NAGRA, BGR und ANDRA durchgeführt, wobei GRS die Messung von Porenwasserdruck, Permeabilität und Sättigungsänderung übernimmt. Ein anderer In-situ-Test ist die Untersuchung zum Langzeitverformungsverhalten des Opalinuston im MTR-URL.

AP2: *Laboruntersuchungen* am Callovo-Oxfordian-Tonstein und Opalinuston zu Langzeitverformung, Quelldruck/Quellverformung, Schädigung und Verheilung sowie am Auffahrungsrückstand aus dem Bure-URL als Versatzmaterial.

AP3: *Modellierung* des Mine-By-Experiments, des Langzeitverformungsverhaltens eines Bohrlochtests und der THM-Laborversuche.

AP4: *Modellentwicklung* für die Schädigung und Verheilung von Tonstein.

AP5: *Ergebniszusammenführung und Berichterstattung.*

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Beenden der Laborversuche an Tonstein und Verschlussmaterialien
- Modellrechnung zur Prognose des Langzeitverhaltens eines Streckenverschlussbauwerks
- Teilnahme und Präsentation bei internationalen Fachtagungen
- Vorbereitung mit Veröffentlichungen zur Teilnahme an weiteren Tagungen in 2017
- Beenden des Projekts mit Erstellung eines Abschlussberichts.

4. Geplante Weiterarbeiten

Vorhaben am 31.12.2016 beendet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang C.L. and Kröhn K.-P. (2016): Sealing behaviour of claystone-bentonite mixtures, 2nd DAEF Conference, Köln, 26-28 September 2016.

Zhang C.L. (2016): Experimental study of thermal effects on clay rock for deep disposal of radioactive waste, 1st International Conference on Energy Geotechnics, ICEGT 2016, Kiel, Germany, 29-31 August 2016.

Zhang C.L. (2017): Response of clay rock to moisture change, International workshop ATMSS – Advances in Laboratory Testing & Modelling of Soils and Shales Swiss Alps, 18-20 January 2017.

Zhang C.L. (2017): Examination of Effective Stress in Clay Rock, Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering (2017), doi: 10.1016/j.jrmge.2016.07.008

Zhang C.L., Conil N., Armand G. (2017): Thermal Effects on Clay Rocks for Deep Disposal of High-Level Radioactive Waste, Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering (2017), doi: 10.1016/j.jrmge.2016.08.006

Zhang C.L. (2017): Sealing Performance of Clay-Based Materials, 3rd Sino-German Workshop on Radioactive Waste Disposal, Dunhuang, China, 16-19 May, 2017

Zhang C.L. (2017): Thermo-Hydro-Mechanical Behaviour of Clay Rock for Deep Disposal of High-Level Radioactive Waste, 4th UNSAT-WASTE Symposium, Shanghai, China, 14- 16 July 2017.

Zhang C.L., Kröhn K.-P. (2017): Sealing Behaviour of Crushed Claystone mixed with Bentonite, 7th International Conference on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Davos, Switzerland, 24-27 September 2017.

Zhang C.L., Czaikowski, O., Wieczorek, K. (2017): Investigations on the Hydro-Mechanical Behaviour of the Sandy Facies of Opalinus Clay, 7th International Conference on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Davos, Switzerland, 24-27 September 2017.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10740
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2010 bis 31.07.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.07.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.802.564,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kröhn	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (HAW) in geologischen Steinsalzformationen sieht die Einbringung verglasteter HAW-Kokillen, teils auch die direkte Endlagerung von 5 m langen Brennstabkokillen in tiefen vertikalen Bohrlöchern und die direkte Endlagerung von Brennelementen in selbstabschirmenden Pollux-Behältern in horizontalen Strecken vor. Einlagerungs-Bohrlöcher und -Strecken werden für den völligen Einschluss der Abfälle im Wirtsgestein mit artgleichem Salzgrusversatz verfüllt. Anhand der bisherigen Ergebnisse kann nicht sicher genug abgeschätzt werden, welcher Kompaktionsgrad und welche Restporosität/-permeabilität erreicht werden, und welche Konsequenzen sich für Langzeitsicherheitsanalysen ergeben.

Es wird ermittelt, welche Prozessabläufe hinsichtlich des vollständigen Einschlusses eine besondere Signifikanz besitzen. Experimentelle und modelltheoretische Arbeiten ergänzen die in Repoperm-1 erzielten Ergebnisse und dienen der Verbesserung der Stoffgesetze.

Ziel ist, den Wissensstand über das Stoffverhalten von Salzgrus im Bereich geringer Porositäten und Permeabilitäten zu verbessern und die relevanten Prozesse bei der Konsolidierung von Salzversatz zu ermitteln.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete von der GRS bearbeitet:

- AP1: Relevante Szenarien und Randbedingungen
- AP2: Laborversuche
- AP3: Stoffgesetze und Modellrechnungen
- AP4: Auswertung und Berichterstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Abschluss der Messungen zum Zweiphasenfluss
Die Auswertung ergab im Wesentlichen folgende Befunde: Zweiphasenflussmessungen mit Salzgrus sind bei einer endlagerrelevanten Korngrößenverteilung bis hinab zu einer Gaspermeabilität von 10^{-15} m² möglich. Die konstitutiven Gleichungen zur relativen Permeabilität und zum Kapillardruck zeigen einen typischen Verlauf, lassen sich aber mit den klassischen Theorien z. B. nach Brooks und Corey oder nach van Genuchten nicht erklären. Materialbedingt bestehen erhebliche Unsicherheiten bei den ermittelten Zusammenhängen, die nur durch weitere Versuche quantifiziert werden können. Eine verlässliche Vorhersage der Versatzkompaktion im Falle eines Lösungszutritts ist somit zurzeit noch nicht möglich. Bei Kenntnis der Bandbreiten bei den Unsicherheiten könnten abschätzende Rechnungen zu Grenzfällen bei extremalen Parametern und Gleichungen durchgeführt werden.
- Abschluss der Modellrechnungen zum THM-Verhalten des Salzgrusversatzes
Gebirgskonvergenz und Versatzkompaktion wurden mit einem rotationssymmetrischen 2D-Modell für den Lösungszutritt in eine Strecke für einen zunächst trockenen Salzgrusversatz nachgebildet. Nach 100 Jahren Modellzeit erfolgte der Einstrom von Lösung in die versetzte Strecke durch geeignete Änderung der hydraulischen Randbedingungen. Infolge des dadurch aktivierten FADT-Prozesses wurde der Kompaktionsvorgang im Modell erheblich beschleunigt. Insgesamt waren die Modellergebnisse in sich schlüssig und demonstrieren somit die erfolgreiche Durchführung einer THM-gekoppelten Modellrechnung für den Salzgrusversatz.
- Fertigstellung des Abschlussberichts.

4. Geplante Weiterarbeiten

Vorhaben am 31.07.2016 beendet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 10810
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 30.09.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 30.09.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 632.854,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hampel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, KIT Karlsruhe, Universität Hannover und TU Braunschweig (FKZ 02E10810 bis 02E10860) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Endlagerung von wärmeentwickelnden hochradioaktiven Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque (NM, USA).

Das Vorhaben setzt inhaltlich die beiden BMBF-Verbundprojekte "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" (Laufzeit: 01.08.2007 bis 31.07.2010) fort.

Im aktuellen BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund steht dabei nun das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung und Verheilung. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Durchführung eines Start-Workshops

AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche

AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte

AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse

AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner

AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner

AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen

AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung

AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum stellte der Zuwendungsempfänger den eigenen Ergebnisbericht sowie den gemeinsamen Synthesebericht zum Verbundprojekt fertig. Eine Zusammenfassung der Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes präsentierte er auf dem 7th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation am 07.-09.09.2016 in Washington DC. Das Projekt endete am 30.09.2016.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Vergleich von Berechnungsergebnissen mit In-situ-Messdaten hat in einigen Fällen gezeigt, dass bestimmte Einflüsse auf das In-situ-Verformungsverhalten von den Stoffmodellen noch nicht ausreichend beschrieben werden.

Dies betrifft die folgenden Themengebiete:

- Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen,
- Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung,
- Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen und
- Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung). Die notwendigen experimentellen Untersuchungen und darauf basierenden Weiterentwicklungen der Modellierung werden in dem am 01.04.2016 begonnenen Verbundprojekt WEIMOS (FKZ 02E11446A-E) durchgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Literatur zum Stoffgesetz CDM und zum Verbundprojekt:

A. Hampel (2015): Description of damage reduction and healing with the CDM constitutive model for the thermo-mechanical behavior of rock salt. *) S. 301-310.

A. Hampel, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, S. Yildirim, R. Rokahr, A. Gärken, C. Missal, J. Stahlmann, K. Herchen & K.-H. Lux (2015): Joint Project III on the comparison of constitutive models for the thermo-mechanical behavior of rock salt – I. Overview and results from model calculations of healing of rock salt. *) S. 349-359.

K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, D. Naumann, T. Popp, A. Hampel, K.-H. Lux, K. Herchen, U. Düsterloh, J.G. Argüello & F. Hansen (2015): Joint Project III on the comparison of constitutive models for the thermo-mechanical behavior of rock salt – II. Extensive laboratory test program with clean salt from WIPP. *) S. 3-12.

U. Düsterloh, K. Herchen, K.-H. Lux, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Hampel, J.G. Argüello & F. Hansen (2015): Joint Project III on the comparison of constitutive models for the thermo-mechanical behavior of rock salt – III. Extensive laboratory test program with argillaceous salt from WIPP and comparison of test results. *) S. 13-21.

*) In: L. Roberts, K. Mellegard & F. Hansen (Hrsg.): Proc. of the Conference on Mechanical Behavior of Salt, Saltmech VIII, South Dakota School of Mines & Technology, Rapid City, SD, USA, 26.-28.05.2015, Taylor & Francis Group, London, ISBN 978-1-138-02840-1.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10941
Vorhabensbezeichnung: Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3	
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2011 bis 31.12.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.297.575,00 EUR	Projektleiter: Dr. Becker

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Sensitivitätsanalyse stellt einen wesentlichen Bestandteil der Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit eines Endlagers dar. Die dafür bislang eingesetzten Verfahren liefern bei komplexen Endlagermodellen jedoch nur bedingt aussagekräftige Ergebnisse. Moderne Methoden, die genauere und verlässlichere Informationen liefern können, sollen im Hinblick auf Endlagermodelle vergleichend getestet und ggf. gezielt angepasst werden. Am Ende des Vorhabens soll eine Vorgehensempfehlung zur Durchführung globaler Sensitivitätsanalysen bei Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit von Endlagern in unterschiedlichen Wirtsformationen gegeben werden.

Im Vorhaben kommen die parallel im Projekt ADEMOS entwickelten statistischen Programmkomponenten zum Einsatz. Bezüglich der Testfälle wird auf Modelle zurückgegriffen, die in den Projekten ISIBEL und GENESIS/ERATO entwickelt wurden bzw. werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Methoden der globalen Sensitivitätsanalyse:

Es ist ein ausführlicher Überblick über die Methoden der globalen Sensitivitätsanalyse sowie die Verfahren zur Stichprobenziehung zu erarbeiten. Die Methoden werden klassifiziert und hinsichtlich ihrer Eignung für den Einsatz im Rahmen von Sicherheitsnachweisen für Endlager bewertet. Laufende Aktivitäten und Entwicklungen im internationalen Bereich werden verfolgt und ausgewertet.

AP2: Definition von Testfällen:

Es sind mehrere Testmodelle und -szenarien zu definieren, anhand derer die verschiedenen Methoden getestet und verglichen werden können. Es sollen vorrangig Modelle für Salz- und Tonformationen betrachtet werden.

AP3: Durchführung und Auswertung von Testrechnungen:

Die im AP1 identifizierten Methoden der Sensitivitätsanalyse werden auf die Testfälle angewandt, soweit dies nach theoretischen Überlegungen sinnvoll erscheint.

AP4: Anpassung von Methoden und Bereitstellung für die Anwendung:

Aufgrund von Ergebnissen der AP's 1 und 3 werden diejenigen Methoden identifiziert und ggf. weiterentwickelt, die für die Anwendung bei der Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern besonders geeignet erscheinen.

AP5: Verfolgung und Bewertung laufender Entwicklungen:

Um sinnvolle, dem Stand von Wissenschaft und Technik entsprechende Sensitivitätsanalysen für Modelle für Endlagersysteme durchführen zu können, ist es notwendig, den sich ständig weiterentwickelnden Stand zu verfolgen und neue Erkenntnisse hinsichtlich ihrer Verwertbar-

keit für den Anwendungsfall zu bewerten und zu dokumentieren. Dies geschieht durch Literaturauswertung sowie Teilnahme an Fachkonferenzen.

- AP6: Identifikation und Test von Methoden zur probabilistischen Sensitivitätsanalyse: Methoden, die für die Analyse stark nichtlinearer Modelle mit über weite Bereiche gestreuten Ausgabegrößen besonders geeignet erscheinen, werden identifiziert und anhand der bereits definierten oder weiterer Testfälle ausführlich untersucht.
- AP7: Internationale Zusammenarbeit:
Im Rahmen des Projekts wird ein internationaler Austausch mit Organisationen in Europa und den USA gepflegt, die an ähnlichen Fragestellungen arbeiten.
- AP8: Dokumentation:
Während der Projektlaufzeit sollen die Ergebnisse in Form von Veröffentlichungen und Konferenzbeiträgen dokumentiert werden. Zum Ende wird ein ausführlicher Gesamt-Abschlussbericht erstellt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1-AP4: Als letzter Arbeitspunkt des AP4 war zum Projektende die Aufstellung einer Vorgehensempfehlung für die Durchführung von Sensitivitätsanalysen bei Endlagermodellen vorgesehen. Eine solche Vorgehensempfehlung wurde entwickelt.
- AP5: Neben der regelmäßigen Beobachtung laufender Aktivitäten wurde die Konferenz SAMO 2016 besucht. Dort wurden wesentliche Projektergebnisse vorgestellt und mit Fachleuten diskutiert sowie weitere Anregungen für eventuelle zukünftige Anschlussforschung bezogen.
- AP6: Der Abschlussbericht des Instituts für Wissenschaftliches Rechnen der TU Braunschweig zu den Untersuchungen zum Einsatz von Metamodellen in der Sensitivitätsanalyse wurde ausgewertet. Ohne weitere methodische Vertiefung scheint der Ansatz in der untersuchten Form keine Vorteile zu bieten. Mit einer auf derselben Grundidee beruhenden Software des Imperial College London wurden jedoch einige Tests vorgenommen, die zu vielversprechenden Ergebnissen führten.
- AP7: Um die im Rahmen des Projekts erzielten Ergebnisse mit einer Gruppe von Experten zu diskutieren und anderen Forschungsergebnissen gegenüberzustellen wurde in Zusammenarbeit mit der TU Clausthal ein internationaler Fachworkshop erfolgreich durchgeführt.
Auf der internationale Fachkonferenz SAMO 2016 wurden drei Beiträge präsentiert.
- AP8: Im Berichtszeitraum lag der Schwerpunkt der Arbeiten auf der Dokumentation und der Weiterarbeit am Abschlussbericht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Projekt ist inhaltlich abgeschlossen. Der Abschlussbericht wird kurzfristig fertiggestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- GRS, TU Clausthal (ed.): International Workshop on Sensitivity Analysis of Final Repository Systems. Braunschweig, 17-18 October 2016
- D.-A. Becker, S. Spießl: Investigation of Modern Methods of Probabilistic Sensitivity Analysis of Final Repository Performance Assessment Models. SAMO 2016
- S. Spießl, D.-A. Becker: A Guideline for Sensitivity Analysis of Repository Models, SAMO 2016
- T. Reiche, D.-A. Becker: RepoSTAR – New Framework for Statistic Runs. SAMO 2016
- S. Spießl, D.-A. Becker: Investigation of Modern Methods of Probabilistic Sensitivity Analysis of Final Repository Performance Assessment Models (MOSEL). GRS-412, Köln 2017 (in Vorbereitung)

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11061A
Vorhabensbezeichnung: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2011 bis 28.02.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 842.910,00 EUR	Projektleiter: Dr. Rübel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das verfügbare Instrumentarium für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für hochaktive Abfälle im Tonstein in Deutschland wird überprüft und bewertet. Die Anforderungen an die einzusetzenden Instrumentarien und benötigten Daten werden katalogisiert. Der Katalog behandelt konzeptuelle Modelle, Szenarienanalyse, Bewertung der Wirksamkeit geologischer und technischer Barrieren (Integrität) sowie Bewertung möglicher Freisetzungen. Es wird geprüft, inwieweit adäquate Instrumentarien und Daten vorliegen und wie deren Anwendbarkeit auf der Grundlage vorliegender FuE-Ergebnisse zu bewerten ist. Schwerpunkte und Zielstellungen für ergänzende FuE-Arbeiten werden in Form einer Defizitanalyse formuliert.

Die gemeinsame Bearbeitung durch BGR, GRS und DBE TECHNOLOGY soll eine ausgewogene und vollständige Betrachtung aller Instrumentarien gewährleisten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geologie der relevanten Tonsteininformationen und zugehöriges Endlagerkonzept
- AP2: Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tonstein in Deutschland
- AP3: FEP-Selektion und Szenarientwicklung
- AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
- AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tonstein
- AP6: Berichtswesen
- AP7: Prozessanalysen zur Gasentwicklung und Gasbewegung

GRS ist federführend für das Arbeitspaket 5. Dieses gliedert sich in die Unteraufgaben:

- AP5.1: Erstellung des Nachweiskonzeptes
- AP5.2: Bewertung der Datenlage
- AP5.3: Bewertung des Instrumentariums

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wurden im Berichtszeitraum vier ganztägige Arbeitsgespräche mit den drei am Projekt beteiligten Organisationen durchgeführt. Die diskutierten Inhalte betrafen vor allem die Szenarientwicklung am Endlagerstandortmodell Süd und die Durchsprache der erstellten Berichtsteile zu den Projektberichten.

AP3: Es wurden mögliche Wege der Szenarienanalyse für das Endlagerstandortmodell Süd diskutiert. Auf Grund des nahenden Projektendes konnten die diskutierten Alternativen nicht mehr getestet werden, sondern es wurde beschlossen, die praktische Umsetzung der Szenarientwicklung für das Endlagerstandortmodell Süd auf ein mögliches Nachfolgeprojekt zu verschieben.

AP6: Es wurden Entwürfe der noch offenen Projektberichte erstellt und diskutiert. Den Schwerpunkt der Diskussionen bildeten dabei die Berichte zu den durchgeführten Prozessanalysen, zur Systemanalyse und der Synthesebericht des Projekts. Insgesamt werden im Projekt Ansicht bei Projektende Ende Februar 2017 20 einzelne Projektberichte vorliegen.

Es wurde eine englischsprachige Veröffentlichung erstellt und beim Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering eingereicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP6: Abschließende Fertigstellung und Veröffentlichung der Projektberichte.
Abschluss des Projekts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine	Förderkennzeichen: 02 E 11061B
Vorhabensbezeichnung: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2011 bis 28.02.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 774.035,00 EUR	Projektleiter: Jobmann

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel dieses Vorhabens ist es, zu prüfen, ob und wie ein Sicherheitsnachweis für ein HAW-Endlager in Tonstein in Deutschland geführt werden kann. Dabei wird zunächst der konzeptionelle Ansatz für einen Sicherheitsnachweis in prinzipieller Anlehnung an das Sicherheits- und Nachweiskonzept für einen Standort im Salz entwickelt, wobei die Methodik zum Nachweis der Integrität der geotechnischen und geologischen Barrieren im Vordergrund steht. Voraussetzung für einen Sicherheitsnachweis ist ein umfassender FEP-Katalog, der auf der Beschreibung der geologischen Gesamtsituation, der geowissenschaftlichen Langzeitprognose, dem Abfallmengengerüst und dem Endlagerkonzept sowie einer Abschätzung aller zukünftig im Endlagersystem zu erwartenden Prozesse basiert, und in dem alle zukünftig relevanten Eigenschaften, Ereignisse und Prozesse beschrieben sind. Es ist daher ein Teilziel, aufbauend auf dem VSG-FEP-Katalog, die FEP zu selektieren bzw. zu ergänzen, die für eine Endlagerung in deutschen Tonsteinformationen relevant sind. Diese sollen für die zwei Referenzregionen in einem FEP-Katalog NORD und einem FEP-Katalog SÜD dokumentiert werden, die dann die Grundlage für die Szenarientwicklung bilden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geologie der relevanten Tonsteinformationen und zugehöriges Endlagerkonzept
- AP2: Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tonstein in Deutschland
- AP3: FEP-Selektion und Szenarientwicklung
- AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
- AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tonstein
- AP6: Berichtswesen

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für AP2, AP4 und AP6 und bearbeitet im AP1 den Unterpunkt 1.2.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde die finale Dokumentation der Projektergebnisse bearbeitet und weitestgehend fertiggestellt. Die Dokumentation besteht aus insgesamt 20 Berichten, von denen die unten aufgeführten 8 Berichte von den Verbundpartnern gemeinsam erstellt wurden.

Insgesamt lässt sich als Ergebnis festhalten, dass durch die im Projekt ANSICHT durchgeführten Arbeiten eine grundlegende Voraussetzung für die sicherheitstechnischen und nachweisgestützten Auslegungen von Endlagerkomponenten sowie für Errichtung, Betrieb und Schließung eines in einer Tonformation zu betreibenden Endlagers geschaffen wurden. Die Ergebnisse können auch dazu beitragen, eine zielgerichtete Optimierung vorzunehmen zwischen Informationsbedarf für die Bewertung der Standorteignung und der Endlagersicherheit in Tonsteinformationen. Den Verantwortlichen für die Endlagerung wird damit ein Instrument bereitgestellt, das bei der anstehenden Standortsuche für ein Endlager für hoch-radioaktive Abfälle genutzt werden kann, insbesondere wenn es darum geht, Sicherheitsanalysen für unterschiedliche Standorte vergleichbar zu machen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung der beiden abschließenden Berichte (Systemanalysebericht und Synthesebericht)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Berichte:

Synthesebericht (erste Entwurfsfassung)

Systemanalyse für die Endlagerstandortmodelle - Methode und exemplarische Berechnungen zum Sicherheitsnachweis (erste Entwurfsfassung)

FEP-Katalog für das Endlagerstandortmodell SÜD

Szenarienentwicklung für das Endlagerstandortmodell NORD

FEP-Katalog für das Endlagerstandortmodell NORD

Spezifische Prozessanalysen

Code-Benchmark zur Vorbereitung numerischer Berechnungen zum Nachweis der Integrität der geologischen Barriere

Quantifizierung von Kriterien für Integritätsnachweise im Tonstein

Veröffentlichungen:

Lommerzheim, A., Jobmann, M., Mrugalla, S. & Rübel, A. (2016): Strategies for Final Disposal of HLW in German Clay Formations. 47th Ann. Meet. Nucl. Tech., 10.-12. May 2016, Hamburg (ANSICHT, 02E11061B)

Maßmann, J., Ziefle, G., Jobmann, M. (2016): Thermal-Hydraulic-Mechanical (THM) Coupled Simulation of a Generic Site for Disposal of High Level Nuclear Waste in Claystone in Germany, AGU Fall Meeting, 12.-16. Dezember 2016, San Francisco, USA

Jobmann, M., Bebiolka, A., Burlaka, V., Herold, P., Jahn, S., Lommerzheim, A., Maßmann, J., Meleshyn, A., Mrugalla, S., Reinhold, K., Rübel, A., Stark, L., Ziefle, G. (2016): Safety Assessment Methodology for a German High-level Waste Repository in Clay Formations. Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering (Open Access), Elsevier (eingereicht zur Veröffentlichung)

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11061C
Vorhabensbezeichnung: Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2012 bis 28.02.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 492.868,00 EUR	Projektleiter: Mrugalla	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Auf Grundlage des derzeitigen Standes von Wissenschaft und Technik zur HAW-Endlagerung sowie unter Berücksichtigung international bewährter Konzepte für Sicherheitsnachweise in verschiedenen geologischen Formationen wird eine Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tongestein erarbeitet und dessen Anwendbarkeit an jeweils einem generischen Modellstandort für NORD- und Süddeutschland getestet. Eine Differenzen-Betrachtung der beiden Modelle zueinander und zu einem Standort im Wirtsgestein Salz (VSG) wird vorgenommen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geologie der relevanten Tongesteinsformationen und zugehöriges Endlagerkonzept
 - AP2: Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tongestein (Deutschland)
 - AP3: FEP-Selektion und Szenarienentwicklung
 - AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
 - AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tongestein
 - AP6: Berichtswesen
- Die BGR ist federführend für die Arbeitspakete 1 und 3.

Unteraufgaben:

- AP1.1: Kriterien zur Auswahl von Referenzregionen und generischer Endlagerstandorte
- AP1.2: Zusammenstellung der Gesteinseigenschaften; Integritätsuntersuchungen „NORD“ und „SÜD“
- AP1.3: Beschreibung der geologischen Endlagerstandortmodelle „NORD“ und „SÜD“
- AP3.1: Prognose der weiteren geologischen Entwicklung für die Endlagerstandortmodelle „NORD“ und „SÜD“.
- AP3.2: Beschreibung der geologischen FEPs „NORD“ und „SÜD“
- AP3.3: Erarbeitung und Beschreibung der Szenarien „NORD“ und „SÜD“

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.3: Die drei Berichte zum Modell „SÜD“ (Standortmodellbeschreibung, Zusammenstellung der Gesteinseigenschaften, Auswahl von Parametern für Modellrechnungen) wurden veröffentlicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Erstellung eines Syntheseberichts zum Projekt.
- Erstellung eines Systemanalyseberichts zum Projekt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Reinhold, K., Stark, L., Kühnlenz, T. & Ptock, L. (2016): Projekt AnSichT - Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Endlagerstandortmodell SÜD – Teil I: Beschreibung des geologischen Endlagerstandortmodells. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Ergebnisbericht: 71 S; Hannover/Berlin

Jahn, S., Mrugalla, S. & Stark, L. (2016): Projekt AnSichT - Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Endlagerstandortmodell SÜD – Teil II: Zusammenstellung von Gesteinseigenschaften für den Langzeitsicherheitsnachweis. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Ergebnisbericht: 146 S.; Hannover

Maßmann, J. (2016): Projekt AnSichT – Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein. Endlagerstandortmodell SÜD – Teil III: Auswahl von Gesteins- und Fluideigenschaften für numerische Berechnungen im Rahmen des Langzeitsicherheitsnachweises. – Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Ergebnisbericht: 20 S.; Hannover

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11072A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K _d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.925.553,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt WEIMAR (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig) dient zur Weiterentwicklung des Smart-K_d-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen, welches im Rahmen des Vorhabens ESTRAL entwickelt und in das Rechenprogramm r^{3t} implementiert wurde. Nach einer Qualifizierung des neuentwickelten Rechenprogramms sollte dieses Konzept so erweitert werden, dass weitere, in natürlichen Systemen wichtige Prozesse berücksichtigt werden. Hierzu zählen die Rückkopplung von Redoxreaktionen und Ionenaustausch- bzw. Sorptionsreaktionen mit verschiedenen Einflussgrößen sowie die Berücksichtigung von Wässern mit sehr hoher Ionenstärke, bei denen der Pitzer-Formalismus anzuwenden ist. Diese Prozesse sollen nun berücksichtigt werden, um die Vorgänge noch realitätsnäher abzubilden und das Programm auf weitere Systeme anwendbar zu machen. Das hier zu entwickelnde Konzept ist sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar und gestattet somit auch einen Wissenstransfer auf andere Forschungsfelder.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Vergleichsrechnungen mit anderem Code
(Qualifizierung des neuen Rechenprogramms, z. B. mit Programmcode PHAST)
- AP2: Implementierung zusätzlicher Prozesse, Komponenten und Einflussgrößen
(Erarbeitung eines aktualisierten konzeptuellen Modells zur Berücksichtigung weiterer wichtiger Prozesse und Einflussgrößen, z. B. Redoxprozesse, höhere Ionenstärken)
- AP3: Laborexperimente
(Sorptions- und Säulenexperimente im Rahmen von Promotionsarbeiten)
- AP4: Erzeugung von SCM-Datensätzen und K_d Wert Matrizen
(Gewinnung thermodynamischer Sorptionsdaten und K_d-Berechnung)
- AP5: Berücksichtigung weiterer externer FEPs
(Umsetzung weiterer FEPs/Szenarien in Strömungs- und Transportmodellen)
- AP6: Anwendungsrechnungen (Strömungs- und Transportrechnungen)
- AP7: Qualitätsmanagement/Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Umstellung der Inputdateien auf das weiterentwickelte Transportprogramm d³f++ auf der Codeplattform UG4 und Weiterführung der Vergleichsrechnungen mit PHAST. Konzeptioneller Vergleich von d³f++ und PHAST in Bezug auf die programmtechnische Abbildung und Reihenfolge der geochemischen Prozesse. Modifikation des Testbeispiels (Verringerung der Komplexität) zur besseren Identifikation von Fehlerquellen/Unterschieden zwischen PHAST und d³f++.
- AP2: Fertigstellung und Dokumentation des konzeptionellen Modells für die Behandlung von Al und Beginn der Implementierung in das Transportprogramm d³f++.
- AP3: Oberflächenkomplexmodellierung zur Eu(III) SCP Bestimmung von Orthoklas mittels Diffuse double layer model (DDLm), basic Stern model (BSM) und non-electrostatic model (noEDL).
Reaktive Transportmodellierung von Eu(III) in Quarzsandsediment sowie der Reinmineralphase Orthoklas mittels DDLm, BSM, noEDL.
Modellierung von bodenphysikalischen Parametern der Säulenexperimente mittels STANMOD und/oder HYDRUS.
Vorstellung der aktuellen Ergebnisse auf der Goldschmidtkonferenz 2016 (Yokohama, Japan) sowie der DAEF Konferenz 2016 (Köln).
Planung und Durchführung der ersten Säulenexperimente mit Ni und Quarz.
Durchführung von ersten Batchversuchen mit Cs an Orthoklas und Muskovit.
- AP7: Durchführung von zwei Projekttreffen mit dem Verbundpartner HZDR in Braunschweig sowie mehrerer Arbeitstreffen zur Konzeptentwicklung.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Berechnung weiterer Varianten des Testfalls (Veränderung der betrachteten Lösung). Fertigstellung und Dokumentation der Modellrechnungen zu dem modifizierten Testfall mit dem weiterentwickelten Transportprogramm d³f++.
- AP2: Fertigstellung der Implementierung des konzeptionellen Modells in das Transportprogramm d³f++. Überarbeitung der Behandlung von Calcit.
- AP3: Oberflächenkomplexmodellierung zur Eu(III) SCP Bestimmung an Muskovit.
Anwendung Fehlerabschätzung der erhobenen SCP mittels Bootstrap-Verfahren.
Reaktive Transportmodellierung von Eu(III) im synthetischen Sediment.
Auswertung und SCP-Bestimmung aus Ni- und Ca-Sorptionsdaten. Durchführung und von Batchversuchen mit Cs an Orthoklas, Muskovit und SCP-Bestimmung.
Planung, Durchführung und Auswertung von Säulenexperimenten mit Ni, Quarz, Orthoklas und Muskovit.
- AP7: Durchführung eines weiteren Projekttreffens mit dem Verbundpartner HZDR.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Britz, S.; Noseck, U.; Durner, W.; Iden, S.; Zachmann, D.; Brendler, V.; Stockmann, M.; Lützenkirchen, J.: Eu(III) reactive transport modelling: Application of the smart K_d – approach. DAEF, 26-28.9.2016, Köln, D
- Britz, S.; Noseck, U.; Durner, W.; Iden, S.; Zachmann, D.; Brendler, V.; Stockmann, M.; Lützenkirchen, J.: Eu(III) reactive transport modeling: The “smart-Kd” approach. Goldschmidt 2016 Conference Abstracts.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11072B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K _d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 30.11.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 30.11.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 589.956,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brendler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt WEIMAR (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig) dient zur Weiterentwicklung des Smart-K_d-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen, welches im Rahmen des Vorhabens ESTRAL entwickelt und in das Rechenprogramm r^{3t} implementiert wurde. Nach einer Qualifizierung des neuentwickelten Rechenprogramms sollte dieses Konzept so erweitert werden, dass weitere, in natürlichen Systemen wichtige Prozesse berücksichtigt werden. Hierzu zählen die Rückkopplung von Redoxreaktionen und Ionenaustausch- bzw. Sorptionsreaktionen mit verschiedenen Einflussgrößen sowie die Berücksichtigung von Wässern mit sehr hoher Ionenstärke, bei denen der Pitzer-Formalismus angewandt werden sollte. Diese Prozesse sollen berücksichtigt werden, um die Vorgänge noch realitätsnäher abzubilden und das Programm auf weitere Systeme anwendbar zu machen. Das hier zu entwickelnde Konzept ist sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar und gestattet somit auch einen Wissenstransfer auf andere Forschungsfelder.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Vergleichsrechnungen mit anderem Code
(Qualifizierung des neuen Rechenprogramms, z. B. mit Programmcode PHAST)
- AP2: Implementierung zusätzlicher Prozesse, Komponenten und Einflussgrößen
(Erarbeitung eines aktualisierten konzeptuellen Modells zur Berücksichtigung weiterer wichtiger Prozesse und Einflussgrößen, z. B. Redoxprozesse, höhere Ionenstärken)
- AP3: Laborexperimente
(Sorptions- und Säulenexperimente im Rahmen von Promotionsarbeiten)
- AP4: Erzeugung von SCM-Datensätzen und K_d Wert Matrizen
(Gewinnung thermodynamischer Sorptionsdaten und K_d-Berechnung)
- AP5: Berücksichtigung weiterer externer FEPs
(Umsetzung weiterer FEPs/Szenarien in Strömungs- und Transportmodellen)
- AP6: Anwendungsrechnungen (Strömungs- und Transportrechnungen)
- AP7: Qualitätsmanagement/Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

- Weiterentwicklung des Konzeptes bezüglich Einbindung von Al als Konkurrenzion

AP4:

- Aktualisierung der Datenbasis WEIMAR_EDH.dat und WEIMAR_Pitzer.dat
- Finalisierung des geochemischen Modells zur Erzeugung der „Smart K_d -Matrizen“
- Anwendung eines verbesserten methodischen Ansatzes für die Sensitivitätsanalyse

4. Geplante Weiterarbeiten

AP7:

- Erstellung des Abschlussberichtes
- Fertigstellung der Publikation zur Beschreibung des „Smart K_d -Konzeptes“
- Aktualisierung der Webseite

5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Stockmann, V. Brendler, J. Flügge, U. Noseck: "Multidimensional "smart K_d -matrices" for realistic description of sorption processes", 15th Water-Rock Interaction International Symposium, 16.-21.10.2016, Évora, Portugal

M. Stockmann, D. Becker, J. Flügge, J. Schikora, U. Noseck, V. Brendler: "Smart K_d -concept for realistic description of sorption processes", DAEF, 26-28.09.2016, Köln, D

S. Britz, U. Noseck, J. Fricke, V. Brendler, M. Stockmann, W. Durner, S. Iden, D. Zachmann, J. Lützenkirchen: „Reactive transport modeling: Application of the «smart K_d -concept»“, DAEF, 26-28.09.2016, Köln, D (POSTERPREIS !)

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11092
Vorhabensbezeichnung: Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 30.04.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 474.726,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Mischo	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es soll eine Grundrezeptur für einen verbesserten Steinsalzversatz vorgeschlagen werden, dessen Gefüge so stabilisiert ist, dass nach dem Einbau ein praktisch 100 %-iger Befüllungsgrad erreicht wird und die Stützwirkung des Versatzes so hoch ist, dass Auflockerungen (Rissbildungen) im umliegenden Gebirge ausgeschlossen werden können. Gleichzeitig soll eine Anfangspermeabilität des Versatzes von $< 10^{-14}$ m² erreicht werden. Die Parameter Verformungswiderstand und Permeabilität sollen sich mit zunehmender Einwirkungszeit der Gebirgskonvergenz verbessern.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Anpassung möglicher Bindemittelsysteme hinsichtlich Mischbarkeit und Benetzung mit Salzgrus
- AP2: Möglichkeiten der Polyhalitbildung durch Anpassung der in AP1 untersuchten Rezepturansätze (Institut für Anorganische Chemie)
- AP3: Laborversuche zur Bestimmung von Festigkeit, Kriech- und Relaxationsverhalten, Permeabilität und Quellverhalten
- AP4: Untersuchung des Materialverhaltens im Einbauzustand
- AP5: Voruntersuchung der alternativen Einbautechnologie
- AP6: Abschluss Etappe I

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP4: Es wurden Blasversatzversuche in situ durchgeführt. Die Versuchsergebnisse zeigen, dass eine Separation des Korngemisches sowie eine Änderung der entsprechenden Versatzzeigenschaften auftreten. Eine ausreichende Verdichtungsenergie konnte nicht ermittelt werden. Der deutlich erhöhte Schüttwinkel des GESAV-Materials erschwerte die Befüllung der Maschine durch ein nicht ausreichendes Nachrutschen des Versatzmaterials. Darüber hinaus wurden Probleme bei hohen Durchgangsmengen im pneumatischen Förderer ermittelt. Eine Optimierung hinsichtlich der In-situ-Versuche wird erarbeitet. Mögliche Qualitätssicherungsverfahren für labortechnische und In-situ-Verfahren wurden identifiziert.
- AP5: Der Aufbau eines neuartigen Versatzverfahrens wurde entwickelt. Eine labortechnische Untersuchung zu Beginn des 1. Quartals 2017 wurde geplant.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP4: Weiterführende Untersuchungen des Misch- und Transporteinflusses auf das Versatzmaterial. Abschließende Ausarbeitung eines Qualitätssicherungsprogramms für In-situ-Versuche.
- AP5: Entwurf einer alternativen Einbautechnologie mit den Schwerpunkten auf der mechanischen Umsetzbarkeit und Beeinflussung der Gefügestabilisierung durch ein neuartiges Einbauverfahren.
- AP6: Erstellung des Abschlussberichts zu GESAV Phase I.

5. Berichte, Veröffentlichungen

S. Becker, M. Gruner, D. Freyer, H. Mischo; „Möglichkeiten der Gefügestabilisierung von Salzgrusversatz (Teil 2)“ in Bergbau, Zeitschrift für Rohstoffgewinnung, Energie, Umwelt Offizielles Organ des RDB e.V.; ISSN-Nr.: 0342-5681, Nr. 11 November 2016, S. 497 - 500

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11102
Vorhabensbezeichnung: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2	
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2012 bis 31.03.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.216.103,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens werden die wissenschaftlichen Ergebnisse von experimentellen und theoretischen FuE-Vorhaben im Hinblick auf ihre Berücksichtigung in Modellvorstellungen und Modelldaten für Langzeitsicherheitsanalysen ausgewertet. Beantragte und laufende Projekte werden hinsichtlich ihrer Relevanz für die Bewertung der Langzeitsicherheit und die Verwendung in einem Safety Case überprüft.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

TA1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

- Verfolgung und Bewertung internationaler Entwicklungen zu offenen Fragen bei Langzeitsicherheitsnachweisen und Einbringung nationaler Interessen in internationale Aktivitäten.
- Weiterentwicklung methodischer Vorgehensweisen in der Langzeitsicherheitsanalyse bzw. für den Safety Case.
- Diskussion von eigenen und externen Ergebnissen in nationalen Diskussionsforen zur Erarbeitung gemeinsamer Stellungnahmen und Vorgehensweisen zu ausgewählten Themen der Endlagerung in Deutschland.
- Auswertung neuer wissenschaftlicher Ergebnisse und Aufbereitung zur Verwendung in Instrumentarien für Langzeitsicherheitsanalysen.

TA2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

- Entwicklung methodischer Ansätze im Hinblick auf die Abwägung zwischen Sicherheit in der Betriebsphase und Langzeitsicherheit.
- Weiterführende Untersuchungen zur Aufsättigung von Bentonithaltigen Buffermaterialien im Hinblick auf die Aufsättigungsdynamik bei begrenztem Wasserangebot.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA1:

- Teilnahme an den Sitzungen der IGSC und der IGSC Core Group, an der Arbeitssitzung zum RK&M Projekt und an der IAEA International Conference on the Safety of Radioactive Waste Management.
- CAST: Durchführung von Rechnungen zur Ausbreitung von gasförmigen C-14 im Endlager entsprechend dem Endlagermodell der VSG. Im ersten Schritt wurde das Rechenmo-

dell für das Programm TOUGH2 erstellt und die Ergebnisse der langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen in der VSG nachmodelliert.

- Teilnahme am technischen Meeting des IAEA-Projekts MODARIA-II in der Arbeitsgruppe 6: Biosphere modelling for long-term safety assessments for waste disposal facilities.
- Mitarbeit bei den Aktivitäten der IGSC: Leitung der Arbeitsgruppe Safety Case Communication und Implementierung aller Kommentare von IGSC und FSC in den Abschlussbericht.
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog und zur FEP-Datenbank (www.saltfep.org). Vorstellung der Arbeiten im Salt Club und auf dem siebten „US/German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation“ vom 7. bis 9. September in Washington.
- Identifizierung der langzeitsicherheitsrelevanten Radionuklide für ein Endlager in Salz anhand von REPOTREND-Rechnungen und Zusammenstellung weiterer Daten für die neue Arbeitsgruppe zu Radionuklidinventaren in CSD-V und CSD-C Abfällen.
- NEA State-of-the-art report: Das Kapitel, das den Stand der Modellierung hochsalinärer Lösungen mit zweiwertigem Eisen unter Verwendung des Pitzer-Ansatzes beschreibt, wurde fertiggestellt. Mit den Arbeiten an dem Kapitel für dreiwertiges Eisen wurde begonnen.
- Dokumentation der Arbeiten zur Quantifizierung potentieller mikrobieller Effekte in einem Endlager in einer Tonformation. Für eine belastbare Quantifizierung wird der Einsatz eines Softwaretools empfohlen.

TA2:

- Eine Reihe unerwarteter Probleme bei der Durchführung des Aufsättigungsversuchs mit begrenzter Wasserzufuhr wurden erkannt und gelöst (Heberleitungseffekt bei parallelem Betrieb mehrerer Zellen, Beeinflussung der Gewichtsmessung durch Auftrieb der Zelle im Wasser und Verdunstung im Ringspalt).

4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme an der RWMC-Sitzung und an den Arbeiten sowie dem nächsten Treffen der NEA Initiative „Preservation of Records, Knowledge and Memory (RK&M)“.
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog. Erweiterung der Funktionsfähigkeit der Datenbank.
- Teilnahme am nächsten Treffen der Arbeitsgruppe zu Radionuklidinventaren in CSD-V und CSD-C Abfällen.
- Teilnahme an der 93. Sitzung des Arbeitskreises HAW-Produkte.
- Mitarbeit an einem zusammenfassenden Bericht über die Auswirkungen von Mikroben in einem Endlager in Salz im Rahmen des Salt Clubs.
- CAST: Durchführungen von Rechnungen zur Ausbreitung von C-14 in einem Endlager im Salz unter Berücksichtigung verschiedener Annahmen zum C-14 Quellterm.
- Teilnahme am Halbjahres-Workshop im Projekt MODARIA-II in Brugg (Schweiz).

TA2:

- Teilnahme am Workshop der Task Force EBS in Hannover.
- Fortsetzung der beiden Versuchsreihen zur Bentonitaufsättigung.
- Weiterführung der Bewertung von Analoga-Studien in Ton.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11122
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.08.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 443.525,00 EUR	Projektleiter: Dr. Moog	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es soll ein Modell entwickelt und experimentell abgesichert werden, mit dem die veränderliche Permeabilität eines Dichtbauwerks aus Sorelbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen in Salzformationen infolge der Korrosion durch Salzlösungen zeit- und ortsabhängig beschrieben werden kann. Das Modell soll die diffusions- und advektionsbestimmte Korrosion durch die geringpermeable störungsfreie Sorelbeton-Matrix ebenso beschreiben, wie die Korrosion auf Rissen und entlang der Kontaktflächen Dichtbauwerk-Salzgebirge. Das Vorhaben wird in Kooperation mit dem Vorhaben LASA (Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar) der GRS durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Laborversuche

- AP1.1: Herstellung von Sorelbetonproben und von Korrosionslösungen
- AP1.2: Ermittlung von Materialkenngrößen des Sorelbetons mit ungestörter Matrix sowie von gestörten Proben
- AP1.3: Kaskadenversuch: Versuche zur Ermittlung des Reaktionspfades der Korrosion mit NaCl- und IP21-Lösung
- AP1.4: Vorbereitung der Versuchsreihen
- AP1.5: Durchführung der Versuchsreihen
- AP1.6: Probenahme und Messungen
- AP1.7: Auswertung der Messdaten

AP2: Modelltheoretische Arbeiten

- AP2.1: Bereitstellung der thermodynamischen Daten
- AP2.2: Aufstellung, Test und Anpassung eines reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung des diffusions- und advektiv bestimmten Lösungsangriffs auf die poröse Matrix von Sorelbeton
- AP2.3: Aufstellung, Test und Anpassung eines reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung des Lösungsangriffs auf Risse und auf der Kontaktfläche zum Salz
- AP2.4: Programmierarbeiten zur Aufrüstung des Programmpakets OpenGeoSy-Rockflow/ChemApp für die Berechnung der Modelle

AP3: Simulationsrechnungen

AP3.1: Geochemische Gleichgewichtsmodellierung der Ergebnisse aus den Kaskadenversuchen

AP3.2: Nachmodellierung der Versuchsergebnisse aus den Versuchsreihen

AP4: Dokumentation der Ergebnisse und Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Verfassen des Abschlussberichts.

4. Geplante Weiterarbeiten

Vorhaben zum 31.08.2016 beendet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jantschik, K., Herbert, H.-J., Hertes, U., Meyer, T., Moog, H. C. (2016): Full scale demonstration of plugs and seals (DOPAS), Deliverable D3.29. Status report on LAVA related laboratory tests and on process modeling activities, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-Bericht 3850, February 2016

Jantschik, K., Moog, H.C. (2016): Chemical and hydraulic behaviour of cementbased sealing materials in rock salt - laboratory investigations and modelling activities, Workshop Mechanisms and Modelling of Waste/Cement Interactions 2016, Murten-Löwenberg (Switzerland)

Czaikowski, O., Jantschik, K., Moog, H.C., Wiczorek, K., Zhan, C.-L. (2016): CH/HM coupled behavior of shaft sealing materials, DOPAS-Seminar 2016, Turku (Finland)

Jantschik, K., Moog, H.C. (2016): Investigation of Chemical-hydraulic Behaviour of Cement based Sealing Materials in Rock Salt (DOPAS-Project), DOPAS-Seminar 2016, Turku (Finland)

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11132
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.08.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 519.088,00 EUR	Projektleiter: Dr. Czaikowski

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das von der EU im Rahmen des DOPAS-Projektes zu 50 % co-finanzierte Vorhaben hat die Bereitstellung von Labordaten für die modelltheoretische Analyse des Langzeitdichtvermögens von Verschlussmaterialien im Zusammenwirken mit der Auflockerungszone zum Ziel. Hierzu sind die notwendigen Kenntnisse und Daten zum geomechanischen und geohydraulischen Materialverhalten auf der Grundlage von laborativen Untersuchungen zu ermitteln und im Hinblick auf einen fundierten Nachweis der Langzeitdichtfunktion eines Schachtverschlusskonzeptes für ein Endlager in Salzformationen zur Verfügung zu stellen.

Das Gesamtziel des Vorhabens wird durch unterschiedliche Projektbeiträge erreicht:

- Laboruntersuchungen am Salz-/Sorelbeton und am System Beton/Gebirge,
- Prozessanalytische Modellrechnungen zur Validierung der THM gekoppelten Stoffmodelle und zur Verbesserung des Verständnisses der gekoppelten hydraulisch-mechanischen Prozesse im Schachtverschlussystem.

Das Vorhaben leistet damit einen Beitrag zur sicherheitsanalytischen Bewertung des Langzeitverhaltens von Salzformationen als Endlagerwirtsgestein.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Laborative Untersuchungen zum Verhalten des verfestigten Salz-/Sorelbetons in Triaxialdruckversuchen mit Ermittlung des Kompaktionsverhaltens, der Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung, der Dilatanz- bzw. Festigkeitsgrenze. Zusätzlich soll das langzeitige mechanische und hydraulische Verhalten in ein-/triaxialen Kriechversuchen ermittelt werden. Durchführung weiterer Untersuchungen zur Bestimmung des HM Verhaltens des Systems Beton/Gebirge.

AP2: Prozessanalytische Modellierung: Auswahl geeigneter Stoffmodelle und Materialdaten, Nachprüfung der Anwendbarkeit der Salzmodelle für Salz-/Sorelbeton, Bestimmung der Stoffmodellparameter aus den Laborversuchen, Kalibrierung und Validierung der ausgewählten Stoffmodelle durch Simulation typischer Laborversuche. Durchführung einer HM gekoppelten Modellrechnungen zur Prognose des Langzeitverhaltens eines Schachtverschlussystems im Salinar.

AP3: Ergebniszusammenführung und Berichterstattung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Abschluss der experimentellen Untersuchungen
- Fortführung modelltheoretischer Untersuchungen im Rahmen einer Masterarbeit bis Ende 2016
- Fertigstellung des Abschlussberichts von LASA

4. Geplante Weiterarbeiten

Vorhaben zum 31.08.2016 beendet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Middelhoff, M.; Czaikowski, O.: Modelling the long-term deformation behavior of concrete based sealing materials in rock salt related to the DOPAS project - Applicability assessment of the „Argillite-/ Composite- model“- approach. CODE_BRIGHT Workshop. 19. May 2016, UPC, Barcelona, Spain.

Czaikowski, O.; Jantschik, K.; Moog, H.C.; Wieczorek, K.; Zhang, C.-L.: CH/HM coupled behavior of shaft sealing materials. DOPAS 2016 Seminar, May 25-27, 2016, Turku, Finland.

Czaikowski, O., Dittrich, J., Hertel, U., Jantschik, K., Wieczorek, K., Zehle, B.: Full scale demonstration of plugs and seals (DOPAS) Deliverable D3.31. Final technical report on EL-SA related testing on mechanical-hydraulic behavior - LASA, GRS-A-3851, Gesellschaft für Anlagen-und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Braunschweig, 2016

Czaikowski, O., Dittrich, J., Hertel, U., Jantschik, K., Wieczorek, K., Zehle, B.: Development of mechanical- hydraulic models for the prediction of the long-term sealing capacity of concrete based sealing materials in rock salt (LASA), GRS-432, ISBN 978-3-946607-14-4, Gesellschaft für Anlagen-und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Braunschweig, 2016

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11142
Vorhabensbezeichnung: Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.08.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 195.121,00 EUR	Projektleiter: Dr. Rübel

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben PASS stellt die von der GRS im Rahmen des internationalen Vorhabens „Full Scale Demonstration of Plugs and Seals“ (DOPAS) durchzuführenden Arbeiten in den Tasks 5.2 und 5.3 des Arbeitspakets 5 dar. Das Projekt DOPAS findet im 7. Rahmenprogramm der Europäischen Union statt. Die GRS nimmt daran als maßgeblicher Partner teil und ist Arbeitspaketleiter des Arbeitspakets 5.

Die Arbeiten in PASS beziehen sich vor allem auf die Auswertung der experimentellen Arbeiten und Prozessmodellierungen im Rahmen der Projekte LAVA, LASA und THM-Ton sowie der Arbeiten der internationalen Projektpartner im Projekt DOPAS im Hinblick auf deren Verwertbarkeit zum Nachweis der Langzeitsicherheit.

Die wichtigsten Aspekte dabei sind die

- Identifizierung der für den Langzeitsicherheitsnachweis relevanten Prozesse, die
- Konzeptionierung von Modellen für integrierte Rechenprogramme, die
- Durchführung von integrierten Rechnungen für generische Endlager, die
- Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zur Bestimmung der Robustheit des Endlagersystems in Bezug auf die geotechnischen Verschlussbauwerke und die
- Identifikation der verbleibenden Unsicherheiten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Verhalten des Verschlusssystems. Dieses Arbeitspaket beinhaltet die Arbeitsschritte: Stand von Wissenschaft und Technik zum Prozessverständnis, Prognose der Prozessabläufe über große Zeiträume und Identifikation relevanter Prozesse

AP2: Konzeptuelle Modelle und Prozessanalyse. Dieses Arbeitspaket beinhaltet die Arbeitsschritte: Review der nationalen und internationalen Standards und Bestimmungen und Entwicklung der konzeptuellen Modelle für die Wirtsgesteinstypen Salz und Tonstein

AP3: Langzeitsicherheitsanalytische Modelle und integrierte Analyse. Dieses Arbeitspaket beinhaltet die Arbeitsschritte: Implementierung, Integrierte Analyse sowie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

AP4: Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP4: Organisation des WP5 in DOPAS als Arbeitspaketleiter.

Fertigstellung des Abschlussberichts von PASS.

Überarbeitung des Deliverable D5.10 als gemeinsamen Abschlussbericht aller Projektpartner im WP5 von DOPAS auf Basis der Kommentare im externen Review Prozess.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Rübel, A., Buhmann, D., Kindlein, J., Lauke, T.: Performance Assessment of Sealing Systems - Conceptual and integrated modelling of plugs and seals. GRS-415, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2016. ISBN: 978-3-944161-97-6

Rübel, A. (Editor), Åkesson, M., Bailey, L. E. F., Börgesson, L., Bosgiraud, J. M., Buhmann, D., Burlaka, V., Conil, N., Crawford, M., Czaikowski, O., Galson, D. A., Gondolli, J., Hakala, M., Hart, J., Havlová, V., Jantschik, K., Jobmann, M., Kindlein, J., Koskinen, K., Kristensson, O., Lauke, T., Moog, H. C., Pintado, X., Rautioaho, E., Rosca-Bocancea, E., Schirmer, S., Schröder, T. J., Trpkšová, D., Valli, J., Večerník, P., Vuorio, M., Wendling, J., Zhang, C.-L.: WP5 final integrated report, DOPAS Project, Deliverable D°5.10

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11152
Vorhabensbezeichnung: Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik, Feld 3.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.08.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 297.778,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Eine wesentliche Komponente in Verschlusskonzepten für Schächte ist eine Schottersäule, die durch ihre Setzungsstabilität als Stützelement für aufliegende Dichtelemente dient. Eine Alternative dazu wäre eine Füllsäule aus Salzgrus. Der Vorteil bei der Verwendung von arteigenem Material ist die Tatsache, dass man nicht nur eine Stützsäule hätte, sondern dass man zusätzlich auch von einer langfristigen Dichtwirkung dieser Säule Kredit nehmen kann. Durch die Konvergenz des Gebirges wird das Salzgrus weiter verdichtet und in seiner Durchlässigkeit reduziert. Um das zu erreichen, bedarf es einer bestmöglichen Verdichtbarkeit des arteigenen Materials sowie geeigneter Verdichtungsverfahren. Im Rahmen dieses Vorhabens soll anhand von Modellberechnungen zum einen untersucht werden, bei welcher Korngrößenverteilung eine bestmögliche In-situ-Verdichtbarkeit erreicht werden kann und zum anderen, welche verfahrenstechnischen Maßnahmen im Rahmen von In-situ-Verdichtungsprozessen eine bestmögliche Verdichtung erwarten lassen.

Zu diesem Zweck wird ein Partikelmodell entwickelt, mit dessen Hilfe unterschiedliche Korngrößen- bzw. Kornverteilungen generiert und ein Verdichtungsprozess simuliert werden kann. Es wird untersucht, welche Korngrößenverteilung die bestmögliche Verdichtbarkeit gewährleistet und welchen Einfluss unterschiedliche Verdichtungsverfahren auf das Verdichtungsergebnis haben. Bei den Verfahren handelt es sich um die Rüttelverdichtung und die Impulsverdichtung. Bei beiden Verfahren handelt es sich um Methoden, bei denen das Material in kurzer Zeit verdichtet wird. Rheologisches Materialverhalten wie beispielsweise Kriechen kommt dabei nicht zum Tragen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Materialoptimierung

AP2: Verfahrensoptimierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im verbliebenen Berichtszeitraum wurde die finale Dokumentation der Projektergebnisse fertiggestellt. Als wesentliches Ergebnis lässt sich folgendes festhalten:

Vorrangiges Ziel war die Entwicklung einer Design Basis (Auslegungsgrundlage) und die Entwicklung von Strategien, um die Übereinstimmung von Referenzentwürfen mit der Design Basis für Verschlussbauwerke nachzuweisen. Wesentliche Ergebnisse zur Definition einer Design Basis waren die Entwicklung von Anforderungen an die im Projekt betrachteten Verschlussbauwerke und die an die Programme zum Nachweis der Konformität mit der Design Basis angepassten Strategien. Die Entwicklung einer Design Basis für ein Referenzdesign eines Schachtverschlusses, d. h. das Design, das als Grundlage für den Sicherheitsnachweis dient, und für die Planung großmaßstäblicher In-situ-Versuche wurden diskutiert. Die Strategie für eine solche Entwicklung wurde als Workflow dargestellt, der skizziert, wie die Design Basis von Verschlussbauwerken mittels eines Arbeitsablaufs mit wachsendem Detaillierungsgrad entwickelt werden kann.

Mit den Ergebnissen der durchgeführten Modellierungsarbeiten wurde eine gute Grundlage geschaffen für die Verbesserung der Modellierungsmöglichkeiten speziell im Zusammenhang mit Gesetzmäßigkeiten zur Beschreibung der Kompaktion granularer Abdichtmaterialien. Untersuchungsergebnisse aus dem Labor und aus In-situ-Versuchen sind die fundamentale Grundlage für die Entwicklung von Stoffgesetzen, die im Rahmen von rechnerisch zu führenden Sicherheitsnachweisen verwendet werden können. Speziell das entwickelte Kompaktionsmodell kann verwendet werden, um die Verdichtung einer Salzgrus-Ton-Mischung mittels der „Discrete Element Modelling“ Methode (DEM) zu simulieren. Nach Überführung in ein vollständiges 3D-Modell kann damit die Möglichkeit geschaffen werden, die Verdichtung eines entsprechenden Materials für den realen Einsatz zu prognostizieren und damit den rechnerischen Funktionsnachweis zu unterstützen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

DOPAS D2.4: WP2 Final Report - Design Basis for DOPAS Plugs and Seals

DOPAS D3.30: WP3 Final Summary Report - Summary of, and Lessons Learned from, Design and Construction of the DOPAS Experiments

DOPAS D4.4: WP4 Integrated Report - Summary of Progress on, and Performance Evaluation of, Design, Construction and Monitoring of Plugs and Seals

DOPAS D5.10: WP5 Final Integrated Report - Performance assessment of the plugs and seals systems

Jobmann, M. & Herold, P. (2016): Compliance Assessment for Plugs and Seals in Germany, DOPAS Seminar, 25.-27. May 2016, Turku, Finland

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11182A
Vorhabensbezeichnung: Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SANToS		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 28.02.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 537.700,00 EUR	Projektleiter: Dr. Rübel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen der wissenschaftlich-technischen Zusammenarbeit von in Fragen der Endlagerung zwischen ROSATOM und dem Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) soll im Themengebiet zur „*Sicherheitsanalyse von Endlagern in oberflächennahen Tonformationen in der Nachbetriebsphase*“ die Überprüfung der Datengrundlage und des Instrumentariums zur Durchführung einer Sicherheitsanalyse für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation durchgeführt werden.

Das auf der Grundlage der lokalen russischen geologischen und hydrogeologischen Verhältnisse entwickelte Endlagerkonzept wird mit den im Rahmen deutscher Forschungsprojekte (z. B. AnSichT) entwickelten Konzepten mit dem Ziel verglichen, ggf. Möglichkeiten zur Optimierung des deutschen Sicherheitsnachweiskonzeptes aufzuzeigen. Die Übertragbarkeit von Erfahrungen, Ergebnissen, Interpretationen und Daten aus dem russischen Konzept auf Deutschland wird geprüft.

Die gemeinsame Bearbeitung durch BGR, GRS und DBE TECHNOLOGY soll eine ausgewogene und vollständige Betrachtung aller Instrumentarien gewährleisten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektkoordination
- AP2: Review der geologischen Gesamtsituation und ergänzende Gesteinsuntersuchungen
- AP3: Systemanalyse
- AP4: Verschlusskonzept und Nachweisführung
- AP5: Berechnungen zur Radionuklidenausbreitung
- AP6: Berichtswesen

GRS ist federführend für das Arbeitspaket 5. Dieses gliedert sich in die Unteraufgaben:

- AP5.1: Indikative Berechnungen mit generischen Modellen
- AP5.2: Berechnungen mit präzisierten Modellen
- AP5.3: Variationsrechnungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Es wurde eine Reise nach Sankt Petersburg zur Besprechung der bisher erzielten Projektergebnisse und zur Abstimmung der weiteren Arbeiten mit den russischen Projektpartnern durchgeführt.
- AP5: Erstellung eines 3D Rechenmodells zur Verwendung in dem Simulationsprogramm d^3f^{++} zur Modellierung der Grundwasserbewegung im Modellgebiet.
Durchführung probabilistischer Rechnungen mit den Rechenprogrammen CLAYPOS, POSA und BioTREND unter Anwendung der in der bisherigen Projektbearbeitung festgelegten Parameterbandbreiten und Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen. Es wurde zum einen eine Unsicherheitsanalyse durchgeführt, um die Bandbreite der errechneten Strahlenexposition auf Grund der Ungewissheit der verwendeten Daten abschätzen zu können. Weiterhin wurde eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt, um diejenigen Parameter zu identifizieren, deren Ungewissheit den größten Einfluss auf die berechnete potenzielle Strahlenexposition haben.
Die Arbeiten zur Berechnung des Radionuklidtransports mit Programmen der Langzeitsicherheitsanalyse sind damit abgeschlossen. Die Ergebnisse wurden in einem Berichtsteil zum Abschlussbericht dokumentiert.
Aufbau eines Modells für das Rechenprogramm TOUGH2 zur Berechnung des Gas transports und der Entwicklung des Gasdrucks innerhalb des Endlagers. Es wurden verschiedene Rechenfälle mit dem erzeugten Modell durchgeführt und ausgewertet. Die erzielten Ergebnisse können auch als Lastannahme für die Auslegung der Verschlussbauwerke durch die anderen Projektpartner verwendet werden. Es wurden weiterhin Ausbreitungsrechnungen gasförmiger Radionuklide im Endlagersystem unter Verwendung des gleichen Modells durchgeführt.
Die Arbeiten zur Berechnung des Gastransports und des Transports gasförmiger Radionuklide sind damit abgeschlossen. Die Ergebnisse wurden in zwei Berichtsteilen zum Abschlussbericht dokumentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP5: Durchführung und Dokumentation der Modellrechnungen zur Grundwasserbewegung mit dem Rechenprogramm d^3f^{++} .
- Fertigstellung und Diskussion des Abschlussberichts.
- Durchführung einer Reise zu den russischen Projektpartnern zur Präsentation und Diskussion der erreichten Projektergebnisse.
- Abschluss des Projekts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11182B	
Vorhabensbezeichnung: Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SANToS			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 28.02.2017		Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 352.065,00 EUR		Projektleiter: Dr. Krone	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Von russischer Seite wird zurzeit geprüft, ob ein Endlager in einer diagenetisch überprägten Tonsteinformation errichtet werden kann. Im Rahmen dieses Vorhabens werden sicherheitstechnische Teilaspekte erarbeitet, die zu einem späteren Zeitpunkt zu einer Bewertung von Standorten in Tonformationen beitragen können. Das besondere Interesse an den gemeinsamen Arbeiten ist darin begründet, dass es im Rahmen des Vorhabens auf der Grundlage realer Erkundungsdaten möglich ist, sicherheitsanalytische Instrumentarien zu testen und ihre Übertragbarkeit auf andere Regionen bzw. Standorte zu bewerten.

Es wird ein Review der geologischen Gesamtsituation durchgeführt. Darauf aufbauend soll ein geologisches Standortmodell erstellt werden, das als Grundlage sowohl für die Entwicklung eines Verschlusskonzeptes, als auch für die Prognose der geologischen Langzeitentwicklung dient. Ausgehend von der Strukturierung des FEP-Kataloges, der im FuE-Vorhaben AnSichT erarbeitet wird, soll ein spezifischer FEP-Katalog entworfen und die Prozesse selektiert werden, die für eine Endlagerung in den Tonsteinformationen der zu untersuchenden Region relevant sind. Abschließend soll mittels Berechnungen zur Radionuklidenausbreitung die Isolationswirkung der Gesamtsystems bestehend aus der geologischen und den geotechnischen Barrieren analysiert und bewertet werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektkoordination
- AP2: Review der geologischen Gesamtsituation und ergänzende Gesteinsuntersuchungen
- AP3: Systemanalyse
- AP4: Verschlusskonzept und Nachweisführung
- AP5: Berechnungen zur Radionuklidenausbreitung
- AP6: Berichtswesen

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend beteiligt an den Arbeitspaketen 1, 3, 4 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Seitens des Verbundpartners BGR wurde ein dreidimensionales geologisches Modell entwickelt. Dieses Modell wurde genutzt, um ein umfassendes Verschlusskonzept für das Endlager in der Tonformation zu entwickeln sowie geeignete Positionen für die Abdichtbauwerke, vor allem in den Schächten und der Rampe, zu identifizieren. Das Verschlussystem wurde so konzipiert, dass freigesetzte Radionuklide, unabhängig vom Ort der Freisetzung innerhalb des Grubengebäudes, immer mindestens drei Verschlussbauwerke durchdringen müssten, um letztendlich in die Biosphäre zu gelangen. Die Verschlussbauwerke sind redundant hinsichtlich der Art der Dichtelemente und diversitär hinsichtlich der Art der verwendeten Materialien für die Dichtelemente konzipiert. Dieses Verschlusskonzept wurde in Berichtsform dokumentiert.

Im September 2016 fand ein Arbeitstreffen mit den russischen Projektpartnern in St. Petersburg statt. Auf diesem Treffen wurde u. a. das Verschlusskonzept vorgestellt und mit den russischen Partnern diskutiert.

Die Durchführung eines Sicherheitsnachweises erfordert eine entsprechende Kenntnis sowohl über das Gesteinsverhalten als auch über alle physikalisch-chemischen Prozesse, die innerhalb und außerhalb des geplanten Endlagers während der zukünftigen Entwicklung ablaufen werden; Prozesse, die aufgrund der geologischen Entwicklung ablaufen werden und solche, die durch die Errichtung des Endlagers angeregt werden. Auf Basis der im FuE-Vorhaben ANSICHT gemachten Erfahrungen im Hinblick auf die Erstellung von FEP-Katalogen für Endlager im Tongestein wurde eine erste FEP-Liste für das in diesem Vorhaben zu betrachtende Endlager in den Kotliner Tönen erstellt. Exemplarisch wurde auch je ein FEP für eine Endlagerkomponente und einen Prozess aus dieser Liste erstellt. Dies diente dazu, zu prüfen, inwieweit die im FuE-Vorhaben ANSICHT entwickelte Methode für die Erstellung eines FEP-Kataloges für Endlager in Tongesteinen allgemeingültig ist und auch auf andere Tonformationen übertragen werden kann. Die Allgemeingültigkeit konnte bestätigt werden. Darüber hinaus kann beides als Grundlage genommen werden, um später einen umfassenden FEP-Katalog für ein Endlager in den Kotliner Tönen zu erstellen.

Es wurde damit begonnen, den Abschlussbericht zu dem Vorhaben zu erstellen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung des Abschlussberichtes zu dem Vorhaben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11193A
Vorhabensbezeichnung: Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2013 bis 31.03.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.465.284,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kudla	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben ELSA2 hat folgende Ziele: 1. Entwicklung eines Schachtverschlusskonzeptes als standortunabhängiges Grundkonzept für Salz- und Tonsteinformationen. 2. Test von einzelnen Funktionselementen im Labor und in halbtechnischen Versuchen mit Entwicklung, Test und Kalibrierung von Materialmodellen zur modelltheoretischen Beschreibung des Materialverhaltens für die rechnerische Nachweisführung. Untersuchungsschwerpunkte sind Füllsäulen aus verdichtetem Steinsalz, Kalotten aus Basaltsteinen als Zusatzelemente in setzungsstabilen Schottersäulen, Widerlagerelemente aus MgO-Beton, Weiterentwicklung von Vergütungsverfahren für konturnahe Gebirgsbereiche und Kontaktzone, Weiterentwicklung der Bauausführung und Qualitätskontrolle von Asphalt dichtungen, Zusatzuntersuchungen zum Bentonitdichtelement (z. B. Integration von Äquipotentialsegmenten), Modelltheoretische Analyse von Bauzuständen sowie Belastungs- und Strömungsprozessen. Das Vorhaben ELSA2 kann in den Schwerpunkt 3 der Technologie-Plattform (IGD-TP): "Plugging and Sealing" eingeordnet werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse für HAW-Endlager
- AP2: Planung für halbtechnische Versuche in situ
- AP3: Laborversuche zu den Arbeitsschritten 2.1 bis 2.6
- AP4: Halbtechnische Versuche zu den Arbeitsschritten 2.1 bis 2.6
- AP5: Modellierung
- AP6: Berichterstattung

AP1 und AP6 werden gemeinsam mit DBE TECHNOLOGY federführend bearbeitet. Die TU Bergakademie Freiberg ist federführend für AP2 bis AP4. Bei AP5 ist DBE TECHNOLOGY federführend.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Für einen verbleibenden Ausbau im Bereich der zukünftigen Dichtelemente in einem Schacht im Tongestein wird ein low-pH-Beton vorgeschlagen, dessen Rezeptur den Anforderungen entsprechend angepasst werden muss. Geopolymere bzw. alkalisch aktivierte Bindemittel werden nicht weiter betrachtet.
- AP2: Keine weiteren Arbeiten.
- AP3: Keine weiteren Arbeiten.
- AP4: Keine weiteren Arbeiten.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Erstellen eines Teilberichtes für AP1.4 (Voraussetzungen für die Technologie des Be-
raubens des Schachtausbaus mit nachfolgendem auflockerungsminimierenden Nach-
schnitt der Gebirgskontur im Tongestein. Aufgabenstellung für einen Beton für den
verbleibenden Ausbau eines Schachtes im Tonstein im Bereich der Dichtelemente.)
- AP2: Planung weiterer Versuche im AP4.
- AP3: Durchführung von Versuchen zur Messung der Scherviskosität von einem Destillati-
onsbitumen (AZALT 70/100) und einem Oxidationsbitumen (STELOX 85/25) im
Temperaturbereich (25 - 75) °C mit einer Kegel-Platte-Anordnung. Als Ergänzung
werden mit beiden Bitumensorten zusätzlich Oszillationsversuche bei 25 °C und 45 °C
durchgeführt. Die ermittelten Parameter fließen in die Modellierungsarbeiten des Pro-
jektpartners DBE TECHNOLOGY (AP5) ein.
- AP4: Zwei In-situ-Bohrlochversuche zum Einbau einer Bitumen-verfüllten Schottersäule
und eines Asphalt-dichtelementes im Kaolin (übertägiger Standort im Ton - AP4.5).
Beginn des zweiten Gesenkversuchs zur Verdichtung von Salzgrus-Ton-Gemisch mit
dem neuen Verdichtungsgerät (AP4.1).
Vorbereitungen für den Großbohrlochversuch D = 1,5 m: Test von Elementen aus
MgO-Beton mit der 3-1-8-Bindemittelphase in Ortbetonbauweise - Rezeptur C3
(AP4.3)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11193B
Vorhabensbezeichnung: Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2013 bis 31.03.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 658.878,97 EUR	Projektleiter: Herold	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen dieses Vorhabens sollen allgemein gültige Grundkonzepte für Schachtverschlüsse in Salz- und Tonsteinformationen entwickelt werden. Das Verschlussystem soll modular aufgebaut sein, damit es an unterschiedliche lokale Situationen und Bedingungen angepasst werden kann. Einzelne Funktionselemente eines solchen Verschlusses sollen im Labor und in halbtechnischen Versuchen auf ihre Eignung getestet werden. Um in der Lage zu sein, rechnerische Zuverlässigkeitsnachweise zu führen, sollen Materialmodelle entwickelt und getestet werden, die in der Lage sind, das Materialverhalten adäquat zu beschreiben.

Um die genannten Ziele zu erreichen, werden vielversprechende Funktionselemente, wie eine Füllsäule aus verdichtetem Steinsalz, Basaltsteinkalotten als Zusatzelemente in Schottersäulen und Bitumendichtelemente im Rahmen von Labor- und In-situ-Untersuchungen getestet. Zu Verbesserung der Einbautechnologie werden Verfahren zur Injektion und zur Vergleichmäßigung einer Fluidaufnahme von Abdichtmaterial weiter entwickelt und getestet. Begleitet werden diese Untersuchungen durch modelltheoretische Arbeiten zur Analyse von Bauzuständen sowie Belastungs- und Strömungsprozessen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse für HAW-Endlager
- AP2: Planung für halbtechnische Versuche in situ
- AP3: Laborversuche
- AP4: Halbtechnische Versuche
- AP5: Modellierung
- AP6: Berichte

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend beteiligt an den Arbeitspaketen 1, 5 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum erfolgte die Bearbeitung des AP1.4.1 zur Verbesserung des Verständnisses der zeitlichen und spannungsabhängigen Entwicklung der Auflockerungszone (ALZ) im Bereich des vorgesehenen Dichtungsstandortes im Schacht. Das bereits im AP5 entwickelte thermo-mechanische Modell zur Ermittlung der ALZ im umgebenden Tongestein eines Schachtverschlusses wurde dazu um eine hydraulische Komponente erweitert und eine spannungsabhängige Berechnung der Permeabilität in das Modell aufgenommen. Das dafür notwendige Stoffgesetz ist aus dem FuE-Vorhaben AnSichT bekannt. In diesem Stoffgesetz wird die Permeabilität abhängig vom effektiven Spannungszustand und dem Vektor der plastischen Dehnung berechnet. Der Anteil der Permeabilität in Abhängigkeit des effektiven Spannungszustandes wird über Näherungsfunktionen beschrieben. Diese wurden aus bekannten geomechanischen Untersuchungen von Tongesteinen bestimmt. Zusätzlich dazu erfolgte im AP1.4.1 auch eine Literaturrecherche zu Untersuchungsergebnissen der spannungsabhängigen Permeabilitätsänderung verschiedener Tongesteine.

Erste Berechnungsergebnisse liegen für die Errichtung des Schachtes und die spätere Betriebsdauer vor. Die Auswertung der kleinsten totalen Hauptspannungen zeigt erwartungsgemäß eine ähnliche Spannungsverteilung wie in den TM-Modellen des AP5. Erwartungsgemäß treten unter Berücksichtigung des Porendrucks deutlich kleinere Hauptdruckspannungen entlang der Schachtwandung auf. Im ursprünglichen Modell wurde eine horizontale Permeabilität von $5,1 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$ und eine vertikale Permeabilität $5,1 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2$ angenommen. Aus dem Stoffmodell ergibt sich in 625 m Teufe eine spannungsabhängige horizontale Permeabilität (x-Richtung, senkrecht zur Schachtwandung) von $1,1 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$. Für die vertikale Permeabilität in z-Richtung berechnet sich in 625 m Teufe ein Wert von $7,9 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$. Infolge des Schacht-abteufens und damit verbundener Spannungsumlagerungen kommt es entlang der Schachtwandung zu einer Permeabilitätserhöhung. Die simulierte Permeabilität steigt in 625 m Tiefe senkrecht zur Schichtung (k_1) auf einen Wert von $8,5 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ und parallel zur Schichtung (k_3 , senkrecht zur Schachtwandung) auf einen Wert von $6,0 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$. Mit dem gewählten Modellierungsansatz kann die Permeabilitätsänderung infolge der THM Effekte zuverlässig dargestellt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.4.1: Der Einbau eines Dichtelementes soll in verschiedenen Modellen für unterschiedliche Einbauvarianten simuliert werden. Geplant ist die Simulation des Einbaus im Ganzen, inkl. Nachschnitt und die segmentweise Errichtung, inkl. Nachschnitt.
- AP6: Die Ergebnisse des AP1.4.1 werden in Abstimmung mit der TU Bergakademie Freiberg in einem Teilbericht dokumentiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- P. Herold, M. Jobmann, W. Kudla, M. Gruner: Shaft seals for HLW repositories (ELSA project), 7th US-German-Workshop Salt Repository Research, Design & Operation, Washington, 07.-09.09.2016
- C. Müller, V. Burlaka, P. Herold, N. Neubert: Impact of Earthquakes on Geotechnical Barriers (Poster), 2nd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal, Köln, 26.-28.09.2016

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11243	
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Rekompaktionsverhalten der EDZ (LASA-EDZ)			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2013 bis 30.09.2017		Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 979.523,00 EUR		Projektleiter: Dr. Czaikowski	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens LASA-EDZ besteht in der gezielten Bereitstellung von Labordaten für die hydro-mechanisch gekoppelte modelltheoretische Analyse des Langzeitdichtvermögens der Auflockerungszone im Bereich eines Schachtverschlusses für ein Endlager in Salzformationen. Hierzu sind die notwendigen Kenntnisse und Daten zum geomechanischen und geohydraulischen Materialverhalten auf der Grundlage von laborativen Untersuchungen zu ermitteln und im Hinblick auf einen fundierten Nachweis der Langzeitdichtfunktion zur Verfügung zu stellen.

Das Vorhaben wird in Kooperation mit dem Vorhaben LAVA 2 (Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen) der GRS durchgeführt. Während im Projekt LASA die mechanisch-hydraulischen Eigenschaften im Vordergrund stehen, soll im Projekt LAVA-2 das System bezüglich chemisch-hydraulischer Prozesse untersucht werden. Die Beschreibungen der Einzelprozesse sollen langfristig in ein THMC-Modell zur Prognose des Langzeitverhaltens von Dichtbauwerken aus Salzbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen einfließen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelle Untersuchungen zur Gasdurchlässigkeit im Autoklav (IST-Zustand der Proben), Ermittlung der Beziehung zwischen der Gasdurchlässigkeit und Minimalspannung während der Belastung in triaxialen Rekompaktionsversuchen, Ermittlung des Langzeitverhaltens der (trockenen/teilgesättigten) Steinsalzproben, bei Lösungszufluss (drainiert) und unter Lösungsdruck (undrainiert).
- AP2: Prozessanalytische Modellierung: Identifikation der bei Entnahme des Kernmaterials an der Entnahmelokation vorliegender Gebirgsbeanspruchungen, Auswahl geeigneter Stoffmodelle und Bestimmung der Stoffparameter für das HM-Verhalten der Auflockerungszone, Nachprüfung der Anwendbarkeit der bestehenden Salzmodelle bei Rekompaktion unter Feuchteinfluss, Bestimmung der Stoffparameter aus den GRS-Laborversuchen, Kalibrierung und Validierung der ausgewählten Stoffmodelle durch Simulation typischer Laborversuche.
- AP3: Ergebniszusammenführung und Berichterstattung.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Ermittlung des Langzeitverhaltens der EDZ und der Kontaktfuge in Abhängigkeit von der Minimalspannung bei Lösungszufluss wurden axial gelochte Steinsalzprüfkörper verwendet, die im Inneren Salzbetonkerne enthalten. Im vergangenen Jahr wurden dazu zwei Versuche mit in dieser Art kombinierten Prüfkörpern parallel durchgeführt und ausgewertet. Der kombinierte Prüfkörper mit dem ungeschädigten Salzbetonkern zeigte im Ausgangszustand bei einer Minimalspannung von 1 MPa eine Laugenpermeabilität im Bereich von 10^{-15} m^2 . Mit steigender Minimalspannung zeichnete sich eine deutliche Abnahme der Permeabilität um mehrere Größenordnungen ab. Bei einer Minimalspannung von 5 MPa wurde der Messbereich von 10^{-20} m^2 unterschritten. Bei einem weiteren Versuch konnte erst bei einer Minimalspannung von 10 MPa eine mit der Zeit weiterhin abnehmende Permeabilität bis in den Bereich von 10^{-18} m^2 beobachtet werden.

Bislang wurde davon ausgegangen, dass dieser Prozess (Reduzierung von Wegsamkeiten) auf das viskose Materialverhalten des Steinsalzes zurückgeführt werden kann. Durch die Erhöhung der Minimalspannung wird die Kontaktfuge geschlossen und die integral über die kombinierte Probe gemessene Laugendurchlässigkeit reduziert. Allerdings wurde dann im 2. Halbjahr 2016 bei der Präparation von kombinierten Probekörper für das parallel laufende Forschungsvorhaben LAVA-II ein weiterer gelochter Salzprüfkörper mit Salzbetonkern ohne Vorschädigung im Autoklaven bei sehr geringen Minimalspannungen von 1 MPa mit gesättigter Salzlauge beaufschlagt und die Laugenpermeabilität bestimmt. Die Kontaktfuge zwischen Salzbeton und Steinsalz hat sich bei dieser sehr geringen konstanten Minimalspannung über mehrere Wochen vollständig geschlossen und es war keine Lösungspermeabilität mehr messbar (letzter messbarer Wert im Bereich von 10^{-19} m^2).

Nach dem oben beschriebenen Verfahren wurde ein weiterer kombinierter Prüfkörper für einen Diffusionsversuche mit einer Ausgangslösungspermeabilität von 10^{-13} m^2 hergestellt. Hier wurde die Durchströmung mit Lösung bei Erreichen einer Lösungspermeabilität im Bereich von 10^{-15} m^2 abgebrochen, damit sich die Kontaktfuge nicht vollständig verschließen kann, da der Prüfkörper in einem weiterführenden Versuch verwendet werden sollte.

Gegenwärtig sind noch 9 weitere Versuche in Vorbereitung.

Derzeit kann auf Basis der durchgeführten Versuche nicht eindeutig belegt werden, ob der vorherrschende Prozess, der zur Reduzierung der Permeabilität führt, durch die Wechselwirkungen mit der gesättigten Salzlösung zu erklären ist, so dass die Minimalspannung in diesem Fall eher eine untergeordnete Rolle spielt bzw. unterstützend wirksam ist. Dazu sind in der weiteren Projektlaufzeit gezielte Versuche vorgesehen, die auch im Hinblick auf die modelltheoretischen Untersuchungen Auskunft über die dominierenden Prozesse geben sollen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung experimenteller Untersuchungen
- Durchführung modelltheoretischer Untersuchungen
- Dokumentation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11263
Vorhabensbezeichnung: Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 30.11.2016	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 30.11.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 228.114,00 EUR	Projektleiter: Filbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ist es, die Grundlage zum Nachweis der technischen Realisierbarkeit einer Schachtförderanlage mit 175 t Nutzlast (Endlagerung von Transport- und Lagerbehältern, TLB) einschließlich der wesentlichen maschinen- und bergtechnischen Komponenten und Anlagenteile zu schaffen sowie die Grundlagen zu legen, zum Nachweis der Sicherheit des Transportbetriebes, insbesondere unter dem Aspekt des Strahlenschutzes. Die Genehmigungsfähigkeit der Endlagerung von radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen in TLB (z. B. vom Typ CASTOR[®]) bedingt den Nachweis, dass alle Komponenten des Schachttransportes für Nutzlasten von bis zu 175 t und die entsprechenden Überlasten dem Stand der Technik entsprechen. In dem vorliegenden Vorhaben soll die wirtsgesteinsunabhängige Einsetzbarkeit der zu entwickelnden Schachtfördertechnik bis zu einer max. Teufe von 1.000 m nachvollziehbar dargestellt werden. Weiterhin werden die zu erwartenden Auswirkungen der Einlagerung von TLB in Ton- bzw. Granitformationen, z. B. hinsichtlich erforderlicher Zwischenlagerzeiten, bewertend beschrieben. Im Rahmen dieses Vorhabens soll der Stand der Technik bei der Durchführung von Störfallanalysen (deterministisch/probabilistisch) unter besonderer Berücksichtigung der Restrisikominimierung ermittelt werden. Dazu sollen die Fortentwicklung der Probabilistischen Sicherheitsanalyse seit 1994, die Übertragbarkeit der Methoden zur PSA für Kernkraftwerke auf die Schachtförderanlage, ein deterministischer Ansatz, internationale Entwicklungen und Maßnahmen zur Restrisikominimierung untersucht werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Differenzbetrachtung probabilistische Sicherheitsanalysen (PSA): 1994 vs 2013
- AP2: Übertragbarkeit der Methoden zur PSA für Kernkraftwerke auf Schachtförderanlagen
- AP3: Bewertung eines deterministischen Ansatzes zur Störfallanalyse
- AP4: Internationale Entwicklungen bei Sicherheitsanalysen zur Schachttransporttechnik
- AP5: Maßnahmen zur Restrisikominimierung
- AP6: Berichtswesen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im 2. Halbjahr (2016) wurden die Stellungnahmen der GRS zu den Berichten

- AP2 "Übertragbarkeit der Methoden zur PSA für Kernkraftwerke auf Schachtförderanlagen" und
- AP5 "Maßnahmen zur Restrisikominimierung"

erstellt, in gegenseitiger Abstimmung in die Berichte eingearbeitet und der Abschlussbericht finalisiert.

Der Entwurf des Abschlussberichtes wurde finalisiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11284
Vorhabensbezeichnung: Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-Nahfeld (BIGBEN)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2014 bis 30.06.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 627.100,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kröhn	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Dampfdiffusionsmodell stellt die Sorptionsisotherme für Bentonit, die den empirischen Zusammenhang zwischen relativer Luftfeuchtigkeit und Wassergehalt widerspiegelt, eine zentrale Zustandsgleichung dar. Bei der Beschreibung der Isotherme existieren zurzeit noch einige Unklarheiten. Dies betrifft vor allem den Temperatureinfluss auf die Isotherme, der in einem realen Buffersystem dadurch von Bedeutung ist, dass die Wiederaufsättigung in der thermischen Phase der Entwicklung eines Endlagers erfolgt. Die Wärmeentwicklung bewirkt im Inneren des Buffers auch ohne Wasseraufnahme von außen eine erhebliche Feuchtigkeitsumlagerung. Ferner ist noch unklar, welchen Einfluss die Hysterese zwischen Auf- und Entsättigung auf den Prozess der Wiederaufsättigung hat.

Diese Unklarheiten sollen durch Untersuchungen des Feuchteaufnahmevermögens unter Temperatureinfluss an tonhaltigen Dicht-/Versatzmaterialien, die noch genauer festzulegen sind (z. B. Calcigel, MX80, Febex-Material), beseitigt werden. Die ermittelten Ansätze für die Sorptionsisothermen werden im Code VIPER implementiert und deren Einsatzfähigkeit durch Modellrechnungen bestätigt.

Parallel dazu wird eine Rechenfallbibliothek einschließlich Dokumentation erstellt. Damit können nicht nur neue Programmversionen auch anhand älterer Modelle getestet werden. Vor allem erfolgt damit eine Überprüfung der älteren Modelle vor dem Hintergrund des im Laufe der Zeit stetig verbesserten und erweiterten Modellkonzepts.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP1: Bestimmung von temperaturabhängigen Sorptionsisothermen
- AP2: Modellrechnungen mit neuen Sorptionsisothermen
- AP3: Erstellung einer systematischen Rechenfallbibliothek
- AP4: Erstellung des Abschlussberichts

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bestimmung von temperaturabhängigen Sorptionsisothermen im Ofen:

Das Sorptionsgleichgewichts bei den Bentonitproben unter unterschiedlichen Luftfeuchtigkeiten, die in Exsikkatoren über verschiedenen Salzlösungen platziert und in einem Wärmeschrank bei 60 °C gehalten worden waren, wurde im Berichtszeitraum erreicht. Daraufhin wurde die Temperatur im Wärmeschrank auf 90 °C angehoben.

Im weiteren Verlauf des Versuchs stellten mehrere Probleme ein: Die Temperaturabhängigkeit der Löslichkeit der Salze, die in den Exsikkatoren für eine bestimmte Luftfeuchtigkeit sorgen sollen, war deutlich unterschätzt worden. Deshalb hatten sich die Salze in einigen Exsikkatoren nach der Temperaturerhöhung auf 90 °C vollständig gelöst, was erst spät erkannt wurde. Bei weiteren Salzlösungen verschiebt sich offenbar auch die relative Luftfeuchtigkeit über der Oberfläche der Lösung, so dass sich die eingestellte Luftfeuchtigkeit in drei Fällen nach der Temperaturerhöhung deutlich verändert hat. Schließlich besteht auch der Verdacht, dass die Dichtungen an den Exsikkatoren, durch die die Leitungen der Wärme- und Feuchtesensoren geführt werden, undicht geworden sein könnten. Auch dadurch würde sich ein niedrigeres Feuchtigkeitsniveau erklären. Damit ist die Bestimmung einiger Datenpunkte für die Adsorptionsisotherme bei 90 °C gefährdet.

Testmessungen einer Isotherme mit dem VSA:

Ein Vapour Sorption Analyser (VSA) der Firma Decagon wurde beschafft. Um sich mit der Arbeitsweise des Geräts vertraut zu machen, wurden unter anderem auch erste Messungen einer Sorptionsisotherme für MX-80 einschließlich Adsorptions- und Desorptionspfad durchgeführt. Die Ergebnisse sind aufgrund des Testcharakters der Messungen noch nicht verwertbar, zeigen aber die prinzipielle Einsatzbereitschaft des Geräts. Desgleichen bestätigte sich auch die erwartete deutliche Reduzierung der Messdauer. Die Messung von Adsorptions- und Desorptionsisothermen in einer Testreihe für fünf Temperaturstufen á 7 Messpunkte dauerte nur knapp 2 Wochen.

Ein letztes verbleibendes Problem betrifft das Kriterium für das Erreichen des Gleichgewichtszustands bei einer vorgegebenen Luftfeuchtigkeit. Bevor verwertbare Messungen gemacht werden können, muss noch die Genauigkeit der extrem fein arbeitenden Wägeeinrichtung überprüft werden, da diese die Grundlage für das Abbruchkriterium bildet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung des Versuchs im Wärmeschrank
- Abschluss der Versuche zur Funktionsbestätigung des VSAs und erste Versuche, die gesuchten Isothermen mithilfe des neuen Geräts zur Feuchtebestimmung zu ermitteln, um die vorhandenen Daten zu ergänzen
- Beginn der Modellrechnungen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11294	
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA)			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik, Feld 3.1			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2014 bis 30.04.2017		Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 765.469,00 EUR		Projektleiter: Herold	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ERNESTA ist es, die technische Umsetzung von Rückholungskonzepten weiter zu konkretisieren, sicherheitstechnische Konsequenzen und Auswirkungen der Sicherheitsanforderung „Rückholbarkeit“ auf die Endlagerauslegung weiter vertieft zu untersuchen und die Auswirkungen hinsichtlich Aufwand und Zeitbedarf aufzuzeigen. Die Planungen sollen Grundlagen für eine genehmigungsreife technische Lösung liefern.

In Deutschland ist die Möglichkeit zur Rückholung als Auslegungsanforderung an ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente seit dem Jahr 2010 in den Sicherheitsanforderungen des BMU. Die Erfüllung der Sicherheitsanforderungen ist Genehmigungsvoraussetzung für die Inbetriebnahme des Endlagers. Innerhalb des Vorhabens sollen zunächst allgemeine Fragestellungen zur Umsetzung und Implementierung der Rückholungsanforderung für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente beantwortet werden. Im Anschluss erfolgt eine Weiterentwicklung und vertiefende Planung für eine mögliche Rückholung von Endlagerbehältern für das Konzept der Strecken- und Bohrlochlagerung im Salz- und Tongestein. Darüber hinaus werden Arbeitsprogramme zur Realisierung des Nachweises der technischen Machbarkeit für die relevanten Komponenten der Rückholungskonzepte erarbeitet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeptübergreifende Fragestellungen und grundlegende Untersuchungen
- AP2: Planung von Rückholungskonzepten bei der Endlagerung im Salzgestein
- AP3: Planung von Rückholungskonzepten bei der Endlagerung im Tongestein
- AP4: Erarbeitung eines Umsetzungsplanes zur Durchführung möglicher Demonstrationsversuche
- AP5: Berichtswesen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Im Berichtszeitraum erfolgte die Bearbeitung der Rückholbarkeit im Tongestein. Die Arbeiten zur vertikalen Bohrlochlagerung im Tongestein wurden abgeschlossen. Die für die Rückholung im Salzgestein entwickelte Saugkokille ist auch bei der vertikalen Bohrlochlagerung im Tongestein einsetzbar. Die Rückholungsabläufe in beiden Wirtsgesteinen sind ähnlich. Durch notwendigen Rückbau des Bohrlochverschlusses und die teilweise Neuerrichtung der Bohr-

lochverrohrung ist aber ein deutlich höherer Aufwand zur Vorbereitung der Entnahme der Behälter aus dem Bohrloch im Tongestein zu erwarten. Die zusätzlichen Arbeitsabläufe und die dazu benötigte Technik wurden beschrieben.

Für die Einlagerungsvariante der horizontalen Streckenlagerung im Tongestein wurde aus mehreren Grobkonzepten zur Freilegung der POLLUX®-Behälter eine Vorzugsvariante ermittelt. Dies ist die Neuauffahrung mit einem möglichst kleinen Querschnitt, ähnlich der Einlagerungsstrecke. Mit der Errichtung kleiner Querschnitte wird eine ausreichende Pfeilmächtigkeit zwischen den Strecken gewährleistet und damit eine Beeinträchtigung der Standicherheit der Einlagerungsfelder verhindert. Die Betriebsabläufe und benötigte Technik während der Rückholung wurden beschrieben. Zur Erleichterung der Rückholungsarbeiten wurden Anforderungen an den Ausbau der Einlagerungsstrecken definiert. Weiterhin wurden die notwendigen Änderungen erarbeitet, um die Einlagerungstechnik konstruktiv an die Erfordernisse der Endlagerung im Tongestein anzupassen. Über eine Klimavorberechnung wurden die zu erwartenden Temperaturen im Rückholungsbergwerk und der Einfluss eines Feuchteintrages bestimmt.

- AP4: Aus den im Projekt erfolgten Weiterentwicklungen der Rückholungskonzepte wird deutlich, dass für die modifizierten und neuentwickelten Rückholungsvorrichtungen ein Nachweis der technischen Machbarkeit notwendig sein wird. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse wurde der notwendige Planungs- und Entwicklungsaufwand bis zur Genehmigungsreife eines Rückholungskonzeptes in Form von vorgeschalteten Planungen, Untersuchungen und insbesondere von Demonstrationsversuchen abgeleitet. Dazu wurden für die wesentlichen Komponenten (Saugkokille) und Einrichtungen (modifizierte Einlagerungsvorrichtung im Salz) entsprechende Vorschläge erarbeitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Die Arbeiten zur Streckenlagerung im Tongestein werden im nachfolgenden Berichtszeitraum abgeschlossen.
- AP5: Die Projektergebnisse werden in je einem Teilbericht zu jeder Einlagerungs- bzw. Rückholungsvariante dokumentiert. Zusätzlich werden die Ergebnisse aller APs in einem Abschlussbericht zusammengefasst.

5. Berichte, Veröffentlichungen

P. Herold: Impact of retrieval requirements on repository design – results of R&D project funded by BMWi (PTKA), 7th US-German-Workshop Salt Repository Research, Design & Operation, Washington, 07-09.09.2016

P. Herold, S. Dörr: Retrievability in connection with the requirements for a final repository for heat-generating, high-level radioactive waste and spent fuel, 2nd Conference on Key Topics in Deep Geological Disposal, Köln, 26-28.09.2016

P. Herold: Technische Konzepte zur Rückholung, ENTRIA-Workshop, Braunschweig, 01/02.11.2016

P. Herold: (Sicherheits-) technische Auswirkungen der Rückholbarkeit von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen auf die Endlagerauslegung in Salz- und Tongesteinsformationen, 12. Projektstatusgespräch zu BMWi-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle, Karlsruhe, 09./10.11.2016

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11304
Vorhabensbezeichnung: Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2014 bis 30.06.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 647.987,00 EUR	Projektleiter: Wieczorek

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Als Partner im Betreiber-Konsortium führt die GRS seit 1999 im Auftrag des BMWi Forschungsarbeiten im schweizerischen Untertagelabor Mont Terri im Opalinuston durch. Die Arbeiten dienen dem Ziel, das Verständnis der in einem Endlagersystem im Tonstein ablaufenden Prozesse weiterzuentwickeln sowie die Stoffmodelle und numerischen Simulationsprogramme zu qualifizieren. Für diesen Zweck werden auch relevante Daten ermittelt. Die Untersuchungen betreffen vor allem Fragestellungen bezüglich des THM-Verhaltens des Tonsteins, der Auflockerungszone und von tonhaltigen Buffer- bzw. Verschlussmaterialien. Durch die Arbeit in Gemeinschaftsprojekten mit internationalen Partnern wird der Aufwand reduziert und der Erkenntnisgewinn maximiert.

Die Ergebnisse des Projekts werden direkten Einfluss auf die Konzeption und -auslegung eines Endlagers im Tonstein haben und ergänzen damit die Arbeiten des Projekts AnSichT.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: FE Experiment – Porendruckmessungen und Modellrechnungen als Beitrag zum Streckenlagerungsexperiment der NAGRA im 1:1 Maßstab
- AP2: HE-E Experiment – Weiterführung des im Rahmen des EU-Projekts PEBS aufgebauten Erhitzerversuchs im Mikrotunnel (mit NAGRA, ENRESA und BGR)
- AP3: DM-A Experiment – Langzeitverformungsmessung des Tonsteins in einem Bohrloch
- AP4: SB-A Experiment – Untersuchung von Bohrlochabdichtung und Auflockerungszone (mit BGR)
- AP5: DB Experiment – Messung von Porendruckverlauf sowie chemischem und thermischem Potential im ungestörten Tonstein in einem tiefen Bohrloch durch die Opalinuston-Formation (mit Swisstopo, IRSN, NWMO, NAGRA und BGR)
- AP6: LT-A Experiment – Eigenschaften der sandigen Fazies: Modellkalibrierung an Hand von Laborexperimenten (mit BGR)
- AP7: Technical und Steering Meetings
- AP8: Weiterentwicklung von VIRTUS für den Einsatz in Tonstein

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Messungen des Porendrucks in der Umgebung des FE-Tunnels dauern an und liefern aussagekräftige Ergebnisse. Ein dreidimensionales Finite-Element-Modell des FE Experiments wurde mit Hilfe von VIRTUS (s. AP8) angelegt und getestet.
- AP2: Der HE-E Versuch wurde weitgehend störungsfrei weitergeführt. Der Buffer im zentralen und erhitzernahen Bereich ist immer noch entsättigt. Der tunnelnahe Gebirgsbereich steht noch unter Saugspannung. Mittels VIRTUS (s. AP8) wurde ein 3D-Modell des Versuchs erstellt und eine thermische Simulation mit CODE_BRIGHT durchgeführt. Dabei wurde gegenüber der früheren 2D-Simulation eine erheblich bessere Übereinstimmung der Temperaturverteilung mit den Messdaten erreicht.
- AP3: Seit 2009 werden mit einer in einem horizontalen Bohrloch eingebauten Dilatometersonde die Langzeitverformung des Bohrlochquerschnitts sowie ergänzend Temperatur und Luftfeuchte gemessen. Es ist weiterhin eine stetige, nur sehr langsam abnehmende Bohrlochkonvergenz messbar.
- AP4: Die Porendruckmessungen im Experiment SB-A wurden fortgesetzt. Das Erbohren einer benachbarten Bohrung hatte den erwarteten Einfluss auf die Messwerte. Die Messungen werden in diesem Jahr abgeschlossen.
- AP5: Die Porendruckmessungen im tiefen DB-Bohrloch wurden fortgesetzt, das Experiment wird in diesem Jahr beendet.
- AP6: Es wurden Experimente zur Bestimmung physikalischer Eigenschaften, der Wasser-Retentionskurve und der Langzeit-Verformbarkeit durchgeführt. Der maximale Wassergehalt (7.1 % - 9.3 % bei relativer Feuchte von 100 %) unter nicht eingespannten Bedingungen ist deutlich höher als im Gebirgsverbund (ca. 5 %). Bei höheren Laststufen ab 9 MPa deviatorischer Belastung konnte zunehmendes Kriechen mit leichter Volumenzunahme beobachtet werden.
- AP8: Mit Hilfe der von Swisstopo zur Verfügung gestellten geologischen und Hohlraumdaten wurde ein VIRTUS-Modell von Mont Terri erstellt. Ausschnitte für die Modellierung der Experimente FE und HE-E wurden exportiert. Hinsichtlich der Visualisierungsmöglichkeiten wurde VIRTUS um die Darstellung von Oberflächensignaturen und realistische Oberflächengestaltung ergänzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Messungen in den laufenden Experimenten
- THM-Prognose der Aufheizphase im FE Experiment (unter Einsatz von VIRTUS)
- 3D-Modellierung des HE-E (unter Einsatz von VIRTUS)
- Modellierung der Bohrlochverformung in DM-A mit viskosen Ansätzen
- Weiterführung von Laborexperimenten an Proben der sandigen und karbonatreichen Fazies

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Wieczorek, K., I. Gaus, J.C. Mayor, K. Schuster, J.-L. García-Sineriz, T. Sakaki (2017): In-situ experiments on bentonite-based buffer and sealing materials at the Mont Terri rock laboratory (Switzerland). *Swiss Journal of Geosciences*, 110 (in press)
- Yu, C., J.-M. Matray, J. Gonçalvès, D. Jaeggi, W. Gräsle, K. Wieczorek, T. Vogt, E. Sykes (2017): DB Experiment - Comparative study of methods to estimate hydraulic parameters in the hydraulically undisturbed Opalinus Clay. *Swiss Journal of Geosciences*, 110 (in press)

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11314
Vorhabensbezeichnung: Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen (KORPHA)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 558.500,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hagemann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

- Identifizierung von Behälterkorrosionsphasen, mit denen in einem Endlager in einer norddeutschen Tonformation zu rechnen ist.
- Synthese und thermodynamische Charakterisierung von Behälterkorrosionsphasen.
- Ableitung des korrosionsdeterminierten Redoxniveaus im Nahfeld eines Endlagers in einer norddeutschen Tonformation und Prüfung der Auswirkung auf den Transport von Radionukliden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Aufbauend auf einer kritischen Bewertung experimenteller Daten zur Korrosion von Behälterstahlmaterialien werden Korrosionsphasen ermittelt, die in einem Endlager in einer norddeutschen Unterkreide-Tonformation auftreten könnten.
- Die zuvor identifizierten Korrosionsphasen werden mit verschiedenen Methoden gezielt synthetisiert. Mit den erhaltenen Verbindungen wie auch anderen kommerziell erhältlichen oder von anderen Arbeitsgruppen hergestellten Präparaten werden experimentelle Untersuchungen durchgeführt, um ihre thermodynamische Stabilität zu ermitteln.
- Auf Grundlage der Erkenntnisse sowie weiterer bekannter Randbedingungen wird die mögliche Bandbreite des Redoxniveaus in einem Endlager in einer norddeutschen Unterkreide-Tonformation modellhaft ermittelt. Mit Hilfe von Stofftransportmodellen wird gezeigt, wie sich die Variabilität des Redoxniveaus auf die Konzentration der Radionuklide entlang des Ausbreitungspfadens im einschlusswirksamen Gebirgsbereich auswirkt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die weitere Auswertung der Löslichkeitsversuche für Chukanovit führte zur Ableitung einer Löslichkeitskonstante, die nahe an den bisher publizierten Literaturwerten liegt. Versuche, die Phase auch grobkristallin zu erhalten, führten bislang zu keinem Erfolg.

Auf Basis dieser Ergebnisse wurden Versuche begonnen, um zu prüfen, ob die Anwesenheit von Magnesium im anstehenden carbonathaltigem Porenwasser zur Ausbildung einer Mischphase aus Chukanovit und dem chemisch verwandten Magnesium-Mineral Artinit führt. Tatsächlich wurde ein Mischprodukt erhalten, das aber selbst bei weitgehendem Ausschluss von Sauerstoff in eine grüne Verbindung, wahrscheinlich einen carbonathaltiger Grüner Rost weiterreagiert. Eine Charakterisierung des grünlichweißen Mischprodukts war daher noch nicht möglich.

In analoger Weise wurde geprüft, welche Produkte entstehen, wenn in Natriumchloridlösungen basisches Fe(II)chlorid gefällt wird, aber gleichzeitig, Magnesium anwesend ist. Die Mischphase Hibbingit $(\text{Fe,Mg})_2\text{Cl}_2(\text{OH})_2$ ist zwar aus der mineralogischen Literatur bekannt, bislang fehlen aber, abgesehen vom reinen Fe(II)-Endglied, jegliche thermodynamische Untersuchungen. Aus den Ergebnissen geht bislang hervor, dass bei hohen Magnesiumgehalten zwei Phasen entstehen, und zwar neben Hibbingit auch eine Magnesiumphase. Eine kontinuierliche homogene Mischreihe besteht also wahrscheinlich nicht.

Durch systematischen Vergleich mit bekannten Mineralen des Kobalts und des Nickels wurde geprüft, welche relevanten Hydroxid- und Carbonatverbindungen des zweiwertigen Eisens ggf. noch unerkant sind. Dabei wurden zwei carbonathaltige Phasen identifiziert, die ein eisenhaltiges Analogon nahelegen.

Die Bildung des chloridhaltigen Fe(III)oxyhydroxids Akaganeit wurde unter verschiedenen Chloridkonzentrationen untersucht. Die in den Syntheselösungen gefundene Gleichgewichtskonzentration von Eisen ist aber unter allen Bedingungen sehr ähnlich. Dieser Befund unterstützt die Vermutung, dass Chlorid zwar ein notwendiger Bestandteil von Akaganeit ist, aber nur als Stabilisator einer bestimmten (sonst chloridfreien) Kristallstruktur.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführung der Synthesen von gemischten eisen(II) – und magnesiumhaltigen Festphasen. Synthese und Charakterisierung von Fe(II)-haltigen Analoga von basischen Nickel- und Kobalt-Verbindungen. Synthese von Grüner-Rost-Verbindungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11324
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung eines chemisch-hydraulischen Modells für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen (LAVA-2)	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2014 bis 30.09.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 771.673,00 EUR	Projektleiter: Dr. Moog

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen von LAVA-2 wird ein Modell entwickelt und experimentell abgesichert, mit dem die veränderliche Permeabilität eines Dichtbauwerks aus Salzbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen in Salzformationen infolge der Korrosion durch Salzlösungen zeit- und ortsabhängig beschrieben werden kann. Das Modell soll die diffusionsbestimmte Korrosion durch die geringpermeable störungsfreie Salzbeton-Matrix ebenso beschreiben, wie die Korrosion auf Rissen und Kontaktflächen Dichtbauwerk-Salzgebirge.

Das Vorhaben wird in Kooperation mit dem Vorhaben LASA (Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar) der GRS durchgeführt. Während im Projekt LASA die mechanisch-hydraulischen Eigenschaften im Vordergrund stehen, soll im Projekt LAVA-2 das System bezüglich chemisch-hydraulischer Prozesse untersucht werden. Die Beschreibungen der Einzelprozesse sollen langfristig in ein THMC-Modell zur Prognose des Langzeitverhaltens von Dichtbauwerken aus Salzbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen einfließen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Laborversuche

- AP1.1: Präparation der Salzbetonproben und der Korrosionslösungen
- AP1.2: Ermittlung von Materialkenngrößen des unkorrodierten Salzbetons
- AP1.3: Kaskadenversuche, Versuche zur Ermittlung des Reaktionspfades der Korrosion mit NaCl- und IP21-Lösung
- AP1.4: Vorbereitung der Versuchsreihen
- AP1.5: Durchführung der Versuchsreihen
- AP1.6: Probenahme und Messungen: Matrixproben, Schnittflächen- und Kontaktflächenproben
- AP1.7: Auswertung der Messdaten

AP2: Modelltheoretische Arbeiten

- AP2.1: Bereitstellung der thermodynamischen Daten
- AP2.2: Test und Anpassung eines reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung des diffusions- und advektiv bestimmten Lösungsangriffs auf die poröse Matrix von Salzbeton
- AP2.3: Test des reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung diskreter Risse

AP3: Simulationsrechnungen

- AP3.1: Geochemische Gleichgewichtsmodellierung der Kaskadenversuche
- AP3.2: Modelltheoretische Betrachtung der Diffusions- sowie Advektionsversuche
- AP3.3: Modelltheoretische Betrachtungen der Schnittflächen- und Kontaktflächenversuche mit diskreten Rissen

AP4: Dokumentation der Ergebnisse und Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Kaskadenversuche im System Salzbeton/Mg-reiche-Lösung wurden im 3. Quartal 2016 abgeschlossen. Die Feststoffproben wurden wie geplant röntgengeographisch ausgewertet und die Lösungen mittels ICP-MS und ICP-OES analysiert.

Die Vorversuche der Through-Diffusion-Versuche mit reinen Salzbetonprüfkörpern befinden sich noch immer in der ersten Versuchsphase (Aufsättigung der Proben). Eine Aufsättigung ist auch nach 15 Monaten in Lösung noch nicht erfolgt.

Für die Durchführung von Advektionsversuchen und Through-Diffusion-Versuchen wurden kombinierte Prüfkörper (Salzbeton in Steinsalz) im Autoklaven hergestellt. Im Autoklaven wurde unter 10 bar Manteldruck und in Kontakt zu einer gesättigten NaCl-Lösung die Permeabilität auf der Kontaktfuge zwischen Salzbeton und Steinsalz auf eine Permeabilität $< 10^{-18} \text{ m}^2$ reduziert. Im Anschluss sollten die Prüfkörper ausgebaut und in die Versuchsanlage für Advektionsversuche eingebaut und mit einer Mg-reichen-Lösung beaufschlagt werden. Dabei stellte sich heraus, dass sich die Kontaktfuge durch den Ausbau aus dem Autoklaven wieder geöffnet hatte. Bei einigen Prüfkörpern wurde auch das Steinsalz durchlässig. Vermutlich ist die deutlich erhöhte Permeabilität gegenüber der Messung im Autoklaven auf den fehlenden Manteldruck zurückzuführen.

Die kombinierten Prüfkörper, die sich bereits in den Advektionszellen befanden, wurden wieder mit gesättigter NaCl-Lösung beaufschlagt, um zu überprüfen, ob ein Schließen der Kontaktfuge auch drucklos möglich ist. Um weitere Kontaktflächenversuche mit gesättigter NaCl-Lösung und Mg-reicher-Lösung am Salzbeton durchführen zu können, werden diese Versuche nun unter Manteldruck im Autoklaven durchgeführt.

Die Messung an dem kombinierten Prüfkörper im PET am HZDR hat im 2. Halbjahr 2016 erste Ergebnisse geliefert. So konnte detektiert werden, dass Tracer in die Kontaktfuge zwischen Salzbeton und Salz eingedrungen ist. Der Versuch wird weiter fortgeführt.

Die Modellierung der Kaskadenversuche im System Salzbeton/Mg-reiche-Lösung wurde auf Grundlage der experimentellen Ergebnisse begonnen. Es zeigte sich jedoch, dass mit dem derzeitigen Kenntnisstand über den Ausgangsphasenbestand des Salzbetons und die sich bildenden Korrosionsprodukte eine Modellierung des Kaskadenversuches nicht möglich ist. Es wird angenommen, dass sich sowohl im ursprünglichen Salzbeton als auch im korrodierten Salzbeton Phasen befinden, die bislang in der Modellierung nicht berücksichtigt werden. Ein Nachweis über Röntgendiffraktometrie war nicht möglich. Möglicherweise müssen einzelne Löslichkeitskonstanten in THEREDA geändert werden.

Die Modellierung der Through-Diffusion-Versuche ist vom Ansatz her möglich. Hier ist jedoch noch eine weitere Modellanpassung nötig, da der Diffusionsstrom aktuell in der Modellierung noch deutlich überschätzt wird.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der Advektionsversuche an kombinierten Prüfkörpern im Autoklaven.
- Überprüfung, ob ein Schließen der Kontaktfuge an kombinierten Prüfkörpern auch drucklos in Advektionszellen erfolgen kann. Wenn dies möglich ist, könnten mit diesem Verfahren ggfs. kombinierte Prüfkörper für die Through-Diffusion-Versuche hergestellt werden.
- Auf Grundlage der bisherigen Erkenntnisse des Diffusionsversuches im PET am HZDR soll noch ein weiterer Diffusionsversuch durchgeführt werden.
- Zur Identifizierung bislang unbekannter Phasen im Salzbeton sowohl vor als auch nach der Korrosion wird eine Zusammenarbeit mit dem KIT-INE angestrebt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jantschik, K.; Czaikowski, O.; Moog, H.C.; Wiczorek, K. (2016): Investigating the sealing capacity of a seal system in rock salt (DOPAS-Project), KERNTECHNIK-Journal, Issue 5/2016, Germany

Jantschik, K.; Hertel, U.; Meyer, T.; Moog, H.C. (2016): Development of chemical-hydraulic models for the prediction of the long-term sealing capacity of concrete based sealing materials in rock salt, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-A-Bericht 3869, Germany

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11334A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt A	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 775.880,00 EUR	Projektleiter: Dr. Munoz

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Projektes EDUKEM ist die Gewinnung abgesicherter Daten zur Speziation und zu den Löslichkeitsgrenzen von Uran (IV/VI) in verdünnten bis hochsalinaren Lösungen flankiert von methodischen Weiterentwicklungen.

Das Ziel des GRS-Teilprojekts EDUKEM ist die Entwicklung neuartiger elektrochemischer Methoden zur Bestimmung der Speziation von U(IV) und U(VI) in komplexen hochsalinaren Lösungen und zur Gewinnung der entsprechenden thermodynamischen Daten. Dieses Ziel wird in zwei Phasen erreicht. In der ersten Phase werden Nieder- und Hochfrequenzmethoden zur Messung der Ionen-Mobilität in hochsalinaren Milieus entwickelt. Die gewonnenen Daten werden in der zweiten Projektphase für die Auswertung der geplanten potentiometrischen Experimente in Uran-Systemen angewandt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Aufbau des experimentellen Messplatzes
- AP2: Durchführung von experimentellen Messungen der Ionen-Mobilität
- AP3: Auswertung der experimentellen Daten und systematische Darstellung der Ionen-Mobilität durch die MSA-Theorie
- AP4: Durchführung der potentiometrischen Messungen
- AP5: Koordination des Verbundvorhabens
- AP6: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Die Sensorik für die Hochfrequenzanlage (TDR) wurde weiterhin optimiert. Man hat herausgefunden, dass das Setzen eines Tropfens Elektrolyt auf das vergoldete Ende eines steifen Koaxialkabels ergibt ein optimaleres Antwort-zu-Rauschen-Verhältnis als das vorherige getestete Konzept, das auf Sensoreintauschen basiert. Dies erlaubte die Vermessung der komplexen Permittivität von 10 MHz bis 20 GHz in Elektrolytkonzentrationen bis 2 mol Kg^{-1} . Weitere Messungen im Niederfrequenzbereich (Impedanzanlage) wurden systematisch in CsCl-, KCl-, NaCl-, MgCl₂- CaCl₂-, Na₂SO₄ und K₂SO₄-Lösungen im Konzentrationsbereich von 0.05 bis 2.0 mol Kg^{-1} durchge-

führt, mit besonderer Beachtung der Messqualität in mittlerem und niedrigerem Frequenzbereich, woher die meiste Information genommen wird.

- AP3: Durch die Hilfe einer neuen Math-Software (Mathcad) wurde die Modellierung der Impedanzdaten mit Basis auf der Kontinuitätsgleichung, aus der die Coehlos' Gleichung für die komplexe Permittivität abgeleitet wird, ermöglicht. Damit konnte man das typische kapazitive Verhalten bei Niedrigfrequenzen mittels eines einfachen Ausdrucks aus der Ionenmobilität und des Diffusionskoeffizienten interpretiert. Eine direkte Messung der Ionenmobilität ist aber nicht möglich, da diese mit dem Diffusionskoeffizienten gekoppelt ist. Die Entkoppelung beider Größen ist nur durch die Anwendung der MSA-Theorie möglich. Die aus dieser Theorie entstandenen Ausdrücke für die Ionenmobilität und den Selbst-Diffusionskoeffizienten wurden überarbeitet und für eine praktische Rechnungsweise in Mathcad implementiert.
- AP4: Elektrochemische und spektroskopische Experimente am Redoxsystem U(VI)/U(IV) in HCl-Lösungen wurden im zweiten Semester 2016 mittels eines zweiwöchigen Aufenthalts im Labor am HZDR fortgesetzt. Ziel dieser Experimente ist die Charakterisierung des Redox-Verhaltens und der Speziation des U(VI)/U(IV)-HCl-Systems zur Gewinnung von thermodynamischen relevanten Daten.
- AP5: Der durch dieses Projekt eingestellte Doktorand zeigt immer noch eine große Motivation an den experimentellen Arbeiten. Außerdem kommt er zu seinen Verpflichtungen an der Universität problemlos nach.
- AP5: Eine Video-Konferenz fand am 30. November 2016 zur Besprechung des Fortschrittes der geplanten Arbeiten, der technischen Schwierigkeiten der experimentellen Ansätze sowie des weiteren Vorgehen bzgl. Kooperationen statt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Systematische Messungen von CsCl-, KCl-, NaCl-, MgCl₂- CaCl₂-, Na₂SO₄ und K₂SO₄-Lösungen mit dem neuen aufgebauten TDR-Sensor.
- Fortsetzung der systematischen Messungen von CsCl-, KCl-, NaCl-, MgCl₂- CaCl₂-, Na₂SO₄ und K₂SO₄-Lösungen mit der Impedanzanlage und Auswertung im Bereich 0.5 mol Kg⁻¹ bis zur Sättigung bei 25 °C.
- Weiterentwicklung der Auswertungsmethode zur getrennten Berechnung der Mobilität und der mobilen Ionen von Impedanzspektren.
- Fortsetzung der elektrochemischen und spektroskopischen Experimente des U(IV)/U(VI)-HCl-Systems am HZDR.
- Vor- und Nachbereitung des 4. Projekttreffens zum Verbundvorhaben EDUKEM im Juni 2017 in Karlsruhe.

5. Berichte, Veröffentlichungen

R. Pattnaik, A.G. Muñoz: Ion mobility in concentrated electrolytes studied by AC-Impedance: an experimental approach for measuring membrane potentials, ECS Trans. 72(36) (2016) 1-10

A.G. Muñoz, S. Lehmann, F. Bok, A. Ikeda-Ohno: Redox stability of Uranium in high ionic strength media: an electrochemical and spectroscopic study, Oral presentation in Prime Conference of The Electrochemical Society, October 2-7, 2016, Honolulu, Hawaii

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11334B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 259.275,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brendler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt EDUKEM (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig und Institut für Nukleare Entsorgung, Karlsruhe Institut für Technologie) setzt neuartige komplementäre Ansätze zur Analyse der Uranspeziation um, welche durch die hohe chemische Komplexität uranhaltiger Lösungen im salinaren Milieu erforderlich sind. Uran bildet im reduzierenden wie auch im oxidierenden Milieu eine Vielzahl von Komplexen, welche oft gleichzeitig und in stark unterschiedlichen Konzentrationen in Lösung vorliegen. Zudem ist für die thermodynamische Beschreibung der Chemie in hochsalinaren Lösungen die Kenntnis ionenspezifischer Wechselwirkungsparameter (Pitzer-Parameter) zwingend erforderlich, um über Aktivitätskoeffizienten eine zuverlässige Einschätzung von Ionenstärkeeffekten auf Löslichkeit und Speziation zu ermöglichen. Die Bestimmung von Pitzer-Parametern mit klassischen Methoden, wie Löslichkeitsexperimenten und spektroskopischen Untersuchungen, soll hier durch alternative elektrochemische Verfahren unterstützt werden. Die Ergebnisse sollen zum Abbau von Unsicherheiten und Konservativitäten bei der Berechnung der Speziation und Löslichkeitsgrenzen von Uran (IV/VI) in hochsalinaren Lösungen führen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Elektrochemische Messungen (GRS)
- AP2: Löslichkeit relevanter U(IV) und U(VI) Phasen (KIT-INE)
- AP3: Spektroskopische Untersuchungen (HZDR-IRE)
- AP3.1: Spektroskopische Charakterisierung von Uran(IV/VI)-Mineral- und -Sekundärphasen
- AP3.2: Spektroskopische Charakterisierung von U(+IV)/U(+VI) in ausgewählten hochsalinaren Lösungen
- AP3.3: Spektroskopische Untersuchungen an Gleichgewichtslösungen
- AP3.4: Ableitung thermodynamischer Parameter
- AP4: Entwicklung eines thermodynamischen Modells für U(VI) (GRS, KIT-INE, HZDR-IRE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3.1:

- Charakterisierung von U(IV)-Phasen aus den Sammlungen der TU Bergakademie Freiberg und den Senckenberg Naturhistorische Sammlungen Dresden mittels Raman
- Synthese von U(IV)-Sulfat-Mineralen als Referenz für spektroskopische Untersuchungen von natürlichen U(IV)-Festphasen
- Aufbau einer Apparatur für Feststoff-TRLFS, Eignung des Systems wurde mittels Testmessungen an synthetischem UO_2 gezeigt

AP3.2:

- Löslichkeitsversuche und Spektroskopie (TRLFS, UV-vis) zum Einfluss von Phosphat auf die U(IV)-Speziation in Lösung (Zusammenarbeit mit KIT-INE)
- Eignung von TRLFS für U(IV)-Speziationsuntersuchungen am Sulfat-System gezeigt
- TRLFS-Messungen an U(IV)-Referenzlösungen (Perchlorat, Chlorid, Sulfat, Karbonat) bei Raum- und Tieftemperatur
- Überarbeitung der Software des Photoakustik-Messsystems (LIPAS)

4. Geplante Weiterarbeiten

AP3.1:

- Spektroskopische Charakterisierung (Raman, Fluoreszenz, XRD) von U(IV)-Sulfat-Synthesen als Referenz für natürliche U(IV)-Festphasen
- Mikroskopie (REM, TEM, XRD) und Spektroskopie (EXAFS) an den Sammlungs-Mineralen: Eignung für Fluoreszenz-Untersuchungen (Prüfen der Reinheit)
- Anwendung von Feststoff-TRLFS zur Charakterisierung der U(IV)-Fluoreszenz und Bestimmung der Speziation von U(IV)-Feststoffen

AP3.2:

- Abschließen der Löslichkeitsversuche und Spektroskopie (TRLFS, UV-vis, eventuell EXAFS) zum Einfluss von Phosphat auf die U(IV)-Speziation
- Weitere Untersuchungen der Eignung von TRLFS für U(IV)-Speziationsuntersuchungen an verschiedenen anorganischen Liganden
- Weitere Untersuchung der Mobilität und Speziation von U(IV) in Porenwässern endlager-relevanter Formationen mit hohen Ionenstärken
- *Chlorid/Karbonat*: Spektroskopische Bestimmung der U(VI)-Speziation in 3 M NaCl - als Funktion des Carbonat-Gehaltes

AP3.4:

- Vertiefende Einarbeitung in Chemometrie zur Spektreninterpretation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Lehmann, S.; Steudtner, R.; Brendler, V.: Speciation of U(IV) with inorganic ligands in aqueous solution investigated by UV/vis and TRLFS. Ninth International Conference on Nuclear and Radiochemistry - NRC9, 29.08.-02.09.2016, Helsinki, Finland.

Lehmann, S.; Bok, F.; Ikeda-Ohno, A.; Muñoz, A. G.: Redox Stability of Uranium in High Ionic Strength Media: An Electrochemical and Spectroscopic Study. PRIME 2016 - 02.-07.10.2016, Honolulu, Hawaii, USA.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11334C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2014 bis 30.11.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 394.555,00 EUR	Projektleiter: Dr. Altmaier	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel dieses Vorhabens ist die Gewinnung abgesicherter Daten zur Speziation und zu den Löslichkeitsgrenzen von Uran(IV/VI) in verdünnten bis hochsalinaren Lösungen flankiert von methodischen Weiterentwicklungen.

Ziel dieses Projektes ist, zu einem verbesserten Verständnis der Uranchemie in endlagerrelevanten wässrigen Systemen und einer wesentlich verbesserten quantitativen Modellierung der Löslichkeit und Speziation für Quelltermabschätzungen im Rahmen von Langzeitsicherheitsanalysen zu kommen. Die Entwicklung neuartiger komplementärer Messmethoden, die zum Abbau von Ungewissheiten und Konservativitäten bei der Berechnung der Speziation und Löslichkeitsgrenzen von Uran(IV/VI) in hochsalinaren Lösungen führen sollen, ist Teil dieses Ansatzes. Es werden erfolgreich etablierte spektroskopische Analysen und Löslichkeitsmessungen durchgeführt, so dass sowohl ein integrales Bild der untersuchten Systeme abgeleitet werden kann, als auch neu entwickelte spektroskopische und elektrochemische Methoden validiert werden können. Dies gilt vor allem für das für endlagerrelevante Bedingungen besonders wichtige U(IV)-System, für das die Datenlage besonders begrenzt ist, aber auch für das unter nicht-reduzierenden Bedingungen relevante U(VI)-System. Die im Rahmen von EDUKEM gewonnenen thermodynamischen Daten und Modellparameter für U(IV) und U(VI) werden in nationale und internationale Datenbankprojekte (NEA-TDB, THEREDA) implementiert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Elektrochemische Messungen (GRS)
- AP2: Löslichkeit und Thermodynamik relevanter U(IV) und U(VI) Phasen (INE)
 - AP2-1: Arbeiten zu U(VI)
 - AP2-2: Arbeiten zu U(IV)
- AP3: Spektroskopische Untersuchungen (IRE)
- AP4: Entwicklung eines thermodynamischen Modells für U(VI) – (INE, GRS, IRE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die Redoxexperimente in verdünnten bis konzentrierten CaCl_2 -Systemen wurden abgeschlossen. XAFS-Analysen ausgewählter Proben stehen noch aus.
- Manuskript (Cevirim et al.) zu "Uranium redox processes in dilute to concentrated saline systems" wurde (bis auf den XAFS Part) fertiggestellt.
- Die Löslichkeitsexperimente mit U(VI) in alkalischen KCl-Systemen inkl. Festphasenanalyse und thermodynamischem Model (SIT) wurden abgeschlossen.
- Manuskript von Altmaier et al. zur U(VI)-Löslichkeit und Thermodynamik in NaCl-Systemen (SIT) wurde fertiggestellt.
- Löslichkeitsexperimente mit U(IV) in verdünnter bis konzentrierter NaCl-, MgCl_2 - und CaCl_2 -Lösung wurden intensiv beprobt. Zusätzliche Proben unter sauren Bedingungen wurden angesetzt. Löslichkeitsdaten bei hohem pH-Wert sind systematisch unterhalb der Nachweisgrenze der ICPMS bei hohen Verdünnungsfaktoren für salinare Proben.
- Die Löslichkeit von U(IV) im System $\text{NaCl-NaHCO}_3\text{-Na}_2\text{CO}_3$ wurde detailliert untersucht. Die Equilibrierung verschiedener Proben ist noch nicht abgeschlossen.
- Die TRLFS-Analyse bei sehr niedrigen Uran-Konzentrationen muss aufgrund der hohen Chloridkonzentration in den Proben optimiert werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Festphasencharakterisierung in den Redoxexperimenten und Einreichung des Manuskripts (Cevirim et al.) zu "Uranium redox processes in dilute to concentrated saline systems".
- Fertigstellung des thermodynamischen Pitzer-Modells für U(VI) in alkalischen KCl-Systemen. Erstellung eines Manuskriptentwurfs.
- Abschluss Löslichkeitsexperimente mit U(IV) in verdünnten bis konzentrierten NaCl-, MgCl_2 - und CaCl_2 -Lösungen unter Karbonatausschluss. Entwicklung eines thermodynamischen (SIT)-Modells.
- Abschluss Löslichkeitsexperimente mit U(IV) im System $\text{NaCl-NaHCO}_3\text{-Na}_2\text{CO}_3$. Entwicklung eines thermodynamischen SIT-Modells.
- TRLFS-Analysen der U(VI)-Speziation in konzentrierten CaCl_2 -Lösungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Posterpräsentation: Yalcintas et al.: „Solubility of $\text{UO}_2(\text{am,hyd})$ in alkaline carbonate solutions“ bei IUPAC Konferenz „17th International Symposium on Solubility Phenomena and Related Equilibrium Processes“, Juli 24-29, 2016, Genf, Schweiz. Auszeichnung mit Posterpreis
 Eingeladener Vortrag: X. Gaona: "Redox chemistry of Pu, Np and U under alkaline to hyperalkaline pH conditions", Plutonium Futures - The Science, September 18-22, Baden-Baden (Germany)

Einreichung des Manuskripts "Solubility of U(VI) in chloride solutions. I. The stable oxides/hydroxides in NaCl systems, solubility products, hydrolysis constants and SIT coefficients", by Altmaier et al. für ein Special Issue in Journal of Chemical Thermodynamics

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11344A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt A	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2015 bis 31.12.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 712.363,00 EUR	Projektleiter: Dr. Meleshyn

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Ziele des Verbundvorhabens bestehen in der Entwicklung abgesicherter, objektiver Kriterien zur Auswahl geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle. Das Hauptziel des Projektes ist es, den Umwandlungsmechanismus von Bentoniten als Funktion von Lösungszusammensetzung, Temperatur und mikrobieller Aktivität anhand von Laborversuchen aufzuklären. Konkret soll festgestellt werden, ob diese Einflüsse zu Änderungen des Fe(III)-Gehalts der reagierten Bentonite bzw. zu Änderungen des Quelldrucks und der Lösungspermeabilität von hochkompaktierten Bentoniten führen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Diese Aufklärung soll im Projekt anhand der Untersuchungen von 15 Bentoniten erfolgen, die mit einer auf den für die Endlagertiefe in der Unterkreidetonformation in Norddeutschland erwarteten Salzgehalt von 150 g/L verdünnten Gipshutlösung und der Opalinustonporenlösung bei 25 °C, 60 °C, 90 °C und 120 °C ein und zwei Jahre reagieren werden. Die durch die Reaktion veränderten Quelldruck und Permeabilität – sowie der Fe(II)/Fe(III)-Gehalt für mikrobielle Versuche – der Bentonite und die Hauptionkonzentrationen der reagierten Lösungen sollen erfasst werden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum erfolgte der Start der 12 von insgesamt geplanten 84 Quelldruck- und Permeabilitätsversuche. Dabei wurde die Lösung in den Quelldruckversuchen unter atmosphärischen Druck (1 bar) aus Büretten und in den Permeabilitätsversuchen unter einem Druck von 2 bar mit einer Pumpe an die Messzellen gespeist. Obwohl ein Versuch wegen einer Undichtigkeit der Messzelle abgebrochen werden musste und in der nächsten Messkampagne wiederholt werden soll, liefern die übrigen 11 Versuche stabile Permeabilitätswerte, die auf die Abwesenheit von einer hydraulischen Risserzeugung in Bentoniten und von offensichtlichen Umläufigkeiten in den Messzellen hindeuten. Diese Ergebnisse unterstützen die Richtigkeit der im 1. Halbjahr 2016 getroffenen Entscheidung, sowohl den Quelldruck als auch die Lösungspermeabilität mit geringen Injektionsdrucken zu messen.

Es wurden 17 Batches bei 25 °C im Dezember 2016 beprobt und die Messungen der Wasseraufnahmekurve der untersuchten Bentonite in Abhängigkeit von der relativen Luftfeuchte gestartet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Die 17 Batchversuche mit einer Reaktionszeit von einem Jahr bei 120 °C werden angesetzt.
- Die Messungen des Quelldrucks und der Permeabilität der Ausgangsbentonite werden fortgesetzt. Die Messungen des Quelldrucks und der Permeabilität der reagierten Bentonite werden für die Proben mit einer Reaktionszeit von einem Jahr erfolgen.
- Die Messungen des Fe(II)/Fe(III)-Gehaltes werden für die Ausgangsmaterial und die Proben aus mikrobiellen Versuchen mit einer ein- bzw. zweijährigen Reaktionszeit durchgeführt.
- Die Messungen der Hauptionkonzentrationen der reagierten Lösungen werden für alle Batches durchgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11344B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2015 bis 31.12.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 202.583,00 EUR	Projektleiter: Dr. Arnold	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel der Arbeiten ist die Entwicklung abgesicherter, objektiver Kriterien zur Auswahl geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle in Tonformationen. Die konkreten Ziele dieses Vorhabens sind: (1) Aufklärung des Lösungs- und Umwandlungsmechanismus von Smektiten (basierend auf dem GRS-Vorhaben „Fe-Bentonit“ und dem BGR Projekt „idealer Bentonit“) als Funktion von Lösungszusammensetzung und Temperatur anhand von Laborversuchen, optimierter Analytik und quantenmechanischer Modellrechnungen; (2) Identifizierung der Prozesse, die bei unterschiedlichen Bentoniten zu unterschiedlichen Reaktivitäten (Langzeitverhalten) führen; (3) Korrelierung der chemisch-mineralogischen Veränderungen der kompaktierten Bentonite mit Änderungen der hydraulischen Eigenschaften (Quelldruck und Permeabilität); (4) Untersuchungen zum Einfluss von Bakterien auf die Bentonitumwandlung; (5) Erläuterung der Rolle der Löslichkeit von Smektiten hinsichtlich der Fe-Korrosion und (6) Ableitung von Kriterien zur Auswahl optimal geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern.

Bisher ist es nicht hinreichend zuverlässig gelungen, alle relevanten experimentellen Daten zum Langzeitverhalten von Bentoniten im Kontakt zu Lösungen unter Endlagerbedingungen mit einem einheitlich abgesicherten Modell zu erklären. Eine Unsicherheit liefert in diesem Zusammenhang die Mikrobiologie. Reaktionen, die abiotisch nicht stattfinden, sind im Kontakt mit Mikroben möglicherweise als relevant anzusehen, da Mikroben spezielle Reaktionen katalysieren können.

Durch ein experimentelles und modelltheoretisches Arbeitsprogramm sollen Lücken im Prozessverständnis der Bentonitumwandlung im Kontakt zu Formationslösungen geschlossen werden. In dem hier vorgeschlagenen Vorhaben sollen zum ersten Mal vier in der Bentonitforschung ausgewiesene nationale Arbeitsgruppen zusammenarbeiten. Zum Erreichen der oben genannten Ziele sind aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten in den Laboren der GRS, der Universität Greifswald und des HZDR vorgesehen. Dafür stellt die BGR 40 unterschiedliche, gut charakterisierte, Bentonite zur Verfügung, von denen 15 von der GRS auf ihre hydromechanischen Eigenschaften bei erhöhten Temperaturen untersucht werden. Zwei Bentonitproben werden mit Nährsubstraten in den Lösungen durchgeführt, um Informationen über eine mögliche Beteiligung von Bakterien an Mineralumwandlungen zu belegen oder auszuschließen.

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11344): Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Abteilung Sicherheitsanalysen, Bereich Endlagersicherheitsforschung, Braunschweig; Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Institut für Geographie und Geologie, Greifswald; Technische Universität München, Theoretische Chemie

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP7.1.2: Einfluss von mikrobiellen Prozessen auf die Bentonitumwandlung

- Bestimmung der Zellzahl bzw. Zelldichte
- Bestimmung der mikrobiellen Diversität
- Real Time Quantitative PCR (oder Q-PCR)
- Kultivierung von Mikroorganismen auf geeigneten Nährmedien
- Catalyzed Reporter Deposition Fluorescence In-Situ-Hybridization (CARD-FISH)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP7.1.2:

Da die ersten mikrobiologischen Proben von der GRS erst im Dezember 2017 bereitgestellt werden konnten, wurde die Zeit genutzt, um im Rahmen einer Masterarbeit die mikrobiell bedingte Transformation des Bentonits B36 molekularbiologisch und geochemisch näher zu analysieren.

Hierfür wurden Mikrokosmen bestehend aus 20 g B36 und 40ml steriler, anaerober Opalinustonporenlösung angesetzt. Die Zusammensetzung der Lösung, das Verhältnis zwischen Lösung und B36 sowie die Zugabe und Konzentration der Substrate, entsprechen den mikrobiologischen Ansätzen der GRS. Nachdem die Atmosphäre der Ansätze mit N₂:CO₂ (80:20) definiert worden war, inkubierten diese über einen Zeitraum von etwa drei Monaten bei 30 °C im Dunkeln, wobei in Abständen von zwei bis drei Wochen Proben genommen worden sind.

Im betrachteten Zeitraum konnte in keinem der Ansätze eine signifikante Veränderung bezüglich der Sauerstoffkonzentration, des pH-Werts und der Sulfatkonzentration nachgewiesen werden. Ausschließlich die Ansätze, welche mit Substraten versehen wurden (Laktat, Azetat, Methanol und AQDS), zeigten signifikante Veränderungen in geochemischen und biologischen Parametern. So konnte beispielsweise eine Verringerung des Redoxpotentials von 505 mV auf 270 mV beobachtet werden. Weiterhin konnte durch HPLC-Analysen der geklärten Lösungsüberstände eine Verringerung der Laktatkonzentration und die Bildung von Azetat sowie Pyruvat nachgewiesen werden. Diese Daten zeigen, dass die natürlicherweise im Bentonit vorkommenden Mikroorganismen in der Lage sind die ihnen angebotenen C- und Energiequellen metabolisch zu nutzen. Zudem konnte in den substrathaltigen Ansätzen gezeigt werden, dass die Fe(II)-Konzentration zunimmt, wohingegen die Fe(III)-Konzentration sinkt. Auch diese Beobachtung lässt auf die Aktivität von Mikroorganismen schließen, welche in der Lage sind im Bentonit enthaltenes Fe(III) direkt oder indirekt (über AQDS) als Elektronenshuttle zu nutzen. Die Zunahme von Eisen in den strukturellen Schichten des Bentonits könnte einen Einfluss auf die Eigenschaften des Bentonits selbst haben, was in Zukunft noch näher untersucht werden könnte.

Die durchgeführten Sequenzanalysen haben nach bisherigem Stand gezeigt, dass in den substrathaltigen Mikrokosmen hauptsächlich Bakterien der Gattung Saccharopolyspora und Bacillus über die Zeit dominieren. Für beide Gattungen wurde die Bildung von Endosporen beschrieben, welche den jeweiligen Organismen Resistenz gegenüber Hitze, UV-Strahlung und γ -Strahlung verleihen können – Einflüsse, die in einem potentiellen Endlager eine große Relevanz haben könnten. Die Besiedlung beginnt erneut, wenn die Wachstumsbedingungen wieder optimal sind. Die bisherigen Ergebnisse zeigen, dass die sich im Bentonit befindlichen Mikroorganismen durchaus in der Lage sind vorhandene Elektronendonatoren und -akzeptoren zu nutzen.

Zusätzlich durchgeführte XRD Analysen der Uni Greifswald an behandeltem und unbehandeltem B36 zeigten, dass bei der Probenaufbereitung (mittels Backenbrecher und Kugelmühle) Fremdmaterial, wie Metalle in den Bentonit mit eingebracht werden können, welches sich womöglich auf die Eigenschaften des Bentonits und auf die Besiedlung durch Mikroorganismen auswirkt. Ob dies auch auf die, für die Batch-Versuche verwendeten Bentonite zutrifft, wird sich mit der Analyse der Reaktionsprodukte zeigen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP7.1.2:

Für einen geochemischen und molekularbiologischen Vergleich der Bentonite B36 und SD80 könnten im Rahmen einer weiteren Masterarbeit Mikrokosmen mit SD80 angesetzt und analysiert werden. Für ausgewählte Probenpunkte der Mikrokosmen von B36 sollte die Sequenzanalyse noch mit einem anderen Primerpaar wiederholt werden.

Nach einem Jahr Inkubation erfolgte am 7. Dezember 2016 die Probenahme der ersten vier Mikrokosmen von SD80 und B36 (Ansätze mit Opalinustonporenlösung bzw. Gipshutlösung bei 25 °C ohne Substrat). Die übrigen 20 Bentonit-Proben werden gegen Ende Februar/Anfang März 2017 genommen (SD80 und B36 nach einem Jahr Inkubation bei 60 °C und 90 °C, jeweils mit und ohne Substrat). Von ausgewählten Proben wird die DNA isoliert und die amplifizierte 16S rRNA Genfragmente mittels Illumina MiSeq sequenziert. Die Daten werden abschließend gegenübergestellt und untereinander bzw. mit den Kurzzeit-Analysen verglichen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald		Förderkennzeichen: 02 E 11344C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2015 bis 31.12.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 169.289,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Warr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge zur

- Aufklärung des Lösungs- und Umwandlungsmechanismus von Smektiten (basierend auf dem GRS-Vorhaben „Fe-Bentonit“) als Funktion von Lösungszusammensetzung und Temperatur anhand von Laborversuchen, optimierter Analytik und quantenmechanischer Modellrechnungen
- Identifizierung der Prozesse, die bei unterschiedlichen Bentoniten zu unterschiedlichen Reaktivitäten (Langzeitverhalten) führen
- Korrelierung der chemisch-mineralogischen Veränderungen der kompaktierten Bentonite
- Untersuchungen zum Einfluss von Bakterien auf die Bentonitumwandlung
- Erläuterung der Rolle der Löslichkeit von Smektiten hinsichtlich der Fe-Korrosion
- Ableitung von Kriterien zur Auswahl optimal geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern.

Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten 02E11344A und 02E11344B.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Analytik der Originalproben (XRD, TEM, CEC)
- AP2: Natürliches Analogon: Beprobung & Analytik
- AP3: Natürliches Analogon: Saponit/Experimente
- AP4: Vorversuche für mineralogische Analytik
- AP5: Vorversuche für Elektronen-Mikroskopie
- AP6: Natürliches Analogon: Saponit/Analytik
- AP7: Natürliches Analogon: Experimente & Analytik
- AP8: Analytik der GRS Reaktionsprodukte
- AP9: Auswertung (Mechanismen)
- AP10: Berichte

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Vorversuche für die mineralogische Analyse zur Erfassung des Ausmaßes von Lösungsprozessen (AP4) wurden abgeschlossen. Die im Rahmen einer Bachelorarbeit ermittelten Ergebnisse haben gezeigt, dass der verwendete Saponit (IMV Nevada) bei Temperaturen bis zu 90 °C über 28 Tage in Opalinustonporen- und Gipshuttlösung stabil bleibt und andere in der Probe enthaltene Minerale, wie Karbonate und Kali-Feldspat, in Lösung gehen. Die Stabilität des Saponits könnte hierbei mit den in der Probe vorhandenen Karbonaten und Salzen in Zusammenhang stehen, die das System gegenüber einer Alteration in alkalinen Salzlösungen gepuffert haben. Zudem erfolgte eine Optimierung der Methode zur Bestimmung der Kationenaustauschkapazität, da die bisher ermittelten CEC-Werte der Bentonitproben im Vergleich zu den Ergebnissen von Kaufhold & Dohrmann (2008) systematisch unterbewertet waren. Des Weiteren werden im Zuge einer Bachelorarbeit Kationenaustauschkapazitäten unter Verwendung verschiedener Kali-Lösungen an Korngrößenfraktionen des Saponits untersucht.

Die Überprüfung des EDX-Detektors des TEM's mit Hilfe von Standardmineralen (AP5) ist abgeschlossen. Zur Beurteilung der Qualität des Systems und dessen Parameter, dienten zuvor ermittelte RFA Daten als Referenz. Zudem wurde eine Konditionierung und Kalibrierung des EDX-Detektors durchgeführt.

Mit der Analyse der bisher erhaltenen Mikrobenkontrollbatches (AP8) wurde begonnen. Es handelt sich dabei um 17 abiotische Proben mit einer Reaktionszeit von ca. 1 Jahr bei 25 °C. Die Proben werden zunächst mittels Dialyseverfahren entsalzt und im Anschluss mit den bekannten Analysemethoden charakterisiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die im Rahmen des Auftrags an Jörn-Kasbohm-Consulting (AP3) durchgeführten Überkopf-Rotationsversuche an vietnamesischen Proben und den Proben GMZ_Na, GMZ_Ca, GMZ_Zeolith (BGR, Dr. Stefan Kaufhold) und der Probe GMZ der Charge von 2015 (TU Lulea, Schweden) sollen Aufschluss über den Temperatureinfluss zum Zeitpunkt der Smektitbildung auf die Stabilität der quellfähigen Phasen als auch den Einfluss der unterschiedlichen Kationenbelegung auf das spezifische Lösungsvermögen geben. Die experimentellen Bedingungen (aqua dest., 20 U/min, Raumtemperatur, 20 Tage) entsprachen den ‚low energy level‘-Parametern aus Nguyen-Thanh et al. (2015). Die TEM Messungen und mineralogische Charakterisierung dieser Proben werden Anfang 2017 abgeschlossen.

Zudem wird der Fokus auf der mineralogischen Charakterisierung der Reaktionsprodukte (AP8) und deren Auswertung liegen. Aufgrund des bestehenden Abhängigkeitsverhältnisses zur GRS und dem Beginn der Batchversuche, verzögert sich die Analyse der Reaktionsprodukte um 1 Jahr. Die Beprobung der letzten Batches der 1-Jahresfrist erfolgt voraussichtlich bis Mitte März 2017 und wird uns im Anschluss zugesandt. Die Reaktionsprodukte werden mit den bekannten Methoden (XRD, RFA, CEC, TEM, FT-IR, STA) mineralogisch charakterisiert und mit den Analyseergebnissen des Ausgangsmaterials verglichen. Die Arbeitspakete (AP6-AP8) werden demzufolge mit zeitlicher Verzögerung entsprechend der im Antrag angegebenen Vorhabensbeschreibung fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Stöver, J. (2016): Experimentelle Alteration eines Saponits mit alkalinen Lösungen. Bachelorarbeit, Universität Greifswald

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München	Förderkennzeichen: 02 E 11344D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt D	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 31.12.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 168.932,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krüger

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

Quantenmechanische Modellierung von Eisensubstitutionen im Kristallgitter und an den Oberflächen von Smektiten und Untersuchung des Einflusses auf die Mineraleigenschaften.

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren“.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete:

- Charakterisierung von Referenzmineralen
- Eisensubstitutionen in Smektiten
- Eisensubstitutionen an Smektitoberflächen
- Eisenadsorption an Smektitoberflächen

Ziel der Arbeiten ist ein Beitrag zur Charakterisierung von Eisenionen in Montmorillonit und Beidellit sowie die Untersuchung der Verteilung dieser Ionen im Festkörper und an seinen Oberflächen als Beitrag zur Untersuchung der Mineraleigenschaften in Abhängigkeit vom Eisengehalt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Eisensubstitutionen in Smektiten; AP3: Eisensubstitutionen an Smektitoberflächen

Bisherige Modellierungen zu oktaedrischen Eisensubstitutionen in transvakantem Pyrophyllit (AP2) wurden um entsprechende Rechnungen für cisvakante Schichtstrukturen mit ein und zwei Fe^{3+} -Substitutionen pro Einheitszelle ergänzt. Wie für unsubstituierten Pyrophyllit ist auch für einen Eisengehalt von bis zu $\frac{1}{4}$ der oktaedrischen Plätze eine transvakante Gitterstruktur bevorzugt. Fe^{3+} -Ionen bevorzugen auch im cisvakanten Gitter nicht benachbarte Positionen.

Untersuchungen zur Verteilung von Fe^{3+} -Ionen in Montmorillonit (AP2) anhand von Modellsystemen mit bis zu 3 Substitutionen pro Einheitszelle ($\frac{3}{8}$ der oktaedrischen Plätze) wurden

um Rechnungen mit der PBE-D3-Methode zur Berücksichtigung von Van-der-Waals-Wechselwirkungen vervollständigt. Diese Rechnungen bestätigen den Befund, dass Montmorillonit mit ansteigendem oktaedrischem Eisengehalt die transvakante Gitterstruktur bevorzugt, im Gegensatz zu idealem Montmorillonit. Analysen von Atomladungen mit verschiedenen Methoden an eisensubstituiertem Montmorillonit und Beidellit ergaben keine interpretierbaren Trends. Damit müssen für die Erklärung der bevorzugten Plätze von Eisenionen in Smektiten andere Faktoren, wie etwa Gitterspannungen, als Wesentlich herangezogen werden.

Die bisherigen systematischen Modellierungen zur Verteilung von oktaedrischen Fe^{3+} -Ionen in Modellsmektiten (AP2) wurden um Systeme mit einer höheren Schichtladung von $-0.5 e$ ergänzt. Die gesammelten Daten werden insbesondere genutzt, um in Zusammenarbeit mit der BGR Hannover Zusammenhänge zwischen verschiedenen Merkmalen von Smektiten anhand berechneter relativer Energien zu untersuchen. In Übereinstimmung mit experimentellen Befunden sind transvakante Gitterstrukturen mit wachsender tetraedrischer Schichtladung bevorzugt. Auch mit zunehmendem Gehalt an Eisensubstitutionen werden transvakante Strukturen stabilisiert. Bei Montmorillonit ist dies der Fall, sobald, je nach Schichtladung, etwa 10 bis 25 % der Oktaederplätze mit Eisen besetzt sind. Darüber hinaus ergaben die ergänzenden Rechnungen für Modellsysteme mit höherer Schichtladung unter etwa neutralen pH-Bedingungen, dass die für neutrale Schichten endotherme oktaedrische Eisensubstitution mit wachsender permanenter Schichtladung energetisch erleichtert wird und für geringe Eisengehalte sogar leicht endotherm werden kann.

Weitere Modellierungen zur Verteilung von Fe^{3+} -Ionen an Oberflächen von Pyrophyllit und Smektiten (AP3) wurden aufgenommen, um bisherige, auf die (010)-Kantenfläche von Montmorillonit beschränkte Ergebnisse zu erweitern und zu verallgemeinern.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Eisensubstitutionen in Smektiten

AP3: Eisensubstitutionen an Smektitoberflächen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstraße 12, 76131 Karlsruhe		Förderkennzeichen: 02 E 11355
Vorhabensbezeichnung: Eine experimentelle Analyse der Verhandlungen um ein Endlager für radioaktive Abfälle (Expander)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2015 bis 31.08.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtförderbetrag des Vorhabens: 197.148,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Schultmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist es, die Herausforderungen der Allokation beständiger Gefahrgüter am Beispiel der Endlagerung radioaktiven Abfalls über wirtschaftswissenschaftliche Laborexperimente besser zu verstehen, Ansätze für eine Lösung dieses gesellschaftlichen Dilemmas zu identifizieren und (wirtschafts-)politische bzw. strategische Empfehlungen abzuleiten. Das Problem wird gezielt in einer Serie von Laborstudien untersucht und um ausführliche Stakeholder-Interviews ergänzt, um sowohl theoretisch als auch empirisch fundierte Lösungsansätze zur Bewältigung der Herausforderungen im Prozess der Endlagersuche zu erarbeiten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das vorliegende Forschungsvorhaben lässt sich als iterativer Prozess verstehen. Ausgehend von einem intensiven Studium der Literatur bezüglich vorheriger Laborexperimente und der Evaluation möglicher Experimentdesigns in Expertengesprächen wird ein grundlegendes Basisdesign entworfen, das im Laufe des Projekts unterschiedlich variiert wird.

Jeder Schritt der erneuten Variation der zu beobachtenden Variablen geht somit auf eine begleitende Diskussion mit Experten und eine Literaturrecherche zurück. Damit soll für jede Untersuchungseinheit bzw. für jeden Analyseschritt ein gewisses Maß externer Validität gewährleistet werden. Zudem geben die Interviews wesentliche Impulse zur Hypothesenbildung.

Das Projekt gliedert sich damit in zwei Phasen. Zum einen wird die Entwicklung eines Designs fokussiert, zum anderen wird dieses Design im weiteren Verlauf gezielt angewandt und variiert.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das aus den Interviewergebnissen abgeleitete Entscheidungsmodell basiert auf dem Grundprinzip des Ultimatumspiels. Dieses wurde an Entscheidungen über die Verteilung risikobehafteter Stoffe in einer Gruppe angepasst. Drei Spieler mit einem Anfangsguthaben von jeweils 100 Geldeinheiten werden dabei jeweils einem fiktiven Lager zugeteilt. Diese werden über unterschiedliche Kosten für die Lagerung des riskanten Stoffes beschrieben. Ein zufällig ausgewählter Spieler muss dann den anderen Spielern einen Vorschlag unterbreiten, welcher Spieler den Stoff, der bei der Lagerung für den ausgewählten Spieler Kosten verursacht, aufnehmen soll. Die anderen Spieler können dieses Angebot annehmen, das heißt, der gewählte Spieler nimmt den Stoff auf und trägt sämtliche Kosten selbst, oder ablehnen. Lehnen sie ab, erfolgt die Lagerung an einem öffentlichen Lager, welches die höchsten Kosten verursacht, die von allen Spielern gleichzeitig getragen werden müssen.

In der experimentellen Umsetzung im berichteten Zeitraum nahmen Studierende des KIT die Plätze der Spieler ein. Die Analyse zeigt, dass die Erwartungen an die Rationalität (im Sinne eines Homo oeconomicus) in diesem einfachen Szenario nicht immer erfüllt werden. Während die Akzeptanzrate der Angebote bei beinahe 95 Prozent liegt, zeigt sich, dass die Vorschlaggeber sehr wohl Unterschiede zwischen den Standorteignungen machen: so erfolgte eine Mehrheit der Angebote an Spieler an Standorten, die niedrigere Lagerkosten aufweisen – auch dann, wenn der Vorschlaggeber dabei selbst betroffen ist. Ohne Notwendigkeit nahm die Hälfte aller Vorschlaggeber eigene Kosten in Kauf, um eine für die gesamte Gruppe effiziente Lösung zu ermöglichen. Dabei bleibt zunächst noch unklar, was genau die vorschlagenden Spieler zum effizienten Vorschlag verleitet: die eigene Überzeugung oder antizipierter Protest der Verhandlungspartner. Diese Fragestellung wird daher in den weiteren Arbeiten genauer analysiert sowie weitere Variationen des Spiels (bspw. mit Kommunikation) modelliert und experimentell überprüft.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im letzten Projektabschnitt werden weitere Variationen der Entscheidungssituation modelliert und experimentell überprüft. Dies steht unmittelbar im Fokus des nächsten Halbjahres. Vor allem auf Basis der bisherigen Ergebnisse werden einzelne Effekte nachverfolgt und in weiteren Variationen möglichst isoliert betrachtet. Die per Interview durchgeführte Expertenbefragung wird im Frühsommer abgeschlossen. Hier ist das Ziel, die qualitativen Erkenntnisse noch stärker aggregiert und strukturiert zusammenzufassen und zu bewerten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Projektstatusgespräch im November 2016 in Karlsruhe
Weitere Publikationen aktuell in Arbeit

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11365
Vorhabensbezeichnung: Lösungsverhalten von Spalt- und Aktivierungsprodukten im Nahfeld eines Endlagers (LÖVE)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2015 bis 31.05.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 827.281,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hagemann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

- Ermittlung der Löslichkeitsgrenzen für Spalt- und Aktivierungsprodukte in salzhaltigen Wässern von norddeutschen Unterkreideton- und Steinsalzformationen
- Entwicklung von theoretischen Methoden zur Ableitung thermodynamischer Größen für Spalt- und Aktivierungsprodukte
- Abbau der Ungewissheiten in Bezug auf die geochemischen Eigenschaften dieser chemischen Elemente und Verbesserung der Belastbarkeit von Ergebnissen von geochemischen Modellrechnungen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Auswertung von Korrosionsexperimenten an radioaktiven Abfällen
- Ermittlung von Bandbreiten für die Zusammensetzungen salzhaltiger Lösungen im Endlager
- Experimentelle Ermittlung maximaler Lösungskonzentrationen
- Ermittlung thermodynamischer Größen durch Schätzverfahren
- Geochemische Modellierung der Radionuklidkonzentration im Nahfeld
- Ableitung von Löslichkeitsgrenzen
- Überprüfung der Auswirkung neuer oder aktualisierter Löslichkeitsgrenzen auf die Ergebnisse von Langzeitsicherheitsanalysen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Um chemisch stabile Randbedingungen für Löslichkeitsversuche zu ermöglichen, wurden größere Mengen der Minerale Polyhalit, Glauberit, Syngenit, Kainit, Carnallit hergestellt, an denen die Salzlösungen IP21 und IP9 gesättigt sind (Halit und Sylvit sind kommerziell erhältlich). Dadurch wird es möglich die Löslichkeitsversuche so durchzuführen, dass auch bei Auflösungs- und Fällungsreaktionen von Spaltelement-Verbindungen die Hintergrundsalkonzentration konstant bleibt.

Löslichkeitsversuche mit einer Reihe von Spaltelementen in relevanten salinaren Lösungen wurden begonnen. Dabei kommen in der Regel Elementhydroxide oder -oxyhydroxide als Ausgangsverbindung in Frage. Hierzu wurden weitere Präparate hergestellt. Versuche mit Selen und Zinn werden mit verschiedenen Oxidationsstufen durchgeführt. Die Versuchsansätze werden so gewählt, dass die Reaktionslösungen verschiedene End-pH-Werte aufweisen. Ergebnisse sind in der ersten Jahreshälfte zu erwarten. In nahezu gesättigten Natriumchlorid-Lösungen wurden Löslichkeitsexperimente mit Blei und Nickel durchgeführt. Diese erfolgten in Form von Titrations von niedrigem zu hohem pH.

Eine vertiefte Auseinandersetzung mit den in norddeutschen Unterkreidetonen denkbaren Porenwasserzusammensetzungen zeigte, dass in die Informationslage als außerordentlich schwach bewertet werden muss. Abgesehen von einem allgemeinen Salinitätsgradienten, der sich aus dem Salzgehalt verschiedener Tiefbohrungen ergibt, lässt sich zur Porenwasserzusammensetzung keine Aussage treffen. Zudem haben chemische Analysen des Porenwassers von tiefen Unterkreidetonen offenbar noch nie stattgefunden. Selbst der Salinitätsgradient darf für einen konkreten Standort nur als Anhaltspunkt dienen, da sich die zugrundeliegenden Lösungsanalysen stets auf wasserleitende Begleitformationen beziehen. Ob ähnliche Salinitäten auch in den Tonformationen auftreten, ist gänzlich unklar. Es besteht dringender Bedarf, die chemischen Eigenschaften der Porenwässer durch neue Bohrungen zu ermitteln.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortsetzung der Versuche zur Bestimmung der Löslichkeit von Spaltelementen in ausgewählten salinaren Lösungen. Untersuchung von Analogien und Korrelationen für ausgewählte Wechselwirkungen zwischen Spaltelement-Spezies und Hintergrundsalkationen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11385
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung von Monitoring-Konzepten in Anlehnung an Sicherheits- und Nachweiskonzepte sowie Ableitung von Entscheidungsgrößen und Reaktionsoptionen (MONTANARA)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.4		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 30.06.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 549.185,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Zuge des Vorhabens soll zunächst die Entwicklung von Monitoring-Konzepten für Endlager in einer Tonformation in Deutschland verfolgt werden. Diese Monitoring-Konzepte soll entwickelt werden auf der Basis des Monitoring Workflows, der im Rahmen des internationalen MoDeRn-Projektes erarbeitet wurde. Ein Monitoring-Konzept soll so ausgerichtet sein, dass es möglich ist, im Zusammenspiel mit dem Einlagerungskonzept bzw. der zeitlichen Abfolge der Einlagerung, die Möglichkeiten und Grenzen einer Überwachung nach Verschluss des Endlagers noch während der Betriebsphase zu bewerten. In Ergänzung dazu werden in analogerer Weise auch die konzeptionellen Überlegungen zum Monitoring eines Endlagers in einer Steinsalzformation aus dem MoDeRn Projekt weiter entwickelt.

Ein weiteres Teilziel ist die Entwicklung von sogenannten „Trigger Values“. Das sind Werte von Messgrößen oder zeitliche Entwicklung von Messgrößen, die, wenn sie erreicht werden, darauf hindeuten, dass das Endlagersystem möglicherweise nicht mehr der erwarteten Entwicklung also dem „Referenzszenario“ entspricht. Abschließend sollen mögliche Handlungsoptionen bei Erreichen von „Trigger Values“ erarbeitet werden sowie eine Einschätzung bzgl. der Effektivität eines Monitorings nach Verschluss des Endlagers. Aktuelle Arbeiten und Ergebnisse des Vorhabens sollen auf entsprechenden internationalen Workshops präsentiert und diskutiert werden, um eine möglichst breite internationale Akzeptanz der Konzeptionen zu erzielen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Weiterentwicklung Monitoring-Konzept für Endlager im Steinsalz
- AP2: Neuentwicklung Monitoring-Konzepte für Endlager im Tonstein
- AP3: Erzeugung synthetischer Monitoring-Ergebnisse und Ableitung von „Trigger Values“ für einzelne Endlagerkomponenten
- AP4: Handlungsoptionen bei Erreichen von „Trigger Values“ und offene Fragen
- AP5: Dokumentation der Ergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Als eine Randbedingung für die Entwicklung von Monitoring-Konzepten wurde vorgesehen, die Endlagerkonzepte aus dem laufenden Forschungsvorhaben ANSICHT zu verwenden, im Rahmen dessen ein Sicherheits- und Nachweiskonzept für ein Endlager in einer Tonformation in Deutschland entwickelt wird. Aus den dortigen Endlagerkonzepten wird zunächst die Option vertikale Bohrlochlagerung verwendet. Gemäß dem Verfüll- und Verschlusskonzept wird nach Beladung eines Bohrloches dieses mit einem Bohrlochverschluss versiegelt. Dies geschieht mit allen Bohrlöchern eines Einlagerungsfeldes.

Für den bisherigen, im Berichtszeitraum entwickelten, Entwurf eines Monitoring-Konzeptes für ein Endlager wird davon ausgegangen, dass nicht das gesamte Endlager im Detail überwacht werden soll, sondern dass einzelne als repräsentativ anzusehende Einlagerungsfelder als sogenannte „Monitoring-Felder“ dazu genutzt werden sollen. In jedem Fall wird das erste beladene Einlagerungsfeld als Monitoring-Feld genutzt, so dass eine möglichst lange Monitoringphase während der Betriebsphase des Endlagers genutzt werden kann. Auch soll nicht jedes Bohrloch überwacht werden, sondern auch hier soll eine repräsentative Auswahl erfolgen.

Es wird überlegt, die ersten drei Einlagerungsbohrungen nicht gleich mit Abfallbehältern zu beladen, sondern mit elektrischen Erhitzern, die die gleiche geometrische Dimension und Wärmeleistung haben wie die Abfallbehälter. Damit wird sowohl der Herstellungs- und Beladungsprozess unter annähernd realen Einlagerungsbedingungen getestet als auch die Installation der einzelnen Bohrlochversiegelungen. Um die Bohrlochversiegelung zu überwachen, werden parallel entsprechende Sensoren und Übertragungssysteme im Bereich der Bohrlochversiegelung installiert, d. h. die Installation des Monitoringsystems geschieht ebenfalls unter realen Bedingungen. Der Vorteil ist, dass diese Arbeiten ohne aufwendigen Strahlenschutz durchgeführt werden können. Notwendige Änderungen sowohl an der Bohrlochversiegelung als auch an dem Monitoringsystem, die sich im Zuge einer Testphase ergeben, können so problemlos durchgeführt werden. Am Ende der Testphase und der Ergebnisbewertung kann dann entschieden werden, ob auf Basis der Testergebnisse an der bisherigen Planung zur folgenden Einlagerung der Abfallbehälter, der Bohrlochversiegelung oder des Monitoringsystems etwas geändert werden soll. Die „Dummy-Bohrungen“ sollen zu Testzwecken während der gesamten Betriebsphase zur Verfügung stehen.

Zur Ausarbeitung des Monitoringprogramms ist geplant, den sogenannten „Parameter-Screening“ Prozess zu nutzen, der im Rahmen des MODERN2020 Projektes entwickelt wird. Dieser Screening Prozess hat zum Ziel, diejenigen Parameter zu identifizieren, die geeignet sind, Informationen über die Entwicklung des Endlagers im Bereich einzelner geotechnischer Barrieren zu liefern, um zu bewerten, ob die Barrieren ihre vorgesehenen Funktionen erfüllen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterentwurf eines Monitoring-Konzeptes für das Endlagerkonzept der vertikalen Bohrlochlagerung aus dem ANSICHT Projekt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11395
Vorhabensbezeichnung: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 363.017,00 EUR	Projektleiter: Kühnlenz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Dies schließt auch die Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein solches Endlager ein. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Gruben- gebäudekonzeption und Auslegungsberechnungen. Das zweite und dritte Teilziel sind die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedene Einlagerungsvarianten. Das vierte Teilziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagern in unterschiedlichen geologischen Formationen geschaffen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagenermittlung (DBE TEC)
- AP2: Erstellung von generischen geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern (BGR und IfG)
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (GRS)
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität (BGR und IfG)
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten (DBE TEC)
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen (GRS)
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit (DBE TEC)
- AP8: Synthesebericht (DBE TEC)

Die BGR ist gemeinsam mit IfG federführend für die AP2 und AP4 zuständig und weiterhin am AP6 beteiligt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum konnte im AP2 auch das zweite 3D-Modell vom Typ „Salzkissen“ fertiggestellt werden. Es wurde an die DBE Technology übergeben und diente zur räumlichen Positionierung des Endlagers und für thermische Auslegungsberechnungen sowie für thermomechanische Modellrechnungen von BGR und IfG. Der parallel zu den geologischen Modellierungsarbeiten erstellte Materialparameter-Bericht fließt in die im AP4 durchgeführten Arbeiten ein und wird in Abhängigkeit von den Ergebnissen und Anforderungen der Modellberechnungen fortführend ergänzt, korrigiert und modifiziert. Auf Basis des für die flache Lagerung entwickelten geologischen Modells wurde im AP4 zunächst ein 3D-Modell zur Durchführung von orientierenden Berechnungen erstellt. Anschließend wurde ein 2D-Fernfeldmodell entsprechend dem von DBE TEC erarbeiteten Endlagerkonzept „Streckenlagerung“ unter Ausnutzung einer Symmetrieebene generiert, das für Vorstudien und Optimierungen der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung verwendet wurde. Drei Aspekte wurden untersucht: 1. Auswirkung der räumlichen Diskretisierung auf die thermischen und thermomechanischen Berechnungsergebnisse; 2. Auswirkung der Modellgröße auf die Berechnungsergebnisse; 3. Beeinflussung der Berechnungsergebnisse durch Variation der Steifigkeiten des Buntsandsteins und des Hauptanhydrits. Die thermischen Ergebnisse zeigten, dass die unterschiedlichen Diskretisierungen keine Auswirkung auf die Ergebnisse im Fernfeld der Einlagerungsstrecken und nur geringe Einflüsse im Nahbereich der Einlagerungsstrecken hatten. In den Einlagerungsstrecken selbst wurden jedoch zum Teil signifikant höhere Temperaturen in den feiner diskretisierten 2D-Modellen berechnet. Die thermomechanischen Berechnungen zeigten für die untersuchten Varianten vergleichbare Ergebnisse. Unterschiede zeigten sich auch hier im Nahbereich der Einlagerungsstrecken. Bei Ansatz einer kleinen Buntsandsteinsteifigkeit wurde das Fluiddruckkriterium am Salzspiegel zentral über dem Einlagerungsbereich verletzt, während mit einer hohen Buntsandsteinsteifigkeit die Verletzung des Fluiddruckkriteriums am Salzspiegel seitlich versetzt zum Endlager auftrat. Die Steifigkeit des geringmächtigen Hauptanhydrits wirkt sich nicht signifikant auf die Lage der fluiddruckverletzten Zone aus.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der thermomechanischen Modellberechnungen für den Typ „flache Lagerung“ und den Typ „Salzkissen“
- in Abhängigkeit von den Ergebnissen und Anforderungen der Modellberechnungen gegebenenfalls eine Ergänzung bzw. Modifizierung des Materialparameter-Berichtes
- Kalibrierung der Berechnungsmodelle zur Integritätsanalyse an Versagensfällen geologischer Barrieren
- Zusammenstellung der Arbeiten und Ergebnisse in den Abschlussberichten von AP2 und AP4

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Dörr, S., Filbert, W., Simo, E., Fahland, S., Hammer, J., Heusermann, S., Kühnlenz, T., Mrugalla, S., Reinhold, K., Buhmann, D., Kindlein, J., Mönig, J., Wolf, J., Minkley, W., Popp, T. (2015): Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes. Zwischenbericht, 105 S

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11405A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 550.199,00 EUR	Projektleiter: Bollingerfehr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Dies soll auch die Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein solches Endlager einschließen. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Grubengebäudekonzeption und Auslegungsberechnungen. Das zweite und dritte Teilziel sind die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedenen Einlagerungsvarianten. Das vierte Teilziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen geschaffen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagersystemen in unterschiedlichen geologischen Formationen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen ermitteln und zusammenstellen
- AP2: Erstellung von generischen geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit
- AP8: Synthesebericht

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend zuständig für AP1, AP5, AP7 und AP8

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Planungsarbeiten im AP5 "Entwicklung von Endlagerkonzepten" für die Einlagerungsvarianten "Streckenlagerung von POLLUX-Behältern" und "horizontale Bohrlochlagerung von Kokillen (BSK-H)" für den zuerst betrachteten geologischen Typ "flache Lagerung" wurden abgeschlossen. Mittels thermischer Auslegungsberechnungen wurden die geometrischen Parameter (Behälter-, Strecken- und Bohrlochabstände) berechnet. Es wurde gezeigt, dass die Auslegungstemperatur von 200 °C an keiner Stelle und zu keinem Zeitpunkt im Grubengebäude überschritten wurde. Die Grubengebäudeplanungen wurden ebenfalls für beide Varianten fertiggestellt. Die Ergebnisse der thermischen Auslegungsberechnungen, der Temperaturverteilungsberechnungen im Grubengebäude bis zu 100.000 Jahren sowie der Planungen der Grubengebäude wurden dokumentiert und den Projektpartnern zur weiteren Verwendung bei den Integritätsanalysen und Konsequenzenanalysen bereitgestellt.

Mit den Planungen für die beiden Einlagerungsvarianten "vertikale Bohrlochlagerung" und "Transport- und Lagerbehälterlagerung" für den betrachteten geologischen Typ "Salzkissen" wurde begonnen. Dazu wurde die geometrisch maximale Größe des Grubengebäudes ermittelt und in Abstimmung mit den Kollegen von BGR und IfG in das von ihnen entwickelte geologische Modell "Typ Salzkissen" eingepasst. Für beide Einlagerungsvarianten wurde auch die jeweilige Teufenlage des Einlagerungshorizontes im generischen Modell abgestimmt und für weitere Planungen festgelegt.

Zum Ende des Berichtszeitraumes wurde planmäßig mit den Arbeiten zur Analyse der Betriebssicherheit begonnen. Zunächst wurden die Betriebsabläufe für die Einlagerungsvarianten Streckenlagerung von POLLUX-Behältern und horizontale Bohrlochlagerung von Kokillen sowie dazugehörige sicherheitsrelevante Komponenten, Einrichtungen und Prozessen zusammengestellt und beschrieben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Schwerpunkt der Arbeiten wird weiterhin AP5 "Entwicklung von Endlagerkonzepten" sein. Für den betrachteten geologischen Typ "Salzkissen" sind die beiden Einlagerungsvarianten "vertikale Bohrlochlagerung" und "Transport- und Lagerbehälterlagerung" zu planen. Dazu gehören thermische Auslegungsberechnungen, die Planungen der Grubengebäude und die Beschreibung eines Verfüll- und Verschlusskonzepts. Im Rahmen des AP7 "Bewertung der Betriebssicherheit" werden die Analyse von Schachstellen und deren Bewertung im Fokus stehen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bollingerfehr; W. (2016): Konzeptentwicklung und Sicherheits- und Nachweiskonzept für ein generisches HAW-Endlager in flachlagernden Salzschieben.- 12. Projektstatusgespräch zu BMWi-geförderten Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle, 09.-10.11.2016, Karlsruhe

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11405B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 525.090,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kindlein	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Dies soll auch die Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein solches Endlager einschließen. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Grubenbaukonzeption und Auslegungsberechnungen. Das zweite und dritte Teilziel sind die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedenen Einlagerungsvarianten. Das vierte Teilziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen geschaffen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagersystemen in unterschiedlichen geologischen Formationen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen ermitteln und zusammenstellen
- AP2: Erstellung von generischen, geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit
- AP8: Synthesebericht

GRS ist federführend für die Arbeitspakete 3 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wurden im Berichtszeitraum insgesamt 3 Arbeitsgespräche mit den vier am Projekt beteiligten Organisationen (GRS, BGR, DBE TECHNOLOGY und IfG) durchgeführt. Die diskutierten Inhalte betrafen vor allem die Entwicklung der geologischen, geomechanischen und radiologischen Rechenmodelle, der Berechnung der Temperaturentwicklung im Endlager sowie die radiologischen Konsequenzenanalysen. Die Arbeiten in den Arbeitspaketen waren:

- AP2: Diskussion von Aufbau und Parametrisierung des generischen geologischen Modells für den Typ Salzkissen sowie der geologischen Barrieremächtigkeiten.
- AP3: Vervollständigung des Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager in flach lagernden Salzstrukturen.
Aufbauend auf den generischen geologischen Modellen wurden die Sicherheits- und Nachweiskonzepte fortentwickelt. Auf Grundlage der Sicherheitsanforderungen des BMUB sowie des Abschlussberichtes der Endlagerkommission wurde das im Rahmen von KOSINA entwickelte Nachweiskonzept für ein Endlager in flacher Lagerung überprüft. Es wurde dargestellt, wie mit Ungewissheiten (Modell-, Parameter- sowie Szenarienungewissheiten) umgegangen werden soll.
- AP4: Diskussion der geomechanischen Modellrechnungen zur Integritätsanalyse. Auswertung der gebirgsmechanischen Modellrechnungen zur Ableitung von Konvergenzraten für unterschiedliche Versatzarten (feucht, trocken) und Temperaturverläufe.
- AP5: Diskussion und Optimierung der Endlagerauslegung für die Varianten Streckenlagerung und horizontale Bohrlochlagerung für den Typ flache Lagerung. Berechnung von Temperaturverläufen für ausgewählte Lokationen im Endlager und Übernahme der Ergebnisse als Input für radiologische Modellrechnungen in AP6.
- AP6: Durchführung von radiologischen Modellrechnungen, Diskussion der Ergebnisse.
Die Arbeiten zur radiologischen Konsequenzenanalyse wurden im Berichtszeitraum intensiviert. Auf Grundlage der bereits abgeleiteten Rechenfälle wurden deterministische Modellrechnungen für den Basisfall sowie für Varianten durchgeführt. Auf Grundlage der Ergebnisse der Variantenrechnungen konnten signifikante Modellparameter sowie Optimierungspotenziale für das Endlagerdesign und die Bauwerksauslegung identifiziert werden.

Zu den Arbeitspaketen 1, 7 und 8 wurden im Berichtszeitraum keine Arbeiten durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Dokumentation des Umgangs mit Ungewissheiten, Berichterstellung.
- AP4: Diskussion des Nachweises des ewG, geomechanische Integrität der Barrieren.
- AP5: Optimierung der Endlagerauslegung der Varianten für den Typ Salzkissen.
- AP6: Durchführung von Modellrechnungen (auch probabilistisch) für alle Varianten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 11405C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2015 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 599.728,00 EUR	Projektleiter: Dr. Minkley	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept sowie die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Grubengebäudekonzeption und Auslegungsberechnungen. Ein zweites Teilziel ist die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedenen Einlagerungsvarianten. Ein weiteres Ziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen geschaffen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagersystemen in unterschiedlichen geologischen Formationen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen ermitteln und zusammenstellen
- AP2: Erstellung von generischen geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit
- AP8: Synthesebericht

Das IfG ist gemeinsam mit BGR federführend für die AP2 und AP4 zuständig.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen von AP4 erfolgten schwerpunktmäßig Arbeiten zur Integritätsanalyse der geologischen Barriere des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs (ewG). Sie ist ein wesentliches Element der Sicherheitsanalyse für Endlager für radioaktive Abfälle. Grundlage bildet das generische Modell des Typs „Flache Lagerung“, für welches repräsentative Schnitte festgelegt wurden.

Unter Berücksichtigung der verschiedenen Einlagerungsvarianten (u. a. Bohrloch-, Streckenlagerung) wurden vom IfG als zweidimensionale Endlagermodelle betrachtet. Dabei wurden explizit Grubenbaue des Endlagerbergwerks, also Förder-, Richt- und Einlagerungstrecken berücksichtigt und abgebildet.

Erste vorläufige Berechnungsergebnisse der thermo-hydro-mechanisch gekoppelten Simulationen zu den Einlagerungsvarianten Streckenlagerung und horizontale Bohrlochlagerung in der flachen Lagerung wurden präsentiert. Innerhalb der ersten Jahrzehnte nach Einlagerung der wärmeentwickelnden Behälter induziert die thermische Expansion des Einlagerungshorizontes einen Hebungsprozess in dessen Folge eine Reduktion der horizontalen Einspannung am Salzspiegel und damit eine lokale Verletzung des Minimalspannungskriteriums zu beobachten ist. Aufgrund der abnehmenden Wärmeleistungen und der kriechbedingten Ausgleichsbewegungen des Salinars bleibt dieser Bereich lokal und zeitlich begrenzt.

Die thermo-hydro-mechanisch gekoppelten Berechnungen zeigen dies explizit anhand der druckgetriebenen Perkolation, d. h. der Entstehung von Fließwegen in dem Bereich, in dem eine Verletzung des Minimalspannungskriteriums vorliegt. Die druckgetriebene Ausbreitung von Fließwegen wird durch den kriechbedingten Wiederanstieg der minimalen Hauptspannung in der Folgezeit gestoppt. Es verbleibt in den vorläufigen Berechnungen ein über 300 m mächtiger Bereich der Salinarbarriere über dem Einlagerungshorizont in dem zu keinem Zeitpunkt eine Kriterienverletzung bzw. Fluidperkolation ausgewiesen wird. Die beiden betrachteten Einlagerungsvarianten unterscheiden sich hierbei durch den global vergleichbaren Wärmeeintrag nur geringfügig.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im Anschluss an abschließende Berechnungen zum Typ „flache Lagerung“ werden die Arbeiten zur Integritätsanalyse fortführend planmäßig für die verschiedenen Einlagerungskonstellationen für den Typ „Salzkissen“ fortgeführt.

Als weiterer Schritt ist die Überprüfung und Kalibrierung der Berechnungsmodelle zur Integritätsanalyse an Versagensfällen geologischer Barrieren durch fluiddruck-getriebene Perkolation entlang diskreter Fließwege im Salzgestein vorgesehen. Dies ist Voraussetzung für eine Validierung der THM-gekoppelten Modellrechnungen zum Nachweis der Integrität der geologischen Barriere.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Rahmen des 12. Projektstatusgespräches zu BMWi-geförderten FuE-Projekten zur Entsorgung radioaktiver Abfälle vom 09.-10.11.2016 in Karlsruhe wurde ein gemeinsamer Übersichtsvortrag von BGR und IfG zu den geologischen Grundlagen und gebirgsmechanische Modellierungen präsentiert.

Zuwendungsempfänger: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 11415A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 431.000,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Reich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die geochemische Wechselwirkung der Actiniden Np, Pu und des Spaltproduktes Tc mit Zementkorrosionsphasen sowie die Vorgänge an der Grenzfläche zwischen Beton und natürlichem Tongestein bzw. Bentonit werden bei mittleren und hohen Ionenstärken untersucht. Bei den Studien mit Pu wird auch der Einfluss organischer Zusätze auf dessen Sorption an Zementphasen betrachtet. Der Schwerpunkt der Studien soll bei den drei- und vierwertigen Actiniden und beim vierwertigen Technetium liegen. Teilweise sollen aber auch Np(V) und Tc(VII) zum Vergleich mit in die Untersuchungen einbezogen werden. Zur Identifizierung der wichtigsten Prozesse bei der Radionuklidrückhaltung sollen die Sorptions- und Diffusionsexperimente mit Speziationsmethoden (XAFS, XRD, XPS, CE-ICP-MS) gekoppelt werden. Diese Daten sollen es ermöglichen, die wichtigsten Prozesse wie Sorption und Diffusion zu modellieren und auf molekularer Ebene zu verstehen, so dass Vorhersagen im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse gemacht werden können. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, dem Karlsruher Institut für Technologie, der Universität des Saarlandes und der TU München zusammengearbeitet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Untersuchung des Einflusses von Zementalterationsphasen auf die Migration von Np, Pu und Tc in Portlandzement
- Einfluss von organischen Zementadditiven auf die Sorption von Plutonium an Zementphasen
- Untersuchung der Diffusion von Np, Pu und Tc in Tongestein unter hyperalkalinen Bedingungen
- Untersuchung der Sorption von Pu und Tc an Ca-Bentonit und ihrer Diffusion in kompaktiertem Ca-Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In Batchversuchen wurde die Sorption von 1×10^{-7} M Th(IV) und 1×10^{-8} M Am(III) an gemörsertem Zementsteinpulver ($< 63 \mu\text{m}$) in Abhängigkeit von der Feststoffmenge (0,5 – 20 g/L) bei pH = 10 und in Abhängigkeit vom pH-Wert (pH 9 - 13) mit 5 g/L in verdünnter Gipshut-Lösung (VGL) unter Ar-Atmosphäre untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass für beide Actiniden über den gesamten pH Bereich eine sehr starke Sorption auftritt ($\log K_d > 4$ für Th(IV) bzw. $\log K_d > 5$ für Am(III)).

Weitere Sorptionsversuche in Abhängigkeit vom pH-Wert (pH 9 - 13) an 5 g/L gemörsertem Zementsteinpulver in VGL wurden mit 1×10^{-8} M Pu(III) bei den gleichen Bedingungen wie für die anderen Actiniden durchgeführt. Hierbei zeigte sich ebenfalls eine sehr starke Sorption mit $\log K_d > 5$ über den gesamten untersuchten pH-Bereich.

Für die Untersuchung der Sorption von Am(III) und U(VI) an Zementkorrosionsphasen wurden CSH-Phasen mit Ca:Si-Verhältnissen (C:S) von 0,75, 1,07 und 1,65 synthetisiert. Bei den anschließenden Batchexperimenten bei pH 10 - 13 mit 1×10^{-8} M Am(III) und 1×10^{-7} M U(VI) unter Ar-Atmosphäre in MilliQ-Wasser war die Sorption nahezu quantitativ mit $\log K_d \geq 4,8$. Dies war unabhängig vom C:S- und vom S/L-Verhältnis (0,5 - 15 g/L).

Es wurden Diffusionsexperimente mit Zementstein (Dicke = 10,9 mm, $\varnothing = 25,7$ mm) begonnen. Bei der Synthese der Zementsteine betrug der Wasser/Zement-Wert (w/z) 0,5 bzw. 0,7. Als mobile Phase wurde VGL eingesetzt. Zur Charakterisierung der Proben wurden zunächst die Diffusionsparameter von HTO in Zementstein ermittelt: $D_e = (5,98 \pm 0,24) \times 10^{-12}$ m²/s und $\varepsilon = 0,49 \pm 0,02$ bzw. $D_e = (1,46 \pm 0,06) \times 10^{-11}$ m²/s und $\varepsilon = 0,45 \pm 0,02$. Nach der Ausdiffusion von HTO wurden die Diffusionsversuche mit 8×10^{-6} M Np(V) gestartet.

Zusätzlich wurden vier kompaktierte Ca-Bentonitproben (Dicke 10,3 mm, $\varnothing = 25,7$ mm) in Diffusionszellen eingebaut und mit VGL als mobile Phase vorkonditioniert. Die Charakterisierung der Proben mittels der Diffusion von HTO wurde gestartet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weitere Batchexperimente zur Sorption von drei- und vierwertigen Actiniden an CSH-Phasen.
- Weitere filterfreie Diffusionsexperimente mit Np(V) und Zementstein (w/z = 0,5 und 0,7).
- Diffusion von Np(V) in kompaktiertem Ca-Bentonit mit VGL bei 25 °C und 60 °C.
- Herstellung und Charakterisierung eines synthetischen Zementporenwassers (ACW) durch Auslaugungsexperimente mit gemörsertem Zementstein.
- XPS-Messungen an Zementsteinen und CSH-Phasen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

I. Dolique: Sorption von Neptunium an Calcium-Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen, 2016 (Diplomarbeit)

M. Maxeiner: Elementanalyse von Tonporenwasser mittels ICP-MS. ICP-MS, ICP-OES, AAS – Vergleich der Messtechniken, 2016 (Bachelorarbeit)

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11415B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 638.860,00 EUR	Projektleiter: Dr. Schmeide	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge zur Verbesserung des Verständnisses dominierender Prozesse für die Mobilisierung bzw. Immobilisierung von Radionukliden auf molekularer Ebene sowie die Bestimmung quantitativer Parameter zur geochemischen Radionuklidrückhaltung an endlagerrelevanten Festphasen. Im Detail wird das Rückhaltevermögen von Zementphasen und Tonmaterialien gegenüber Radionukliden (Cm, Eu, U, Tc) unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken mittels Batch- und Diffusionsexperimenten untersucht. Durch Einsatz spektroskopischer Methoden sollen gebildete Oberflächenkomplexe bzw. der strukturelle Einbau der Radionuklide in die Mineralphasen auf molekularer Ebene spezifiziert und über längere Zeiträume verfolgt werden, um eine mögliche Freisetzung von Radionukliden infolge von veränderten Umgebungsparametern aufzuzeigen. Ein weiteres Ziel besteht in der Bereitstellung verbesserter Bewertungsgrundlagen zum Einfluss polymerer Zementfließmittel (Superplasticizer) auf das Adsorptionsverhalten von Radionukliden im Freisetzungsfall. Am Beispiel von Polycarboxylatethern (PCE) als aktuelle Generation von Superplasticizern sollen die Bedingungen für eine verringerte adsorptive Immobilisierung von Actiniden-Analoga an Zementphasen und Tonmaterialien festgestellt werden. Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten der Universitäten Mainz, Dresden, Saarbrücken, München, Heidelberg, Potsdam und des Karlsruher Instituts für Technologie.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Spektroskopische Untersuchung der Stabilität von Radionuklid-dotierten Zementphasen (Cm, U und Tc)
- AP2: Spektroskopische Untersuchung der Stabilität von Radionuklid-dotierten Tonmineralphasen (Cm, U und Tc)
- AP3: Untersuchung der Sorption und Diffusion von U an/in Tongestein und Ca-Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen
- AP4: Untersuchung der Komplexbildung von Eu mit polymeren Zementfließmitteln (Polycarboxylatether)
- AP5: Synthese und Charakterisierung ¹⁴C-markierter Polycarboxylatether
- AP6: Untersuchung des Einflusses polymerer Zementfließmittel (Polycarboxylatether) auf die Adsorption von Eu an Zementphasen
- AP7: Untersuchung des Einflusses polymerer Zementfließmittel (Polycarboxylatether) auf die Adsorption von Eu an Tongestein und Ca-Bentonit
- AP8: Entwicklung geochemischer Modelle
- AP9: Methodenentwicklung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Um die Langzeitstabilität von U(VI)-dotierten CSH-Phasen (Ca:Si-Verhältnisse: 1,0 – 2,0; 30 – 50 µg/g U(VI)) in hochsalinaren Lösungen zu beurteilen, wurde deren Laugungsverhalten in verschiedenen Salzlösungen (2,5 M NaCl; 2,5 M NaCl/0,5 M Na₂SO₄; 2,5 M NaCl/0,02 M NaHCO₃) unter Anwendung von ICP-MS sowie verschiedener spektroskopischer Methoden wie zeitaufgelöste Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS), Infrarotspektroskopie (IR) und Pulver-Röntgendiffraktometrie (PXRD) untersucht. Die Ergebnisse zeigten, dass weder NaCl noch Na₂SO₄ die strukturelle Stabilität der CSH-Phasen und deren Rückhaltevermögen für U(VI) beeinflussen. Dagegen führt die Anwesenheit von Carbonat in der Salzlösung zu einer Auflösung der CSH-Phasen und damit zu einer Freisetzung von U(VI).
- Die U(VI)-Sorption an Ca-Bentonit wurde in Ab- und Anwesenheit von CO₂ untersucht ([UO₂²⁺] = 5×10⁻⁷ M, S/L = 10 g/L, verd. Gipschlösung (I = 2,6 M), pH 8 – 13). Der Carbonatgehalt der in Anwesenheit von CO₂ untersuchten Proben wurde für jede Probe ermittelt (1,1×10⁻⁴ – 5,4×10⁻³ M). Im pH-Bereich 8,0 – 9,5 ist die U(VI)-Rückhaltung bei Anwesenheit von CO₂ deutlich geringer als in Abwesenheit von CO₂. Im pH Bereich 10 – 12 wurde eine nahezu vollständige U(VI)-Rückhaltung, sowohl bei Ab- als auch bei Anwesenheit von CO₂, festgestellt. Bei pH > 12 wurde ein Rückgang der U(VI)-Rückhaltung beobachtet. Mittels TRLFS wurde gezeigt, dass bei den hier untersuchten mittleren Carbonatgehalten bei pH 8,5 – 10 Uranyl-Carbonat-Spezies und bei pH > 10 anionische Uranyl-Hydroxo-Spezies in Lösung vorliegen. In Abwesenheit von CO₂ bestimmen Uranyl-Hydroxo-Spezies die aquatische U(VI)-Speziation über den kompletten untersuchten pH-Bereich.
- In Radiotraceruntersuchungen zur Eu(III)-Komplexbildung mit einem Zementfließmittel auf PCE-Basis wurde gezeigt, dass diese Additive im Freisetzungsfall ein hohes Mobilisierungspotenzial gegenüber mehrwertigen Radiometallen aufweisen. Unter den für Zementssysteme typischen hochalkalinen Bedingungen erfolgt die Bindung selbst bei Elektrolytkonz. bis 4 M NaCl bzw. 1 M CaCl₂ nahezu vollständig. Sorptionsverhalten und chemische Stabilität des Komplexbildners müssen jedoch ebenso betrachtet werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der U(VI) Batch-Sorptions-Experimente an Ca-Bentonit (Aufnahme von Sorptionsisothermen bei pH 10,5 und pH 12,5; Variation des Carbonatgehaltes sowie der Ionenstärke.
- Feststoff-TRLFS zur Charakterisierung der sorbierten U(VI)-Oberflächenkomplexe.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wolter, J.-M., Schmeide, K., Stumpf, T.: Stability of uranium(VI) doped CSH phases in high saline water. Vortrag: Kompetenzzentrum Ost für Kerntechnik, Seminar für Doktoranden und Nachwuchswissenschaftler im HZDR, 08.12.2016, Dresden, Germany

Philipp, T., Schmeide, K., Stumpf, T.: Uranium(VI) retention by Ca-bentonite under (hyper)alkaline conditions. Posterbeitrag: THUL School in Actinide Chemistry 2016, 19.-23.09.2016, Dresden, Germany

Lippold, H., Eidner, S., Kumke, M.U., Lippmann-Pipke, J.: Dynamics of metal-humate complexation equilibria as revealed by isotope exchange studies – a matter of concentration and time. *Geochim. Cosmochim. Acta* 197, 62-70 (2017)

Kulenkampff, J., Gründig, M., Lippmann-Pipke, J., Zakhnini, A.: Quantitative experimental monitoring of molecular diffusion in clay with positron emission tomography. *Solid Earth* 7, 1207-1215 (2016).

Kulenkampff, J., Gründig, M., Zakhnini, A., Lippmann-Pipke, J.: Geoscientific process monitoring with positron emission tomography (GeoPET). *Solid Earth* 7, 1217-1231 (2016)

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11415C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 559.679,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marquardt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Forschungs- und Entwicklungs-Aktivitäten (FuE) dieses Vorhaben beinhalten die anwendungsbezogene, standortunabhängige Grundlagenforschung auf dem Gebiet der Entsorgung insbesondere Wärme entwickelnder und langlebiger radioaktiver Abfälle. In diesem Vorhaben werden sicherheitsrelevante Phänomene und Prozesse untersucht, prozessbeschreibende Modelle und Codes entwickelt und bereitgestellt sowie die Methodik zur Führung von Sicherheitsnachweisen optimiert. Die FuE-Arbeiten haben zum Ziel, die wissenschaftlich-technischen Grundlagen zur Realisierung eines Endlagers für radioaktive Abfälle bereitzustellen, den Stand von Wissenschaft und Technik ständig weiterzuentwickeln sowie zum Aufbau, Weiterentwicklung und Erhalt der wissenschaftlich-technischen Kompetenz und Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung in Deutschland beizutragen. Das Vorhaben liefert standortunabhängige Ergebnisse aus Untersuchungen zum geochemischen Verhalten von Actiniden in Lösungen - Grundwässer bzw. Porenwässer -, die im Kontakt mit Betonbauwerken stehen. Hierbei werden für die relevanten Actiniden thermodynamische Daten zur Komplexbildung - vorwiegend gelöste organischen Komponenten (Plasticizer) - und Sorptionsdaten auf Basis von Oberflächenkomplexbildungsmodellen abgeleitet. Diese Daten können über einem thermodynamischen Modell in eine Sicherheitsanalyse eines Endlagers Eingang finden.

Zusammenarbeiten laufen mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, der Universitäten Mainz, Potsdam, Heidelberg, Köln, des Saarlandes sowie der TU München.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Radionuklidrückhaltung im System Zement-, Zementkorrosionsprodukten bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- AP2: Radionuklid-Rückhaltung durch Sorption am Tonmineral Illit bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- AP3: Thermodynamische Modellierung:
- AP4: Methodenentwicklung: Analytik, Spektroskopie, Quantenchemie

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen des AP1 des GRaZ-Projektes wurde die Löslichkeit von Th(IV) und U(VI) in NaCl-, CaCl₂- und MgCl₂-Lösungen in Anwesenheit organischer Zementadditive bzw. entsprechender Modellliganden untersucht. Bei diesen „Screeningexperimenten“ wurden Melamin, Phtalat, Citrat, Adipat, Methylacrylat, 1,2-Ethandiol und Gluconat als Liganden verwendet. Mit diesen Liganden wurden Stammlösungen mit einer Elektrolytkonzentration von 2,5 M (NaCl) und 1 M (CaCl₂ und MgCl₂) hergestellt. Die Löslichkeitsexperimente wurden jeweils bei pH 9 und 13 (NaCl), pH 9 und 12 (CaCl₂) sowie pH 9 (MgCl₂) durchgeführt. Als Bodenkörper wurden Th(OH)₄(am) sowie Na₂U₂O₇·H₂O(cr) (NaCl-System), CaU₂O₇·3H₂O(cr) (CaCl₂-System) und UO₃·2H₂O(cr) (MgCl₂-System) verwendet. Innerhalb von 6 Monaten wurden sowohl für die Th(IV)- als auch die U(VI)-Proben mehrere Probenahmen durchgeführt, wobei die Ergebnisse der jeweils letzten Probenahmen noch ausstehen. Die bisherigen Ergebnisse zeigen, dass für alle untersuchten Salzkonzentrationen und pH-Werte Citrat und Gluconat einen signifikanten Einfluss auf die Löslichkeit von Th(IV) und U(VI) haben. Dieser Effekt ist bei Th(VI) deutlicher ausgeprägt als bei U(VI). Mit allen anderen untersuchten Liganden kann hingegen kein signifikanter Einfluss auf die Löslichkeit festgestellt werden. Daher wird bei weiterführenden Experimenten der Focus auf Citrat und Gluconat gelegt.

Im Rahmen des AP2 des GRaZ-Projektes wurde die Sorption von trivalenten Lanthaniden und Actiniden in Ab- und Anwesenheit endlagerrelevanter Carbonat-Konzentrationen in salinaren Lösungen untersucht. Hierzu wurden Experimente im Gleichgewicht mit atmosphärischem CO₂-Partialdruck ($p_{\text{CO}_2} = 10^{-3,3}$ bar) und in einer Ar-CO₂-Atmosphäre mit einem erhöhtem CO₂-Partialdruck von 1 % CO₂ ($p_{\text{CO}_2} = 10^{-2}$ bar) durchgeführt. Die Versuche wurden durch Kontrollexperimente in Abwesenheit von CO₂ ergänzt. In allen experimentellen Reihen wurde das Tonmineral Illit (Na-IdP-2) mit einer Feststoffkonzentration von 1 g/L eingesetzt. In einem pH-Bereich von pH 6-10 wurden Experimenten in 0.1 M, 1 M und 3 M NaCl Lösungen durchgeführt. Als Ergebnis findet man, dass die Sorption trivalenter Lanthaniden und Actiniden mit steigendem pH-Wert zunimmt und ab einem pH-Wert von ca. 8 ein quasi-quantitativer Rückhalt erreicht wird. In Anwesenheit von Carbonat nimmt der Rückhalt unter atmosphärischen Bedingungen im pH-Bereich pH = 8.5-10 allerdings um 10 % ab. Für höhere CO₂-Partialdrücke und somit steigende CO₃²⁻-Konzentrationen in Lösung, tritt dieser Effekt (Abfall der Sorption) wie im Fall der 1 % CO₂-Atmosphäre bereits ab einem pH-Wert von pH = 7.5 auf. In Abwesenheit von Carbonat verbleibt die Sorption auch bei höheren pH-Werten auf einem konstant hohen Niveau.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschließende Beurteilung der Screeningexperimente zur Löslichkeit von Th(IV) und U(VI) in Gegenwart potentieller organischer Zementadditive oder Modellliganden.
- Ausarbeitung von ausgedehnten Löslichkeitsversuchen für Th(IV) und U(VI) in Anwesenheit von Citrat und Gluconat basierend auf den Ergebnissen aus den „Screening-Löslichkeitsversuchen“.
- Ausarbeitung von „Screening-Experimenten“ für Np(V)-Systeme auf Basis der Ergebnisse der Löslichkeitsexperimente mit Th(IV) und U(VI).
- Sorptionsexperimente von Eu(III) an Illit bei 10 % CO₂-Atmosphäre.
- Sorptionsexperimente von Eu(III) an Illit in Anwesenheit von Gluconat sowie die Sorption von Gluconat an Tonmineralien.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarbrücken	Förderkennzeichen: 02 E 11415D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt D	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 458.021,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kickelbick

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zu Projektbeginn werden Korrosionsprodukte von Zementstein bzw. auch von ausgewählten Betonproben inklusive der organischen Zementzusätze unter den Bedingungen eines Standorts in Tongestein unter hochsalinaren Bedingungen untersucht. Insbesondere wird Portlandzement (PZ Doppel N CEM I 42,5 N) ohne bzw. mit typischen organischen Zementzusätzen (beispielsweise Glenium 51) studiert werden. Dabei wird untersucht, welche Formationswässer sich im Kontakt mit mittleren bis hohen Salinitäten ausbilden und welche Korrosionsprodukte unter solchen Bedingungen entstehen. Zu diesen Arbeiten gehören die Charakterisierung der hyperalkalinen Porenwässer inklusive der enthaltenen organischen Komponenten sowie die Herstellung entsprechender synthetischer Formationswässer.

Als weiteren Schwerpunkt werden Untersuchungen zu den Wechselwirkungen solcher hochalkaliner Wässer mit den verwendeten Tonen durchgeführt. Hierzu werden Opalinuston sowie Ca-Bentonit (Calcigel), der als Puffer-Material und Bohrlochverschluss im Endlagerkonzept vorgesehen ist, eingesetzt. Ziel der Untersuchungen ist die Bestimmung der Rückhaltung bzw. Mobilität endlagerrelevanter Elemente (bzw. Elementgemische in einer dem Endlagerinventar entsprechenden Zusammensetzung) im Ton unter dem Einfluss der gebildeten hyperalkalinen Formationswässer hoher Ionenstärke mit Hilfe von Batch-Versuchen und Miniatur-Säulen-Experimenten (MSE).

Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit dem Karlsruher Institut für Technologie, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und den Universitäten Dresden, Heidelberg, Mainz, München und Potsdam.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

UdS-API (Verbund AP1 und AP4)

- Untersuchung der Zusammensetzung von Zementporenwasser (CPW) mittels Auslaugversuchen, Definition und Herstellung von synthetischem Zementporenwasser (ACW) für weitere Untersuchungen

UdS-APII (Verbund AP2 und AP4)

- Untersuchung der Wechselwirkung von ACW mit Ton (Batch-Versuche mit Opalinuston und Calcigel), Analyse des Korrosionsprozesses von Ton durch hoch-pH und ACW

UdS-APIII (Verbund AP2)

- Untersuchung der Sorption von endlagerrelevanten Elementen an unverändertem und verändertem Ton („aged clay“) in Anwesenheit von ACW (Batch-Versuche)

UdS-APIV (Verbund AP2 und AP4)

- Wechselwirkung von CPW bzw. ACW mit Ton bzw. Tongemischen (OPA, Ca-Bentonit) mittels Miniatur-Säulen-Experimenten (MSE)

UdS-APV (Verbund AP1 und AP4)

- Untersuchung des Einflusses organischer Additive im Eluat aus Korrosionsprozessen auf die Retardation bzw. Mobilisierung von endlagerrelevanten Metallen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden Opalinuston (OPA) und Calcigel mit Hilfe hochsalinärer Lösungen ausgelaugt und getrocknet. Die gealterten Tone konnten nach mehrwöchiger Trocknungszeit für Sorptionsuntersuchungen verwendet werden, welche zurzeit noch andauern.

Für die laufenden Sorptionsuntersuchungen wurden verdünnte Gipschlösung und 0,1 M NaCl Lösung bei pH 8 eingesetzt sowie das künstlich hergestellte Zementporenwasser (ACW) und 0,1 / 1 / 5 M NaCl Lösungen, welche ebenfalls auf pH 13 eingestellt wurden. Erste Ergebnisse für Europium an nicht gealtertem Ton liegen bereits vor. Hierbei bewirkt eine Erhöhung des pH-Wertes von 8 auf 13 eine deutliche Steigerung der Rückhaltung (log K_d von 4,1 (PW) auf

5,6 (ACW)). Bei pH 8 führt das PW zu einer leichten Abnahme der Rückhaltung im Vergleich zu 0,1 M, was auf erhöhte Gehalte an mehrwertigen Kationen in Lösung zurück zu führen ist. Im stark Alkalischen scheint die Zunahme an Ionenstärke die Rückhaltung viel mehr zu verstärken. Von 0,1 M auf 1 M NaCl erhöht sich der $\log K_d$ Wert um fast 0,5 log Einheiten. Die Unterschiede zwischen 1, 5 M NaCl und ACW sind hin gegen fast zu vernachlässigen. Die höchste Rückhaltung kann mit ACW ($\log K_d = 5,6$) gefunden werden.

Neben diesen Untersuchungen wird der Einfluss des Betonfließmittels „Glenium 51“ auf die Sorption der Elemente des Waste-Cocktails (Eu, U, Cs und I) an Calciumbentonit in verschiedenen Medien (MilliQ-Wasser, NaOH bei pH = 12,5; verdünnte Gipschlösung und künstliches Zementporenwasser) untersucht. Die Versuche sind noch nicht abgeschlossen, erste Ergebnisse liegen für Europium, Uran und Cäsium vor. Diese deuten an, dass ein Einfluss des Fließmittels in MilliQ-Wasser, NaOH und in der verdünnten Gipschlösung in der Regel vernachlässigbar ist.

Die Validierung des ACW erfolgte über vergleichende Sorptionsuntersuchungen von Europium an OPA und Calcigel mit dem künstlichen (ACW) und dem ausgelagten Zementporenwasser (CPW). Diese Versuche dauern ebenfalls noch an.

Die Optimierung einer neuartigen Methode, um Iod in endlagerrelevanten Elementgemischen (U, Eu, Cs und I) mittels ICP-MS simultan mit jenen anderen Elementen zu quantifizieren, konnte im Berichtszeitraum abgeschlossen werden. In Lösung vorliegendes Iodid ist unter sauren Messbedingungen nicht quantifizierbar, da es leicht flüchtige Verbindungen bildet. Durch Zugabe von Natriumhypochlorit bei neutralem pH-Wert und Raumtemperatur kann es innerhalb einer Stunde zu Iodat oxidiert werden. Das entstandene Iodat bildet keine flüchtigen Verbindungen und kann unter sauren Messbedingungen simultan mit U, Eu und Cs quantifiziert werden. Diese Methode erlaubt es, Iod sowohl in Matrices mit niedriger als auch mit hoher Ionenstärke (bis zu 5 M) zu analysieren. Durch eine Erhöhung der Reaktionszeit von einer Stunde auf drei Stunden lässt sich die Oxidation auch im basischen pH-Bereich (pH = 12,5) durchführen. Dies ermöglicht die simultane Quantifizierung von U, Eu, Cs und I im hochsalinaren und alkalischen ACW ohne die Lösungen vorher in den neutralen pH Bereich bringen zu müssen.

Die HPLC-ICP-MS-Kopplung wurde zur Realisierung von MSE mit hohen Salzgehalten umgebaut und abschließend optimiert. Es wurde eine *split flow* Ausführung gewählt, die mit einem manuellen Splitventil und dem *Burgener Mira Mist CE* Zerstäuber sowie der dazugehörigen Mini-Glaskammer realisiert wurde. Durch diesen Aufbau wird das ICP-MS-Gerät auch bei stark salzhaltigen Matrices nur durch sehr wenig Salz belastet. Mit dem zuvor genannten Aufbau konnten erste orientierende Experimente zur dynamischen Sorption/Desorption von Europium an OPA in Gegenwart von 0,5 M NaCl unter online-Detektion mittels ICP-MS zufriedenstellend durchgeführt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Berichtszeitraum werden die Sorptionsuntersuchungen von Europium und Uran an gealtertem und nicht gealtertem Opalinuston und Calcigel bei verschiedenen Sorptionsbedingungen beendet. Zudem werden in Zukunft die Sorptionsuntersuchungen auf die restlichen Elemente des Waste-Cocktails (Cs, I) ausgeweitet, wobei die optimierte ICP-MS Methodik zur Messung von Iod in Gegenwart der anderen Analyten eine wichtige Rolle spielen wird. Außerdem soll das Fließmittel „Glenium 51“ bei Einwirkung verschiedener Medien (MilliQ-Wasser, NaOH bei pH = 12,5, verdünnte Gipschlösung und ACW) auf seine Stabilität untersucht werden. Dadurch soll eine Abschätzung zu seiner längerfristigen Relevanz für die Endlagersicherheit ermöglicht werden.

Die Validierung des hergestellten ACW wird durch Sorptionsuntersuchungen von endlagerrelevanten Elementgemischen (U, Eu, Cs und I) an Opalinuston und Calcigel im Vergleich mit CPW fortgeführt.

Zudem kann die HPLC-ICP-MS-Kopplung nun für weitere Experimente zur dynamischen Sorption/Desorption von endlagerrelevanten Elementen an OPA oder anderen Sorbentien herangezogen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

K. Brix, R. Kautenburger, C. Hein, J.M. Sander, G. Kickelbick (2016): Modifying the Speciation of Iodine in Saline Matrices for Quantification by ICP-MS. TraceSpec 2016, Gdansk, Polen (Poster)

R. Kautenburger, K. Brix, C. Hein, J.M. Sander, G. Kickelbick (2016): Metal Mobility in Clay - From ICP-MS Batch and CE-ICP-MS Speciation to Miniaturised Clay Column Experiments (MCCE) Using LC-ICP-MS. TraceSpec 2016, Gdansk, Polen (Vortrag)

J. M. Sander, K. Brix, C. Hein, R. Kautenburger, G. Kickelbick (2016): Fast Miniaturised Column Experiments for Host Rock Characterisation of Final Disposal Sites in Clay. TraceSpec 2016, Gdansk, Polen (Vortrag)

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München	Förderkennzeichen: 02 E 11415E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt E	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 476.760,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krüger

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Actiniden an C-S-H-Phasen
- Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung von Actiniden in basischen Lösungen

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen“ GraZ

Komplementär zum BMBF-Verbundprojekt ThermAC

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

AP1: Wechselwirkung von Actiniden mit C-S-H-Phasen

AP2: Actinidenkomplexe in basischen Lösungen

AP3: Unterstützung spektroskopischer Experimente

AP1 umfasst quantenmechanische Berechnungen periodischer Modelle von C-S-H-Phasen und die Untersuchungen der Wechselwirkung von Actinidenspezies mit diesen.

In AP2 werden Hydroxid- und Carbonatkomplexe von Actiniden in basischer wässriger Lösung sowie ihre Wechselwirkung mit Lösungskationen und Modellen von Zementadditiven untersucht.

AP3 ist der Unterstützung der Interpretation spektroskopischer Experimente im Verbund durch die Berechnung entsprechender Parameter gewidmet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: C-S-H-Phasen; AP1.3: Sorption an C-S-H-Phasen; AP2.1: Hydroxide und Carbonate.

Die Charakterisierung von Tobermorit mit C/S-Verhältnissen von 0.67 bis 1 als Modell für C-S-H-Phasen (AP1.1) wurde um Rechnungen zu Schwingungsfrequenzen erweitert, auch um an Arbeiten des Projektpartners U Potsdam anzuschließen. Der Vergleich mit dem Experiment für idealen 14 Å-Tobermorit zeigt gute Übereinstimmung und nur wenig Einfluss des C/S-Verhältnisses. Zuordnungen der Frequenzen zu Moden werden größtenteils bestätigt. Am Modell 14 Å-Tobermorit wurde der Einbau von Uranyl(VI) in C-S-H-Phasen rechnerisch untersucht (AP1.3). Betrachtet wurden vier verschiedene Plätze in der Zwischenschicht der Minerallagen. Uranyl(VI)

zeigt als Adsorbat bevorzugt die Koordinationszahl 4 und tendiert mit wachsendem C/S-Verhältnis zur Bildung von Monohydroxid. Bei guter qualitativer Übereinstimmung geometrischer Parameter werden U-O-Bindungslängen im Vergleich zum Experiment leicht überschätzt. Ein mit EXAFS gemessener U-Si-Abstand von ~310 pm könnte einem Platz an einem verbrückenden SiO₄-Tetraeder entsprechen, für den ein Abstand von 299 pm berechnet wurde. Andere Plätze zeigen kurze U-Si-Abstände um 330 pm. Längere U-Si-Abstände von 355-380 pm sowie ähnliche U-Ca-Abstände passen gut zum Experiment.

Modellierungen zur Hydrolyse von U(VI) und Am(III) (AP2.1) mit dem Ziel definierte Spezies für thermodynamische Modellierungen zu erhalten, wurden fortgeführt. Rechnungen zu einkernigen Oxo-Hydroxokomplexen als alternativen Spezies zu Hydroxiden ergaben für U(VI) den bekannten Komplex [UO₂O(OH)₃]³⁻ als einzige Spezies, die stabiler als der entsprechende Hydroxokomplex ist. Verbesserte Rechnungen für Am(III) zeigen, dass die Komplexe [AmO(OH)_n]¹⁻ⁿ für n = 0-4 weniger stabil sind als die analogen Hydroxospezies [Am(OH)_{n+2}]¹⁻ⁿ. Diese Ergebnisse belegen, dass Oxoliganden nur bei starker Abstoßung zwischen OH-Liganden bevorzugt sind. Die systematische Charakterisierung dreikerniger U(VI)-Hydroxokomplexe wurde um anionische Spezies erweitert (AP2.1). Für die formale Spezies [(UO₂)₃(OH)₇]⁻ wurde wie für kationische Spezies eine zentral μ_3 -O-verbrückte Ringstruktur als stabilste berechnet. Lineare Strukturen sind etwas weniger stabil. Ringförmige Isomere ohne zentrale Stabilisierung wurden im Gegensatz zu kationischen Trimeren nicht gefunden. [(UO₂)₃O(OH)₆]²⁻ ist im Vergleich zu monomeren Hydroxokomplexen stabiler als Trimere positiverer Ladung. Nach Isomeren dieses Trimers, insbesondere linearen Strukturen, wird gesucht. Die Resultate zu kationischen Trimerkomplexen wurden durch exemplarische dynamische Simulationen mit 166 expliziten Wassermolekülen über 15 ps überprüft, insbesondere hinsichtlich Koordinationszahlen. Die Simulationen bestätigen die Ergebnisse von einfachen Optimierungen. Ergänzt wurden diese Arbeiten durch weitere Modellierungen von U(VI)-Dimerkomplexen. Für die bekannte formale Spezies [(UO₂)₂(OH)₂]²⁺ wird eine zweifach OH-verbrückte Struktur bestätigt, die jedoch mit einer O-verbrückten nahezu entartet ist. Ein einfach OH-verbrücktes Isomer ist weniger stabil. Der diskutierte Dimerkomplex [(UO₂)₂OH]³⁺ ist gegenüber Monomeren leicht instabil und damit nur bei hoher Konzentration möglich. Rechnungen zu dimeren Am-Hydroxokomplexen ergaben, dass die Spezies [Am₂(OH)₂(H₂O)_n]⁴⁺ mit siebenfacher Koordination von Am³⁺ etwas stabiler als Monohydroxide und damit möglich ist. Spinzustände dieses Komplexes werden noch untersucht.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1: C-S-H-Phasen

AP1.2: Oberflächen von C-S-H-Phasen

AP1.3: Sorption an C-S-H-Phasen

AP2.1: Hydroxide und Carbonate

AP2.2: Ternäre Komplexe mit Lösungskationen

5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Kremleva, S. Krüger: Comparative Computational Study of Np(V) and U(VI) Adsorption on (110) Edge Surfaces of Montmorillonite, Clay and Clay Minerals 64 (2016) 438

I. Chiorescu, S. Krüger, N. Rösch: Quantum Chemical Modeling of Actinide Hydrolysis Complexes, Vortrag, Konferenz ATAS 2016, 7.-10. November 2016, Richland WA, USA

Zuwendungsempfänger: Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 11415F
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt F		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 339.580,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kumke	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Universität Potsdam (Physikalische Chemie) wird Laser-basierte optische Verfahren zur Bearbeitung der im Verbund definierten Arbeitspakete AP1 - AP4 einsetzen bzw. (weiter-)entwickeln. Ziel der durchgeführten Arbeiten ist die Entwicklung analytischer, optischer Methoden zur Verbesserung des molekularen Prozessverständnisses der Wechselwirkung von Actinoid-Ionen (bzw. Lanthanoid-Ionen als Analoga) mit Mineralphasen, wie Bentonit, Tongestein und Zementalterationsphasen. Mit Hilfe moderner, ortsauflösender Schwingungsspektroskopie werden komplementär die interessierenden Wechselwirkungen zusätzlich aus Sicht der Mineralphase(n) beschrieben. Das Vorhaben wird in einem Verbundprojekt gemeinsam mit der Universität Mainz, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, dem Karlsruher Institut für Technologie, der Universität des Saarlandes, der TU München, der TU Dresden sowie der Universität Heidelberg durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Radionuklid-Rückhaltung an Zementalterationsphasen (mittlere bis hohe Ionenstärken):
Speziation von Eu(III) an/auf CSH-Phasen mittels:
- zeitaufgelöster Laserspektroskopie (TRLFS)
- Schwingungsspektroskopie/-mikroskopie
- AP2: Radionuklid-Rückhaltung an Tongestein (hyperalkalin, mittlere bis hohe Ionenstärke):
- TRLFS, Raman-Mikroskopie und SFG-Spektroskopie zur Untersuchung von Opalinuston- bzw. Calcium-Bentonit-Oberflächen
- Speziationsuntersuchungen von Eu(III) bei hohen pH-Werten und Ionenstärken in Lösung
- AP4: Methodenentwicklung:
- Weiterentwicklung optischer Mikroskopie-Techniken zur Untersuchung von Mineraloberflächen im Zusammenhang mit der Sorption von Lanthanoiden

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die dem AP1 zugeordnete Lumineszenz-spektroskopische Analyse des Sorptionsprozesses von Eu(III) an CSH I unter Variation des pH -Wertes ($10 \leq pH \leq 13$) und der Kontaktzeit wurde fortgesetzt. Bei den untersuchten pH -Werten konnten drei verschiedene Eu(III)-Spezies in den CSH-Wasser-Suspensionen identifiziert werden. Die bestimmten Lumineszenzabklingzeiten deuten darauf hin, dass sich eine Eu(III)-Spezies in den Calciumschichten der CSH-Phase befindet, die nicht von Wassermolekülen koordiniert ist. Die zweite Eu(III)-Spezies (koordiniert von zwei Wassermolekülen) könnte in der Calcium-Wasser-Schicht der CSH-Phase eingelagert oder an endständige Silanol-Gruppen koordiniert sein. Bei der dritten Eu(III)-Spezies scheint es sich um $\text{Eu}(\text{OH})_x$ zu handeln. Bei einem pH -Wert von 11.0 konnte nach 22 Tagen Kontaktzeit eine Gleichgewichtseinstellung beobachtet werden, während dessen bei $pH = 12.0$ als auch $pH = 12.6$ auch nach 130 Tagen der Sorptionsprozess noch nicht abgeschlossen ist. Ein pH -Wert zwischen 12.0 und 12.6 beeinflusst weder die gefundenen Eu(III)-Spezies noch die Geschwindigkeit des Sorptionsprozesses. Als Referenz wurde die Lumineszenz von Eu(III) in Wasser (unter N_2 -Atmosphäre) bei $pH = 12.0$ untersucht.

Zusätzlich wurde die strukturelle Charakterisierung von CSH 0.9, CSH 1.4, AFm- SO_4 , AFm- CO_3 , C_3AH_6 und Ettringit mit Raman-Mikroskopie abgeschlossen.

Für die dem AP2 zugeordnete Untersuchung der Sorption von Eu(III) an Ca-Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen, wurde mit Messungen unter Variation der Kontaktzeit und Ionenstärke (in Wasser, NaCl- sowie Gipshutlösung) begonnen. Die Lumineszenzanregungsspektren des Eu(III) bei pH 12 bzw. pH 10 in 2.5 mol L^{-1} Natriumchloridlösung in Wechselwirkung mit Bentonit gebracht, weisen auf das Vorhandensein mehrerer Eu(III)-Spezies in diesen Systemen hin. Die Raman-Spektren dieser Bentonit-Eu(III)-Proben lassen sich auf die Bestandteile Quarz, Glimmer und Feldspate zurückführen und zeigen im unteren Wellenzahlbereich kaum Abhängigkeiten vom pH -Wert oder der Eu(III)-Konzentration.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die lumineszenz- und schwingungsspektroskopischen Untersuchungen des Sorptionsprozesses von Eu(III) an CSH I sollen fortgesetzt und an 14 \AA Tobermorit, CSH 0.9 sowie CSH 1.4 begonnen werden. Der pH -Wert, die Kontaktzeit, die Eu(III)-Konzentration, die Ionenstärke (eingestellt mit NaCl oder in Gipshutlösung) sowie die Temperatur ($4 \text{ K}, 293 \text{ K} \leq T \leq 353 \text{ K}$) sollen die dabei zu analysierenden Einflussparameter sein. Die Untersuchung der Lumineszenzeigenschaften von Eu(III) in Wasser bei pH 11.0 und 12.6 (unter N_2 -Atmosphäre) wird als Referenz benötigt.

Der Sorptionsprozess von Eu(III) an CSH I als auch an Bentonit bei verschiedenen CO_2 -Partialdrücken (Stickstoff: CO_2 -Gasgemische 96:4 bzw. 99,96:0,04) soll untersucht werden.

Die spektroskopischen Untersuchungen von an Bentonit und dessen Einzelbestandteilen (z. B. Montmorillonit) sorbiertem Eu(III) sollen unter Variation der Kontaktzeit weitergeführt werden. Hierbei sollen die Parameter pH -Wert ($10 \leq pH \leq 13$), Ionenstärke (in Wasser, NaCl- sowie Gipshutlösung) und Temperatur ($293 \text{ K} \leq T \leq 353 \text{ K}$) variiert werden. Der Vergleich zwischen Bentonit und seinen Einzelbestandteilen soll Rückschlüsse zulassen, an welchen Mineralien es vorwiegend zu Sorptionsprozessen im Bentonit kommt. Weiterhin soll auf diese Weise untersucht werden, inwiefern Bestandteile zu einer Beeinflussung der Lumineszenzeigenschaften, etwa durch Eisen induziert, führen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zwei Manuskripte zur Publikation in internationalen Journalen sind in Vorbereitung.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden	Förderkennzeichen: 02 E 11415G
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt G	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 239.258,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Stumpf

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Projekt befasst sich mit Arbeiten zum grundlegenden Prozessverständnis der Speziation von (dreiwertigen) Actiniden/Lanthaniden (An/Ln) in chemischen Medien, die sich aus Zementdegradationsprozessen ergeben sowie die Bedingungen potentieller deutscher Wirtsgesteine berücksichtigen, d. h. es werden alkaline Lösungen mit mittleren bis hohen Ionenstärken betrachtet. Es werden folgende Vorhabensziele definiert: a) Identifizierung relevanter organischer Zementadditive (Plastifizierer und Super-plastifizierer, in enger Zusammenarbeit mit den Verbundpartnern), b) Bestimmung konsistenter thermodynamischer Datensätze zur Wechselwirkung der relevanten organischen Zementadditive mit redoxstabilen An/Ln in alkalinen Lösungen, c) Charakterisierung des Einflusses additivhaltiger CSH-Zementphasen auf die Actinidenspeziation, d) Erweiterung des bisherigen Wissensstandes zur Wechselwirkung von An/Ln mit Boratspezies in alkalinen Lösungen inklusive der Identifizierung von borathaltigen Sekundärphasen, e) Machbarkeitsstudie zur Sorptionskalorimetrie von Ln an endlagerrelevanten festen Phasen zur direkten Ermittlung von Sorptionsenthalpien

Das Forschungsvorhaben erfolgt in enger Kooperation mit den Projekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam und Heidelberg sowie dem Institut für Ressourcenökologie vom Helmholtzzentrum Dresden-Rossendorf und dem Institut für Nukleare Entsorgung vom Karlsruher Institut für Technologie.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

TU-AP-1.1: Thermodynamische Untersuchungen im System Ac/Ln-organische Zementzusatzstoffe in alkalinen Lösungen und künstlichen Zementporenwasser mit folgenden Schwerpunkten: Herstellung/Charakterisierung definierter CSH-Mineralphasen und Ettringit mit ausgewählten relevanten Additiven, Batchversuche zur Freisetzung und/oder Sorption von Additiven im binären System Zementadditiv-CSH-Mineralphase, spektroskopische und thermodynamische Charakterisierung löslicher Komplexspezies im binären System Actinid-Zementadditiv/Modellligand

TU-AP-1.2: Untersuchungen im System Actinid-Borat-organische Zementadditive in alkalinen Lösungen mit folgenden Schwerpunkten: thermodyn. Charakterisierung der Wechselwirkung von Boraten mit Zementadditiv auf Polyolbasis (Boratesterbildung, $\text{pH} > 7$), spektroskopische und thermodynamische Charakterisierung der Wechselwirkung von Ln/An mit den Boratestern

TU-AP-4.1: Etablierung der isothermen Titrationskalorimetrie zur Bestimmung von Sorptionsenthalpien folgenden Schwerpunkten: Machbarkeitsstudie zur Sorptionskalorimetrie von Ln(III) mit Modellphasen (z. B. TiO_2) als Funktion der Ionenstärke, Anpassung/Entwicklung entsprechender der Auswerteroutinen an die Spezifika der Sorption, sorptionskalorimetrische Untersuchungen mit Ln(III) an endlagerrelevanten Phasen (Ton, CSH-Phasen) als f(pH, I, Medium)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TU-AP-1.1:

Die Komplexbildung von Americium(III) mit Malat wurde im pH-Bereich von 1 bis 8 und einem Konzentrationsverhältnis Am: Malat = 1:20 mittels EXAFS-Spektroskopie (Kooperation mit dem HZDR) untersucht. Für die Auswertung der experimentellen Spektren mittels ITFA (Iterative Transformation Factor Analysis) wurde

eine errechnete Speziation, die aus TRLFS- und ITC-Messungen hervorging (Zwischenbericht I), genutzt. Außerdem wurde eine asymmetrische Bindung des Malats über einen Chelating angenommen und es wurden zwei Komplexspezies in die Auswertung einbezogen. Die Anpassung der ermittelten Einzelkomponentenspektren (2 Komplex) ergab eine monodentate Bindung des Malatanions an Am(III) mit Am-O-Bindungsabständen von 2.48 Å (Komponente 1) bis 2.39 Å (Komponente 2) und ein Am-C-Bindungsabstand von 3.33 Å. Das Am-Lactat-System [Fröhlich 2015] zeigt ähnliche Bindungsabstände, somit wird ein ähnlicher Bindungsmodus der beiden Systeme angenommen. Die Koordinationszahl des Am(III) verringert sich maximal um eins durch die Komplexierung mit Malat.

Des Weiteren wurden ATR-IR-Messungen im System Neodym(III)-Malat mit einem Konzentrationsverhältnis von 1:1 bei verschiedenen pH-Werten (1-8) durchgeführt. Ab pH 7 ist eine Ausfällung eines weißen Feststoffes erkennbar. Die IR-Spektren zeigen große Ähnlichkeiten zum Eu(III)-Citrat-System. Die Schwingung der OH-Gruppe des Malats wird durch die Komplexierung nicht beeinflusst, somit wird eine monodentate Koordination des Malats über beide Carboxylgruppen an das Metall angenommen.

Mittels TRLFS wurden in Zusammenarbeit mit dem HZDR und der Universität Potsdam neue Erkenntnisse zur Europium(III)-Hydrolyse generiert. Im untersuchten System (10^{-6} M Eu(III)) wurde, in wiederholten Messungen, keine gelöste lumineszierende Europium(III)-Hydroxo-Spezies gefunden. Begonnene quantenmechanische Berechnungen sollen Aufschlüsse über den Quenchingmechanismus liefern. Basierend auf der Annahme von nicht lumineszierenden Europium-Hydroxo-Spezies konnten thermodynamische Konstanten für die Komplexe $\text{Eu}(\text{OH})_2^+$ und $\text{Eu}(\text{OH})_3$ erhalten werden. Ein Überschreiten der Löslichkeit des Europium(III) resultierte in einem lumineszierenden Europium-Präzipitat. Diese Europiumspezies wurden für die Bestimmung der Löslichkeit des Europium(III) bei drei pH-Werten (7, 8 und 9) genutzt und mit Ergebnissen aus Batch ICP-MS-Messungen verglichen.

Es wurden isotherme titrationskalorimetrische Messungen zur Komplexierung von Eu mit Glenium im pH-Bereich 3 bis 5,5 durchgeführt. Eine Auswertung der Ergebnisse steht noch aus.

Mit der Präparation amorpher CSH-Phasen mit verschiedenen Ca:Si-Verhältnissen für Adsorptionversuche mit Zementadditiven und deren Charakterisierung wurde begonnen.

TU-AP-4.1:

Es wurde ein erster Matlab Algorithmus zur Auswertung von isothermen kalorimetrischen Sorptionsmessungen entwickelt. Basierend auf der Langmuir-Isotherme können sowohl einzelne Datensätze als auch experimentelle Sets, beispielsweise mit unterschiedlichen Fest-Flüssigverhältnissen, ausgewertet werden. Erste Ergebnisse dazu sind für das Se(IV)-Hematit-System in Zusammenarbeit mit dem HZDR generiert worden. Eigene isotherme mikro-kalorimetrischen Sorptionsmessungen im System Ln(III)-Hematit, Ln(III)- Al_2O_3 bzw. Ln(III)- Si_2O_3 führten bisher nicht zu auswertbaren Ergebnissen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Für die obigen EXAFS- und IR-Messungen werden theoretische Berechnungen mit der oben prognostizierten Struktur durchgeführt (in Zusammenarbeit mit dem HZDR)
- Fortsetzung der Arbeiten zur Herstellung/Charakterisierung definierter CSH-Phasen + additivhaltiger CHS-Phasen (radiomarkiertes Additiv bzw. Modelligand), Batchversuche mit den CHS-Phasen zur Auslaugung des Additiv
- Fortsetzung der Arbeiten zur Entwicklung eines Matlab-Codes zur Auswertung titrationskalorimetrischen Daten, Anwendung auf Sorptionskalorimetrie

5. Berichte, Veröffentlichungen

Poster: F. Taube, M. Acker, S. Taut, T. Stumpf: Spectroscopic and microcalorimetric investigations on An(III)/Ln(III) complexes formed by the cement additive malate“ 9th international conference on nuclear and radiochemistry, Helsinki, Finnland, August 29 - September 2, 2016

Vortrag: F. Taube, ROBL-Workshop, 14.12.2016, HZDR

Zuwendungsempfänger: Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg		Förderkennzeichen: 02 E 11415H
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt H		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2015 bis 31.08.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 352.934,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Panak	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel dieses Verbundprojektes ist die Aufklärung des geochemischen Verhaltens von Actiniden im natürlichen Tongestein unter dem Einfluss von Zementalterationsphasen und organischen Zementzusätzen. Die Arbeiten dieses Teilprojektes beschäftigen sich daher mit dem Einfluss diverser Plasticizer und Superplasticizer, die in der Herstellung von Zementen zum Einsatz kommen und im Laufe der Lagerzeit freigesetzt werden können, auf den Quellterm und die Komplexierung von trivalenten Actiniden im Temperaturbereich bis 90 °C. Ergänzt werden diese Untersuchungen durch Arbeiten zur Wechselwirkung mit verschiedenen Modellliganden wie Malonat, Succinat etc. Dadurch sollen wichtige thermodynamische Daten der im geochemischen Milieu im Nah- und Fernbereich eines Endlagers ablaufenden Reaktionen der dreiwertigen Actinidionen erhalten werden. Das Projekt liefert somit einen entscheidenden Beitrag für eine thermodynamisch fundierte Langzeitsicherheitsanalyse von nuklearen Endlagern. Des Weiteren werden grundlegende Erkenntnisse bezüglich des Komplexierungsverhaltens der trivalenten Actiniden und Lanthaniden erhalten, die auch in anderen wissenschaftlichen Bereichen von großer Bedeutung sein können.

Die in diesem Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten erfolgten in direkter Kooperation mit dem Karlsruher Institut für Technologie, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, der Universität Mainz, Potsdam, Universität des Saarlandes sowie der TU-München.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Einfluss von organischen Zementadditiven auf den Quellterm von trivalenten Actiniden.
- AP2: Komplexierung von dreiwertigen Actiniden mit organischen Zementadditiven.
- AP3: Weiterentwicklung von spektroskopischen Methoden zur Anwendung auf saline Systeme unter zementrelevanten Bedingungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Komplexierung von Cm(III) mit Methylmethacrylat konnten temperaturabhängige thermodynamische Stabilitätskonstanten ($\log K_n^0(T)$, ($n = 1-3$)) ermittelt werden. Während $\log K_1^0(T)$ im gesamten Temperaturbereich nahezu konstant bei 3.0-3.2 liegt, zeigen der zweite und dritte Komplexierungsschritt eine deutlich ausgeprägte Temperaturabhängigkeit. $\log K_2^0(T)$ steigt um 0.5 log Einheiten im Temperaturbereich von 20-90 °C, $\log K_3^0(T)$ um ca. 0.8 log Einheiten.

EXAFS Messungen zur Komplexierung von Gd(III) und Tb(III) mit dem Polycarboxylat-Superplasticizer Glenium® 51 zeigen einen deutlichen Einfluss des Polycarboxylats auf die Koordinationssphäre der dreiwertigen Lanthanide. Während in Abwesenheit des Glenium® 51 lediglich 10 Sauerstoffnachbarn in einem Abstand von 2.40-2.41 Å beobachtet wurden, konnten in Anwesenheit des Liganden zudem 3 Kohlenstoffnachbarn bei 2.72-2.73 Å nachgewiesen werden. Dies bedeutet, dass das dreiwertige Metallion in beiden Fällen von drei Carboxylgruppen koordiniert wird, die mehrheitlich bidentat koordinieren. Eine monodentate Koordination würde in signifikant längeren Kohlenstoffabständen resultieren. Diese Ergebnisse decken sich hervorragend mit den thermodynamischen Untersuchungen zur Komplexierung von Eu(III) und der Annahme des Ladungsneutralisationsmodells, dass die drei positiven Ladungen des Metallions durch eine entsprechende Anzahl an negativ geladenen Liganden kompensiert werden.

Erste Screeningexperimente bezüglich des Einflusses der zementorganischen Modellliganden Melamin, Phtalat, Adipat, Methylacrylat, Ethylenglycol und Citrat auf die Löslichkeit von $\text{Nd}(\text{OH})_{3,s}$ in NaCl-, CaCl_2 - und MgCl_2 -Lösungen bei Konzentrationen von 1.0 – 5.0 mol kg^{-1} und pH = 9 – 12.5 wurden durchgeführt. Dabei zeigt die Anwesenheit von Citrat in NaCl-Lösung und pH = 12.5 eine Erhöhung der Löslichkeit der Festphase um 1-2 Größenordnungen. Für die anderen Liganden und/oder Elektrolyten wurde kein signifikanter Effekt beobachtet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- TRLFS Untersuchungen zur Komplexierung von Eu(III) und Cm(III) mit weiteren Modellliganden und Superplasticizern (Kooperation mit AK Plank (TUM)).
- EXAFS-spektroskopische Untersuchungen zur Komplexierung von Np(V) mit Oxalat (ESRF, Februar 2017).
- UV/Vis Untersuchungen zur Komplexierung von Np(V) mit Glenium® 51.
- Fortführung und Auswertung der Batchexperimente zur Bestimmung des Einflusses der zementorganischen Modellliganden auf die Löslichkeit von Nd(III).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Skerencak-Frech, A., Trumm, M., Fröhlich, D.R., Panak, P.J.: Coordination and thermodynamics of trivalent actinides with malonate at increased temperatures: A spectroscopic and quantum chemical study, submitted

Fröhlich, D.R., Maiwald, M.M., Taube, F., Plank, J., Panak, P.J.: A thermodynamical and structural study on the complexation of trivalent lanthanides with a polycarboxylate based concrete superplasticizer, submitted

Fröhlich, D.R., Kremleva, A., Rossberg, A., Skerencak-Frech, A., Koke, C., Krüger, S., Rösch, N., Panak, P.J.: A combined EXAFS spectroscopic and quantum chemical study on the complex formation of Am(III) with formate, submitted

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolf-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11425
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Bautechnische Realisierung Technikumsprüfstand mit Durchführung und Auswertung erster Versuche (Salzschnittblöcke)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2015 bis 31.07.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.241.071,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr.-Ing. Düsterloh	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bautechnische Realisierung eines im Vorhaben FKZ 02E11223 ausgelegten Technikumsprüfstandes und Durchführung und Auswertung erster Versuche zur Eignung von Abdichtungselementen aus Steinsalzschnittblöcken mit Fugenfüllung zur langzeitsicheren Abdichtung eines Endlagers im Steinsalz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erstellung der Ausschreibungsunterlagen und Einholung aktualisierter Angebote.
- AP2: Vorbereitung der Versuchshalle für die bautechnische Realisierung des Technikumsprüfstandes.
- AP3: Bautechnische Realisierung und Synthese der Anlagenkomponenten mit Testläufen zur Funktionalität und Anlagensicherheit.
- AP4: Beschaffung von gewachsenem Steinsalz.
- AP5: Herstellung von Salzschnittblöcken.
- AP6: Untersuchungen zur hydraulisch dichten Ummantelung der Großprüfkörper.
- AP7: Durchführung und Auswertung von Technikumsversuchen unter variierten THM-Beanspruchungen.
- AP8: Erstellung numerischer Berechnungsmodelle zur THM gekoppelten Reanalyse.
- AP9: Rechnerische Reanalyse der Technikumsversuche mit Verifikation und Validation.
- AP10: Erstellung Schlussbericht.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Abschluss der Arbeiten zur Fertigstellung des Prüfstandes.
Aufbau Schaltschrank und Integration der Mess- und Regeleinrichtungen.
Kalibrierung der Druck- und Wegaufnehmer.
Abschluss der Funktionstests zur EMC-Steuerung.
Handbetrieb der Anlage.
- AP4: Abschluss der bohrtechnischen Gewinnung gewachsenen Steinsalzes durch GTS Teutschenthal.
Zweite Teillieferung von ca. 15 t Probenmaterial am 15.12.2016.
- AP8: Aufbau numerischer Berechnungsmodelle entsprechend Prüfkörpergeometrie (Blockstruktur gemäß geplanter Anordnung der Salzschnittblöcke mit Interface-Elementen).
Grundlegende Berechnungen zur Funktionalität der Berechnungsmodelle und Verifikation der Berechnungsergebnisse.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Übungen zur Montage und Demontage mit Festlegung der Positionsräume für die zweiteilige Triaxialzelle
- Aufbau und Montage der Arbeitsbühne zum Prüfkörperaufbau
- Herstellung von Salzschnittblöcken
- Testversuche mit Prüfkörperdummy
- Numerische Untersuchungen zur Modellierung und Reanalyse der Technikumsversuche

5. Berichte, Veröffentlichungen

Düsterloh, U. (2015): Design of a pilot plant to analyze sealing systems based on a bricking of rock salt, In: The Mechanical Behavior of Salt VIII, CRC Press Balkema, Taylor and Francis Group, London UK, 2015

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11435
Vorhabensbezeichnung: MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl ₂ -Lösung (MgO-SEAL)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und -technik, Feld 3.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2015 bis 31.07.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 933.119,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kudla	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

MgO-Beton ist als Baustoff für zukünftige Verschlussbauwerke in einem HAW-Endlager im Salinar vorgeschlagen worden. Das Vorhaben MgO-SEAL dient dem Ziel, das Langzeitverhalten von MgO-Spritzbeton nach Lösungskontakt im Maßstab eines realen Bauwerks zu bewerten. Genutzt wird dazu, dass aus Spritzbeton der Rezeptur D4 (5-1-8-Bindemittelphase) in der Grube Teutschenthal errichtete Dammbauwerk GV2 nach einer Standzeit von 7 Jahren. Das Forschungsvorhaben ist ein Beitrag zum Langzeitsicherheitsnachweis von Verschlusselementen aus MgO-Beton mit der 5-1-8-Bindemittelphase für zukünftige HAW-Endlager im Salinar.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Voruntersuchungen, pneumatische Dichtheitsprüfung, Einrichtung des Versuchsortes GV2.
- AP2: Laboruntersuchungen an Bohrkernen aus dem MgO-Beton (Phasenbestand, Festigkeits- und Kriechverhalten, Porosität, Permeabilität).
- AP3: Lösungsangriff (hydraulische Druckbeaufschlagung GV2) über lange Bohrlöcher und über die vorhandene Druckkammer.
- AP4: Planung des selektiven Rückbaus und Nachuntersuchungen.
- AP5: Interpretation der Versuchsergebnisse und Empfehlungen für die Gestaltung von Verschlussbauwerken aus MgO-Spritzbeton.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Pumpanlage für die Druckbeaufschlagung des Versuchs GV2 wurde in Betrieb genommen.
- AP2: In Laborversuchen wurde bei einer Durchströmung von Bohrkernen längs der Bohrlochachse (axiale Durchströmung) eine geringe Permeabilität festgestellt (meist 10^{-19} - 10^{-20} m²). Die Gaspermeabilität entlang der Betonierabschnittsgrenzen (also senkrecht zur Bauwerksachse) ist meist 1 – 2 Größenordnungen höher. Dies beeinflusst zwangsläufig die In-situ-Messungen, bei denen das Prüffluid über die Bohrlochwand in den radial verlaufenden Wegsamkeiten abströmen kann.
- AP3: Die Befüllung der Druckkammer des GV2 mit getracierter CaCl₂-MgCl₂-Lösung wurde am 6.10.2016 begonnen. Die Befüllung endete am 24.10.2016 und es wurden insgesamt 1110 Liter Lösung in die Druckkammer gepumpt. Am 2.11.2016 wurde mit einer moderaten Druckbeaufschlagung (ca. 0,5 bis 1 bar) begonnen. Am 17.11.2016 erfolgte eine Detektion der Erhöhung der Feuchte in der Sohle durch Reaktion der Feuchtegeber von MFPA (nach einer Bauwerkslänge von ca. 6,7 m).
In den Bohrlöchern B38, B39, B40 und B41 wurde durch IBeWa und IfG Leipzig mit der Lösungsdruckbeaufschlagung begonnen. Erste vorläufige Ergebnisse zeigen, dass die Grenzen zwischen den Spritzbetonabschnitten vereinzelt potentielle Schwachstellen sein können. Da hier die Strömung eher senkrecht zu Bohrlochachse verläuft, wurde eine erhöhte Permeabilität (Einzelwert $3,5 \cdot 10^{-16}$ m²) ermittelt. Die Ursachen für die erhöhte Permeabilität bei einigen (nicht allen!) Betonierabschnitten muss ermittelt werden. Erst danach können Aussagen zur Permeabilität des Gesamtbauwerks erfolgen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP2: Zusätzliche Phasenuntersuchungen zur Beschreibung der Betonierabschnittsgrenzen.
- AP3: Abschluss der Druckbeaufschlagung des Bauwerkes GV2 über die Druckkammer. Fortsetzung der Langzeitflüssigkeitspermeabilitätsmessungen in den Bohrlöchern B38, B39, B40 und B 41. Identifikation von Schwachstellen.
- AP4: Planungsarbeiten für zukünftige Arbeiten (Dauer der Langzeitflüssigkeitspermeabilitätsmessungen, Nachuntersuchungen, selektiver Rückbau).
- AP5: Arbeiten am Abschlussbericht zu AP1, AP2, AP3.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz	Förderkennzeichen: 02 E 11446A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 30.06.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 330.429,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hampel

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Leibniz Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger koordiniert das Vorhaben und betreut die Kooperation mit den Sandia National Laboratories. Er beteiligt sich im Teilprojekt A mit dem von ihm entwickelten Stoffmodell CDM und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Itasca).

Da der Zuwendungsempfänger noch bis zum 30.09.2016 zu 100 % im Verbundprojekt III zum Stoffgesetzvergleich (FKZ 02E10810) beschäftigt war, nahm er in der ersten Hälfte des Berichtszeitraums nur am Projektworkshop 03 am 09.-10.08.2016 in Hannover teil und präsentierte Arbeiten des Verbundes am 07.-09.09.2016 auf dem 7th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation in Washington DC.

Nach dem 01.10.2016 organisierte er den Workshop 04 am 08.-09.11.2016 in Karlsruhe und stellte das Projekt WEIMOS auf dem 12. Projektstatusgespräch des Projektträgers Karlsruhe (PTKA-WTE) am 09.-10.11.2016 beim KIT sowie auf dem Fall Meeting der American Geophysical Union (AGU) am 12.-16.12.2016 in San Francisco vor.

Parallel bereitete er die Simulation des Aufstiegs eines generischen Salzstocks mit seinem CDM-Stoffgesetz vor. Mit diesen Berechnungen und dem Vergleich der Ergebnisse mit Daten zu realen Salzstöcken wird von den Partnern in AP1 die Gültigkeit ihrer aktuellen Stoffgesetzformulierungen für das Kriechen bei kleinen Deviatorspannungen untersucht, da diese Formulierungen auf die Modellierung des Salzaufstiegs einen großen Einfluss haben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird die gemeinsam mit den Partnern vereinbarten Arbeiten durchführen, u. a. die Simulationen zum Salzaufstieg in AP1, Vorausberechnungen der geplanten Verheilungsversuche in AP2 und Studien zur Wirkung von Zugspannungen in AP3. Er wird die weiteren Projektworkshops organisieren und gemeinsam mit den Partnern durchführen. Der Workshop 05 wird am 02.-03.02.2017 beim IfG Leipzig stattfinden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 11446B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 545.980,00 EUR	Projektleiter: Dr. Salzer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Partner am 9./10. August in Hannover und am 8./9. November in Karlsruhe, den 3. bzw. 4. Projekt-Workshop durch. Auf den Workshops wurden die Planung der weiteren Arbeiten vertieft sowie erste Berechnungsergebnisse zu den gemeinsam vereinbarten und von allen Partnern zu berechnenden Strukturen vorgestellt und besprochen.

Das vorliegende Teilvorhaben B beteiligt sich mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley und dem erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach Günther/Salzer an den geplanten Arbeiten. Dabei wird das Programm FLAC3D (Fa. Itasca) verwendet.

Außerdem organisiert und koordiniert das IfG die Beschaffung von weiterem Prüfkörpermaterial aus der WIPP und realisiert die Planung und Durchführung der Laborversuche zur Ableitung der Kriechparameter bei kleinen Deviatorspannungen (AP1), wozu die Entwicklung und der Bau von drei neuartigen Versuchsständen für Kriechversuche mit einer verbesserten Messgenauigkeit vorgesehen ist.

Das IfG hat den 3. und 4. Projekt-Workshop gemeinsam mit den Partnern vorbereitet und durchgeführt. Auf den Workshops wurden die Ergebnisse der bisherigen Planungen und Arbeiten sowie der Zusammenarbeit mit Sandia National Laboratories vorgestellt und diskutiert.

Am 8. Juli erfolgte eine weitere Lieferung von „clean salt“ in Form von 17 Großkernstücken (\varnothing ca. 30 cm Länge ca. 60 cm) aus der WIPP an das IfG. Das Kernmaterial wurde entsprechend dem vorab vereinbarten Schlüssel unter TUC (6 Kernstücke), BGR (6 Kernstücke) und IfG (5 Kernstücke) aufgeteilt. Auf dem 3. WS erfolgten mit der BGR Gespräche zur Abstimmung des Laborprogramms der Kriechversuche bei kleinen Deviatorspannungen.

Im November 2016 wurden erste Ergebnisse des orientierenden Laborprogramms für Kriechversuche mit bereits vorhandenen Kriechversuchsständen vorgestellt und mit den Projektpartnern diskutiert. Die Entwicklung, der Bau sowie eine erste Testphase eines Prototyps für die neuartigen Kriechversuchsstände mit einer erhöhten Messgenauigkeit (u. a. durch eine kapazitive Messung der Längenänderung) wurden abgeschlossen.

Außerdem wurde im Rahmen von AP1 durch das IfG ein generisches Salzstockmodell erarbeitet und allen Partnern zur Verfügung gestellt. Die Nachrechnung der Salzstockhebungsraten (0,01 bis 0,05 mm/a) soll Aussagen über das Kriechverhalten bei kleinen Deviatorspannungen an Hand eines natürlichen Analogons liefern. Erste Ergebnisse dazu wurden durch das IfG auf dem 4. WS präsentiert.

Da IfG hat weiterhin die abgestimmten Simulationsrechnungen zur Extensionsbelastungen für die Simulation eines Spaltzug- bzw. indirekten Zugversuchs sowie eines Biegezugversuchs durchgeführt und auf dem 3. und 4. WS vorgestellt und mit den Partnern diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im 1. Halbjahr 2017 werden die Kriechversuche mit den konventionellen Prüfständen weitergeführt und abgeschlossen. Gleichzeitig ist geplant, die drei neuartigen Kriechversuchsstände, die erforderliche Datenerfassungsanlage und Klimakammer fertigzustellen und wenn möglich einen ersten Testlauf zu starten.

Weiterhin werden die Arbeiten zum Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastung, zur Verheilung sowie zur Abstimmung bzw. dem Aufbau des virtuellen Demonstrators fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 11446C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 250.023,00 EUR	Projektleiter: Staudtmeister	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In dem Berichtszeitraum wurden vom Zuwendungsempfänger in Bezug auf das AP1 diverse Simulationsberechnungen zum Salzstockaufstieg durchgeführt. Die Ergebnisse wurden in den Projekt-Workshops vorgestellt und mit den Projektpartnern diskutiert. Generelle Vorgehensweise und der mögliche Beitrag der BGR zu den Laborversuchen bei kleinen Differenzspannungen wurde mit den Projektpartnern besprochen und diskutiert.

Im Rahmen des AP2 wurden die von der TUC vorgeschlagenen Verheilungsversuche vorberechnet und die Ergebnisse hierzu vorgestellt. Nach näherer Untersuchung zum theoretischen Materialverhalten von Steinsalz bei Zugversagen hat der Zuwendungsempfänger zur Berücksichtigung das von ihm entwickelte und verwendete Stoffmodell Lubby-CF mit einem weiteren, in der Literatur bereits erprobten Term erweitert. Das Stoffmodell wurde ebenfalls insoweit weiterentwickelt, dass eine Veränderung im elastischen Materialverhalten infolge dilatanter Auflockerung berücksichtigt werden kann. Das modifizierte Stoffmodell wurde mit diversen Simulationsberechnungen zum Spaltzugversuch sowie Biegebalken ausgetestet und verifiziert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird an weiteren Workshops teilnehmen. Weitere Ergebnisse aus den Simulationsberechnungen zum Salzstockaufstieg sowie Biegebalken und Spaltzugversuch werden vorgestellt. Falls erforderlich werden weitere Berechnungen hierzu durchgeführt. Die Ergebnisse aus den Vorberechnungen zu den Verheilungsversuchen sollen mit den Projektpartnern verglichen und gegebenenfalls Änderungen an der Versuchsmatrix bzw. weitere Vorberechnungen durchgeführt werden. Weiterhin sind Modellberechnungen zum AP4 sowie AP5 geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Yıldırım, S., D. Zapf & K. Staudtmeister 2016: The Lubby-CF constitutive model for the thermo-mechanical behavior of rock salt. Proceeding of the 4th Itasca Symposium on Applied Numerical Modeling. Itasca, March 7-9, 2016, Lima, Peru

Zapf, D., Yıldırım, S., K. Staudtmeister & B. Leuger 2016: Rock Mechanical Dimensioning of Gas Storage Caverns in the Salt Dome Edge Region, Proceeding of the 4th Itasca Symposium on Applied Numerical Modeling. Itasca. March 7-9, 2016. Lima, Peru

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 11446D
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 233.387,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Stahlmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Leibniz Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich an dem Verbundprojekt im Teilprojekt D mit dem Stoffmodell für Steinsalz TUBSalt und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D der Fa. Itasca.

Im Berichtszeitraum wurden zwei Workshops in Hannover und Karlsruhe durchgeführt. Dabei wurden weitere Berechnungen zur Modellierung von Zugspannungen anhand eines Spaltzugversuchs und eine Biegebalkens vorgestellt. Der Spaltzugversuch zeigt auch bei weiteren Untersuchungen sehr gute Ergebnisse, beim Biegebalken gibt es zurzeit noch Probleme mit der vom IfG vorgeschlagenen modifizierten Lasteinleitung.

Es wurden Prognosen zu Verheilungsversuchen berechnet, die in der Art der Belastung vergleichbar mit den momentan an der TUC durchgeführten Laborversuchen sind. Bei einem ersten Vergleich der Ergebnisse zeigen sich Differenzen bei den Partnern, die wahrscheinlich durch unterschiedliche Interpretationen bei der Kennwertermittlung begründet sind. Hier sollen weitere Untersuchungen folgen.

Ein ebenfalls vom IfG entworfenes Modell zur Modellierung kleiner Differenzspannungen anhand einer Simulation zum Aufstieg eines Salzstocks konnte ebenfalls erfolgreich berechnet werden. Hier steht noch eine abschließende Auswertung im Rahmen der Projektpartner aus.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Zeit liegt der Schwerpunkt der Arbeiten auf der Berechnung des Biegebalkens sowie der Auswertung des Salzstockaufstiegs und der Verheilungsprognosen. Außerdem ist die Sammlung der Ergebnisse der Verheilungsprognosen der Projektpartner geplant. Daraus soll für den nächsten Workshop eine Diskussionsgrundlage erstellt werden.

Für das 1. Quartal 2017 ist die Veröffentlichung der Version 6.0 des Programms FLAC3D geplant. Damit verbunden sind eine neue Eingabesprache sowie potenziell Änderungen in der Einbindung der Stoffmodelle. Daher wird die Anpassung des Stoffmodells sowie der bestehenden Berechnungsmodelle wahrscheinlich Zeit in Anspruch nehmen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Missal, C.; Gährken, A.; Stahlmann, J. (2016): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (Verbundprojekt: Teilvorhaben 6) Endbericht des Teilvorhabens. TU Braunschweig, Institut für Grundbau und Bodenmechanik. Braunschweig

Missal, C.; Gährken, A.; Stahlmann, J. (2016): Ein thermisch-mechanisches Stoffmodell für Steinsalz mit Berücksichtigung von Schädigung, Bruch und Verheilung. geotechnik, 39. Jahrgang, Heft 1, S. 2-17, Ernst & Sohn, Berlin

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11446E
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 406.332,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Leibniz Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA. Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert. Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Projektpartner am 09./10. August 2016 in Hannover und am 08./09. Juni 2016 in Karlsruhe jeweils einen Projekt-Workshop durch.

Die Projektpartner diskutierten Arbeiten zu mehreren Themenbereichen des Projekts. Der Zuwendungsempfänger zeigte vorgenommene Modifizierungen im Stoffmodell Lux/Wolters, wodurch sich die Schädigungsentwicklung aufgrund von Zugspannungen unabhängiger und variabler von der Schädigungsentwicklung infolge von Druck- und Schubspannungen steuern lässt. Die Auswirkungen dieser Modifikationen wurden anhand von Simulationsberechnungen zu einem Spaltzugversuch („Brazilian-Test“) wie auch einem Biegebalkenversuch demonstriert. Auf dem Projektworkshop in Karlsruhe präsentierte der Zuwendungsempfänger eine analytische Lösung zur Berechnung der inneren Spannungen und der Durchbiegung bei einem Biegebalkenversuch unter Annahme eines elastischen Materialverhaltens sowie erste numerische Simulationen zu einem Salzstockaufstieg, wodurch insbesondere das Kriechverhalten von Salzgestein bei kleinen deviatorischen Spannungen charakterisiert werden soll.

Darüber hinaus stellte der Zuwendungsempfänger die Versuchsergebnisse von zwei Verheilungsversuchen mit einer Versuchsdauer von jeweils 8 Monaten dar. Die Versuche zeigen zu erwartende Ergebnisse hinsichtlich der Verzerrungen und der Ultraschallwellenmessung. Für die Beurteilung der Dilatanzmessung sind noch weitere Kalibrierungsversuche notwendig, da die Messergebnisse ungewöhnlich große volumetrische Verformungen zeigen. Die diesbezüglich auf dem Workshop diskutierten Kalibrierungsversuche wurden anschließend zum Ende des Berichtszeitraums durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird am fünften Projekt-Workshop am 02.-03. Februar 2017 in Leipzig teilnehmen und weitere numerische Simulationen zum Verformungsverhalten infolge von Zugbeanspruchungen an Salzgestein durchführen sowie weitere Stoffmodellmodifikationen bei sich darstellenden Defiziten vornehmen. Die geplanten Verheilungsversuche mit geänderter Belastungsgeschichte sollen begonnen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11456A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- e^2), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2016 bis 28.02.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 720.962,00 EUR	Projektleiter: Dr. Huber	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel des Vorhabens ist es, die Kenntnisse zur Langzeit-Integrität der Bentonitbarriere im Kontakt mit niedrig mineralisierten Grundwässern (z. B. glazialen Schmelzwässern) und die damit verbundene Bentonit-Erosion und potentielle Mobilisation von Tonminerkolloide/-Nanopartikel aus dem Nahfeldbereich zu untersuchen. Ein weiterer Aspekt ist die Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen-Wechselwirkung und der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erweitern und auf dieser Basis die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation zu bewerten. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Es schließt damit an die Arbeiten der vorangegangenen KOLLORADO Vorhaben an.

Im Einzelnen soll das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel durch die im KIT-INE angewandten spektro-/mikroskopischen Methoden dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen Radionuklidtransports zu erreichen. Zudem sollen die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse verwendeten Codes ermittelt werden. Im Rahmen der Modellierungsarbeiten werden die Codes COFRAME und d³f++ für den kolloidgetragenen Schadstofftransport anhand von In-situ-Experimenten am Standort Grimsel weiter qualifiziert und Modelle zu Bentoniterosion weiterentwickelt und angewandt. Im vorliegenden Bericht werden die Arbeiten des KIT beschrieben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT-INE)
 - AP1.1 Mechanismen der Kolloid-RN-Kluftmineral-Wechselwirkung
 - AP1.2. Kolloidgetragene Radionuklid-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/KIT-INE)
 - AP2.1: Simulationsrechnungen für weitere CFM Homolog/RN Experimente (GRS)
 - AP2.2: Simulationsrechnungen für das integrierte CFM Experiment (GRS/KIT-INE))
 - AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
 - AP2.4: Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen im Kristallingestein (KIT-INE)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS/KIT-INE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Status: Zwei Experimente zur Bentoniterosion werden weiterhin durchgeführt und die ersten Ergebnisse des sogenannten „LIT mock-up“-Tests sind stimmig zu den Ergebnissen vorheriger Erosionsexperimente. Für den konservativen Tracer Amino-G konnte ein Durchbruch gefolgt von einem Konzentrationsplateau gemessen werden. Die Vergleichbarkeit der Laborergebnisse zu den LIT Daten ist aufgrund der viel größeren Verdünnung im Feldexperiment erschwert. Durch die Auflösung calciumhaltiger Sekundärphasen in den ersten Monaten des La-

borversuchs (Überschreitung der CCC) ist die mobile Kolloidkonzentration in vielen Proben nasschemisch nicht messbar. Von den enthaltenen Radionukliden konnten bislang ^{99}Tc , ^{233}U und ^{237}Np detektiert werden.

Weiterhin sind kinetische Batchstudien (> 100 Tage) zur Radionuklid-Reversibilität an Kluftfüllmaterial des Grimsel Granodiorits für die Einzelelemente Am, Np, Pu und Tc sowie für einen Radionuklidcocktail (Am, Np, Pu, Tc und U) fortgeführt worden. Aufgrund der sehr geringen Reversibilität der drei- und vierwertigen Radionuklide, wurde durch Zugabe von synthetischen Ni-Montmorillonitkolloiden (Konkurrenzoberfläche) versucht, eine Radionuklid-desorption zu initiieren. Die Ergebnisse zeigen, dass bei vergleichbaren Kontaktzeiten die drei- bis fünffache Radionuklidmenge im Vergleich zur Desorption ohne kolloidale Phase remobilisiert werden konnte.

Die Versuche zum natürlichen Illit-Kolloidtransport in der Fließzelle sind abgeschlossen. Unter gleichen hydrogeochemischen Randbedingungen weist Illit einen höheren Widererhalt als die Latexkolloide auf. Experimente zum Effekt der Fließkanalgeometrie auf den Tracertransport unter Verwendung von 2 natürlichen Granitklüften aus Soultz-sous-Forets (Frankreich) werden derzeit durchgeführt. Ein 2D Modell kann die experimentell erzielten Ergebnisse bestätigen. Anschließend werden Versuche mit Kolloiden (Latex & Illit) wiederholt, um Unterschiede im Transportverhalten zwischen Tracer und Kolloiden zu untersuchen.

AP1.2: Status: Schwerpunkt der Arbeiten im 2. Hj. 2016 lag weiterhin auf der begleitenden Analytik und Interpretation der Proben des „Long term In-situ-Test (LIT)“ sowie Proben des Remobilisationstest („REMOB“).

(a) Ein neues Verfahren für die Ultrapurenanalytik mittels AMS von Tc-99 und Aktiniden in den Proben des „Long term In-situ-Test (LIT)“ wurde entwickelt. Die Methode wurde zuerst an Standardproben getestet und verifiziert. Hierzu wurden der Technetium Anteil und der Aktiniden Anteil chemisch getrennt und die Konzentrationen der Nuklide wurden in jedem Anteil mittels ICPMS gemessen. Die chemische Trennung bietet gute Ausbeuten, und zwar ca. 91 % für Tc-99 in dem Technetium Anteil und ca. 85 %, 77 %, 79 % und 96 % für U-233, Np-237, Pu-244 und Am-243 im Aktiniden Anteil. Die neue Methode ermöglicht die Bestimmung von Tc-99 in der gleichen LIT Probe im fg/g Bereich und von Aktiniden im fg/g und ag/g Bereich mittels AMS.

(b) Der Versuch (REMOB-Test) der hydraulischen Störung des Injektionsbereichs von Run 13-05 durch Fließrichtungsumkehr und Erhöhung des Volumenstroms auf max. 192 mL/min zeigte nur eine relativ geringe Erhöhung der Kolloidkonzentration (LIBD) auf maximal 154 ppb bei einer mittleren Teilchengröße von 8-44 nm. Die experimentelle Idee der Remobilisation von Ni-markierten synthetischen Montmorillonitkolloiden und der Bestimmung einer RN Desorptionskinetik gestaltet sich als analytische Herausforderung, da schon die Ni Konzentrationen nahe der Nachweisgrenze liegen und somit die Actinidenkonzentrationen im ppq Bereich zu erwarten sind und nur mittels AMS erschlossen werden können. Diese Analysen stehen noch aus.

AP2.4: Status: Modellierungen zum Einfluss der Kluftgeometrie auf das Bentoniterosionsverhalten wurden fortgeführt. Mathematisch generierte Aperturverteilungen für zwei verschiedene Korrelationslängen (0.2 m und 1.75 m) wurden für die Berechnung der heterogenen Fließfelder implementiert. Die Ergebnisse zeigen einen deutlichen Einfluss der Kluftheterogenität auf das Erosionsverhalten für hohe und mittlere Fließgeschwindigkeiten (1×10^{-5} m/s bis 5×10^{-7} m/s). Für Fließgeschwindigkeiten $< 1 \times 10^{-7}$ m/s ist kein Effekt der Kluftgeometrie mehr zu erkennen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1 & 2: Schwerpunkt des nächsten ½ a wird neben den laufenden Laborversuchen und Modellierungen vor allem eine Feldkampagne zur Messung (LIBD) der Kolloidmobilisierung in der CFM Scherzone durch einen Stimulationstest der ETH Zürich im Nahfeld des LIT Versuches sein. Darüber hinaus wird das neue Laborprogramm zum Effekt von sauerstoffreichen glazialen Schmelzwässern auf die Radionuklidmobilisierung in geklüfteten Bohrkernen begonnen.

AP3: Für KOLLORADO- e^2 wird weiterhin auf Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften mit peer-review Verfahren fokussiert (siehe Berichte & Veröffentlichungen).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Stoll, Huber, Schill, Schäfer (in preparation): Nanoparticulate illite transport experiments in the ultra-trace concentration range investigated by LIBD (Laser-induced Breakdown-Detection)

Rinderknecht, Huber, Heck, Geckeis, Schäfer (in preparation): Impact of sorption time on RN sorption and desorption kinetics on fault gouge material from Grimsel

Huber, Leone, Trumm, Neretnieks, Moreno, Wenka, Schäfer (in preparation): Impact of fracture geometry on bentonite erosion

Quinto, Lagos, Plaschke, Schäfer, Steier, Golser and Geckeis (in preparation): Multi-actinides analysis with AMS for ultra-trace determination and small sample sizes: application to in situ tracer experiments and environmental samples and a comparison with SF-ICPMS

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11456B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- e^2), Teilprojekt B	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2016 bis 28.02.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 298.115,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel des Vorhabens ist es, die Kenntnisse zur Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen Wechselwirkung und der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erweitern und auf dieser Basis die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation zu bewerten. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Es schließt damit an die Arbeiten der Vorhaben KOLLORADO-1 und KOLLORADO-2 an.

Im Einzelnen soll das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel durch die im KIT-INE angewandten spektroskopischen und mikroskopischen Methoden dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen Radionuklidtransports zu erreichen. Zudem sollen die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse verwendeten Codes ermittelt werden. Im Rahmen der Modellierungsarbeiten werden die Codes COFRAME und d³f++ für den kolloidgetragenen Schadstofftransport anhand von In-situ-Experimenten am Standort Grimsel weiter qualifiziert und Modelle zu Bentoniterosion und Transport weiterentwickelt und angewandt.

Im vorliegenden Bericht werden die Arbeiten der GRS beschrieben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT-INE)
 - AP1.1: Mechanismen der Kolloid-RN-Kluftmineral-Wechselwirkung
 - AP1.2: Kolloidgetragene Radionuklid-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/KIT-INE)
 - AP2.1: Simulationsrechnungen für weitere CFM Homolog/RN Experimente (GRS)
 - AP2.2: Simulationsrechnungen für das integrierte CFM Experiment (GRS/KIT-INE)
 - AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
 - AP2.4: Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen im Kristallingestein (KIT-INE)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS/KIT-INE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Durchführung weiterer Testrechnungen zur Vorbereitung des geplanten internationalen Benchmarks zur Speziation der in den CFM-Feldexperimenten verwendeten Radionuklide in Bentonit-Porenwasser, Grimsel-Grundwasser und einem ausgewählten Mischwasser.

Beginn von Simulationsrechnungen der Durchbruchkurven für U und Np in CFM RUN 13-05 und CRR #32 unter Berücksichtigung der Redoxkinetik und der dadurch bedingten, mit zunehmender Transportzeit erhöhten Sorption.

Durchführung weiterer Vorhersagerechnungen für ein geplantes Feldexperiment zur kolloidgetragenen Radionuklidmigration speziell unter Berücksichtigung von zwei Sorptionsplätzen mit langsamer bzw. schneller Desorptionskinetik.

AP3: Abstimmung mit dem Projektpartner KIT-INE zu den weiteren Arbeiten.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Koordination in Kooperation mit KIT-INE und Durchführung des internationalen Benchmarks zur Speziation der in den CFM-Feldexperimenten verwendeten Radionuklide. Versendung der Excel-Datei mit der Aufgabenstellung an die Teilnehmer aus USA, UK, Südkorea, Japan und Deutschland.

Anpassung der im Vorhaben WEIMAR entwickelten Datenbasis auf die hier notwendigen Randbedingungen. Durchführung der Speziationsrechnungen mit dem Rechenprogramm PHREEQC.

Durchführung der Rechnungen zum Radionuklidverhalten im Langzeit-Tailing der Durchbruchkurven des Experiments CFM RUN 13-05. Überprüfung der Parameter, die das Plateau des Tailings bestimmen.

Weiterführung der Simulationsrechnungen zu den Durchbruchkurven für U und Np in CFM RUN 13-05 und CRR #32 unter Berücksichtigung der Redoxkinetik.

AP3: Teilnahme an dem nächsten CFM-Meeting mit Präsentation und Diskussion der Ergebnisse mit den anderen Modellierergruppen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Huber, F.; Noseck, U.; Schäfer, Th. (Eds.): Stability of compacted bentonite for radionuclide retardation – Experiments and modelling. Project Kollorado-e; Final Report. Karlsruhe Institut für Technologie, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH. KIT Open Report DOI: 10.5445/IR/1000059756

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11466
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.3	
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.447.555,00 EUR	Projektleiter: Reiche

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Inhalt dieses FuE-Vorhabens ist die Entwicklung eines Rechenmoduls für das Programmpaket RepoTREND zur Simulation von Prozessen im Nahfeld eines Endlagersystems. Dabei muss die dem Nahfeldmodul zugrunde liegende Softwarearchitektur (sie definiert die grundlegenden Komponenten eines Softwaresystems und beschreibt die Zusammenhänge, die zwischen den Komponenten bestehen) vor allem eine hohe Modularität der Programmstruktur und eine hohe Flexibilität gegenüber neuen Anforderungen aufweisen, um eine einfache Modifikation und Erweiterung des Programmcodes zu gewährleisten. Die Entwicklung einer Softwarearchitektur mit den genannten Hauptmerkmalen ist eine Voraussetzung für den Erfolg des gesamten Projekts und beeinflusst maßgeblich den erforderlichen Aufwand für die Entwicklung des Programmcodes. Die Erstellung relevanter Softwarearchitektur gilt deswegen als das wichtigste Teilziel des Projekts.

Die Arbeiten dienen als Grundlage für die Durchführung von Modellrechnungen zur integrierten Analyse der Langzeitsicherheit in zahlreichen aktuellen und zukünftigen Projekten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Anforderungsanalyse und Wissensmanagement. Anforderungen werden ermittelt, spezifiziert, analysiert, strukturiert, abgestimmt und bewertet. Das Wissensmanagement umfasst sowohl interne Maßnahmen (wie Know-How-Transfer durch interne Diskussionsrunden) als auch das Einbeziehen des Know-Hows von externen Experten (z. B. durch die Teilnahme an den fachlichen Konferenzen).
- AP2: Vorarbeiten für die Codeentwicklung. Neue Konzepte und Modelle müssen erstellt werden: konzeptionelles, mathematisches und numerisches Modell des Nahfeldmoduls, Entwurf der Softwarearchitektur, Entwurf einzelner Programmkomponenten, Optimierungskonzepte.
- AP3: Codeentwicklung. Umsetzung der in AP2 erarbeiteten Konzepte in einen Programmcode.
- AP4: Test, Qualitätssicherung, Dokumentation. Umfangreiche Tests ist in allen Phasen der Programmentwicklung werden durchgeführt. Die folgenden QS-Maßnahmen werden geleistet: Standardisierung der Arbeitsprozesse, Versions- und Konfigurationsmanagement, Release-Freigebe, Bugtracking, Lokalisierung von Problemen, Programmkommentare, Konventionen, Review des Programmcodes. Die gesamte Entwicklung über alle Phasen wird ausführlich dokumentiert.
- AP5: Verfolgung von Anforderungen aus aktuell laufenden FuE-Projekten. Die Anforderungen aus den aktuell laufenden FuE-Projekten werden aufgenommen und so weit analysiert, dass eine Entscheidung getroffen werden kann, ob eine Anforderung bei der aktuellen Entwicklung berücksichtigt werden kann oder später, im Rahmen eines separaten Projekts bzw. Arbeitspakets, realisiert werden soll.
- AP6: Berichte zum Projektfortschritt. Alle durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden in Halbjahres- und Jahresberichten sowie im Abschlussbericht dokumentiert.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Im Hinblick auf eine Weiterentwicklung des Werkzeugs RepoSUN (Komponente des statistischen Rahmens RepoSTAR) zur statistischen Auswertung von probabilistischen Rechenläufen wurden Tests mit der am Imperial College London entwickelten Software SobolGSA durchgeführt. Eine darin verwendete

Methode ist möglicherweise geeignet, Sensitivitätsindizes höherer und totaler Ordnung numerisch effektiv und für beliebige Stichproben zu berechnen und damit eine Lücke in RepoSUN zu schließen. Die in Abstimmung und Zusammenarbeit mit den Entwicklern durchgeführten Tests verliefen vielversprechend und lassen auf eine sinnvolle Erweiterung von RepoSUN hoffen.

AP2: Es wurde ein Designkonzept zur Erstellung einer globalen Jacobi-Matrix zur Berechnung von Fluidflüssen und anderen Systemparametern aus den lokalen Blockreihen ausgearbeitet. Eine Blockreihe repräsentiert ein diskretes Gitterelement (finites Volumenelement). Nach dem Konzept soll die globale Jacobi-Matrix nicht wie beim konventionellen Ansatz aus Matrixelementen zusammengesetzt werden, sondern aus Zeigern auf Matrixelemente, die in Submatrizen der entsprechenden Blockreihen gruppiert sind. Dies ermöglicht, dass die Matrixeinträge nach jeder Iteration entsprechend lokalen Anforderungen neu berechnet werden können, ohne dass die Struktur der globalen Jacobi-Matrix geändert werden muss. Somit muss die globale Jacobi-Matrix nicht nach jeder Iteration neu aufgebaut werden, sondern nur dann, wenn der Variablenvektor sich ändert, d. h. wenn Prozesse im System oder die Relevanz der zu berücksichtigenden Effekte sich ändern. Dieses Konzept zielt auf einen deutlichen Performancegewinn, weil die globale Jacobi-Matrix i. A. sehr groß ist und diese zusammenzubauen dementsprechend sehr viel Rechenzeit erfordert.

Es wurden unterschiedliche Konzepte zur dynamischen (Um)Nummerierung von Gitterelementen evaluiert. Basierend auf den bekannten Konzepten wurde ein Konzept entwickelt, das die Spezifik des zu entwickelnden Nahfeldmoduls *NaTREND* berücksichtigt. Durch die geeignete Nummerierung von Gitterelementen kann die Kondition der Jacobi-Matrix deutlich verbessert werden, was zur Performancesteigerung beim Lösen des Gleichungssystems führt. Es wurde eine Reihe von Designentscheidungen bezüglich der grundlegenden Programmstrukturen getroffen.

AP3: Es wurde mit der Entwicklung des im AP2 erwähnten Konzepts zur Aufbau der globalen Jacobi-Matrix begonnen. Weiterhin wurden Entwicklungsarbeiten zur Berechnung von Fluidströmen und Umgebungsparametern fortgesetzt.

AP4: Die umfangreiche Bibliothek von automatischen Testfällen, die für RepoTREND entwickelt und gepflegt wird, wurde umstrukturiert. Die neue Struktur ermöglicht bessere Wartbarkeit und Lesbarkeit der Tests, einfachere Durchführung von diesen und einfacheres Versionsmanagement. Die Tests wurden in zwei Kategorien aufgeteilt – schnelle und länger dauernde. Die Ausführung aller schnellen Tests dauert nicht länger als zwei Minuten. Diese Tests werden unmittelbar während der Programmcodeentwicklung mehrmals am Tag ausgeführt und liefern einen schnellen Feedback darüber, ob der Code nicht unabsichtlich beschädigt wurde. Länger dauernde Tests werden einmal am Tag (12:00) und einmal nachts ausgeführt.

Es erfolgte ein umfangreiches Refactoring der vorhandenen Tests. Hauptziel bei dieser Aktion war, die Wartbarkeit und Lesbarkeit der Tests zu vereinfachen. Es wurden weitere Unit-Tests zu neu implementierten Programmstrukturen entwickelt.

Die entwickelten Konzepte, zugrunde liegenden Entscheidungen sowie der Projektfortschritt wurden dokumentiert.

Aktuell erfolgt eine Evaluierung der Konzepte zum sogenannten Single-Source-Publishing (Einzelquellenausgabe). Die Idee dabei ist, die ganze Projektdokumentation als eine einzige Quelle in einer Umgebung in einem geeigneten speziellen Format zu pflegen, so dass aus dieser Quelle jederzeit erforderliche Dokumente im erforderlichen Format und Layout per Mausklick generiert werden können, wie z. B. GRS-Bericht, Onlinehilfe für die graphische Benutzeroberfläche XENIA, Benutzeranleitungen, Projektpräsentation usw. Der Hauptvorteil bei dieser Art von Dokumentationsführung ist, dass Dokumentation parallel zu der Softwareentwicklung fortlaufend gepflegt werden kann, und somit stets aktuell ist. Zu besonderen Meilensteinen, wie z. B. zum Projektende, kann der entsprechende Dokumentationsstand als freigegebenes Release abgelegt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Schwerpunkt im nächsten Halbjahr ist das AP2. Weiterhin sollen für das Nahfeldmodul *NaTREND* relevante vorhandene Modelle und Konzepte identifiziert und evaluiert sowie eigene Konzepte erstellt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Reiche, T.: Development of a Program Data Structure Enabling the Flexible Integration of Effects into a Basis Flow Model, 20.-24. July, 2016, Toronto
(https://www.conftool.pro/cmwr2016/index.php?page=browseSessions&form_session=53).

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11476A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt A	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.3	
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 30.06.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 723.180,00 EUR	Projektleiter: Schneider

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit d^3f und r^3t wurden Werkzeuge zur Modellierung der dichteabhängigen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien (Vorhaben GRUPRO bzw. TRAPRO) mit expliziter Berücksichtigung von Wärmetransport, Klüften und Kluftsystemen sowie freier Grundwasserflächen (E-DuR) entwickelt. Durch die Umstellung auf die neue, C++-basierte Plattform UG4 erfuhren die Codes eine deutliche Beschleunigung und wurden zu einem einheitlichen Werkzeug „ d^3f++ “ integriert (A-DuR, H-DuR). Der Code d^3f++ wurde bzw. wird in den Vorhaben WEIMAR, QUADER und SANTOS angewendet.

Das Vorhaben hat eine Anwendung des Grundwasserströmungs- und Transportcodes d^3f++ auf endlagerrelevante Aufgabenstellungen, Vergleichsrechnungen mit anderen Codes und damit einen Nachweis seiner Leistungsfähigkeit sowie die Erhöhung des Vertrauens in die Modellierungsergebnisse zum Ziel. Dazu gehören eine Weiterentwicklung der Lösungsverfahren insbesondere für regionale Modelle mit freier Grundwasserfläche, eine weitere Beschleunigung und eine breitere Anwendbarkeit. Letzteres soll neben Verbesserungen in Benutzeroberfläche und Präprozessor durch die Einführung eines Speicherterms geschehen, dessen Implementierung in d^3f++ eine genauere Modellierung kurzfristiger Prozesse ermöglicht.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete von der GRS bearbeitet:

AP1: Anwendungs- und Vergleichsrechnungen

AP2: Erweiterung des Anwendungsbereichs d^3f++

AP4: Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1.1: Äspö Task 9: Die Ergebnisse des Workshops zum Skin-Effekt, der im Frühjahr in Prag stattgefunden hatte, wurden zusammengefasst und auf dem Treffen der Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes vorgestellt. Die Ergebnisse geben Anlass, die Ausrichtung der Projektarbeiten zu Task 9 zu ändern.
- AP1.2: Site Descriptive Model (SDM) für Äspö: Ein Arbeitsplan zur Erstellung eines hydrogeologischen Site Descriptive Models (SDM) für Äspö wurde erarbeitet und in Form eines formellen Agreements zwischen SKB und GRS festgelegt. Die Arbeiten zur Erstellung eines hydrogeologischen Modells haben begonnen.
- AP1.3: Modell der WIPP Site: Auf einem auf Basis der ProMesh-Weiterentwicklung verbesserten Prismengitter mit 280 000 Elementen wurden erste Rechnungen mit freier Grundwasseroberfläche durchgeführt.
Die Ergebnisse wurden am 9.9.2016 im Rahmen des Deutsch-Amerikanischen Workshops in Washington sowie am 8.12.2016 auf der IMG in Bruchsal vorgestellt.
- AP2.1: Mit der Erarbeitung des Konzeptes zur Erweiterung der Strömungsgleichung in d^3f^{++} um einen Speicherterm wurde begonnen.
- AP2.2: Die 3D Gittergenerierung in ProMesh wurde weiterentwickelt. Die vertikale Auflösung der Prismengitter wurde optimiert, so dass sie den Erfordernissen der Mehrgitterverfahren besser gerecht werden.
- AP4: Am 25.11.2016 fand bei der GRS in Braunschweig das erste Projekt-Statusgespräch statt. Dabei stellten die GRS-Mitarbeiter den Stand der derzeitigen Anwendungsrechnungen und die G-CSC-Mitarbeiter die bis dahin erfolgten Entwicklungsarbeiten vor, die Reihenfolge und die zeitliche Planung der weiteren Arbeiten wurden festgelegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.1: Task 9: Erarbeitung einer neuen Herangehensweise an die Modellrechnungen zu Task 9 und Umsetzung
- AP1.2: SDM: Erstellung eines hydrogeologischen Modells für das SDM und Zusammenstellung der Eingabedaten für d^3f^{++}
- AP1.3: WIPP-Site: Die Rechnungen mit freier Oberfläche werden über längere Zeiträume fortgeführt, die Grundwasserstände werden anhand der vorhandenen Messwerte kalibriert
- AP2.1: Das Konzept für die Erweiterung der Strömungsgleichung in d^3f^{++} um einen Speicherterm wird fertiggestellt
- AP4: Das nächste Projektstatusgespräch wird im Mai 2017 stattfinden

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Theodor-W.-Adorno-Platz 1, 60323 Frankfurt am Main		Förderkennzeichen: 02 E 11476B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 30.06.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 595.088,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Wittum	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziele des Projekts sind eine Anwendung des Grundwasserströmungs- und Transportcodes d^3f++ auf endlagerrelevante Aufgabenstellungen, Vergleichsrechnungen mit anderen Codes und damit einen Nachweis seiner Leistungsfähigkeit sowie die Erhöhung des Vertrauens in die Modellierungsergebnisse. Dazu gehört eine Weiterentwicklung von d^3f++ hinsichtlich einer verbesserten Robustheit der Lösungsverfahren insbesondere für regionale Modelle mit dünnen Schichten und freier Grundwasseroberfläche, einer weiteren Beschleunigung der Rechnungen und einer breiteren Anwendbarkeit. Letzteres soll neben Verbesserungen in der Benutzeroberfläche und der Modellerstellung durch die Einführung eines Speicherterms geschehen, der eine genauere Modellierung kurzfristiger Prozesse ermöglicht. Hierzu sollen im Projekt Anwendungs- und Vergleichsrechnungen: 1.1 Äspö Task 9, 1.2 „Äspö site descriptive model“, 1.3 Modell der WIPP Site (AP1), die Erweiterung des Anwendungsbereichs von d^3f++ : 2.1 Erweiterung der Strömungsgleichung in d^3f++ um einen Speicherterm, 2.2 Weiterentwicklung des Präprozessors ProMesh (AP2) und die Weiterentwicklung der Lösungsverfahren: 3.1 Übertragung und Implementierung des LIMEX-Verfahrens, 3.2 Robuste Glättungsverfahren für den geometrischen Mehrgitterlöser, 3.3 Verbesserung der Grobgitterkorrektur, 3.4 Anpassung der FAMG-Verfahren an die thermohaline Grundwasserströmung und parallele Skalierbarkeit, 3.5 Parallele adaptive Verfahren und angepasste Gitterstrukturen, 3.6 Stabile Modellierung freier Grundwasseroberflächen (AP3) eingebracht werden.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Das Simulationssystem UG ist weltweit über 390-mal lizenziert. Diese Nutzergemeinde ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse. Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig. Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der drei BMBF-Projekte vom 01.10.2006-31.03.2011 (FKZ 02E10326), vom 01.10.2008-30.09.2012 (FKZ 02E10568) und vom 01.03.2012-31.10.2015 (FKZ 02E11062).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete vom Lehrstuhl Simulation und Modellierung der Universität Frankfurt bearbeitet:

- AP1: Anwendungs- und Vergleichsrechnungen
- AP2: Erweiterung des Anwendungsbereichs von d^3f++
- AP3: Weiterentwicklung der Lösungsverfahren

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Im Hinblick auf Simulationen über große Zeitspannen wurde ein Testproblem auf der original WIPP-Geometrie für die Simulation von dichtegetriebener Strömung über 20.000 bzw. 100.000 Jahre aufgesetzt. Unter Nutzung der unter AP2 erwähnten Projektoren wurden Löser, Gitter und Verfeinerungsmethoden derart optimiert, dass eine Lösung des Problems in vergleichsweise sehr kurzer Zeit möglich war (Rechenzeit von wenigen Stunden).
- AP2: Die Simulation auf weitläufigen und komplexen Geometrien wie der WIPP-Site erfordert eine extrem hohe Elementzahl, um eine befriedigende Lösungsgenauigkeit zu erreichen. Solch detaillierte Gitter müssen dabei selbst schon durch parallele Gittergenerierung erzeugt werden. Gleichzeitig wird eine verteilte Gitterhierarchie bis hin zu vergleichsweise groben Gittern benötigt, die die Anwendung effizienter Mehrgitterlöser ermöglicht. Hierzu wurde eine spezielle 3D-Projektionsmethode entwickelt, die es erlaubt, ausgehend von einem groben Gitter durch wiederholte Verfeinerung beliebig feine Gitter zu erstellen und dabei die Geometrie des eigentlichen Problemgebiets mit jeder Verfeinerung besser zu approximieren. Parallele Testrechnungen zeigten, dass sich dieser Ansatz auch parallel sehr effizient verfolgen lässt. Zudem wurden am Transportcode von d^3f++ (ehemals r^3t) einige Ergänzungen vorgenommen, insbesondere beim Schadstofftransport in geklüfteten Medien.
- Aufbauend auf den begonnenen Arbeiten zur Definition einer Spezifikationsschicht, die eine Validierung der Simulationsskripte ermöglicht, wurde mit der Entwicklung einer Bibliothek begonnen, die Validierungsskripte, die gemäß der Spezifikation entwickelt wurden, einlesen und verarbeiten kann. Dies ist die Voraussetzung für die automatische Validierung der Parameter und kann optional auch die Grundlage zur automatischen Generierung von problemspezifischen Benutzerschnittstellen darstellen, welche zusätzlich zum vorhandenen Java-Binding auch auf Skriptebene eingesetzt werden könnte.
- AP3: Eine entscheidende Technik bei der Konstruktion robuster Glätter in hochgradig anisotropen Geometrien ist die Reduktion der Anisotropie durch anisotrope Verfeinerung bei der Erzeugung der zugrunde liegenden Mehrgitterhierarchien. Ein Algorithmus zur automatischen anisotropen Verfeinerung wurde implementiert und für das WIPP Problem getestet. Dabei konnte die erwartete verbesserte Robustheit des Glätters in der Praxis beobachtet werden. Dies hat auch entscheidende Konsequenzen für die Parallelisierung, da es nun ausreicht lokale Kopplungen bei der Glättung zu berücksichtigen. Die Parallelisierung robuster Glätter wie dem ILU Verfahren ist ohne Verluste in der Leistungsfähigkeit nicht ohne weiteres möglich. Der sehr effiziente Ansatz über blockweise Jakobi Glättung zwischen den Prozessen mit prozessweise lokaler ILU Glättung hat sich dabei als sehr praktikable und effiziente Alternative erwiesen. Dieser Ansatz kann bei starker Parallelisierung allerdings die erwünschten Eigenschaften der ILU Glättung auf hochgradig anisotropen Gittern mildern. Ein hybrider Ansatz wurde deshalb verfolgt, um die effiziente Parallelisierung für hohe Prozesszahlen zu ermöglichen. Unter Ausnutzung der in UG4 verfügbaren hierarchischen Verteilung konnte ein Verfahren entwickelt werden, das durch geschachtelte Anwendung von Mehrgitterverfahren auf der verteilten Geometrie sowie einem parallelen Grobgitterlöser auf einer Teilmenge der verfügbaren Prozessoren einen skalierbaren parallelen Löser für dichtegetriebene Strömung auf hochgradig anisotropen Gebieten darstellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11486A	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt A			
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik, Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3			
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2018		Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 224.999,00 EUR		Projektleiter: Dr. Wolf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Wesentlichen soll eine Vorgehensweise entwickelt werden, die eine nachvollziehbare Abwägung zwischen den Anforderungen an die Sicherheit während der Betriebsphase und der Langzeitsicherheit erlaubt. Für die deutschen Endlagerkonzepte in Ton- und Salzgestein werden auf der Basis von FEP die Abhängigkeiten zwischen Betriebs- und Nachverschlussphase dokumentiert. Darauf basierend sollen Methoden und Ansätze entwickelt werden, die eine nachvollziehbare Bewertung der Abhängigkeiten von Betriebs- und Nachbetriebsphase erlauben. Des Weiteren werden im Rahmen der Arbeiten die Grundzüge für ein Sicherheitskonzept in der Betriebsphase erstellt und geprüft, ob es Harmonisierungsbedarf zwischen den Sicherheitskonzepten der Betriebs- und Nachverschlussphase gibt. Mit diesem Vorhaben werden neuartige konzeptionelle Ansätze und methodische Voraussetzungen geschaffen, die es erlauben, einen konsistenten und in sich geschlossenen Sicherheitsnachweis zu führen. Die gemeinsame Bearbeitung des Vorhabens durch die DBE TECHNOLOGY und die GRS, insbesondere deren Arbeiten auf dem Gebiet der Betriebs- und Langzeitsicherheit und Mitarbeit in entsprechenden internationalen Gremien bilden die Grundlage für eine erfolgreiche Durchführung des Vorhabens.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst die folgenden Arbeitspakete:

- AP1: Grundlagen (rechtlicher Rahmen, internationale Empfehlungen, Endlagerkonzepte)
- AP2: Grundzüge eines Sicherheitskonzepts für die Betriebsphase
- AP3: Zusammenstellung eines Kataloges mit FEP beim Bau und Betrieb eines Endlagers
- AP4: Bewertung der Betriebsphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf die Langzeitsicherheit
- AP5: Bewertung der Nachverschlussphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf den sicheren Betrieb eines Endlagers
- AP6: Methoden und Ansätze
- AP7: Dokumentation

GRS ist federführend für die Arbeitspakete 1, 4, 6 und 7.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Auswertung der internationalen Empfehlungen zur Behandlung der Betriebs- und Nachverschlussphase im Safety Case (z. B. IAEA, NEA) wurden abgeschlossen und dokumentiert (siehe Jahresbericht 2016). Ein Austausch mit Projektpartnern aus dem Vorhaben GEOSAF-II fand dazu am 16.08.16 in Köln statt. Im Rahmen eines vierwöchigen IAEA-Stipendiums war eine Mitarbeiterin von SURAO (CZ) in die Arbeiten eingebunden.

AP3: Es wurde eine FEP-Liste für die Betriebsphase erstellt und auf zwei Treffen am 30.09.16 in Braunschweig und am 02.12.16 in Peine mit der DBE Technology diskutiert und erweitert.

AP4: Die bereits zusammengestellten FEP aus AP3 wurden hinsichtlich ihrer Relevanz für die Langzeitsicherheit der deutschen Endlagerkonzepte in Salz- und Tongestein bewertet.

Die Arbeiten in den anderen Arbeitspaketen wurden noch nicht begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die Arbeiten sind abgeschlossen und dokumentiert.

AP2: Es werden die Grundzüge eines Sicherheitskonzeptes für die Betriebsphase zusammengestellt.

AP3+4: Die Arbeiten an der FEP-Liste für die Betriebsphase und die Bewertung der FEP werden fortgeführt.

AP5: Bewertung der FEP für die Nachverschlussphase von Endlagern in Ton- und Salzgestein hinsichtlich ihrer Bedeutung für die Betriebsphase.

AP6+7: Die Arbeiten in diesen AP beginnen in der zweiten Hälfte des Jahres 2017.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11486B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik, Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2016 bis 31.03.2018	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 200.389,80 EUR	Projektleiter: Filbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das wesentliche Ziel des Vorhabens ist es, eine Vorgehensweise zu entwickeln, die eine nachvollziehbare Abwägung zwischen den Anforderungen an die Sicherheit während der Betriebsphase eines Endlagers für ausgediente Brennelemente und wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und der Langzeitsicherheit erlaubt. Für die deutschen Endlagerkonzepte in Ton- und Salzgestein werden auf der Basis von FEP die Abhängigkeiten zwischen Betriebs- und Nachverschlussphase dokumentiert. Darauf basierend sollen Methoden und Ansätze entwickelt werden, die eine nachvollziehbare Bewertung der Abhängigkeiten von Betriebs- und Nachbetriebsphase erlauben. Des Weiteren werden im Rahmen der Arbeiten die Grundzüge für ein Sicherheitskonzept in der Betriebsphase erstellt und geprüft, ob es Harmonisierungsbedarf zwischen den Sicherheitskonzepten der Betriebs- und Nachverschlussphase gibt. Mit diesem Vorhaben werden neuartige konzeptionelle Ansätze und methodische Voraussetzungen geschaffen, die es erlauben, einen konsistenten und in sich geschlossenen Sicherheitsnachweis zu führen. Die gemeinsame Bearbeitung des Vorhabens durch die DBE TECHNOLOGY und die GRS, insbesondere deren Arbeiten auf dem Gebiet der Betriebs- und Langzeitsicherheit und Mitarbeit in entsprechenden internationalen Gremien bilden die Grundlage für eine erfolgreiche Durchführung des Vorhabens.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst die folgenden Arbeitspakete:

- AP1: Grundlagen (rechtlicher Rahmen, internationale Empfehlungen, Endlagerkonzepte)
- AP2: Grundzüge eines Sicherheitskonzepts für die Betriebsphase
- AP3: Zusammenstellung eines Kataloges mit FEP beim Bau und Betrieb eines Endlagers
- AP4: Bewertung der Betriebsphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf die Langzeitsicherheit
- AP5: Bewertung der Nachverschlussphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf den sicheren Betrieb eines Endlagers
- AP6: Methoden und Ansätze
- AP7: Dokumentation

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für die Arbeitspakete 2, 3 und 5.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die zusammenfassende Darstellung der folgenden für das Vorhaben ausgewählten Endlagerkonzepte wurde weitgehend abgeschlossen:

Für Steinsalz:

- Streckenlagerung (POLLUX®-Behälter)
- Bohrlochlagerung (rückholbaren Kokille (BSK-R))
- Horizontale Kurzbohrlochlagerung (Transport- und Lagerbehälter (TLB))

Für Tonstein:

- Streckenlagerung (POLLUX®-Behälter)
- Bohrlochlagerung (BSK-R)

AP2: Es wurde mit der Erstellung der Grundzüge eines Sicherheitskonzeptes für die Betriebsphase begonnen.

AP3: Die Zuarbeit zur Zusammenstellung eines Kataloges mit FEP zum Bau und Betrieb eines Endlagers wurde aufgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Im 1. Quartal 2017 erfolgt der Abschluss der zusammenfassenden Darstellung der Endlagerkonzepte.

AP2: Die Erstellung der Grundzüge eines Sicherheitskonzeptes für die Betriebsphase wird fortgeführt.

AP3: Die Zusammenstellung eines Kataloges mit FEP zum Bau und Betrieb eines Endlagers wird fortgeführt.

AP4: Die Zuarbeit zur Bewertung der Betriebsphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf die Langzeitsicherheit wird aufgenommen.

AP5: Die Bewertung der Nachverschlussphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf den sicheren Betrieb eines Endlagers wird aufgenommen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11496A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt A	
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2016 bis 30.04.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016
Gesamtkosten des Vorhabens: 786.134,00 EUR	Projektleiter: Dr. Muñoz

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel dieses Vorhabens ist das wesentlich verbesserte Verständnis der metallischen Korrosion der Abfallbehälter in salzhaltigen, geochemischen Milieus und der Rückhaltung von Actiniden durch die Korrosionsprodukte unter den im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle im Ton- und im Salzgestein herrschenden Temperatur- und Druckbedingungen. Die Anwendung elektrochemischer Hochdruck/Hochtemperatur-Messmethoden mit samt moderner Spektroskopie- und Mikroskopie-Techniken soll dem Abbau von Ungewissheiten und Konservativitäten bei der Erstellung einer Langzeitprognose für die Freisetzung von Actiniden nach einem Ausfall von Endlagerbehältern dienen. Das Vorhaben steht in enger Verbindung zu dem Vorhaben KORPHA 02E11314, das die Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen zum Ziel hat. Beide Vorhaben leisten damit einen Beitrag zur sicherheitsanalytischen Bewertung des Langzeitverhaltens von Ton- und Salzformationen als Endlagerwirtsgesteine.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Im Einzelnen werden folgende Teilziele verfolgt:

- AP1: Aufbau einer elektrochemischen Messzelle zur Untersuchung der Korrosionskinetik
- AP2: Durchführung Voltammetrie- und elektrochemischer Impedanz-Experimente
- AP3: Identifizierung generierter Korrosionsprodukte: chem./kristallographische Analyse
- AP4: Morphologische Analyse der korrodierten Oberfläche und Identifizierung aktiver (Metallauflösung) und passiver (kathodische Gegenreaktion) Bereiche
- AP5: Bestimmung der Rückhaltung von Actiniden an ausgewählten
- AP6: Eisenkorrosionsprodukten, Identifizierung sorbierter Spezies und Aufklärung von Sorptionsmechanismen
- AP7: Pilotstudie zur Anwendung quantenchemischer Methoden zur Untersuchung der Actinidenwechselwirkung mit Eisenoxidoberflächen
- AP8: Koordination des Verbundvorhabens

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Der elektrochemische Druckreaktor mitsamt dem Druckkontrollsystem wurde aufgebaut und seine Funktion wurde überprüft. Dazu gehört auch die Entwicklung eines Konzeptes zur Montierung der zu untersuchenden Proben als elektrochemische Elektroden: elektrischer Anschluss und Rahmen der aktiven Fläche durch Epoxidharz. Eine Politurmethode wurde dazu auch entwickelt.
- AP8: Vor- und Nachbereitung des 1. Projekttreffens zum Verbundvorhaben KORSO
Abstimmung von den in den elektrochemischen Experimenten zu verwendenden Stählen und deren Bedingungen und den technischen Details bzgl. der Probenüberlieferung zu weiteren Oberflächenanalysen mit dem Projektpartner.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung von systematischen Polarisationsexperimenten bei verschiedenen Temperaturen (25 °C bis 120 °C) und Drucken (2 bar bis 100 bar) in Endlager-relevanten Salzlösungen: Q-Lösungen
- Erkennung der Aktiv-Passiv- und Passiv-Transaktiv-Übergänge
- Identifizierung möglicher Pittingkorrosionsprozesse und Repassivationsfähigkeit
- Identifizierung der Korrosionsprodukte

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11496B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2016 bis 30.04.2019	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 400.000,00 EUR	Projektleiter: Dr. Finck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die chemische und mechanische Stabilität von Metallbehältern mit radioaktiven Abfällen stellt im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse einen wichtigen Aspekt dar. Für eine robuste Modellierung der Behälterkorrosion unter endlagerrelevanten Bedingungen ist ein detailliertes Verständnis der Teilprozesse des korrodierenden Materials erforderlich. Information zur Metallkorrosion für Bedingungen eines Endlagers in Steinsalz stehen nur sehr begrenzt aus der Literatur zur Verfügung. Ziel des Vorhabens ist es das Verständnis der Metallkorrosion der Abfallbehälter im salzhaltigen Milieu unter den im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle herrschende T- und P- Bedingungen wesentlich zu verbessern. Mit Hilfe elektrochemischer Methoden sollen Teilreaktionen erschlossen werden, und mit Hilfe spektroskopischer und mikroskopischer Methoden die Struktur und die Zusammensetzung der Korrosionsprodukte sowie deren Oberflächen- Morphologie charakterisiert werden. Ein weiterer Schwerpunkt des Vorhabens ist es die Rückhaltung von Radionukliden an synthetischen, gut charakterisierten Referenz- Eisenkorrosionsprodukte mittels spektroskopischer und chemischer Methoden zu untersuchen. Ziel dieser Arbeiten ist es Unsicherheiten bezüglich der Wechselwirkung dieser Sekundärphasen mit Radionukliden und der langfristigen Prognostizierbarkeit der Auswirkungen auf die Radionuklidmobilität abzubauen. Eine Zusammenarbeit läuft mit der GRS Braunschweig.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP0: Literaturstudie
- AP1: Elektrochemische Untersuchungen
- AP2 Identifizierung von Eisenkorrosionsphasen und Sorption von Actiniden
 - AP2.2: Langzeitkorrosionsexperimente und Sorption von Actiniden
 - AP2.3: Quantenchemischen Rechnungen
- AP3: Dokumentation und Publikation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1 + AP2:

Erste Korrosionsexperimente mit Fe(0) in reiner NaCl- oder MgCl₂-Lösung wurden bei erhöhter Temperatur (60 °C) und in geschlossenem Gefäß angesetzt. Nach mehreren Wochen Kontaktzeit soll die Oberfläche mittels mikroskopischer und spektroskopischer Methoden untersucht und die gebildeten Korrosionsprodukte identifiziert werden. Diese Versuche sollen als Referenzen zu den Langzeitkorrosionsexperimenten in Autoklaven mit Werkstoffen der HAW-Kokillen oder der POLLUX-Behälter dienen. Der Aufbau der Autoklaven mit Manometer und Ventile wird fortgesetzt. Der Werkstoff der HAW-Kokille wurde gekauft und der GRS auch bereitgestellt, ein Werkstoff für den POLLUX-Behälter wurde bestellt. Die Optimierungen der Strukturen von Hämatit und Goethit wurden mit Dichte-Funktional-Rechnungen (DFT) durchgeführt. Die Resultate stimmen sehr gut mit den experimentellen Werten überein.

Die Arbeiten zu Langzeitkorrosionsexperimenten und Rückhaltung von Actiniden werden im Wesentlichen von Frau Nikoleta Vozarova durchgeführt. Frau Vozarova hat ihre Doktorarbeit am 01.12.2016 am KIT-INE angefangen. Durch das verspätete Eintrittsdatum verzögerten sich die Arbeiten um ca. 7 Monate.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP0: Fortsetzung der bereits begonnenen Literaturstudie

AP1: Aufbau der elektrochemischen Zelle

AP2: Aufbau der Langzeitkorrosionsexperimente und Weiterführung der quantenchemischen Rechnungen zu den Fe-Phasen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11506
Vorhabensbezeichnung: Vorprojekt – Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH ² M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.3		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2016 bis 30.04.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 68.800,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bei dem geplanten Forschungsvorhaben „BenVaSim“ handelt es sich um ein internationales Simulatoren-Benchmarking-Projekt, dessen Ziel es ist, die numerisch korrekte und geotechnisch grundsätzlich aussagekräftige Funktionsweise unterschiedlicher TH²M-Simulationsprogramme nachzuweisen. Zu diesem Zweck ist die Simulation von Modellbeispielen unterschiedlichen Komplexitätsgrads mit diesen Simulatoren angedacht. Das übergeordnete Ziel ist dabei die nationale Verfügbarkeit von mehreren qualitätsgesicherten Simulatoren für die Durchführung von fluiddynamischen Analysen zum Verhalten von untertägigen Endlagersystemen im Tonstein- und Salinargebirge als Grundlage für die Erarbeitung von Langzeitsicherheitsanalysen zu Endlagerkonzepten. Das Vorhaben soll in Zusammenarbeit mit der BGR, dem schweizerischen ENSI, der GRS mit ihren Bereichen „Endlagersicherheitsforschung“ und „Strahlen- und Umweltschutz“ (→ BMUB-FKZ: 3616E03230) sowie dem US-amerikanischen LBNL stattfinden und baut vom Standpunkt des Zuwendungsempfängers aus auf dem BMWi-Forschungsvorhaben mit dem FKZ 02E11041 auf, in dessen Rahmen der FTK-Simulator entwickelt worden ist, der Gegenstand des geplanten Benchmarkings sein wird.

Insbesondere ist es das Ziel dieses Vorprojekts, vorbereitende Maßnahmen für das BenVaSim-Hauptprojekt zur Erlangung der vorstehend genannten Ziele vorzunehmen. Unter diese Maßnahmen fällt neben Recherche- und Aufbereitungsarbeiten zur Planung konkreterer Inhalte für das Hauptprojekt vornehmlich die Weiterentwicklung des vom Zuwendungsempfänger in das Benchmarking einzubringenden FTK-Simulators zur Effizienzsteigerung.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Aufarbeitung d. Arbeiten an der TUC zu THM-Simulationen mit dem FTK-Simulator
- AP2: Vorstellung der beteiligten Simulatoren und einschlägiger Erfahrungen der Partner
- AP3: Literaturrecherche zu Benchmarkings und TH²M-Simulatoren/offene Fragen
- AP4: Weiterentwicklung des FTK-Simulators
- AP5: Vorbereitende Maßnahmen für das Benchmarking
- AP6: Dokumentation der Arbeiten, Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Grundidee des im vorangehenden BMWi-Vorhaben 02E11041 entwickelten FTK-Simulators besteht in der sequenziellen Kopplung der Simulatoren FLAC3D und TOUGH2. Diese Art der Prozesskopplung führt hierbei insbesondere bei größeren Modellgeometrien und Zustandsänderungen erfahrungsgemäß zu deutlich ausgedehnten Berechnungszeiträumen mit dem FTK-Simulator. Durch das hier bearbeitete BenVaSim-Vorprojekt ist daher eine Reduzierung dieser Zeiträume durch die Verwendung des parallelisierten Simulators TOUGH2-MP anstelle von TOUGH2 angestrebt worden. Erste orientierende Testsimulationen zu einem dreidimensionalen Modellbeispiel mit TOUGH2-MP (ohne FLAC3D) haben bereits gezeigt, dass eine zeitliche Reduktion für hydraulische Teilberechnungen mit dem Faktor 4 im Vergleich zur Berechnung mit TOUGH2 durchaus möglich ist.

Im Berichtszeitraum ist zu diesem Zweck eine zielgerichtete Einarbeitung in die im Vergleich zu TOUGH2 stark veränderten Codestrukturen von TOUGH2-MP erfolgt. Darauf aufbauend sind sowohl in TOUGH2-MP wie auch in den FTK-Funktionen Code-Adaptionen zur korrekten Einbindung von TOUGH2-MP in den FTK-Simulator, zur Übertragung der bereits bei der Entwicklung von TOUGH2 implementierten Modifikationen auf TOUGH2-MP sowie zur Erweiterung der Funktionalität und Erleichterung der Handhabbarkeit des FTK-Simulators vorgenommen worden (AP4 / → „FTK 3.00“). Testsimulationen haben die korrekte Funktionsweise des durch TOUGH2-MP aktualisierten Simulators bestätigt.

Des Weiteren sind Terminplanungen und organisatorische Vorbereitungen zur Durchführung der bilateralen Fachtreffen mit BenVaSim-Projektpartnern hinsichtlich der Simulatorvorstellung (AP2) sowie eine Gegenüberstellung von ersten, bereits bekannten Fähigkeiten beteiligter Simulatoren und erste Recherchen zu bestehenden Benchmarking-Projekten (AP2 bzw. AP3) erfolgt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im kommenden Jahr werden sowohl die terminlich festgelegten bilateralen Fachtreffen wie auch ein für Februar 2017 anvisiertes gemeinsames BenVaSim-Vortreffen zur Besprechung erster Aspekte zum Benchmarking-Projekt (z. B. Modellvorschläge oder Fachtreffen) durchgeführt (AP2) sowie die begonnenen Rechercharbeiten fortgeführt und ausgedehnt (AP3 und AP5). Ebenso werden die fachbezogenen Vorbereitungen für das BenVaSim-Vortreffen und das Kick-off-Treffen im Hauptprojekt vorgenommen (AP1 und AP5) und die geplanten, begonnenen und bereits vollendeten Arbeiten zum Vorprojekt dokumentiert (AP6).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11516
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung eines technischen Konzeptes für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle und ausgediente Brennelemente in Kristallingestein in Deutschland (KONEKD)		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik, Felder 3.1 + 3.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2016 bis 30.09.2017	Berichtszeitraum: 01.08.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 279.025,00 EUR	Projektleiter: Bertrams	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, ein technisches Konzept für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente für Kristallin als Wirtsgestein in Deutschland zu entwickeln.

Zunächst soll der Stand von Wissenschaft und Technik zur Herstellung von Schächten, Rampen, Strecken und Einlagerungsbohrungen im Kristallin zusammengestellt und hinsichtlich eventuell noch notwendigem FuE-Bedarf bewertet werden.

Auf Basis generischer geologischer Daten soll ein technisches Endlagerkonzept in modellhafter Struktur und Aufbau entwickelt werden.

Weiterhin sollen die erforderlichen Zeitdauern und Kosten für Planung, Herstellung und Betrieb eines solchen Endlagers im Kristallin abgeschätzt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Ermittlung der Methoden und Verfahren zur Herstellung von Tageszugängen, Großbohrlöchern und Strecken im Kristallin

AP2: Konzeptionelle Planung eines Endlagers anhand vorher ermittelter Daten und Abfallmengen

AP3: Abschätzen des Aufwandes für die Planung, Genehmigung und Realisierung eines Endlagers im Kristallin

AP4: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die grundlegenden Recherchearbeiten aus AP1 und die Aufgaben aus AP2 zur Erhebung eines geologischen Datensatzes, des Abfallmengengerüsts und die Auswahl von Behälterkonzepten wurden abgeschlossen.

Schwerpunkt der Arbeiten im Berichtszeitraum waren die endlagerspezifischen Beschreibungen und Empfehlungen im Hinblick auf die bergtechnischen Prozesse und die Maschinenauswahl zur Erstellung und Erhaltung des Grubengebäudes und von Einlagerungsbohrlöchern in einem Endlagerbergwerk in Kristallin. Dabei wurden Designentscheidungen aus dem Einlagerungskonzept und der Grubengebäudeplanung berücksichtigt.

Anders als bei Endlagerkonzepten in Sedimentgesteinen basiert die Vortriebstechnik weniger auf Teilschnittmaschinen als auf Vollschnittmaschinen sowie Bohren und Sprengen.

Aufgrund seiner Genese kann Ungestörtheit und Standfestigkeit von Gebirge aus kristallinem Gestein nicht a priori vorausgesetzt werden. Stattdessen findet eine Begrenzung der für ein Endlager akzeptablen Standfestigkeitsqualität nach unten statt. Diese liegt bei „Good“ nach dem international anerkannten Klassifizierungssystem Q. Schlechtere Qualitäten werden nur lokal angenommen. Diese Annahmen werden durch die FuE Erkenntnisse der SKB am realen Standort Forsmark als plausibel bestätigt.

Verschiedene Ausbaustufen, die auf Gebirgsankern und Spritzbeton beruhen, werden für die erwarteten Standfestigkeitsklassen ausgewählt. Injektionen sorgen für die Abdichtung von Wasserzuflüssen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im kommenden Berichtszeitraum wird der Schwerpunkt der Arbeiten im AP2 "Konzeptionelle Planung eines Endlagers anhand vorher ermittelter Daten und Abfallmengen" liegen. Dabei wird zunächst die Einlagerungstechnik konzipiert, dann das Layout des Grubengebäudes konstruiert. Zu letzterem gehört auch die Beschreibung eines Verfüll- und Verschlusskonzepts. Dabei kann weiterhin auf Erfahrungen und Ergebnissen von FuE-Arbeiten für HAW-Endlager in Skandinavien zurückgegriffen werden. Erste Betrachtungen zur Wittertechnik und zum Strahlenschutz fließen ebenso in diese Aufgaben ein. Darüber hinaus wird zum Ende des Berichtszeitraumes mit den Arbeiten zur Aufwandsabschätzung begonnen (AP3).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11526A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in Tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt A		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Felder 3.1 + 3.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2016 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.12.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 56.642,50 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kudla	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben CREATIEF soll die Chancen und Risiken der Option Endlagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe in Tiefen Bohrlöchern (3000 m bis 5000 m) in technischer und sicherheitstechnischer Hinsicht vertieft untersuchen. Dabei sollen insbesondere die bisher getroffenen Annahmen und Randbedingungen in aktuellen Studien und Forschungsvorhaben im Ausland und Inland analysiert und bewertet werden. Mögliche Defizite sollen identifiziert werden. Dabei soll vor allem untersucht werden, in wieweit die aktuellen Studien im Sinne einer soliden technisch-wissenschaftlichen Prüfung zur Bewertung der technischen und insbesondere sicherheitstechnischen Machbarkeit belastbar sind. Für identifizierte mögliche Schwachstellen bei den Annahmen und Randbedingungen sowie im technischen Konzept sollen - soweit möglich - Verbesserungen und Lösungsansätze entwickelt werden. Dazu soll eine SWOT-Analyse angefertigt werden.

Das Vorhaben CREATIEF hat Bezug zum FuE-Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik und zum FuE-Bereich 4: Sicherheitsnachweis.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Analyse der in der nationalen und internationalen Literatur getroffenen Annahmen und Randbedingungen
- AP2: Analyse und Bewertung der Eckpunkte bei der "Tiefen Bohrlochlagerung"
- AP3: Gesamtbewertung von Chancen und Risiken
- AP4: Dokumentation und Abschlussbericht

Die TU Bergakademie Freiberg ist federführend für AP1. Bei AP2 bis AP4 ist DBE TECHNOLOGY federführend.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Absprachen mit DBE TECHNOLOGY zur Arbeitsteilung.
- AP2: Absprachen mit DBE TECHNOLOGY zur Arbeitsteilung.
- AP3: Noch keine Arbeiten.
- AP4: Noch keine Arbeiten.

Der Kooperationsvertrag mit DBE TECHNOLOGY liegt vor.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Abschluss der Analyse der in der nationalen und internationalen Literatur getroffenen Annahmen und Randbedingungen. Bewertungen der Information hinsichtlich der rechtlichen Rahmenbedingungen in Deutschland.
- AP2: Erkundungsverfahren bis 5000 m Tiefe, Bohrtechnik bis 5000 m Tiefe für die Einlagerungsbohrungen, Einbau dichter Verrohrungen mit größeren Durchmessern für Endlagergebäude, Einlagerung in einem Stützfluid, Verfüllen und Verschließen von Einlagerungsbohrlöchern, Rückbau von Verrohrungen für den Einbau der Verschlüsse, Rückholung und Bergung der Endlagergebäude, Einlagerungs- und Rückholungstechnik, Betriebssicherheit und Havariebewältigung.
- AP3: Planmäßige Arbeiten ab 2. HJ 2017.
- AP4: Planmäßige Arbeiten ab Januar 2018.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11526B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in Tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt B		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik, Felder 3.1 + 3.2		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2016 bis 28.02.2018	Berichtszeitraum: 01.12.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 100.091,50 EUR	Projektleiter: Bollingerfehr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben CREATIEF soll die Chancen und Risiken der Option Endlagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe in Tiefen Bohrlöchern (3000 m bis 5000 m) in technischer und sicherheitstechnischer Hinsicht vertieft untersuchen. Dabei sollen insbesondere die bisher getroffenen Annahmen und Randbedingungen in aktuellen Studien und Forschungsvorhaben im Ausland und Inland analysiert und bewertet werden. Mögliche Defizite sollen identifiziert werden. Dabei soll vor allem untersucht werden, in wieweit die aktuellen Studien im Sinne einer soliden technisch-wissenschaftlichen Prüfung zur Bewertung der technischen und insbesondere sicherheitstechnischen Machbarkeit belastbar sind. Für identifizierte mögliche Schwachstellen bei den Annahmen und Randbedingungen sowie im technischen Konzept sollen - soweit möglich - Verbesserungen und Lösungsansätze entwickelt werden. Dazu soll eine SWOT-Analyse angefertigt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Analyse der in der nationalen und internationalen Literatur getroffenen Annahmen und Randbedingungen
- AP2: Analyse und Bewertung der Eckpunkte der Option "Tiefe Bohrlochlagerung"
- AP3: Gesamtbewertung von Chancen und Risiken
- AP4: Dokumentation und Abschlussbericht

Die TU Bergakademie Freiberg ist federführend für AP1. Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend zuständig für AP2, 3 und 4.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Anfang Dezember wurde in einem Kick-Off Meeting im Detail zwischen den beiden Projektpartnern die Bearbeitung der einzelnen Arbeitspakete diskutiert, abgestimmt und Bearbeitungsschritte und Termine für regelmäßige Projektgespräche vereinbart. Der für Verbundvorhaben obligatorisch notwendige Zusammenarbeitsvertrag wurde entworfen, abgestimmt und von beiden Partnern unterschrieben.

Mit der Literaturrecherche wurde begonnen; in den beiden Häusern verfügbare Quellen wurden ausgetauscht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im kommenden Berichtszeitraum wird der Schwerpunkt für DBE TECHNOLOGY GmbH auf den Arbeiten zur Analyse und Bewertung der Eckpunkte bei der "Tiefen Bohrlochlagerung" (AP2) liegen. Dazu gehören: Erkundungsverfahren bis 5000 m Tiefe, Bohrtechnik bis 5000 m Tiefe für die Einlagerungsbohrungen, Einbau dichter Verrohrungen mit größeren Durchmessern für Endlagergebäude, Einlagerung in einem Stützfluid, Verfüllen und Verschließen von Einlagerungsbohrlöchern, Rückbau von Verrohrungen für den Einbau der Verschlüsse, Rückholung und Bergung der Endlagergebäude, Einlagerungs- und Rückholungstechnik, Betriebssicherheit und Havariebewältigung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

2.2 Vorhaben Bereich 6

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6263
Vorhabensbezeichnung: Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden		
Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle Bereich 6: Kernmaterialüberwachung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 30.09.2017	Berichtszeitraum: 01.07.2016 bis 31.12.2016	
Gesamtkosten des Vorhabens: 950.632,00 EUR	Projektleiter: Dr. Niemeyer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Aufgabe des Vorhabens besteht darin, die Bundesregierung (vertreten durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie, BMWi) in Fragen der internationalen Kernmaterialüberwachung zu beraten und bei der Weiterentwicklung der Kontrollen zu unterstützen. Im Einzelnen zielte das Vorhaben ab auf Lösungsvorschläge zur weiteren Implementierung des Zusatzprotokolls, Einführung der sog. integrierten Sicherungsmaßnahmen (Integrated Safeguards), Weiterentwicklung des sog. Staatskontrollansatzes (State-level Approach), Entwicklung von anlagen- und brennstoffkreislaufspezifischen Kontrollmethoden sowie Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden unter dem Aspekt der Proliferationsresistenz. Die Arbeiten dienten der Bereitstellung von Arbeitspapieren, Techniken und Veröffentlichungen und der Entwicklung von Auswertemethoden mit dem Ziel der Übernahme der Ergebnisse durch BMWi, Euratom-Kontrollbehörde und Internationale Atomenergie-Organisation (IAEO).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Programmpunkte und Arbeitspakete sind:

- Weiterentwicklung von Safeguardstechnologien (Digitale Überwachungssysteme und Datenfernübertragung, analytische Messmethoden, Satellitenfernerkundung und Geoinformationstechnologien)
- Neuentwicklung von Safeguardstechnologien (Technologische Zukunftsforschung, Simultane Lokalisierung und Kartenerstellung, geophysikalische Messverfahren, Lasertechniken)
- Safeguards-by-Design
- Safeguards für Nuklearanlagen (Entsorgung abgebrannter Brennelemente, Zentrifugenanreicherungsanlagen)
- Weiterentwicklung des staatspezifischen Kontrollansatzes
- Kooperation mit der DGAP zur technisch-politischen Schnittstelle der internationalen Safeguards
- Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
- Entwicklung eines Qualitätsmanagements für das EURATOM-Safeguardssystem
- Weiterentwicklung von Safeguards-Überlegungen im Rahmen von „3S“ (Sicherheit, Sicherung, Safeguards)
- Mitarbeit in der European Safeguards R&D Association (ESARDA)
- Weitere Aktivitäten (INMM, SAGSI)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Weiterentwicklung von Safeguardstechnologien: *a) Einschluss und Überwachung:* Anforderungen in der Entsorgung von Brennelementen im Rahmen der integrierten Sicherungsmaßnahmen; *b) Datenfernübertragung (DFÜ):* Unterstützung bei der Vorbereitung und Durchführung eines DFÜ-Feldtests in Leistungsreaktoren; *c) Safeguardsanalytik:* Promotionsprojekt zur Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Qualifizierung Jülichs für das Netzwerk der IAEO-Analyselaboratorien (NWAL); *d) Satellitenfernerkundung:* Projekt zum Einsatz von Fernerkundung seitens der IAEO; *e) Geoinformationstechnologien:* Entwicklung einer Prozedur zur Erstellung GIS-fähiger Anlagenpläne; *f) Inspekti-*

onsplanung und -bewertung: Projekt zur Verbesserung der Kernmaterialüberwachung unter Einbezug neuer Methoden aus Statistik und Spieltheorie.

- Safeguards für Nuklearanlagen: *a) Geologische Endlagerung*: Grundlagenermittlung zur Fortschreibung der Safeguardskonzepte und Auswirkungen der Rückholungs- und Bergungsoption auf Safeguardsmaßnahmen in verschiedenen Wirtsgesteinen; Mitarbeit in der Expertengruppe ASTOR; Konzeptstudie 3S (Safety-Security-Safeguards) bezgl. Entsorgung; *b) Zusatzprotokoll und Implementierung von Integrated Safeguards (IS)*: Unterstützung und Beratung von Betreibern, Unterstützung des BMWi bei Anfragen von IAEO und Euratom, Erstellung der Deklaration für Deutschland nach dem Zusatzprotokoll; *c) IAEO-Inspektionsberichte*: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Unterstützung des staatspezifischen Kontrollkonzeptes (SLC): Akquisitionspfadanalyse (APA).
- Kooperation mit der DGAP: Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen a) Deutschlands Cybersicherheit im internationalen Kontext, b) Völkerrecht im ‚Cyberwar‘, c) Innovationen in der Mikrosensorik – Herausforderungen für die Exportkontrolle.
- Pflege des nationalen Safeguards-Internetportals „safeguards.de“.
- ESARDA: Vize-Präsidenschaft, Steering Committee, Executive Board, Mitarbeit in vier AGs, Vorbereitung des ESARDA Symposiums Jülich/Düsseldorf, 15.-18. Mai 2017.
- Weitere Aktivitäten: *a) SMÜ/AKÜ-Safeguardskreis und VGB-Arbeitskreis*: Mitarbeit; *b) INMM*: Mitarbeit International Safeguards Division; JNMM Associated Editors; *c) SAGSI*: Mitarbeit.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Einschluss und Überwachung: Anforderungen in der Entsorgung von Brennelementen.
- Datenfernübertragung: Unterstützung bei der Implementierung der DFÜ in Reaktoren.
- Safeguardsanalytik: Fortsetzung des Promotionsprojekts zur Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Fortsetzung der NWAL-Qualifizierung Jülichs.
- Satellitenfernerkundung: Machbarkeitsstudie bezgl. satellitengestützter Videodaten.
- Geoinformationstechnologien: Weiterentwicklung zur Erstellung GIS-fähiger Anlagenpläne.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Wissenschaftliche Beiträge, Training bei der IAEO.
- Novel Technologies: Fortsetzung der Studie zu Navigations- und Positionierungstechniken.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von SLC, APA, Safeguards-by-design (SBD) und 3S.
- Endlagerung: Fortsetzung der Grundlagenermittlung zur Fortschreibung der Safeguardskonzepte.
- Unterstützung des BMWi bei Umsetzung des Zusatzprotokolls und Bewertung von IS und SLC.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Kooperation mit der DGAP: Expertensitzungen.
- Safeguards-Webportal: Betreuung des Webportals „safeguards.de“.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA- bzw. INMM-Gremien und –Arbeitsgruppen, weitere Vorbereitung und Durchführung des ESARDA Symposiums Jülich/Düsseldorf, Mai 2017.
- Mitarbeit in den nationalen Gremien AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis, SAGSI-Mitarbeit.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Knott, A.: Production and Characterization of Monodisperse Uranium Particles for Nuclear Safeguards Applications. Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment 336 (Dissertation RWTH Aachen), 2016
- Middendorp, R., Dürr, M., Bosbach, D.: The Stability of Uranium Microspheres for Future Application as Reference Standard in Analytical Measurements. *Procedia chemistry* 21, 2016: 285-292
- Niemeyer, I., Deissmann, G., Bosbach, D.: Bridging nuclear safety, security and safeguards at geological disposal of high-level radioactive waste and spent nuclear fuel. *Proc. International Conference on the Safety of Radioactive Waste Management*, CN-242, Vienna, Austria, 2016
- Rutkowski, J., Cauty, M., Niemeyer, I., Stein, G., Rezniczek, A.: Acquisition Path Analysis: JCPOA Case Study. *Proc. INMM 57th Annual Meeting*, Atlanta, Georgia, USA, 2016

Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung

In den Halbjahresberichten werden in kurzgefasster Form die Ergebnisse der laufenden Forschungsvorhaben dargestellt. Vorhabenrelevante Publikationen werden, soweit es der Platz zulässt, zwar aufgelistet, es ist aber nicht immer möglich alle Veröffentlichungen (schriftlich oder mündlich) aufzunehmen. Ferner waren bisher Informationen zu Aus- und Weiterbildungsmaßnahmen nicht explizit aufgenommen worden.

Es wurde daher vereinbart, zukünftig die Gesamtzahl der Publikationen zu nennen und Informationen zu Ausbildungsaspekten zu geben. Zahlen wurden von den Vorhabennehmern zur Verfügung gestellt und das Jahr 2015 als Referenz ausgewählt.

Diese zusammenfassende Darstellung wird im jährlichen Rhythmus erfolgen, d. h. sie wird jeweils im zweiten Halbjahresbericht erscheinen. Damit soll - zusätzlich zur Kurzdarstellung der Vorhabenergebnisse - dokumentiert werden, dass und wie die Ergebnisse verbreitet, bekanntgemacht und publiziert werden.

Publikationen

Im Jahr 2016 wurden rund 42 Veröffentlichungen in begutachteten Journalen, in Form von Schlussberichten, Doktor-, Master-, Bachelor- und Studienarbeiten gemacht. Davon sind ca. 33 % Universitäten, ca. 38 % Einrichtungen der Helmholtz Gemeinschaft und ca. 29 % sonstigen Forschungseinrichtungen und Firmen zuzuordnen.

Im Jahr 2016 wurden auf Konferenzen, bei Workshops und sonstigen Veranstaltungen mehr als 90 Vorträge gehalten und Ergebnisse (Poster etc.) präsentiert. Davon entfielen ca. 21 % auf Universitäten, ca. 37 % auf Einrichtungen der Helmholtz-Gemeinschaft und ca. 42 % auf Forschungseinrichtungen und Firmen.

Aus- und Weiterbildung


Ein strategisches Forschungsziel der BMWi-Förderung ist die Bereitstellung von Expertise und Wissen, der wissenschaftlich-technischen Kompetenz und als wichtiges Element dabei die Unterstützung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses.


Die Aus- und Weiterbildung von Post-Docs, Doktoranden, Master- und Bachelorstudenten erfolgt nahezu ausschließlich durch Universitäten und Einrichtungen der Helmholtz Gemeinschaft. Gleichwohl erfolgt in einzelnen Fällen die Ausbildung von Studenten im Rahmen einer wissenschaftlichen Kooperation zwischen Universitäten und Firmen.

Im Jahr 2016 waren 67 Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden. (Universitäten 75 %, Einrichtungen der Helmholtz Gemeinschaft 25 %).


3 Verzeichnis der Forschungsstellen


Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		
02 E 11061C	Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)	📖 40
02 E 11395	Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA)	📖 100
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), 12200 Berlin		
1501509	Langzeitverhalten von Metall- und Elastomerdichtungen sowie Polyethylen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (LaMEP)	📖 18
DBE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		
02 E 11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	📖 38
02 E 11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	📖 56
02 E 11182B	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS	📖 60
02 E 11193B	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	📖 64
02 E 11263	Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)	📖 68
02 E 11294	Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA)	📖 72
02 E 11385	Entwicklung von Monitoring-Konzepten in Anlehnung an Sicherheits- und Nachweiskonzepte sowie Ableitung von Entscheidungsgrößen und Reaktionsoptionen (MONTANARA)	📖 98
02 E 11405A	Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt A	📖 102
02 E 11486B	Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt B	📖 150

02 E 11516 Entwicklung eines technischen Konzeptes für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle und ausgediente Brennelemente in Kristallingestein in Deutschland (KONEKD)  158


02 E 11526B Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in Tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt B  162

Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz


02 E 10810 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)  32

02 E 11446A Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A  128


Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald


02 E 11344C Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilproject C  90


Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich


02 W 6263 Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden  166

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln


02 E 10377 Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen  28


02 E 10740 Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager  30

02 E 10941 Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL  34

02 E 11061A Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)  36


02 E 11072A Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K_d-Konzeptes für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS  42

02 E 11102 Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern  48

02 E 11122 Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA  50

02 E 11132 Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA  52

02 E 11142 Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS  54

02 E 11182A Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS  58


- 02 E 11243** Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Re-kompaktionsverhalten der EDZ(LASA-EDZ) 66
- 02 E 11284** Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-Nahfeld (BIGBEN) 70
- 02 E 11304** Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri 74
- 02 E 11314** Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen (KORPHA) 76
- 02 E 11324** Entwicklung eines chemisch-hydraulischen Modells für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen (LAVA-2) 78
- 02 E 11334A** Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt A 80
- 02 E 11344A** Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt A 86
- 02 E 11365** Lösungsverhalten von Spalt- und Aktivierungsprodukten im Nahfeld eines Endlagers (LÖVE) 96
- 02 E 11405B** Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt B 104
- 02 E 11456B** Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- e^2), Teilprojekt B 140
- 02 E 11466** Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (Re-poTREND+) 142
- 02 E 11476A** Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt A 144
- 02 E 11486A** Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt A 148
- 02 E 11496A** Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt A 152

<p>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 400 (B6), 01328 Dresden</p>
--


- 02 E 11072B** Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K_d-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR 44
- 02 E 11334B** Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt B 82
- 02 E 11344B** Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt B 88


- 02 E 11415B Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zemental-
terationsphasen (GRaZ), Teilprojekt B  110

Hochschule Zittau/Görlitz, Theodor-Körner-Allee 16, 02763 Zittau


- 1501518B Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zu-
standsüberwachung von Transport und Lagerbehältern für abgebrann-
te Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle
bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Akustische Mess-
verfahren  24

IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig


- 02 E 11405C Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für
wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in
Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits-
und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt C  106

- 02 E 11446B Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgs-
mechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz
(WEIMOS), Teilprojekt B  130


Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz

- 02 E 11415A Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zemental-
terationsphasen (GRaZ), Teilprojekt A  108


**Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage
31, 60325 Frankfurt am Main**

- 02 E 11476B Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komple-
xen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt B  146


Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe

- 02 E 11355 Eine experimentelle Analyse der Verhandlungen um ein Endlager für
radioaktive Abfälle (Expander)  94


Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover


- 02 E 11446C Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgs-
mechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz
(WEIMOS), Teilprojekt C  132

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg

- 02 E 11415H Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zemental-
terationsphasen (GRaZ), Teilprojekt H  122

**Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie
(KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen**

- 02 E 11334C Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experi-
menteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger
salinärer Lösungen; Teilprojekt C  84

- 02 E 11415C Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zemental-
terationsphasen (GRaZ), Teilprojekt C  112

02 E 11456A Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- e^2), Teilprojekt A 📖 138

02 E 11496B Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt B 📖 154

Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg

02 E 11092 Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1 📖 46

02 E 11193A Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen 📖 62

02 E 11435 MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von $MgCl_2$ -Lösung (MgO-SEAL) 📖 126

02 E 11526A Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in Tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt A 📖 160

Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig

02 E 11446D Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D 📖 134

Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld

02 E 11425 Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Bautechnische Realisierung Technikumsprüfstand mit Durchführung und Auswertung erster Versuche (Salzschnittblöcke) 📖 124

02 E 11446E Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E 📖 136

02 E 11506 Vorprojekt – Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH^2M -Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluid-dynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim) 📖 156



Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden

02 E 11415G Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt G 📖 120

1501510 Struktur-Eigenschafts-Funktionsbeziehungen von Elastomerdichtungswerkstoffen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (StrukElast) 📖 20

1501518A Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Analysen zu strahlungsbasierten und thermographischen Messverfahren 📖 22

Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München

- 02 E 11344D Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt D  92
- 02 E 11415E Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt E  116

Universität des Saarlandes, Campus Saarbrücken, 66123 Saarbrücken

- 02 E 11415D Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt D  114

Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam

- 02 E 11415F Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt F  118