

KIT
Universität des Landes Baden-Württemberg
und
nationales Forschungszentrum
in der Helmholtz-Gemeinschaft

PTE Nr. 47

BMWf geförderte FuE zu
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Januar - 30. Juni 2014

Projektträger Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung
(PTKA-WTE)

August 2014

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:

- Endlagerung 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

Das KIT betreut seit 1991 im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) als Projektträger FuE-Vorhaben auf dem Gebiet „Entsorgung“. Die FuE-Schwerpunkte sind in den Förderkonzepten „Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“ und „Schwerpunkte zukünftiger FuE-Arbeiten bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle“ sowie deren Fortschreibungen aufgeführt. Seit dem Ende der BMBF-geförderten FuE zur untertägigen Entsorgung chemotoxischer Abfälle im Jahr 2011 ist die Betreuung der FuE zur Endlagerung radioaktiver Abfälle der Tätigkeitsschwerpunkt.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMWi im Rahmen des Förderkonzepts geförderten FuE-Vorhaben zu den aufgeführten Themenbereichen:

Endlagerung radioaktiver Abfälle

BMWi Referat II A5

- Endlagersystem
- Systemverhalten und Systembeschreibung
- Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung
- Kernmaterialüberwachung

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

Dem Bericht liegt folgendes Gliederungsprinzip zugrunde:

Im Teil 1 sind die FuE-Vorhaben dem jeweiligen Themenbereich zugeordnet.

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

- E ⇒ „Endlagerung radioaktiver Abfälle“
- W ⇒ „Kernmaterialüberwachung“

Im Teil 3 sind die FuE-Vorhaben den jeweiligen Forschungsstellen zugeordnet.

Inhaltsverzeichnis

1	Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen	1
1.1	<i>Endlagersystem</i>	<i>1</i>
1.2	<i>Systemverhalten und Systembeschreibung</i>	<i>3</i>
1.4	<i>Kernmaterialüberwachung.....</i>	<i>7</i>
2	Formalisierte Zwischenberichte	9
2.1	E-VORHABEN.....	9
2.2	W-VORHABEN.....	141
3	Verzeichnis der Forschungsstellen	145

1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

1.1 Endlagersystem

02 E 10689	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 18
02 E 10719	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 20
02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 22
02 E 10730	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	DBE Technology GmbH, Peine	📖 24
02 E 10740	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 26
02 E 10750	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 28
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen – Kurztitel: URSEL	DBE Technology GmbH, Peine	📖 30
02 E 10880	Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 52
02 E11061A	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 84
02 E11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 86
02 E11061C	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 88
02 E 11092	Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 102

02 E 11132	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 108
02 E 11142	Performance Assessment of Sealing Systems - Kurztitel: PASS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 110
02 E 11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 112
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	📖 118
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	📖 120
02 E 11223	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Vorprojekt zur Kalkulation und Qualifizierung der Forschungsarbeiten	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 128
02 E 11233	Status Quo der Lagerung C-14-haltiger Abfälle aus deutschen Hochtemperatur- und Forschungsreaktoren und Strategie (Lösungsansatz) zu deren künftigen Endlagerung (CarbonForeSt)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 130
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) mbH, Köln	📖 132
02 E 11253	Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung – Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 134
02 E 11263	Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 136

1.2 Systemverhalten und Systembeschreibung

02 E 9944	Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 10
02 E 10367	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 12
02 E 10377	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 14
02 E 10608	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 16
02 E 10770	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 32
02 E 10780	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	Forschungszentrum Jülich GmbH	📖 34
02 E 10790X	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 36
02 E 10800	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 38
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	📖 40
02 E 10820	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 42
02 E 10830	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 44

	lung von Steinsalz (TV2: IfG)		
02 E 10840	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 46
02 E 10850	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)	Leibniz Universität Hannover	📖 48
02 E 10860	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)	TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig	📖 50
02 E 10890	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 54
02 E 10900	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	DBE Technology GmbH, Peine	📖 56
02 E 10910	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 58
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) mbH, Köln	📖 60
02 E 10951	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 62
02 E 10961	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 64
02 E 10971	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 66
02 E 10981	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	📖 68
02 E 10991	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes	Universität des Saarlandes, Saarbrücken	📖 70

02 E 11001	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München	TU München	📖 72
02 E 11011	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam	Universität Potsdam	📖 74
02 E 11021	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden	TU Dresden	📖 76
02 E 11031	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg	Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg	📖 78
02 E 11041	Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten in Tongestein unter Endlagerbedingungen	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 80
02 E 11051	Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 82
02 E11062A	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 90
02 E11062B	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Friedrich-Schiller-Universität Jena	📖 92
02 E11062C	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Johann Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt am Main	📖 94
02 E11072A	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 96
02 E11072B	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	📖 98
02 E11082	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) Phase II – Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone im Korngrößenmaßstab und Überführung der Ergebnisse auf die Makroebene zur Simulation eines Injektionsvorganges	DBE Technology GmbH, Peine	📖 100
02 E11102	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 104

02 E11122	Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 106
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) mbH, Köln	📖 114
02 E11182B	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SAnToS	DBE Technology GmbH, Peine	📖 116
02 E11203A	Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 122
02 E11203B	Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen	📖 124
02 E11213	Qualifizierung der Rechenprogramme d^3f und r^3t , Kurztitel Quader	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 126
02 E 11273	Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 138

1.4 Kernmaterialüberwachung

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

**Forschungszentrum
Jülich GmbH**

 142

2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 E-Vorhaben

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 9944
Vorhabensbezeichnung: Goelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2004 bis 28.02.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 28.02.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 529.957,00 EUR	Projektleiter: Wieczorek	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des von SKB durchgeführten Projektes "Prototype-Repository" wird die Endlagerung bestrahlter Brennelemente in vertikalen Bohrlöchern im Hartgestein durch elektrische Erhitzer simuliert. Die Versuchsstrecke und die Resthohlräume in den Einlagerungsbohrlöchern im Granit sind mit Ton-Splitt-Lockermaterial bzw. mit hoch kompaktierten Bentonit-Formteilen verfüllt. GRS überwacht in diesem Projekt seit 2001 den räumlichen und zeitlichen Verlauf der Aufsättigung der Bentonitbarrieren mit Hilfe geoelektrischer Widerstandsmessungen. Aus der Verteilung des spezifischen elektrischen Widerstandes im Bereich verschiedener Elektrodenarrays wird die Wassergehaltsverteilung an Hand bereits durchgeführter Labormessungen ermittelt. Zur Absicherung der Ergebnisse und zur Erprobung neuer Auswerteverfahren soll ein Aufsättigungsversuch mit geoelektrischer Überwachung im Labormaßstab durchgeführt werden. Die experimentellen Messergebnisse stellen eine wichtige Datenbasis zur Überprüfung der numerischen Simulation des Aufsättigungsverhaltens von Tonbarrieren in Langzeitsicherheitsanalysen dar. Der Erfolg des Vorhabens wird durch die Qualität der bisher erzielten Ergebnisse abgesichert.

Im Rahmen der Aufwältigung der Sektion II des Prototype Repository unternimmt GRS Laboruntersuchungen zur Validierung der In-situ-Ergebnisse und inspiziert die Elektroden nach zehnjährigem Einsatz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: In-situ-Ermittlung der räumlichen und zeitlichen Wasserverteilung in Gebirge, Bohrloch-Buffer und Streckenversatz

AP2: Laborversuche zur Überprüfung der Korrelation inhomogener Wasserverteilungen in tonhaltigem Versatz mit gemessener Resistivitätsverteilung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die geoelektrischen Messungen, die seit der Aufwältigung von Sektion II nur noch im Streckenversatz in Sektion I betrieben wurden, wurden bereits 2013 beendet. Da ein Rücktransport der Messanlage Ende 2013 aus organisatorischen Gründen nicht möglich war, wurde das Projekt kostenneutral um zwei Monate verlängert und die Messanlage im Berichtszeitraum zurück geholt.

AP2: Der Beitrag für den Abschlussbericht zu den Prototype Repository Nachuntersuchungen wurde finalisiert. Ein Gesamtbericht zu den geoelektrischen Messungen und den diesbezüglichen Nachuntersuchungen im Äspö Prototype Repository wird Ende August vorgelegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung des Gesamtberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10367
Vorhabensbezeichnung: Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2007 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.224.600,00 EUR	Projektleiter: Reiche

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Inhalt des Vorhabens ist eine Umarbeitung und Anpassung des Programmpakets EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit von geologischen Endlagern für radioaktive Abfälle an moderne Softwareanforderungen. Dabei steht neben der Vereinheitlichung von verwandten Modulen und Versionen sowie der Einführung einheitlicher moderner Datenstrukturen insbesondere die Optimierung von Algorithmen und Ablaufstrukturen im Vordergrund. Moderne, anwendungsorientierte Benutzerschnittstellen werden realisiert. Die Ausgabemöglichkeiten werden erweitert und flexibilisiert. Bei der Umsetzung kommen moderne Programmiersprachen zum Einsatz.

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: Code-Analyse und Know-how-Transfer.

Alle Codeteile des Programmpakets werden sorgfältig erfasst, katalogisiert und analysiert. Tiefgehende Kenntnisse des Programmaufbaus werden von älteren auf jüngere Mitarbeiter transferiert.

AP2: Erarbeitung eines neuen Programmkonzepts.

In zwei Arbeitsschritten werden neue Konzepte für die Programmierung, für die Datenübergabe sowie für den Programmablauf entwickelt. Dafür werden moderne Strategien angewandt. Die Datenverwaltung wird über ein Datenbanksystem realisiert.

AP3: Codeumstellung und -entwicklung.

Das Arbeitspaket umfasst zwei Arbeitsschritte, von denen der erste die Umstellung aller vorhandenen Module auf eine moderne Programmiersprache unter Beachtung der Konzepte aus AP2 umfasst. Im zweiten Arbeitsschritt wird ein neuer Statistik-Rahmen für die Durchführung probabilistischer Analysen entwickelt.

AP4: Steuerung des Programmablaufs und Anbindung an externe Programme.

Die einzelnen unabhängigen Programmmodule werden in drei Arbeitsschritten miteinander sowie mit externen Programmen verknüpft. Im ersten Schritt werden die globale Programmablaufsteuerung und der Datentransfer zwischen den Modulen neu organisiert. Die weiteren Arbeitsschritte dienen dem Anschluss an externe Programme zur statistischen Analyse und zur grafischen Visualisierung von Ergebnissen.

AP5: Test und Dokumentation.

Im ersten Arbeitsschritt werden mehrere frühere Studien mit dem neuen Programmpaket detailliert nachgerechnet und mit den alten Ergebnissen verglichen. Der zweite Arbeitsschritt dient der ausführlichen Dokumentation der neuen Programme.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Arbeitspaket 1

Zum Erwerb des aktuellen Wissens auf den für die Entwicklung von *RepoTREND* relevanten Fachgebieten wurde an der internationalen Konferenz „Computational Methods in Water Resources“ vom 10. bis zum 13. Juni in Stuttgart teilgenommen.

Arbeitspaket 2

In Zusammenarbeit mit dem Projekt MOSEL wurden Anforderungen für ein neues Programm zur Stichprobenziehung und Auswertung von probabilistischen Rechenläufen erarbeitet. Dieses Programm wird im Rahmen eines Unterauftrags im Projekt MOSEL entwickelt, aufgrund der zahlreichen Schnittstellen zum Projekt AEMOS, insbesondere der erforderlichen Anbindung an *RepoTREND*, war hierfür auch ein Arbeitsaufwand im Projekt ADEMOS erforderlich. Dies betrifft insbesondere die technischen Spezifikationen des neuen Softwareprodukts.

Arbeitspaket 3

Entsprechend neuen Anforderungen wurden folgende Erweiterungen in *RepoTREND*-Modulen umgesetzt:

- In *COFRAME* werden Massenbilanzen sowohl für Kolloide als auch für Nuklide als Funktion der Zeit berechnet und in einem für das Postprocessing geeigneten Format ausgegeben.
- In *COFRAME* wurde eine zusätzliche Randbedingung umgesetzt: konstante Anteile von im Kluftwasser gelösten Nukliden an dem Einstromrand können vom Benutzer spezifiziert werden.
- Die Ausgabedateien von *BioTREND* wurden um zusätzliche Informationen/Angaben zu den berechneten Teilsommen erweitert.

Das Modul *RepoSTAR* zur Steuerung von statistischen Rechenläufen wurde aufgrund von geänderten Anforderungen neu konzipiert und umgeschrieben. Die geänderte Version ist jetzt in der Lage, mit folgenden Situationen korrekt umzugehen:

- mehrere Ausgabesegmente in LOPOS,
- verschiedene CLAYPOS-Ausgabedateien,
- mehrere GeoTREND-Module mit jeweils verschiedenen Ausgabedateien,
- mehrere BioTREND-Module.

Bei der Überarbeitung und Erweiterung von *RepoTREND*-Modulen wurden auch verschiedene Fehler beseitigt.

Arbeitspaket 5

In Zusammenarbeit mit dem Projekt Kolorado-e wurden umfangreiche Modellrechnungen von einigen in Grimsel durchgeführten Experimenten mit *COFRAME* durchgeführt. Die Ergebnisse wurden auf dem CFM-Projekttreffen im Mai 2014 präsentiert. *COFRAME* hat sich erfolgreich für diesen Aufgabenbereich qualifiziert.

Ein Artikel zu dem in *COFRAME* umgesetzten Modell des kolloidbeeinflussten Transports von Radionukliden in geklüftet-porösen Medien, inklusive Ergebnissen der Variationsrechnungen und Modellrechnungen für Experimente an GTS, wurde verfasst und bei der Fachzeitschrift „Contaminant Hydrology“ eingereicht. Eine ausführliche Dokumentation zu den Modulen *FRAME* und *COFRAME* in Form eines GRS-Berichts wurde erstellt (s. Abschnitt 5).

4. Geplante Weiterarbeiten

Eine ausführliche Dokumentation zum Modul *BioTREND* soll erstellt werden. Die im Fortrancode CLAYPOS im Jahr 2012 durchgeführten Anpassungen sollen dokumentiert werden.

Weitere Module – Nachfolger von CLAYPOS und TRAPIC – sollen an *RepoTREND* angebunden werden. Des Weiteren sollen die Analyse für das Nahfeldmodul *NaTREND* unter der Berücksichtigung des Zwei-Phasen-Flusses durchgeführt und das Konzept dafür entwickelt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Reiche, T., Noseck, U., Wolf, J. W.: Modellierung des Schadstofftransports in geklüftet-porösen Medien unter der Berücksichtigung von Kolloiden mit den Transportprogrammen *FRAME* und *COFRAME*, GRS-Bericht 333, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, 2014.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10377	
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen			
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 30.06.2015		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 4.172.565,00 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 neuen ANDRA-Forschungsprogramm für das Untertage-labor Bure (ULB) in den Jahren 2007 bis 2011 und am Mine-By-Experiment im Mont Terri Rock Laboratory (MTRL) 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 weiterer In-situ-Test hat die Untersuchung des Langzeitverformungsverhaltens des Opalinuston im MTRL zum Ziel.
- AP2: *Laboruntersuchungen* am Callovo-Oxfordian-Tonstein und Opalinuston zu Langzeitverformung, Quelldruck/Quellverformung, Schädigung und Verheilung sowie am Auffahrungsrückstand aus dem ULB als Versatzmaterial.
- AP3: *Modellierung* des Mine-By-Experiments, des Langzeitverformungsverhaltens eines Bohrlochs im MTRL und der THM-Laborversuche.
- AP4: *Modellentwicklung* für die Schädigung und Verheilung von Tonstein.
- AP5: *Ergebniszusammenführung und Berichterstattung*.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Laboruntersuchungen an Tonstein:

- Auswertung der Triaxialversuche zur Schädigung und Verheilung vom Tonstein
- Vergleichsversuche zur Quelldruckentwicklung von COX-Tonstein und sandigem OPA-Tonstein bei Luftbefeuchtung unter Axial-Begrenzung ohne Radialbeanspruchung
- Auswertung der Gasmigrationsversuche am vorgeschädigten und anschließend verheilten Tonstein mit Messungen von Gasdurchbruchdrücken bzw. Gaspermeabilitäten bei Manteldrücken von 2 bis 15 MPa

Laboruntersuchungen an tonhaltigen Verschlussbaumaterialien:

Folgende Vergleichsversuche an kompaktiertem Tonstein-Bentonit-Gemisch im COX/MX80 Verhältnis von 60/40 und Bentonit-Sand-Gemisch im MX80/Sand-Verhältnis von 70/30 wurden gestartet zur Bestimmung der geotechnischen Eigenschaften der beiden Gemische

- Wasseraufnahmefähigkeit bei unterschiedlichen Luftfeuchten
- Quellungsfähigkeit mit Wasserzunahme
- Wassersättigungsprozess beim drucklosen Kontakt mit Tonwasser
- Wasser- und Gaspermeabilität
- Technikum-Versuchs zur Simulierung des Bohrlochverschlusses, wobei die kompaktierten Blöcke in großen Oedometerzellen (D=100mm; H=100mm) eingebaut sind und die Dichtigkeit des Bohrlochverschlusses gegen Wassertransport bzw. Gasinjektion untersucht werden.

In-situ-Bohrlochverformung:

Tendenz (stationärer Verlauf) auch im 1. Halbjahr unverändert, minimaler Messbereich noch nicht erreicht. Im Nahbereich der Dilatometersonde noch kein stationäres Porendruckfeld gemessen.

Modellierung (DM-A-Exp.):

Erstellung eines 2D Modells (ebener Verzerrungszustand) im Bereich des Referenzschnittes mit Berücksichtigung der Einflüsse der Galerie 04 und Niche DR sowie hydraulischer Anisotropie. HM-gekoppelte Simulation des zeitlich versetzten Einbaus der Dilatometersonde und der Bohrlocherstellung (Piezometer) zur Ermittlung des Porenwasserdruckfeldes zum Vergleich mit Messbefunden. Variation von Randbedingungen zur Anpassung an Messbefunde. Gute Übereinstimmung bei 2 von 3 Messsensoren. Abweichung der Messbefunde (DM-B01) zu den Simulationswerten eventuell durch eine Vergrößerung des Messbereichs (mit Luftabschluss) und/oder eine mögliche Undichtigkeiten des Messintervalls erklärbar.

Modellentwicklung:

Ein Stoffansatz für Kriechen von Tonstein ist formuliert worden. Die Vorgehensweise der Modellimplementierung in CODE-BRIGHT wurde mit dem Code-Entwickler UPC/CIMNE im Rahmen des Konsortiums diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Laborversuche am Tonstein und Tonversatz
- Entwicklung eines Stoffansatzes für Schädigung – Kompaktion- Permeabilitätsänderung von Tonstein
- Implementierung und Validierung des Kriechansatzes (von UPC/CIMNE)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Eine Poster-Präsentation im Rahmen der PEBS-Konferenz bei der BGR am 6.-7. Feb. 2014: Investigations of Excavated Claystone as Backfill/Seal Material

Vortrag am ANDRA-Fachgespräch über Gastransport am 25. Feb. 2014: Gas Permeability Variations of COX-claystone with Damage and Reconsolidation

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10608
Vorhabensbezeichnung: Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2008 bis 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.584.830,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hagemann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

- Erstellung eines thermodynamischen Modells für Sulfidspezies
- Ermittlung thermodynamischer Daten für wichtige Hintergrundsalze
- Entwicklung einer Programmgruppe zur Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse für geochemische Modellierungen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Untersuchung der Löslichkeit und Bestimmung der Aktivitätskoeffizienten von H₂S und Hydrogensulfid in salinaren Lösungen bei 15 - 40 °C. Untersuchung der thermodynamischen Stabilität ausgewählter Schwermetallsulfide und –sulfidokomplexe.
- Kritische Literaturlauswertung zu kolligativen Eigenschaften von Hintergrundsalden (Nitrale und Perchlorate von Kalium, Natrium und Lithium) und ihrer Wechselwirkungen mit anorganischen Komplexbildnern Hydroxid, Chlorid und Carbonat bei 25 - 90 °C. Ergänzende Wasserdampfdruckmessungen sowie Löslichkeitsmessungen.
- Entwicklung von Werkzeugen zur Durchführung geochemischer Modellrechnungen und Unsicherheitsanalysen in einem Schritt durchzuführen. Hierzu werden drei Programm-Module entwickelt, die die Planung, Durchführung und Auswertung von statistisch begleiteten Rechnungen ermöglichen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In den letzten 6 Monaten wurden alle experimentell gewonnenen Daten zur Erstellung eines thermodynamischen Modells für die H_2S und HS^- Sulfidspezies systematisch aufgearbeitet. Die noch zur Auswertung der potentiometrischen Messdaten der HS^- -Versuche für NaCl 40 °C benötigte pH- Korrekturfunktion für hochsalinare Lösungen bei dieser Temperatur wurde im Labor zusätzlich experimentell bestimmt. Im Anschluss daran erfolgte die Auswertung der bereits vorliegenden potentiometrischen Messdaten für dieses System. Nach der Auswertung aller Versuchs-Systeme erfolgte die Ableitung der Wechselwirkungsparameter für H_2S und HS^- . Die Literaturstudie zum Thema Sulfidokomplexe wurde weiter verfolgt. Einen großen Anteil der Arbeit im 1. Halbjahr 2014 umfasste die Zusammenstellung aller Daten und die Erstellung des Endberichtes für dieses Arbeitspaket.

Im ersten Halbjahr 2014 wurden für die Hintergrundsalze LiClO_4 , NaClO_4 , KNO_3 und NaNO_3 polytherme thermodynamische Aktivitätsmodelle entwickelt. Für NaNO_3 konnte dabei auf ein bekanntes Modell zurückgegriffen werden, welches dem konventionellen Pitzer-Modell angepasst werden musste. Für die anderen Systeme wurden detaillierte Literaturstudien durchgeführt und die Ergebnisse, im Fall der Perchlorate zusammen mit den Ergebnissen eigener experimenteller Daten, ausgewertet. Für die Ableitung der ternären Wechselwirkungsparameter werden neben den binären Daten der Hintergrundsalze auch die binären Daten der zweiten Komponente benötigt. Hierfür wurden ebenfalls auf der Grundlage detaillierter Literaturauswertungen polytherme thermodynamische Aktivitätsmodelle für LiCl und LiOH entwickelt. Für ternäre Lösungen kann aufgrund eigener Messungen wie auch aufgrund von Literaturdaten in der Regel von einer idealen Mischung ausgegangen werden. Deshalb können künstlich erzeugte Aktivitätsdaten zur Modellentwicklung genutzt werden.

Im Berichtszeitraum wurden die Werkzeuge zur probabilistischen Modellierung geochemischer Prozesse fertig gestellt. Es ist nunmehr für Rechnungen mit Geochemist's Workbench wie auch mit PHREEQC möglich, ausgehend von einer einheitlichen Benutzeroberfläche, Rechnungen zu planen, Unsichere Faktoren auszuwählen und statistisch zu charakterisieren und zu variieren und dann eine Kolonne an geochemischen Rechnungen zu starten. Die statistische Auswertung der Ergebnisse erfolgt automatisch und beinhaltet eine Unsicherheitsanalyse mit prognostizierten Ergebnisbandbreiten sowie eine Sensitivitätsanalyse, in der die relative Bedeutung von Faktorunsicherheiten für die Ergebnisunsicherheit berechnet wird. Alle wesentlichen Randbedingungen und Ergebnisse der Rechenläufe werden ebenfalls automatisch in einem Report zusammengefasst.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10689	
Vorhabensbezeichnung: Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS			
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2009 bis 31.08.2014		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.003.689,00 EUR		Projektleiter: Wieczorek	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit Blick auf die Langzeitsicherheit eines Endlagers im Tonstein ist ein vertieftes Verständnis gekoppelter Prozesse im Nahfeld in der frühen Nachbetriebsphase notwendig, da das Verhalten der EBS in dieser Phase einen nicht zu vernachlässigenden Einfluss auf den späteren Zustand haben kann. Das EU-kofinanzierte Projekt PEBS der Partner BGR, NAGRA, SKB, GRS, ENRESA, AITEMIN, CIMNE, UDC, CIEMAT, ANDRA, UAM, DM Iberia, Solexperts, TK Consult, Clay Technology, BRIUG und JAEA ist der Verbesserung des Verständnisses der im Nahfeld ablaufenden THM-C-Prozesse und der Verringerung in der Unsicherheit ihrer Beschreibung gewidmet, um dadurch den Nachweis zu ermöglichen, dass die EBS ihre Sicherheitsfunktion erfüllt. Diese Ziele sollen seitens GRS durch Laboruntersuchungen insbesondere zum thermischen Verhalten von Puffermaterialien und Tongestein, durch In-situ-Messungen im Rahmen eines Validierungsexperimentes im Mont Terri URL, durch Modellrechnungen zur Vorhersage und Auswertung dieses Experimentes sowie zur Extrapolation auf lange Zeiträume und durch Mitarbeit bei der Analyse der gesamten Ergebnisse in Bezug auf die Sicherheitsfunktion der EBS unterstützt werden. Die Ergebnisse des Projekts haben direkten Einfluss auf die Endlagerkonzeption und -auslegung und ergänzen damit die Arbeiten des Projekts ERATO.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Laboruntersuchungen an Tonstein und Puffermaterial
- AP2: Erhitzerversuch in Mont Terri
- AP3: Prozessmodellierung
- AP4: Langzeitsicherheitsbetrachtung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Das Laborprogramm zur Bestimmung der thermischen Parameter von Bentonit-Pellets und granularer Sand-Bentonit-Mischung wurde abgeschlossen und im Deliverable D2.2-9 dokumentiert.
- AP2: Der Erhitzerversuch HE-E läuft seit 28.06.2011 weitgehend störungsfrei und die Messdaten werden laufend registriert.
- AP3: Für den Erhitzerversuch HE-E wurden zweidimensionale Interpretationsrechnungen (ebener Schnitt) durchgeführt, wobei u. a. der Einfluss der Anfangssättigung im Gebirge untersucht wurde. Das Temperaturfeld und die gemessene Luftfeuchteverteilung im Buffer wurden gut nachgebildet. Defizite bestehen bei der Prognose der Porendruckverteilung im Gebirge, für das mechanisch-hydraulische Verhalten des Tonsteins ist eine Weiterentwicklung der physikalischen Modelle notwendig (Ergebnisse veröffentlicht im PEBS Deliverable D2.2-11/D3.2-2).

Hinsichtlich der Langzeitextrapolation wurde ein dreidimensionales thermisch-hydraulisch gekoppeltes Modell eines Tonendlagers (NAGRA-Konzept) entwickelt und berechnet und mit entsprechenden Rechnungen von NAGRA und CIMNE verglichen. Die Ergebnisse werden im Deliverable D3.5-4 veröffentlicht. Dieses fasst die Modellierungsergebnisse aller Partner zur Langzeitextrapolation zusammen und wird von GRS koordiniert.

AP4: Der WP4-Abschlussbericht zur Analyse der experimentellen Arbeiten und der Prozessmodellierung hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Tonendlagers (PEBS Deliverable D4.1) wurde im Entwurf fertig gestellt. Dabei übernahm GRS die Koordination von Case 4 (Geochemische Prozesse).

Sonstiges:

Die PEBS-Ergebnisse wurden im Rahmen der PEBS-Abschlusskonferenz am 6. und 7. Februar 2014 bei BGR in Hannover vorgestellt. Gemeinsam mit NAGRA erstellt GRS zu dieser Konferenz ein zusammenfassendes Dokument.

Die Streckenlagerung von BE-Behältern in einem Tonendlager (wie im 1:2 Maßstab im HE-E betrachtet) wird als Alternative zum im Projekt AnSichT entwickelten Referenzkonzept Bohrlochlagerung betrachtet. NAGRA bereitet einen 1:1 Versuch (Mont Terri Experiment FE) zur Streckenlagerung vor, der von GRS durch Messungen im Nahbereich im Gebirge und durch Modellierung begleitet werden soll. Hierzu sind insgesamt neun Messbohrlöcher mit Minipiezometern und Temperatursensoren instrumentiert. Außerdem führt GRS als Partner in der FE-Modellierungsgruppe numerische Simulationen zum FE-Experiment durch.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des Erhitzerversuchs in Mont Terri
- Weiterführung der FE-Simulationen
- Fertigstellung des Berichts zu den Prozessmodellierungen zur Langzeitextrapolation (PEBS Deliverable D3.5-4)
- Abschluss des PEBS Deliverable D4.1
- Bericht zur PEBS-Abschlusskonferenz
- PEBS Abschlussbericht

5. Berichte, Veröffentlichungen

Gaus, I., L. Johnson, K. Wiczorek, A. Gens, J.-L. García-Siñeriz, T. Trick, R. Senger, U. Kuhlmann, A. Dueck, M.V. Villar, O. Leupin, O. Czaikowski, B. Garitte, K. Schuster, J.C. Mayor: EBS Performance at Temperatures above 100 °C - PEBS Case 2, International Conference on the Performance of Engineered Barriers – Physical and Chemical Properties, Behaviour & Evolution, February 6-7, 2014, BGR, Hannover, Germany.

Cuevas, J., J. Samper, M.J. Turrero, K. Wiczorek: Impact of the Geochemical Evolution of Bentonite Barriers on Repository Safety Functions - PEBS Case 4, International Conference on the Performance of Engineered Barriers – Physical and Chemical Properties, Behaviour & Evolution, February 6-7, 2014, BGR, Hannover, Germany.

Gaus, I., B. Garitte, R. Senger, A. Gens, R. Vasconcelos, J.-L. Garía-Sineríz, T. Trick, K. Wiczorek, O. Czaikowski, K. Schuster, J.C. Mayor, M. Velasco, U. Kuhlmann, M.V. Villar: The HE-E Experiment: Lay-out, Interpretation and THM Modelling, Combining D2.2-11 and D3.2-2 of the PEBS Project, May 2014.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10719
Vorhabensbezeichnung: Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2009 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.299.590,00 EUR	Projektleiter: Dr. Wolf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben knüpft unmittelbar an die Ergebnisse des FuE-Vorhabens ISIBEL an. Ziel ist die Vervollständigung des bereits verfügbaren Instrumentariums zur technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar.

Schwerpunkte bilden dabei die Entwicklung von alternativen Szenarien für den Sicherheitsnachweis, die Untersuchung der Anwendbarkeit von natürlichen Analoga, der Langzeitnachweis für Verschlussbauwerke, Untersuchungen von Instrumentarien auf Prozesslevel, die Analyse von Gasbildungs- und -transportprozessen sowie die konzeptionelle und numerische Umsetzung der Referenz- und Alternativszenarien in Modelle für den Langzeitsicherheitsnachweis. An Hand des internationalen Standes von Wissenschaft und Technik wird untersucht, wie die neu gewonnenen Erkenntnisse und die Ergebnisse von bereits abgeschlossenen FuE-Vorhaben zu einem Sicherheitsnachweis zusammengeführt werden können.

Die gemeinsame Bearbeitung durch DBE TEC, BGR und GRS gewährleistet eine vollständige und ausgewogene Betrachtung aller Instrumente, die in den verschiedenen Teilen einer Sicherheitsanalyse erforderlich sind. Für die Untersuchungen zum Langzeitnachweis für Verschlussbauwerke wird außerdem das Institut für Endlagerforschung der TU-Clausthal hinzugezogen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung von alternativen Szenarien (gestrichen, s. Halbjahresbericht 2011/1)
 - AP2: Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte
 - AP3: Untersuchungen von Instrumentarien für Prozessanalysen
 - AP4: Gasprozesse
 - AP5: Detaillierte Untersuchungen zum Referenzszenario und zu Alternativszenarien
 - AP6: Anwendbarkeit von Natürlichen Analoga
 - AP7: Abschlussbericht / Publikation der ISIBEL-Ergebnisse
 - AP8: Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung
 - AP9: Arbeiten zum FEP-Katalog
- GRS ist federführend für die Arbeitspakete 3, 4, 5 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Die Ergebnisse der hydrogeologischen Rechnungen zum Deckgebirge über dem Salzstock Gorleben haben Modifikationen am Programmcode d³f notwendig gemacht. Die erfolgten Änderungen wurden getestet.
- AP4: Der Abschlussbericht für das Arbeitspaket 4 wurde im Jahr 2013 veröffentlicht.
- AP5: Die Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums wurde fortgeführt. Das Referenzszenarium aus der VSG wurde im Programm RepoTREND umgesetzt. Die Ergebnisse wurden auf einem Arbeitstreffen am 12.06. den Projektpartnern DBE Technology und BGR vorgestellt und diskutiert.
- AP6: Die Endredaktion des Berichtes wurde auf die zweite Jahreshälfte 2014 verschoben.
- AP7: Der Abschlussbericht wurde im Jahr 2013 veröffentlicht.
- AP9: Das ursprünglich für die erste Jahreshälfte 2014 vorgesehene Treffen der NEA FEP Task Group, auf dem der Stand der Arbeiten zur FEP Datenbank vorgestellt werden soll, findet jetzt am 06. Oktober in Paris statt. Weitere Arbeiten in diesem AP sind von dem Treffen abhängig.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Der Bericht zu den geochemischen Rechnungen soll um eine Bewertung der vorhandenen Ergebnisse aus Sicht der Führung eines Langzeitsicherheitsnachweises im Rahmen einer Aufstockung des AP erweitert werden. Der Bericht zu den hydrogeologischen Rechnungen wird nach Abschluss der Tests von d³f im Laufe des Jahres 2014 fertiggestellt.
- AP4: Das Arbeitspaket ist mit der Veröffentlichung des Abschlussberichts abgeschlossen.
- AP5: Die Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums wird fortgeführt. Des Weiteren wird getestet, ob die für das Referenzszenarium entwickelte Methode zur Umsetzung von Szenarien in probabilistische Rechnungen auch für die Alternativszenarien eingesetzt werden kann.
- AP6: Im Jahr 2014 erfolgen die Endredaktion und die Veröffentlichung des Berichtes.
- AP7: Das Arbeitspaket ist mit der Veröffentlichung des Abschlussberichts abgeschlossen.
- AP9: Teilnahme der GRS am Treffen der NEA FEP Task Group am 06. Oktober in Paris. Im Nachgang dieses Treffens wird eine Vorgehensweise entwickelt, wie der FEP-Katalog aus ISIBEL und VSG in diese Datenbank eingespeist werden kann.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10729
Vorhabensbezeichnung: Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2009 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.283.972,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krone	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben knüpft unmittelbar an die Ergebnisse des FuE-Vorhabens ISIBEL an. Ziel ist die Vervollständigung des bereits verfügbaren Instrumentariums zur technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar.

Schwerpunkte bilden dabei die Entwicklung von alternativen Szenarien für den Sicherheitsnachweis, die Untersuchung der Anwendbarkeit von natürlichen Analoga, der Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlussbauwerke, Untersuchungen von Instrumentarien auf Prozesslevel, die Analyse von Gasbildungs- und -transportprozessen sowie die konzeptionelle und numerische Umsetzung der Referenz- und Alternativszenarien in Modelle für den Langzeitsicherheitsnachweis. An Hand des internationalen Standes von Wissenschaft und Technik wird untersucht, wie die neu gewonnenen Erkenntnisse und die Ergebnisse von bereits abgeschlossenen FuE-Vorhaben zu einem Sicherheitsnachweis zusammengeführt werden können.

Die gemeinsame Bearbeitung durch DBE TECHNOLOGY GmbH, BGR und GRS gewährleistet eine vollständige und ausgewogene Betrachtung aller Instrumente, die in den verschiedenen Teilen einer Sicherheitsanalyse erforderlich sind. Für die Untersuchungen zum Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlussbauwerke wird außerdem das Institut für Endlagerforschung der TU-Clausthal hinzugezogen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung von alternativen Szenarien
- AP2: Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte
- AP2A: Ergänzung des endzulagernden Inventars
- AP3: Untersuchungen von Instrumentarien für Prozessanalysen
- AP4: Gasprozesse
- AP5: Detaillierte Untersuchungen zum Referenzszenario und zu Alternativszenarien
- AP6: Anwendbarkeit von Natürlichen Analoga
- AP7: Abschlussbericht / Publikation der KOMTESSA-Ergebnisse
- AP8: Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung
- AP9: Arbeiten zum FEP-Katalog

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für die Arbeitspakete 2, 2A, 7 und 8 tätig und weiterhin am AP3 und AP9 beteiligt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlusskonzepte:
Der Abschlussbericht der TU Clausthal befindet sich z. Z. in der Endabstimmung.
- AP2A: Ergänzung des endzulagernden Inventars:
Der Bericht über das Abfallmengengerüst der nicht-wärmeentwickelnden, nicht Konradgängigen, radioaktiven Abfälle befindet sich z. Z. in der Endabstimmung.
- AP3: Thermomechanische Berechnungen:
Die Rechenergebnisse wurden im Abschlussbericht (s. u.) dokumentiert.
- AP7: Abschlussbericht:
Die Ergebnisse der Projekte ISIBEL/KOMTESSA wurden unter Berücksichtigung der Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben und einer Bestandsaufnahme zum Stand von Wissenschaft und Technik für die HAW-Endlagerung im Salz in einem englischen Sachstandsbericht zusammengefasst. Der Bericht wurde Anfang 2014 verteilt.
- AP8: Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung:
Die Arbeiten zur Entwicklung einer Methodik zur anforderungsorientierten Konzeption eines HAW-Endlagers und zur Konzeptoptimierung wurden planmäßig weitergeführt. Einerseits wurde dazu zunächst eine Zusammenstellung von Anforderungen für ein HAW-Endlager in Deutschland erarbeitet. Regulatorische Vorgaben (z. B. AtG, BMU 2010) wurden dahingehend überprüft, ob diese hinreichen, um daraus konkrete Konzeptvorgaben für das Endlager abzuleiten. Andererseits wurden die Vorgehensweisen bei den bisherigen Endlagerkonzeptplanungen für die „Aktualisierung Konzept Endlager Gorleben (1998)“ und die „Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben – VSG- (2013)“ analysiert. Es zeigt sich, dass die Planungen für das Streckenlagerungskonzept sehr ähnlich sind, obwohl es bei der „Aktualisierung des Konzeptes Endlager Gorleben“ noch kein ausgereiftes Sicherheits- und Nachweiskonzept gab.
- AP9: Arbeiten zum FEP-Katalog:
Mit BGR und GRS wurde das Vorgehen bzgl. der Übersetzung des VSG-FEP-Katalogs für die Übernahme in die NEA-FEP-Datenbank abgestimmt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2, 2A: Fertigstellung der Berichte.
- AP8: Die Entwicklung einer Vorgehensweise (Methodik) zur anforderungsorientierten Endlagerkonzeption und –optimierung wird fortgeführt.
- AP9: Vorbereitung des VSG-FEP-Katalogs für die Übernahme in die NEA-FEP-Datenbank.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Bollingerfehr, W., Buhmann, D., Filbert, W., Keller, S., Krone, J., Lommerzheim, A., Mönig, J., Mru-galla, S., Müller-Hoeppe, N., Weber, J.R. & Wolf, J. (2013): Status of the safety concept and safety demonstration for an HLW repository in salt. Summary report.- FKZ 02E10719 and 02E10729, Bericht-Nr. TEC-15-2013-AB, Peine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10730
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2010 bis 31.10.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 463.328,00 EUR	Projektleiter: Dr. Franz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben REPOPERM Phase 2 soll mit Hilfe eines gezielten Laborversuchsprogramms und aktuell zur Verfügung stehender Modelle und Codes der Wissensstand über das Stoffverhalten von Salzgrus im Bereich geringer Porositäten und Permeabilitäten verbessert werden. Auf dieser Grundlage soll die Signifikanz einzelner Prozesse im Hinblick auf den sicheren Einschluss der radioaktiven Abfälle im Wirtsgestein und damit der Langzeitsicherheit des Endlagers überprüft werden.

Da in den bisherigen Arbeiten zu diesem Thema überwiegend trockener Versatz betrachtet wurde und nur wenige Ergebnisse aus dem Bereich kleiner Porositäten (<10 %) vorliegen, soll im Rahmen dieses Vorhabens die Entwicklung der mechanischen und hydraulischen Parameter bei geringen Porositäten versuchsgestützt untersucht werden. Die Auswirkungen eines Lösungskontaktes auf die HM-Eigenschaften des Salzgrusversatzes sollen ebenfalls durch Laborversuche geklärt und die daraus resultierenden Konsequenzen für die Wirksamkeit der Salzgrusbarriere überprüft werden. Basierend auf den Laboruntersuchungen sollen die Berechnungsmodelle für die Kompaktion von Salzgrus verbessert werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Relevante Szenarien und Randbedingungen

AP2: Laborversuche

AP3: Stoffgesetze und Modellberechnungen

AP4: Auswertung und Berichtserstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3: Einsatz alternativer Berechnungscodes:

Ein Ziel war es, die Nutzung alternativer Berechnungscodes zur Modellierung von Prozessen der Salzgruskompaktion zu testen. Im Rahmen der Arbeiten kamen die beiden DEM-Codes PFC3D und 3DEC der Firma Itasca zum Einsatz.

In PFC3D und 3DEC wurden sogenannte Clusterpartikel erstellt. Aus diesen Gebilden wurden anschließend konvexe Hüllen gebildet, die in 3DEC als Volumenelemente/ Polyeder eingelesen werden können. Berechnungen zur Kompaktion dieser Polyeder zeigten jedoch sehr lange Rechenzeiten. Obwohl im Berichtszeitraum versucht wurde, die Rechenzeiten durch eine geometrische Optimierung zu erhöhen, liegen die Rechenzeiten mit 3DEC in für die Praxis untauglichen Größenordnungen. Aus diesem Grund wurde das Hauptaugenmerk bei den weiteren Berechnungen auf die Anwendung des Codes PFC3D gelegt.

Um auch hier eine Steigerung der Rechenzeiten zu erzielen, wurden die entsprechenden Berechnungsfiles aufgrund der Multithreadingfunktionalität (paralleles Ausführen verschiedener Berechnungsteile auf einem Prozessor) auf die neue PFC3D Programmversion 5.0 editiert. Des Weiteren wurden die Kalibrierungsarbeiten der PFC3D Clusterpartikel abgeschlossen. Allerdings sind bisher nur elasto-plastische Verformungsprozesse realisierbar, da geeignete viskose Stoffmodelle bisher für PFC3D-Cluster nicht zur Verfügung stehen. Für den anschließenden zu simulierenden Kompaktionsversuch lassen sich somit nur Verformungsprozesse wie Kornverschiebung und Kornzertrümmerung auflösen und somit Prozesse, die unter relativ geringen Einspannungen zu Restporositäten von knapp 10 % führen.

AP4: Berichterstellung:

Im Berichtszeitraum wurde damit begonnen, erste Teile des Abschlussberichtes im Entwurf zu erstellen. Die Berichtsteile umfassen die Untersuchungen, die an Dünnschliffen von kompaktierten Salzgrußproben durchgeführt wurden sowie die Computer-tomographischen und nano-tomographischen Untersuchungen an zwei speziell ausgewählten kompaktierten Proben unterschiedlicher Porosität.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im Zusammenhang mit der Partikelmodellierung soll überprüft werden, inwieweit ein Oedometerversuch in geeigneter Weise nachgebildet werden kann um eine Modellkalibrierung zu ermöglichen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keller, L., Jobmann, M., Schuetz, P., Gasser, P. (2013): On the potential of tomographic methods when applied to compacted crushed rock salt, Transport in Porous Media, accepted for publication.

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2010 bis 31.10.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.248.460,00 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

Im Berichtszeitraum fand ein Treffen der Projektpartner zur Steuerung des Gesamtprojekts und zu einzelnen APen statt sowie drei Treffen der Gruppe „Stoffmodelle“.

Beim Langzeitkompaktionsversuch wurde die trockene Probe mit gesättigter Salzlösung geflutet. Nachdem die Porosität im trockenen Zustand über 11 Monate nur um 0,4 % abgenom-

men hatte, ging die Porosität innerhalb von 6 Wochen von 13,5 % auf 3,4 % zurück. Die Kompaktionsbedingungen für die Proben mit 0,1 % und 1 % Anfangsfeuchtigkeit wurden nicht verändert. Sie erreichten eine Porosität von 9,7 % bzw. 0,5 %. Die Kompaktionsrate für die am weitesten fortgeschrittene Probe (1 % Anfangsfeuchte) liegt immer noch bei ca. 10^{-9} 1/s mit nur gering fallender Tendenz. Daher ist nicht auszuschließen, dass der abgeleitete Wert von 0,5 % nicht ganz der Realität entspricht. Genauen Aufschluss darüber kann erst die Nachuntersuchung erbringen.

Für den Pilotversuch zur Bestimmung der Zweiphasenflussparameter einer vorkompaktierten Salzgrusprobe wurde ein Vorversuch mit einer Probenpermeabilität von etwa $7 \cdot 10^{-15}$ m² durchgeführt. Die aus den Messungen abgeleitete Kapillardruckkurve weist im kritischen Bereich der geringen Änderungen mit der Sättigung eine für die Parameteranpassung hinreichende Menge an Datenpunkten auf. Auch eine charakteristische Kurve für die relative Permeabilität konnte aufgenommen werden. In der Versuchsführung wurden Schwachpunkte identifiziert, die für den Pilotversuch beseitigt werden. Ein auf den Erkenntnissen des Vorversuchs beruhendes Messprogramm für den Pilotversuch wurde erarbeitet.

Der triaxiale Kompaktionsversuch im Autoklaven mit vier unterschiedlich feuchten Proben (0 %, 0,3 %, 0,6 % und 2,0 %) wurde nach dem Jahreswechsel begonnen. Die anfängliche Last von 4 MPa wurde innerhalb des Berichtszeitraums auf 7 und schließlich auf 10 MPa angehoben. Nach etwa 100 Tagen ist anscheinend das Gummijacket um die vollständig trockene Probe durch die Kompaktion beschädigt worden, so dass für diese Probe keine weiteren Daten aufgenommen werden konnten. Durch eine verbesserte Temperatur- und Druckkorrektur konnte die Qualität der übrigen Messdaten verbessert werden. Es stellte sich eine erhebliche Porositätsabnahme bei der ersten Laststufe ein, wobei der Verlauf der Kompaktion bei 2 % Anfangsfeuchte deutlich von dem der drei anderen Proben abwich. Demgegenüber haben die weiteren Lasterhöhungen kaum spürbare Veränderungen gezeigt.

Der Vergleich der bei den Projektpartnern für die Modellierung der Kompaktion verwendeten Stoffmodelle ergab, dass die Modellansätze im Hinblick auf die Abbildung unterschiedlicher Randbedingungen bei Oedometerversuchen (weggeregelt oder spannungsgeregelt) Widersprüche aufweisen. Die Ursache für die sich aus den modelltheoretischen Beschreibungen der Vorgänge ergebenden Unterschiede ist noch unklar.

Das Modell einer unter dem Einfluss zutretender Lösung kompaktierenden Strecke wurde vorbereitet. Da die hierfür erforderlichen Eingabedaten noch nicht vollständig vorliegen (ungesättigte Strömung), soll das Modell die Einsatzfähigkeit der angewendeten Rechenwerkzeuge hinsichtlich der vollen Palette von THM-Effekten demonstrieren. Weitere unbekannte Größen wurden ggf. geschätzt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung des Langzeitkompaktionsversuchs in trockener Atmosphäre
- Wiederholung des triaxialen Autoklavversuchs
- Durchführung des Pilotversuchs zur Ermittlung von Zweiphasenflussparametern
- Diskussion der Widersprüche in den Modellansätzen
- THM-gekoppelte Modellierung

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10750
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen – Kurztitel: URSEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 552.070,00 EUR	Projektleiter: Dr. Flügge	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Aufbauend auf den Projekten ASTER und WIBASTA soll die deutsch-russische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Klärung methodischer Fragen der sicherheitlichen Bewertung aber auch der Standortcharakterisierung und -bewertung sowie der Konzeptoptimierung fortgesetzt werden.

Das Projekt orientiert sich an den von russischer Seite im Rahmen des föderalen Zielprogramms „Radiologische Sicherheit“ geplanten Arbeiten zur Erkundung des vorgesehenen Endlagerstandortes Jennissejskij für die erste Ausbaustufe eines Endlagers für gering wärmeentwickelnde langlebige Abfälle und eines Untertagelabors für die Endlagerung stark wärmeentwickelnder hochradioaktiver Abfälle an diesem Standort.

Zur sicherheitlichen Bewertung eines potenziellen HAW-Endlagers in Russland sollen daher die Arbeiten aus ASTER und WIBASTA für das Untersuchungsgebiet Jennissejskij fortgesetzt und aktualisiert werden.

Insgesamt wird das Vorhaben dazu beitragen, die Wissensbasis und das Beurteilungsvermögen zu HAW-Endlagerkonzepten in magmatischen Wirtsgesteinen weiterzuentwickeln, um für die drei grundsätzlich in Frage kommenden Wirtsgesteine über eine wissenschaftlich fundierte Entscheidungsbasis zu verfügen. Die gemeinsame Bearbeitung durch DBE TECHNOLOGY, BGR und GRS gewährleistet eine umfassende und ausgewogene Betrachtung, die in den verschiedenen Teilen einer Sicherheitsanalyse erforderlich sind.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Ausgangsdaten und Sicherheitsnachweiskonzept
- AP2: Begleitung und Optimierung der weiterführenden Erkundungsarbeiten
- AP3: Auswertung der neuen Erkundungsergebnisse
- AP4: Optimierung des Endlagerkonzeptes
- AP5: Präzisierung des sicherheitsanalytischen Modells und Bewertung möglicher radiologischer Konsequenzen
- AP6: Vorläufige Bewertung der Robustheit und Sicherheit des Endlagersystems
- AP7: Projektkoordination

Die GRS ist beteiligt an den Arbeitspaketen 2, 5 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Von den im Juni 2013 an die beteiligten deutschen Organisationen übergebenen Proben aus der Kernbohrung R12 wurden vier Proben zur Bestimmung der geomechanischen Eigenschaften ausgewählt. An diesen Proben wurden die triaxiale Festigkeit, die Dilatanz, das E-Modul und die Querdehnungszahl bestimmt. Weitere Untersuchungen umfassten die Bestimmung der Gesamtporosität und der Korndichte an Gesteinspulver der acht Bohrkerne und die Analyse der Gaspermeabilität an Kernscheiben. Die Bestimmung der Permeabilität für eine synthetische Lösung, deren chemische Zusammensetzung der des Grundwassers am Standort Jennisjkskij entspricht, wurde begonnen.

Die Berechnungen zur Radionuklidenausbreitung wurden dem neuen Einlagerungskonzept angepasst und mit den aktualisierten Daten erneut durchgeführt.

Für die aktualisierten Transportrechnungen wurden Sensitivitätsanalysen für das Nah- und Fernfeld durchgeführt. Die Parameter, die den größten Einfluss auf die Radionuklidenausbreitung haben, konnten identifiziert werden.

Die Beschreibung der sicherheitsanalytischen Rechnungen und der Grundwassermodellierung wurde weitergeführt. Ein Zwischenbericht wurde erstellt und ein erster Entwurf den russischen Partnern im Februar zur Verfügung gestellt. Auf einem Projekttreffen am 06.03.2014 wurden die Ergebnisse und Schlussfolgerungen mit den deutschen und russischen Kollegen aller beteiligten Organisationen diskutiert und der Zwischenbericht im Anschluss überarbeitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die von NO.RAO übergebenen Kernproben werden von GRS hinsichtlich der Permeabilität für die oben genannte synthetische Lösung analysiert.

Die sicherheitsanalytischen und hydrogeologischen Rechnungen werden laufend an die neuen Ergebnisse der Laboruntersuchungen von GRS und BGR angepasst. Auf der Basis der im zweiten Halbjahr 2014 durchzuführenden Transportrechnungen für einen inerten Tracer mit dem Transportcode r^3t sollen realistischere Transportrechnungen für dosisrelevante Radionuklide (z. B. Cs-135) auf Basis des in d^3f berechneten Strömungsfeldes durchgeführt werden.

Die Beschreibung der sicherheitsanalytischen Rechnungen und der Grundwassermodellierung wird weitergeführt. Auf einem Projekttreffen Ende Juli 2014 in Peine und einem geplanten weiteren Treffen im Herbst in Moskau werden die Ergebnisse und Schlussfolgerungen den deutschen und russischen Kollegen vorgestellt und gemeinsam diskutiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10760
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen – Kurztitel: URSEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.09.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 848.119,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krone	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zielsetzung dieses Vorhabens besteht darin, für ein HAW-Endlager in magmatischen Gesteinen (z. B. Granit) mit einer komplexen geologischen Struktur einen methodischen Ansatz für die sicherheitliche Bewertung, Optimierung sowie Beurteilung der Robustheit des Endlagersystems und der Sicherheitlichkeitaussage zu erarbeiten und beispielhaft zu erproben. Im Unterschied zu den Endlagerkonzepten im Ton und Salz kann bei der Endlagerung im Granit nicht von einem vollständigen Einschluss der Abfälle durch das Wirtsgestein ausgegangen werden. Mögliche Einschränkungen des Isolationspotenzials der geologischen Barriere werden maßgeblich durch die vorhandenen Kluftsysteme und ihre wahrscheinliche weitere Entwicklung bestimmt. Im Zusammenhang mit der eingeschränkten Kenntnis über die aktuell und zukünftig vorliegenden Kluftsysteme und die damit verbundenen Unsicherheiten wird die Frage geklärt, inwieweit die Sicherheit sich auf weitere Rückhaltefunktionen der geologischen Barriere stützen kann und was die zusätzlichen technischen Barrieren leisten müssen, damit der Nachweis der Einhaltung der Schutzziele mit einer hinreichenden Robustheit geführt werden kann.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Ausgangsdaten und Sicherheitsnachweiskonzept
- AP2: Begleitung und Optimierung der weiterführenden Erkundungsarbeiten
- AP3: Auswertung der neuen Erkundungsergebnisse
- AP4: Optimierung des Endlagerkonzeptes
- AP5: Präzisierung des sicherheitsanalytischen Modells und Bewertung möglicher radiologischer Konsequenzen
- AP6: Vorläufige Bewertung der Robustheit und Sicherheit des Endlagersystems sowie seine weitere Optimierung
- AP7: Projektkoordination

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen der Projektkoordination erfolgte die Vorbereitung und Durchführung eines weiteren deutsch-russischen Arbeitstreffens in Moskau am 06.03.2014. An diesem Treffen nahmen von russischer Seite neben VNIPI PT auch der Nationale Endlagerbetreiber NO.RAO. und das Geologische Institut Krasnojarsk teil. Auf dem Treffen wurde der Zwischenbericht, der seitens der deutschen Verbundpartner erstellt wurde, im Detail diskutiert.

Dieser Bericht stellt in ausführlicher Form folgende Inhalte dar:

- die geologische und hydrogeologische Situation am geplanten Standort in Krasnojarsk
- die tektonischen Strukturen und seismischen Aktivitäten
- die petrographischen sowie chemischen und physikalischen Gesteinseigenschaften
- charakteristische Daten des einzulagernden Abfallinventars
- das aktuelle Endlagerkonzept des russischen Partners
- bisherigen Untersuchungen der Verbundpartner zu dem Thema technische und geotechnische Barrieren
- Untersuchungen zur Grundwasserströmung und zur Migration von Radionukliden.

Im weiteren Umkreis verschiedener Endlagerstandorte kann das Auftreten von Erdbeben nicht ausgeschlossen werden. Eine offene Frage im Hinblick auf die Auflockerungszone um untertägige Strecken ist, inwieweit es durch das Auftreten von Erdbeben zu einer zusätzlichen Schädigung innerhalb einer Auflockerungszone kommt. Das entsprechende numerische Modell wurde erfolgreich getestet und es konnten erste Ergebnisse erzielt werden. Demnach ist eine zusätzliche Schädigung durch Erdbebeneinfluss zwar vorhanden, aber nur sehr begrenzt. Weitere Berechnungen sollen dieses Ergebnis verifizieren.

4. Geplante Weiterarbeiten

Überarbeitung des oben genannten Zwischenberichtes anhand des Gesprächsergebnisses im Moskau und aller eingegangenen Kommentare und Ergänzungen.

Weiterführung der Arbeiten zur Simulation einer durch Erdbeben induzierten Erschütterung des Gebirges im Bereich einer aufgefahrenen Strecke und Charakterisierung des Einflusses auf die Auflockerungszone.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M., Flügge, J., Hammer, J., Krone, J., Kühnlenz, T., Meleshyn, A., Wolf, J. (2014): Site-specific evaluation of safety issues for high-level waste disposal in crystalline rock, Technical Report, DBE TECHNOLOGY, BGR, GRS, Peine, Hannover, Braunschweig (1. Entwurfsfassung).

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10770
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 685.975,00 EUR	Projektleiter: Dr. Bischofer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das primäre Ziel von VESPA ist es, Konservativitäten in den Annahmen, die für die Radionuklide ^{14}C , ^{79}Se , ^{129}I und ^{99}Tc in Langzeitsicherheitsnachweisen z. Z. angenommen werden, abzubauen.

Ziel des GRS-Teilprojekts VESPA ist es, thermodynamische Daten für I, Se und Cs in hochsalinaren Lösungen des Systems Na, K, Mg, Ca – Cl, SO_4 – H_2O bei Temperaturen von 25 – 90 °C zu bestimmen.

Des Weiteren werden Löslichkeitskonstanten von LDH-Verbindungen (Layered Double Hydroxides) in endlagerrelevanten Lösungen bestimmt sowie der aktuelle Wissensstand zu Spalt- und Aktivierungsprodukten dargestellt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Literaturstudien

AP2: Bestimmung thermodynamischer Daten

AP3: Eingabe thermodynamischer Daten in die Referenzdatenbasis THEREDA

AP4: Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis

AP5: Zusammenfassender Bericht zum Wissensstand über die Rückhaltung Spalt- und Aktivierungsprodukte

AP6: Überprüfung der Anwendbarkeit eines Verfahrens zur Messung des Redoxpotentials bei hohen Ionenstärken

AP7: Koordination des Verbundvorhabens

AP8: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Im Berichtszeitraum wurde die isopiestic Untersuchung von Systemen mit Cs, Se und mit der Auswertung von sieben Töpfen bei 40, 60 und 90 °C abgeschlossen.

Hinzu kam die Analyse und Auswertung von Löslichkeitsversuchen in den Systemen $\text{CaSeO}_3\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ und $\text{CaSeO}_4\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ bei 25, 40 und 60 und 90 °C.

Diese Daten bildeten die Grundlage zur Erstellung eines polythermen Datensatzes für die genannten Elemente.

Zum Zweck der Weiterentwicklung einer Methode zur störungsfreien Messung des Redoxniveaus wurden die Löslichkeitsmessungen zu Kaliumhexacyanoferraten abgeschlossen und ausgewertet. Diese bildeten die Grundlage zur Auswertung von Redox titrationen in gemischten FeII-hexacyanoferrat/ FeIII-hexacyanoferrat-Lösungen, die variierende KCl-Konzentrationen aufwiesen. Die Auswertung ermöglichte die Entwicklung eines halbempirischen Modells zur Prognose des beobachteten Redoxpotentials. Es sind jedoch zusätzlich Anstrengungen nötig, um ein einheitliches Modell zu erstellen, das auch für die früher vorgenommenen Messungen in $\text{FeCl}_2/\text{FeCl}_3$ -Lösungen anwendbar ist.

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 8. Projekttreffens im Mai 2014 zum Verbundvorhaben VESPA.

4. Geplante Weiterarbeiten

Koordination des Verbundvorhabens:

Zusammenführung von Berichtsteilen der einzelnen Institutionen zum Abschlussbericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 E 10780
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 217.340,00 EUR	Projektleiter: Dr. Curtius	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Langlebige Spalt- und Aktivierungsprodukte ^{14}C , ^{36}Cl , ^{79}Se , ^{129}I , ^{135}Cs und ^{99}Tc besitzen eine hohe Mobilität, wenn sie in anionischer Form vorliegen. Ihr Beitrag zur Dosisbelastung in Langzeitsicherheitsberechnungen wird bislang überkonservativ abgeschätzt, da die Rückhalteprozesse im Nahfeldbereich in den Endlagerbarrieren ungenügend bekannt sind. Eine Korrektur dieser überkonservativen Abschätzung wird als Arbeitsziel angestrebt, indem experimentell die Rückhaltekapazitäten der in anionischer Form vorliegenden Radioisotope ^{75}Se , ^{129}I , ^{99}Tc an lamellaren Doppelhydroxid-Verbindungen (LDH), die als Endlagerbarriere vorhanden sind, ermittelt werden sollen.

Folgende Teilziele wurden definiert:

- Synthese und Identifizierung von Mischkristall-LDH-Verbindungen (partieller Austausch des zweiwertigen Magnesiums gegen zweiwertiges Cobalt, Eisen und Nickel).
- Zusammenfassung des aktuellen Wissensstandes zur Rückhaltung von Selenit, Iodid und Pertechnetat an LDH-Verbindungen und
- Untersuchungen zur Rückhaltung der anionischen Radionuklidspezies (Selenit, Iodid und Pertechnetat) an den synthetisierten Mischkristall-LDH-Verbindungen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Synthese und Charakterisierung von modifizierten LDHs.

AP2: Literaturstudie zur Rückhaltung anionischer Spezies an LDH-Verbindungen.

AP3: Rückhaltung anionischer Radionuklidspezies an den modifizierten LDHs

AP4: Ergebnisdokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP2: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP3: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP4: Arbeiten sind abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP2: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP3: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP4: Korrekturlesung und Korrekturbearbeitung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10790X
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2013 bis 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 76.356,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brendler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Primäres Ziel des Verbundprojektes VESPA mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, des Karlsruhe Institut für Technologie und des Forschungszentrums Jülich ist es, Konservativitäten in den Annahmen, die für die Radionuklide ^{14}C , ^{79}Se , ^{129}I und ^{99}Tc in Langzeitsicherheitsnachweise, z. Z. angenommen werden, abzubauen. Ziel des Teilvorhabens des HZDR ist die Identifikation von Rückhalteprozessen für das Spaltprodukt ^{79}Se . Dabei werden auch konkurrierende Reaktionen erfasst sowie der Einfluss des Redoxzustandes untersucht. Neben Batchversuchen sind spektroskopische Speziesnachweise ein wichtiger Bestandteil der Untersuchungen. Thermodynamische Daten werden ermittelt und im Fall hinreichender Qualifizierung in die Referenzdatenbasis THEREDA implementiert. Sorptionsparameter werden in die mineralspezifische Sorptionsdatenbank RES³T eingebunden. Die Untersuchungen konzentrieren sich auf die Randbedingungen in den Wirtsgesteinen Salz und Ton, der Temperaturbereich umfasst 25 °C bis 90 °C.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Sorptionsversuche

(Batchversuche von Se an Alumosilikaten und verschiedene Eisen-, Titan- und Aluminiumoxide bei höheren Temperaturen, Feststoffanalyse der Sorbentien, spektroskopische Untersuchung der Oberflächenspezies)

AP2: Komplexierung von Se bei höheren Temperaturen

(Mg, Ca, Fe Komplexierung von Se bei höheren Temperaturen)

AP3: Reduktion von Selen

(Synthese von Magnetite, Batch Versuche, spektroskopische Untersuchung der Oberflächenspezies)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Sorptionsversuche

- Die temperaturabhängige Sorption von Se(VI) und Se(IV) an α -Fe₂O₃, Anatas (TiO₂) und δ -Al₂O₃ zeigt eine Abnahme der Sorption bei höheren Temperaturen. Die Intensität der Abnahme ist auch von der Höhe der Ionenstärke und Art des Hintergrundelektrolyten abhängig.
- Um die Struktur der Oberflächenkomplexe von Se(IV) an TiO₂ zu erklären, wurden Proben mit EXAFS gemessen. Die Interpretation der Ergebnisse läuft zurzeit.
- SCM-Modellierung: die Bestimmung von Konstanten zur Oberflächenkomplexierung für die binären Systeme Se/(Fe,Al,Ti)_xO_y läuft zurzeit.
- Die Sorbentien wurden intensiv charakterisiert und auf ihre Stabilität an der Grenzfläche Mineral-Wasser untersucht. Die Alterungsuntersuchungen von δ -Al₂O₃ zeigten keine Phasenumwandlung des Oxids in Hydroxide, jedoch die Abhängigkeit der Auflösung des Minerals von pH-Wert und Ionenstärke.

AP3: Reduktion von Selen

- Die Phasenreinheit des synthetisierten Magnetits wurde mittels Mössbauer, XRD und XPS bestätigt. Die Versuche zu Temperatur- und Ionenstärkeeffekten auf die Se(VI) und Se(IV) Sorption laufen zurzeit.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Sorptionsversuche

- Abschluss der EXAFS-Auswertung und der Parametrierung zur Oberflächenkomplexierung.

AP3: Reduktion von Selen

- Abschluss der Sorptionsversuche von Se(IV/VI) an Magnetit.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jordan, N.; Domaschke, S.; Foerstendorf, H.; Scheinost, A. C.; Franzen, C.; Zimmermann, V.; Weiss, S.; Heim, K.: Uptake of selenium oxyanions by hematite. Goldschmidt 2014, 08.-13.06.2014, Sacramento, USA.

Jordan, N.; Ritter, A.; Scheinost, A. C.; Weiß, S.; Schild, D.; Hübner, R.: Selenium(IV) Uptake by Maghemite (γ -Fe₂O₃). Environmental Science & Technology 48(2014)3, 1665-1674.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10800
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 665.294,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Geckeis	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Qualität von Langzeitsicherheitsnachweisen für Endlager radioaktiver Abfälle hängt stark von dem wissenschaftlichen Verständnis der stattfindenden Prozesse, der Qualität verwendeter Datenbasen sowie von deren konzeptioneller und mathematischer Umsetzung in Modellen ab. Ein weitgehend standortunabhängiger Forschungsbedarf besteht für geochemische Daten und Werkzeuge bezüglich der mobilen Spalt- und Aktivierungsprodukte und deren Rückhalteprozesse in den Endlagerbarrieren, wie z. B. Thermodynamik und Sorption bei höheren Temperaturen und zu Rückhalteprozessen durch Mineralisation, d. h. durch den Einbau in neu gebildete Mineralphasen. Diese Daten wurden für deutsche Endlagerkonzepte bisher unzureichend ermittelt. Im Falle eines Vergleichs von Tonsteinstandorten haben diese Forschungsarbeiten eine entscheidende Bedeutung: Die Ergebnisse erlauben die Ableitung der Größe des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs. Die langlebigen Spalt-nuklide ^{79}Se und ^{99}Tc gelten in vielen Langzeitsicherheitsrechnungen zu Endlagern für radioaktive Abfälle als dosisbestimmend. Ein Grund für diese Einschätzung ist die Tatsache, dass beide Nuklide anionische Spezies bilden können, die nur geringe Sorption an Mineralphasen eingehen und bei denen die Löslichkeit relevanter Festphasen i. allg. sehr hoch liegt. Im Falle von ^{99}Tc gilt dies allerdings nur für oxidierende Bedingungen, unter denen sich TcO_4^- bildet. Die Arbeiten zur Ermittlung belastbarer Daten zur Redoxchemie des Tc sind daher geeignet, überkonservative Annahmen bzgl. der Tc-Mobilität zu vermeiden. Se bildet auch unter reduzierenden Bedingungen anionische Spezies wie Se^{2-} , Se_2^{2-} und SeO_3^{2-} , für die ähnliches gilt wie für TcO_4^- . Für alle anionischen Se-Spezies ist bekannt, dass sich feste Lösungen mit Mineralphasen wie Pyrit bzw. Calcit bilden können. Für die Radionuklidrückhaltung durch Bildung fester Lösungen existieren jedoch nur wenige belastbare Daten, die im Rahmen des Projekts erarbeitet werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP0: Dokumentation des State-of-the-Art
- AP1: Aquatische Chemie und Thermodynamik von Tc(IV)
- AP2: Reduktionschemie von Tc(VII) / Tc(IV) in verschiedenen Medien
- AP3: Einfluss der Reduktionskinetik auf die Tc-Migration in natürlichen Systemen
- AP4: Struktureller Einbau von Selen in Mineralphasen (Pyrit, Calcit)
- AP5: Dokumentation und Publikation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP0: Status: Die Literaturstudie zum State-of-the-Art im Rahmen von AP0 ist abgeschlossen, im Berichtszeitraum wurden keine weiteren Arbeiten hierzu durchgeführt.
- AP1: Status: Die Löslichkeitsexperimente mit Tc(IV)-oxyhydroxid Festphase in karbonatfreien NaCl , CaCl_2 und MgCl_2 Lösungen sind abgeschlossen. Die Arbeiten zur Ableitung eines thermodynamischen Modells wurden weitergeführt und abgeschlossen. Die Ableitung thermodynamischer Daten erfolgte sowohl nach dem SIT als auch dem Pitzer Ansatz. Nach Publikation des neu entwickelten thermodynamischen Mo-

dells zur Tc(IV) Hydrolyse und Löslichkeit in einer „peer-reviewed“ Fachzeitschrift werden die Daten entsprechend der dort definierten Kriterien in die thermodynamische Referenzdatenbasis THEREDA implementiert.

- AP2: Status: Die weiterführenden EXAFS Messungen zum Redoxverhalten von Tc(VII)/Tc(IV) bei Anwesenheit von Eisenphasen wurden erfolgreich durchgeführt, ausgewertet und interpretiert. Die EXAFS-Studien werden zeitnah im Rahmen der Dissertation von Frau Yalcintas in englischer Sprache publiziert.
- AP3: Status: Die Arbeiten zur Tc(VII) Reduktionskinetik in Abhängigkeit von der eingesetzten $^{99}\text{Tc(VII)}/^{95}\text{mTc(VII)}$ Konzentration in Gegenwart von anoxischem Probenmaterial (Granodiorite aus Äspö, Schweden) und anderen kristallinen Materialien (Nizhnekansk Granit Massiv, Russland) sind abgeschlossen. Säulenversuche an natürlichen Klüften aus dem Äspö Granodiorite mit Pulsinjektionen von HTO, ^{36}Cl und $^{95\text{m}}\text{Tc(VII)}$ wurden durch sogenannte „stop-flow“ Experimente erweitert, um Verweilzeiten vergleichbar zu den Kontaktzeiten der Batchexperimente zu realisieren und die Reduktionskinetiken vergleichen zu können. Diese Arbeiten wurden bei der Goldschmidt 2014 Konferenz in Sacramento (USA) vorgestellt. Sorptionsisothermen zur Tc(VII) Magnetit-Wechselwirkung in Abhängigkeit von der stöchiometrischen Zusammensetzung der Magnetitphase wurden mit einer neuen $^{95\text{m}}\text{Tc}$ Stammlösung fortgeführt.
- AP4: Status: Die Arbeiten über die Struktur der Selenit Einbauespezies in Calcit (P-GIXAFS) und entsprechende experimentell und theoretisch bestimmte thermodynamische Parameter zur Modellierung von Einbau und Adsorption sind veröffentlicht. Weitere Aragonit- Rekristallisationsexperimente zur Überprüfung/Verbesserung des in der Publikation vorgeschlagenen thermodynamischen Modells laufen. Erste Ergebnisse untermauern das bisherige Modell. Die Studien zur Wechselwirkung von Selenid mit Mackinawit sind abgeschlossen und ein Manuskript zu den spektroskopischen Daten (EXAFS/XANES) ist veröffentlicht.

Arbeiten im Rahmen des Aufstockungsantrags 2013:

Die Arbeiten zu Tc werden innerhalb AP1 und AP2 aufgeführt.

Die im Rahmen des Aufstockungsantrags aus 2013 geplanten Arbeiten für den Aufbau einer Anlage zur Analyse der ^{14}C Speziation innerhalb eines Handschuhkastens wurden abgeschlossen. Die Tests und Kalibrierungsarbeiten mit ^{14}C dotierten Referenzproben verliefen erfolgreich. Teilaspekte der geförderten Arbeiten wurden von Herrn Michel Herm auf dem CAST Projektmeeting in Paris (2.+3. Juli 2014) mit großem Erfolg vorgestellt.

Die geplanten Arbeiten zur Rückhaltung von ^{129}I an Sorelphasen im Salinar konnten im Bearbeitungszeitraum nicht fertig gestellt werden. Auf Grund der erforderlichen Voräquilibrierungszeiten konnten die synthetisierten Sorelphasen innerhalb der Projektlaufzeit nicht mehr mit ^{129}I kontaktiert werden. Die Arbeiten fokussieren somit auf die Anwendung und Bewertung verschiedener Methoden zur kontrollierten Synthese von monomineralischen Sorelphase- Proben. Die Experimente zur ^{129}I Rückhaltung an Sorelphasen sind perspektivisch ein Bestandteil des derzeit entwickelten „Nachfolgeantrags“ zum VESPA-Verbundprojekt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Mit diesem Berichtszeitraum sind die Arbeiten zum Verbundprojekt VESPA abgeschlossen. Der Abschlussbericht ist in Bearbeitung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Peer-reviewed eingereicht oder in Vorbereitung:

Manuskript von Yalcintas et al. zur Tc-Redoxchemie bei hoher Ionenstärke wurde bei Radiochimica Acta eingereicht und ist derzeit „under revision“ (AP2).

Heberling, et al. (2014) “A thermodynamic adsorption/entrapment model for selenium(IV) coprecipitation with calcite.” *Geochim. Cosmochim. Acta* 134, 16-38.

Totskiy et al. (2014): “Tc(VII) immobilization on granitic rocks from Äspö HRL (Sweden) and Nizhnekansky massif (Russia)” *Goldschmidt 2014, Book of Abstracts*, p. 2506.

Finck et al. „Selenide Retention by Mackinawite“, *Environ. Sci. Technol.*, 46 (2012) 10004-10011.

Die Arbeiten von Frau Yalcintas im Rahmen von AP1, AP2 und des Aufstockungsantrags werden innerhalb der Dissertation von Frau Yalcintas zusammengestellt und publiziert.

Die Arbeiten von Herrn Totskiy im Rahmen von AP3 werden innerhalb der Dissertation zusammengestellt und publiziert.

Ein Manuskript von Yalcintas et al. zum thermodynamischen Modell für Tc(IV) ist in Präparation (AP1).

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 30.09.2016		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
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.

In diesem 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 (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

Der Zuwendungsempfänger koordiniert das Vorhaben und betreut die Kooperation mit den Sandia National Laboratories. Er beteiligt sich an dem Stoffgesetzvergleich im Teilvorhaben 1 mit dem von ihm entwickelten Composite-Dilatanz-Modell (CDM) und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Itasca).

Im Berichtszeitraum wertete der Zuwendungsempfänger die Ergebnisse seiner Berechnungen zum Steinsalzverhalten in der Umgebung des Dammjochs in einer 700 m tiefen Strecke der Schachanlage Asse II aus und erstellte einen umfangreichen und detaillierten Vergleich der Ergebnisse der Projektpartner. Die Strecke war 1911 aufgeföhren und das 25 m lange Dammjoch 1914 eingebaut worden. Der Berechnungszeitraum betrug 88 Jahre ab der Aufföhren. Zum Vergleich wurden auch Simulationen der offenen Strecke ohne Dammjoch durchgeföhrt. Aus den Ergebnissen gezogene Schlussfolgerungen führten zu weiteren Simulationen mit veränderten Randbedingungen, die ebenfalls ausgewertet und verglichen wurden.

Außerdem wertete der Zuwendungsempfänger ältere Laborversuche von Sandia mit Steinsalz vom Typ clean salt aus der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico (USA) mit heutigen Verfahren nach dem aktuellen Stand der Wissenschaft neu aus. Ein Vergleich mit Ergebnissen von Laborversuchen des IfG und der TUC aus 2013 und 2014 mit neu erbohrtem clean salt aus der WIPP ergab eine gute Übereinstimmung. Im Vergleich mit Ergebnissen von Laborversuchen des IfG mit Asse-Speisesalz aus 2011 und 2012 zeigte sich eine etwas erhöhte stationäre Kriechrate (bis zu Faktor 2 bis 10). Durch umfangreiche Nachrechnungen der Versuche mit clean salt bestimmte er für sein CDM-Stoffgesetz einen salztypspezifischen Parameterkennwertsatz, mit dem Berechnungen von Untertagestrukturen in der WIPP erfolgen werden.

Gemeinsam mit den Partnern führte der Zuwendungsempfänger den 12. und 13. Projektworkshop am 16.-17.01.2014 in Karlsruhe und am 27.-29.05.2014 in Albuquerque, NM, USA durch.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird mit seinem Stoffgesetz CDM zahlreiche vor kurzem fertiggestellte Kriech- und Festigkeits-Laborversuche der TUC mit argillaceous salt aus der WIPP nachrechnen und dabei auch für diesen Salztyp einen einheitlichen salztypspezifischen Kennwertsatz bestimmen. Mit den ermittelten Kennwerten für clean salt und argillaceous salt wird er dann die geplanten Benchmark-Berechnungen des „Room D“ aus der WIPP durchföhren.

Arbeiten des Verbundes wird der Zuwendungsempfänger gemeinsam mit J.G. Argüello (Sandia), U. Düsterloh (TUC) und T. Popp (IfG) auf dem 5th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation am 08.-10.09.2014 in Santa Fe, New Mexico, USA präsentieren. Außerdem wird er mit den Partnern den 14. und 15. Projektworkshop am 21.-22.07.2014 und 29.-30.10.2014 in der TU Clausthal durchföhren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Literatur zum CDM-Stoffgesetz und zum aktuellen Verbundprojekt:

A. Hampel (2012): The CDM constitutive model for the mechanical behavior of rock salt: Recent developments and extensions. In: P. Bérest, M. Ghoreychi, F. Hady-Hassen & M. Tijani (Hrsg.): Proceedings of the 7th Conference on the Mechanical Behavior of Salt, Paris, 16.-19. April 2012. S. 45-55. CRC Press/Balkema, Leiden NL.

A. Hampel, J.G. Argüello, F.D. Hansen, R.M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, K.-H. Lux, K. Herchen, U. Düsterloh, A. Pudewills, S. Yildirim, K. Staudtmeister, R. Rokahr, D. Zapf, A. Gährken, C. Missal & J. Stahlmann (2013): Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project. In: Proceedings of the 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium, San Francisco, CA, USA, 23.-26. Juni 2013. American Rock Mechanics Association (ARMA).

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 10820
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 791.203,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

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.

In diesem BMWi-Verbundprojekt führt jeder Partner mit seinem Stoffmodell und Programmsystem Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einer realen Untertagestruktur im Steinsalz durch. Im Vordergrund stehen dabei nunmehr das thermo-mechanische Verhalten und die Schädigungsrückbildung (Verheilung) von Steinsalz. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffmodellfähigkeiten 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 führten die Projektpartner am 16./17. Januar 2014 in Karlsruhe (veranstaltet vom KIT) sowie am 28./29. Mai 2014 in Albuquerque (New Mexico, USA; veranstaltet von Sandia National Laboratories) jeweils einen Projekt-Workshop durch.

Auf dem Projekt-Workshop in Karlsruhe wurden von den Projektpartnern numerische Simulationsergebnisse dargestellt und diskutiert. Diesbezüglich präsentierte der Zuwendungsempfänger modifizierte numerische Simulationsergebnisse zur Untertagesituation „Dammjoch“. Im weiteren Projektverlauf wurden die Berechnungsergebnisse an zuvor zwischen den Projektpartnern abgestimmten einheitlichen Berechnungsmodellpunkten ausgewertet und dem Projektkoordinator für den Ergebnisvergleich übergeben. Der Ergebnisvergleich wurde auf dem Projektworkshop in Albuquerque vorgestellt und inhaltlich diskutiert. Darüber hinaus präsentierte der Zuwendungsempfänger auf diesem Workshop Laborergebnisse von durchgeführten Festigkeits- und Kriechversuchen an tonhaltigem Steinsalz der Lokation WIPP-Site (New Mexico / USA) sowie Berechnungsergebnisse von Re-Analysen von Kriechversuchen inklusive Parameteranpassung für das Stoffmodell Lux/Wolters für reines Steinsalz sowie tonhaltigem Steinsalz der WIPP-Site.

Die im letzten Berichtszeitraum aufgesetzten Wiederholungsversuche zum Verheilungsverhalten an Asse-Speisesalz mussten aufgrund von technischen Schwierigkeiten vorzeitig abgebrochen werden. Anschließend erfolgten weitere Testversuche und Modifikationen an der Anlagentechnik, die erfolgreich abgeschlossen werden konnten. Demzufolge können diese Versuche zu Beginn des 2. Halbjahres 2014 neu aufgesetzt werden.

Darüber hinaus wurden sowohl Festigkeitsversuche wie auch Kriechversuche mit tonhaltigem Steinsalz der Lokation WIPP-Site gemäß vorgesehenem Versuchsprogramm durchgeführt. Dabei konnte das geplante Versuchsprogramm bis auf wenige noch ausstehende Versuche abgeschlossen werden. Die Ergebnisse wurden vom Zuwendungsempfänger aufbereitet und den anderen Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird die Berechnungsergebnisse zur Situation „Dammjoch“ überarbeiten und dem Projektkoordinator für den Ergebnisvergleich zwischen den Projektpartnern übermitteln, so dass der Vergleich abschließend bewertet und auf dem US-German Workshop in Santa Fe (Anfang September 2014) vorgestellt werden kann. Des Weiteren sollen alle verfügbaren Laborversuche (Asse-Speisesalz sowie WIPP-Salz) abschließend nachgerechnet und ein einheitlicher lokationsbezogener Parametersatz für das Stoffmodell Lux/Wolters erarbeitet werden. Zusätzlich sind mit diesen einheitlichen lokationsbezogenen Parametersätzen erste numerische Berechnungen an einer Untertagestruktur im Endlager WIPP-Site (Room D) geplant. Daneben wird das vorgesehene laborative Versuchsprogramm fortgeführt und nach Möglichkeit zeitnah abgeschlossen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Der Zuwendungsempfänger wird die Laborergebnisse an Steinsalz der Lokation WIPP-Site auf dem US-German Workshop in Santa Fe sowie auf der SaltMech8 in Rapid City / USA im Mai 2015 vorstellen.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 10830
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 977.150,00 EUR		Projektleiter: Dr. Salzer

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" und "Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz" fort. Im März 2013 erfolgte eine Verlängerung für die WIPP-site-spezifischen Untersuchungen.

In diesem 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 (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 führten die Partner am 16./17. Januar in Karlsruhe und am 28./29. Mai in Albuquerque, jeweils einen Projekt-Workshop durch. Auf den Workshops wurden Berechnungsergebnisse zu den gemeinsam vereinbarten und von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen vorgestellt und besprochen. Außerdem wurden Labor- und In-situ-Daten sowie Modellansätze zum thermomechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz diskutiert und die Rahmenbedingungen für weitere Modellberechnungen gemeinsam festgelegt.

Das vorliegende Teilvorhaben 3 beteiligt sich mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley und dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach Günther/Salzer am Stoffgesetzvergleich. Dabei wird das Programm FLAC3D (Fa. Itasca) verwendet. Außerdem ist das IfG maßgeblich an der Planung und Durchführung der Laborversuche zur Ableitung der Stoffmodellparameter beteiligt und führt ergänzende Messungen am Dammjoch durch.

Das IfG hat den 12. Projekt-Workshop gemeinsam mit den Partnern am 16. und 17. Januar am KIT in Karlsruhe sowie den 13. Projekt-Workshop am 28. und 29. Mai bei Sandia National Laboratories in Albuquerque vorbereitet und durchgeführt. Auf den Workshops wurden die Ergebnisse der bisherigen Arbeiten sowie der Zusammenarbeit mit Sandia National Laboratories, insbesondere die Fortschritte bei der Realisierung des geplanten Laborprogramms an den von Sandia National Laboratories zur Verfügung gestellten Großlochbohrkernen aus der WIPP-site vorgestellt und diskutiert. Diese Laborversuche schaffen die Voraussetzung für die Durchführung der in der Verlängerungsphase geplanten Benchmark-Berechnungen für Room B und D in der WIPP-site mit und ohne Erhitzer.

Im Berichtszeitraum hat das IfG die geplanten triaxialen Druck- und Kriechversuche bei unterschiedlichen Manteldrücken und Temperaturen (triaxiale Druckversuche bei 25 °C, 60 °C und 100 °C; triaxiale Kriechversuche bei 25 °C, 60 °C und 80 °C) am sogenannten „clean salt“ der WIPP-site vollständig und die Prüfkörperherstellung fast abgeschlossen, wobei bis Ende Juni 58 große Prüfkörper und 4 komplette Großkerne aus dem sogenannten „argillaceous salt“ der WIPP-site der TU Clausthal übergeben worden sind. Die geplanten triaxialen Kriechversuche bei unterschiedlichen Manteldrücken und Temperaturen (25 °C, 60 °C und 80 °C) an „argillaceous salt“ wurden durch das IfG ebenfalls abgeschlossen.

Außerdem hat das IfG weitere Verbesserungen bei der Nachrechnung der Verformungs- und Verheilungsprozesse am Dammjoch erzielt und den einheitlichen Eingabe- und Ausgabefiles zum Dammjoch für alle Projektpartner nochmals verbessert und übergeben.

Auf der 48th ARMA vom 1.-4. Juni in Minneapolis, MN, USA, wurde vom IfG u. a. ein Vortrag zur Methodik der Laborversuche und zu Weiterentwicklungen des Günther/Salzer-Stoffmodells gehalten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2014 werden zusätzliche Untertagemessungen zur Bestimmung des Einspannungszustandes und der Dilatanz in der Umgebung des Dammjoches durchgeführt und die Prüfkörperherstellung abgeschlossen.

Außerdem sind weitere Verbesserungen bei der Nachrechnung der Laborversuche mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell sowie der Beginn der Nachrechnungen für die Erhitzerversuche im Room B sowie für die ungestörten Ergebnisse aus Room D geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zu den IfG-Stoffgesetzen:

GÜNTHER, R.-M., SALZER, K., POPP, T. & LÜDELING, C. (2014): Steady state-creep of rock salt - Improved Approaches for Lab Determination and Modeling to describe transient, stationary and accelerated creep, dilatancy and healing. Paper prepared for presentation at the 48th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium held in Minneapolis, MN, USA, 1-4 June 2014.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10840
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 302.359,00 EUR	Projektleiter: Pudewills	

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.

In diesem 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 (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

Die durchgeführten Arbeiten betrafen im Wesentlichen die folgenden Themen:

- Im ersten Halbjahr 2014 wurden Modellrechnungen zu ausgewählten Laborversuchen an WIPP-Salzproben durchgeführt und die Ergebnisse auf dem Workshop 13 in Albuquerque, Ende Mai dargestellt und mit den Verbundpartnern diskutiert. Da die Messergebnisse an „argillaceous salt“ und die Langzeitkriechversuche nur partiell fertig waren, konnte die Ermittlung oder Anpassung der Stoffparameter noch nicht durchgeführt werden.
- Nach der intensiven Besprechung über die Möglichkeiten einer gemeinsamen Darstellung der umfangreichen Rechenergebnisse zum Dammjoch während der 12. und 13. Workshops, wurden neuere Simulationsrechnungen für das „Dammjoch-Problem“ durchgeführt bei dem das verwendete Gitternetz an eine gemeinsame Geometrie der Streckenkontur angepasst wurde. Diese Anpassung soll einen besseren Vergleich der von Verbundpartnern erhaltenen Ergebnisse (Konvergenz-, Dehnung-, Dilatanz-, Verheilung- und Spannungsentwicklung) erlauben. Dadurch wurde eine neue Darstellung der Rechenergebnisse notwendig, die ebenfalls fertig gestellt und teilweise an den Koordinator für eine Gegenüberstellung aller Ergebnisse der Partner weitergeleitet wurden.
- Mit Hilfe der bereits vorhandenen Veröffentlichungen zum Stoffverhalten des Steinsalzes aus der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico wurde ein vorläufiges 2D-Modell für „Room D“ erstellt und die ersten Rechnungen durchgeführt. Ein Vergleich der Berechnungsergebnisse mit In-situ-Messdaten aus den Untertagestrukturen wurde ebenfalls beim gemeinsamen Workshop in Albuquerque bei SANDIA präsentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Halbjahr 2014 sollen zunächst weitere Modellrechnungen der neuen, vorhandenen Laborversuche durchgeführt werden. Weiterhin sollen die vorhandenen Stoffmodelle angepasst werden, um die geplanten Benchmarkrechnungen der Untertagestrukturen „Room D“ und „Room B“ im WIPP zu simulieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Pudewills, A. (2011): Numerische Simulation zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz, BMBF - Verbundprojekt 02C1597, Einzelbericht zum Teilprojekt 3, KIT Scientific Reports, KIT-SR 7579.

K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, T. Popp, M. Wiedemann, A. Hampel, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh: Joint projects on the comparison of constitutive models for the mechanical behavior of rock salt: I. Overview of the projects, reference mine for 3-D benchmark calculations, in-situ measurements and laboratory tests. In Proc. of the 7th Conf. on the Mechanical Behavior of Salt, Paris, France, 16-19 April 2012, P. Berest, M. Ghoreychi, F. Hadj-Hassen & M. Tijani, (eds), CRC Press, Taylor & Francis Group, London, UK.

Hampel, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh: Joint projects on the comparison of constitutive models for the mechanical behavior of rock salt: II. Overview of the models and results of 3D benchmark calculations. In Proc. of the 7th Conf. on the Mechanical Behavior of Salt, Paris, France, 16-19 April 2012, P. Berest, M. Ghoreychi, F. Hadj-Hassen & M. Tijani, (eds.), CRC Press, Taylor & Francis Group, London, UK.

Hampel, A., L. Argüello, F. Hansen, R.-M. Günther, K. Salzer, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh, A. Pudewills, S. Yildirim, R. Rokahr, A. Gährken, C. Missal, J. Stahlmann: Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project, 2013. In Proceedings of Proceedings of the 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium 23-26 June 2013, San Francisco, ISBN: 978-0-894844-0-4.

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 10850
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 391.592,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Rokahr

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.

In diesem 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 (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

Nach weiterer Optimierungen im Stoffgesetz Lubby-MDCF wurden die projektspezifischen Versuche zum ASSE Speisesalz ein weiteres Mal nachgerechnet und eine neue Parameterbestimmung durchgeführt. Mit den neuen Parametern wurde der IFC-Versuch nachgerechnet und weitere Berechnungen am Dammjoch-Modell durchgeführt. Kriechversuche zum „clean salt“, aus der WIPP-Site wurden nachgerechnet. Erste Berechnungen zu Room B aus der WIPP-Site wurden begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschließende Berechnungen zum Dammjoch-Modell sollen durchgeführt werden. Projektspezifische Kriechversuche zum „argillaceous salt“ aus der WIPP-Site sollen nachgerechnet werden. Das Berechnungsmodell zur WIPP-Site soll verfeinert und weitere Berechnungen durchgeführt und mit den Projektpartnern besprochen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Hauck, R. (2001): Tragverhalten tiefliegender Salzkavernen bei atmosphärischem Innendruck
 Hampel, A., O. Schulze, U. Heemann, F. Zetsche, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, Z. Hou, R. Wolters, U. Düsterloh, D. Zapf, R. Rokahr, A. Pudewills (2007): Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1004-1054), Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Projektträger PTKA-WTE.
 Schulze, O., U. Heemann, F. Zetsche, A. Hampel, A. Pudewills, R.-M. Günther, W. Minkley, K. Salzer, Z. Hou, R. Wolters, R. Rokahr & D. Zapf (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, I. Modeling of deformation processes and benchmark calculations.
 Hou, Z., R. Wolters, U. Düsterloh, R. Rokahr, D. Zapf, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, U. Heemann, O. Schulze, F. Zetsche & A. Hampel (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, II. Numerical modeling of two in situ case studies and comparison.
 Leuger, B., Staudtmeister, K., Yildirim, S., Zapf, D. (2010): Modeling of creep mechanism and damage of rock salt. Proceedings of the 7th european conference on numerical methods in geotechnical engineering, T. Benz, St. Nordal, London, UK, S. 89-94.
 Hampel, A., R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh (2010): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1577-1617), Karlsruher Institut für Technologie, Projektträger PTKA-WTE.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 10860
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2010 bis 31.03.2016		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 405.066,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Stahlmann

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.

In diesem 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 (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

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich an dem Stoffgesetzvergleich im Teilvorhaben 6 mit dem Stoffgesetz für Steinsalz IGB-TUBS (Döring) und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen zurzeit das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D in der Version 5.0 der Firma Itasca sowie das Finite-Elemente-Programm ANSYS in der Version 13.

Am 16. und 17. Januar fand der 12. Workshop zum Stoffgesetzvergleich in Karlsruhe statt. Dort wurden Berechnungsergebnisse der Versuche aus dem COSA II Report (IFC und HFCP) mit dem Programmsystem ANSYS vorgestellt.

Am 28. und 29. Mai fand der 13. Workshop auf Einladung der amerikanischen Partner vom Sandia National Laboratories erneut in Albuquerque, New Mexico, USA statt. Dort erfolgte ein Vergleich der drei Salztypen Asse Speisesalz, WIPP Clean Salt und WIPP Argillaceous Salt anhand der von den Projektpartnern IfG und TUC zur Verfügung gestellten Daten von Laborversuchen. Außerdem wurden mit FLAC3D erstellte Nachrechnungen der Laborversuche an WIPP Salt und dem Dammjoch vorgestellt. Im Stoffmodell wurden dafür Änderungen vorgenommen, die den Einfluss von Volumendehnung und Belastungsgeschwindigkeit qualitativ richtig abbilden können. Zum Zeitpunkt des Workshops konnte jedoch noch keine zufriedenstellende Güte erreicht werden.

Diese Problemstellung wurde nach dem Workshop in Albuquerque erneut aufgegriffen und ein Ansatz entwickelt, der den Einfluss der Oktaederspannungen und der Belastungsgeschwindigkeit besser darstellt.

Das bisher zur Bestimmung der Materialparameter verwendete Programm MS Excel 2010 wurde durch das Mathematikprogramm Matlab 2014a der Firma The Mathworks abgelöst. Hierzu wurde das Stoffmodell in Matlab-Skripte umgesetzt, womit eine größere Flexibilität für die Einbindung der Versuchsdaten und die Modellierung der Randbedingungen erreicht werden konnte.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die im Stoffmodell vorgenommenen Änderungen müssen weiter geprüft werden. Außerdem ist mit einer Vollendung des Laborprogrammes des Verbundprojektes zu rechnen. Dadurch werden neue Versuchsdaten zur Verfügung stehen, die eine Parameterbestimmung für die beiden Salztypen der WIPP ermöglichen werden.

Die Implementierung der Änderungen am Stoffmodell in ANSYS ist noch nicht fehlerfrei erfolgt, zusätzlich ist hier ein Wechsel von Version 13 auf Version 15 geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Stahlmann, J.; Missal, C. (2010): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz. Poster. 31. Baugrundtagung 3. bis 6. November 2010, München

Hampel, A.; Argüello, J.G.; Hansen, F.D.; Günther, R.M.; Salzer, K.; Minkley, W.; Lux, K.-H.; Herchen, K.; Düsterloh, U.; Pudewills, A.; Yildirim, S.; Staudtmeister, K.; Rokahr, R.; Zapf, D.; Gärken, A.; Missal, C.; Stahlmann, J. (2013): Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project. 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium, 23.-26.06.2013, San Francisco, CA, USA

Missal, C.; Döring, I.; Stahlmann, J. (2014): Comparison of Triaxial Strength Tests of Clean Halite and Argillaceous Halite from the WIPP. 48th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium, 01.-04.06.2014, Minneapolis, MN, USA

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10880
Vorhabensbezeichnung: Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2010 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 519.570,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Voigt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit diesem Forschungsvorhabens sollen die Wissenslücken im Bereich des MgO-Baustoffs als potentiell, langzeitstabiles Material zur Errichtung von geotechnischen Barrieren im Salinar geschlossen werden. Ein geschlossenes Gesamtbild zu den kausalen Zusammenhängen zwischen Bindemittelphasenbildung und mechanischen Eigenschaften soll erarbeitet werden. Dazu gehört die Klassifizierung von MgO-Typen für entsprechende Auswahlkriterien für den Einsatz je nach Anforderung an den Baustoff.

Es werden die temperaturabhängigen Phasengleichgewichte (=Bindemittelphase) im Grundsystem MgO-MgCl₂-H₂O von 25 °C bis 120 °C bestimmt. Damit soll die eindeutige Identifikation der beim Abbinden des Sorelsystems entstehenden Phasen im Zusammenhang mit den jeweiligen Bildungsbedingungen und den sich daraus entwickelnden mechanischen Eigenschaften möglich sein. Der Zusammenhang zwischen Phasenbildung, technologischer Verarbeitbarkeit, möglicher Entwicklung eines Expansionsdruckes und Endfestigkeit soll dabei sichtbar gemacht werden.

Über das Grundsystem hinaus werden für reale Baustoffsysteme die Untersuchungen auf das System MgO-CaCl₂/MgCl₂-H₂O und MgO-MgSO₄-H₂O erweitert. Für das System MgO-MgSO₄-H₂O sollen die temperaturabhängigen Phasengleichgewichte bestimmt werden, um in Kombination mit dem Grundsystem auf mögliche Mischphasen im Bindersystem unter Einfluss von Sulfat-haltigen Lösungen schließen zu können. Aus den gewonnen temperaturabhängigen Löslichkeitsdaten der genannten Systeme können Parameter abgeleitet werden, welche thermodynamische und geochemische Modellierungen der Wechselwirkungen mit den Komponenten des hexären Systems der ozeanischen Salze für übergreifende Anwendungen ermöglichen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Phasenbildung im Grundsystem MgO-MgCl₂-H₂O bei erhöhten Temperaturen (40 °C, 60 °C, 80 °C, 100 °C, 120 °C)
- AP2: Einfluss von Sulfat und Natriumchlorid auf die Sorelphasenbildung
- AP3: Schlussfolgerungen für die Rezepturentwicklung
- AP4: Expansionsdruck von Sorelphasen
- AP5: Vorschlag für In-situ-Versuch

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Berichtserfassung für AP1 und AP2.

Quantifizierung der Phasenbestandsentwicklung für die Abbindereaktionen der Sorelbaustoffrezepturen C3 (=R3a) und D4-Spritzbeton (=Spritzbetonrezeptur mit 5-1-8 Phase aus dem abgeschlossenen Vorhaben „CARLA“, GV2) in entsprechenden Temperatur-Zeit-Fenstern in Korrelation zum Druckverhalten (in 4 verschiedenen Abbindetemperaturprofilen für C3, ein Temperaturprofil für D4-Spritzbeton). Für eine Rezeptur, die auf die Bildung der 3-1-8 Phase stöchiometrisch eingestellt ist (C3), hängt die Primärphasenbildung (5-1-8 oder 9-1-4 oder 5-1-8+9-1-4 neben amorphen Phasenanteilen) maßgeblich von der beim Abbinden erreichten Maximaltemperatur und Dauer der Temperatureinwirkung ab. Die Sekundärkristallisation der 3-1-8 Phase setzt in Abhängigkeit von der Abkühlrate zu unterschiedlichen Zeiten und Temperaturen ein und ist mit einer Kristallisationsdruckentwicklung verbunden, wenn sich der Baustoff im eingespannten Zustand befindet. Ein von Beginn des Abbindens an entstehender amorpher Phasenanteil im Bereich von ca. 30 % des Bindemittelphasenanteils hat sich nach ca. 2 Jahren einhergehend mit der Kristallisation der 3-1-8 Phase auf 10-20 % reduziert.

Im Fall einer auf die Bildung der 5-1-8 Phase stöchiometrisch eingestellten Rezeptur, bildet sich diese Phase sofort ohne amorphe Anteile auf direktem Weg und ohne weitere Umwandlung.

Es laufen Messungen zum Druckverhalten und Phasenbestandsentwicklung beider Rezepturen (C3, D4) bei sekundärem Lösungszutritt. Dabei zeigt sich generell eine systematische Permeabilitätsverringering bei beiden Rezepturen. Nach Abschaltung des anstehenden Fluiddruckes können die Druckwerte direkt dem Kristallisationsdruck zugeordnet werden.

Es wurden die kalorimetrischen Daten für die C3-Rezeptur ausgewertet. Die adiabatische Temperaturerhöhung für den C3-Beton beträgt demnach 55K.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss aller noch laufenden Messungen zur Erfassung des Druckverhaltens bei sekundärem Lösungszutritt, Auswertung der Messergebnisse, Ausbau der Proben aus den Messzellen und Bestimmung des vorliegenden Phasenbestandes für beide Baustoffrezepturen (C3 und D4).

Generelle Berichtserfassung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10890
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.861.233,00 EUR	Projektleiter: Wieczorek

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen ein leistungsstarkes Instrument zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen bereitgestellt werden. Zu diesem Zweck bietet das Programmpaket innovative Werkzeuge zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager. Die Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und die darauf aufbauende Entwicklung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen ist ein weiteres wesentliches Ziel im Projekt VIRTUS. Das Projekt leistet somit einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen. Insgesamt sollen die Erkenntnisse bei der zeitnahen Entwicklung eines fundierten Sicherheitsnachweises nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation helfen.

Das Vorhaben wird als Gemeinschaftsprojekt von GRS (Projektleitung), BGR und DBE TEC durchgeführt, die Softwareentwicklung übernimmt IFF als Unterauftragnehmer der GRS.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der Softwareplattform für ein Virtuelles Untertagelabor/Endlagersystem im Steinsalz (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP2: Erstellung, Dokumentation und Pflege der VIRTUS-Datenbank(en) mit Auswertung der vorhandenen Primärliteratur und Erzeugung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für PLC-Simulationen (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP3: Service-orientierte Architektur (GRS (IFF) in Abstimmung mit BGR, DBETEC)
- AP4: Erarbeitung und Modifizierung des geologischen Standortmodells (BGR)
- AP5: Prototypische THMC-Modellierung ausgewählter Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung bzw. entsprechender HAW-Endlagerkonfigurationen (GRS, BGR, DBETEC)
- AP6: Abschlussbericht und VIRTUS-Präsentation in einer Fachveranstaltung (GRS (IFF), BGR, DBETEC)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Algorithmen zur Aufbereitung der geologischen Modelle und zum Verschneiden mit dem Grubengebäudemodell wurden weiter optimiert. Die Exportmöglichkeiten der geometrischen Modelle und die Importmöglichkeiten der Ergebnisdateien wurden weiterentwickelt und um zusätzliche Steuerungsmöglichkeiten erweitert. Bei der Visualisierung von Ergebnisdatensätzen wurde die Möglichkeit geschaffen, tensorielle Datensätze als Tripod in verschiedenen Schnittebenen visualisieren zu lassen. Der erste Ansatz eines „Hot Spot“ Konzepts zum schnellen und übersichtlichen Zugriff auf die in VIRTUS verfügbaren Informationen wurde implementiert.
- AP2: Das XML-basierte Datenbanksystem wurde in VIRTUS integriert. Die Literaturlauswertung für Salzgesteine und technische Materialien inklusive Salzgrus wurde bis auf den Themenbereich mechanische Parameter abgeschlossen; hier sind noch Arbeiten erforderlich. Das Datenbanksystem muss noch geprüft und mit den ermittelten Daten versehen werden.
- AP3: Die VIRTUS Plattform wurde bereits in der vorangehenden Berichtsphase in Form einer service-orientierten Architektur umgesetzt. Die Komponenten befinden sich noch in der Testphase.
- AP5: Zur Demonstration der VIRTUS-Funktionen zur Visualisierung von Simulationsergebnissen werden zurzeit drei prototypische Experimente modelliert. Jeder der Projektpartner übernimmt dabei die Modellierung eines Experiments. GRS übernimmt dabei die gekoppelte thermisch-mechanische Simulation einer aufgeheizten Strecke, die sich einem Kaliflöz und Anhydritblöcken annähert. Diese Berechnung untersucht die mechanische Reaktion des Gebirges auf die Aufheizung, mit gekoppelten Effekten wie thermisch-induzierten Spannungen und Beschleunigung des Kriechens durch erhöhte Temperatur.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterentwicklung des Hot Spot Konzepts
- Prüfung der THM-Datenbank und Auffüllen mit Daten
- Abschluss der Simulation der definierten Experimente
- Visualisierung der Modellierungsergebnisse
- Fertigstellung der Servicearchitektur
- VIRTUS Präsentation und Abschlussbericht

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., S. Masik, J. Behlau, C. Mueller: Virtual Underground Laboratory for Rock Salt – VIRTUS, WM2014 Conference, March 2 – 6, 2014, Phoenix, Arizona, USA.

Wieczorek, K., S. Masik, J. Behlau, C. Müller: VIRTUS – Virtuelles Untertagelabor im Salz, 11. Fachtagung „Digital Engineering zum Planen, Testen und Betreiben technischer Systeme“, 17. IFF-Wissenschaftstage, Magdeburg, 24. – 26. Juni 2014.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10900
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 243.324,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll ein leistungsstarkes Instrument zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager sowie zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen bereit gestellt werden.

Mit der Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und der Ableitung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen leistet das Projekt auch einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen und trägt damit insgesamt zur zeitnahen Entwicklung eines fundierten Safety Case nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation bei.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der Softwareplattform für ein Virtuelles Untertagelabor/Endlagersystem im Steinsalz (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP2: Erstellung, Dokumentation und Pflege der VIRTUS-Datenbank(en) mit Auswertung der vorhandenen Primärliteratur und Erzeugung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für PLC-Simulationen (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP3: Service-orientierte Architektur (GRS (IFF) in Abstimmung mit BGR, DBETEC)
- AP4: Erarbeitung und Modifizierung des geologischen Standortmodells (BGR)
- AP5: Prototypische THMC-Modellierung ausgewählter Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung bzw. entsprechender HAW-Endlagerkonfigurationen (GRS, BGR, DBETEC)
- AP6: Abschlussbericht und VIRTUS-Präsentation in einer Fachveranstaltung (GRS (IFF), BGR, DBETEC)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1.4: Im Berichtszeitraum stand weiterhin die Überprüfung und Bewertung der verschiedenen VIRTUS-Funktionalitäten auf die für ihren Einsatz definierten Anforderungen im Vordergrund. Die gewonnenen Erkenntnisse dienen der Behebung von Fehlern und der Optimierung von Workflowprozessen. Die Schwerpunkte lagen im Bereich der Modellerstellung, insbesondere bei der Kombination von Geologie und Grubengebäude, sowie der Exportmöglichkeiten der geometrischen Modelle. Die entsprechenden Pipelines wurden weiterentwickelt und um zusätzliche Steuerungsmöglichkeiten erweitert. Des Weiteren wurden Optimierungen bei der Visualisierung von Ergebnisdatensätzen vorgenommen. Ein weiterer wichtiger Punkt betraf die Implementierung des sog. Hotspot-Konzeptes, mit denen ein intuitiver Zugriff auf modellgebundene Informationen, wie z. B. digitale Medien, ermöglicht werden soll.
- AP2: Das AP sieht die Erstellung einer VIRTUS-Datenbank vor, die Informationen über wichtige Modellierungsparameter enthält und somit als Datenbasis für PLC-Simulationen dienen soll. Das xml-basierte Datenbanksystem wurde in VIRTUS integriert. Die Literaturlauswertung für Salzgesteine und technische Materialien wurde bis auf den Themenbereich „Mechanische Parameter“ abgeschlossen.
- AP5: Im Berichtszeitraum wurde weiterhin an der Umsetzung prototypischer Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung gearbeitet, um den Funktionsumfang von VIRTUS in einem Workflow zu demonstrieren. Jeder der Projektpartner übernimmt dabei die Modellierung eines Experiments. Die DBE TECHNOLOGY GmbH führt thermische Berechnungen eines Feldes von Einlagerungsbohrlöchern zur Illustration der Wärmeausbreitung durch. Die Berechnungen an einem vereinfachten Modell mit einem Einlagerungsbohrloch wurden abgeschlossen und die Ergebnisse dieser Berechnung erfolgreich in VIRTUS importiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführende Überprüfung der verschiedenen VIRTUS-Softwareversionen zur Sicherung der Qualität und Konsistenz geometrischer Modelle.
- Prüfung des Datenbanksystems und anschließende Dateneingabe.
- Durchführung eines erweiterten Experiments mit Erhöhung des Komplexitätsgrades (realistischer Streckenquerschnitt und Erhöhung der Anzahl von Einlagerungsbohrlöchern) sowie eine abgestimmte Visualisierung der Ergebnisse.
- Weiterentwicklung des Hotspot Konzeptes.
- Abschließende VIRTUS Präsentation sowie Anfertigung eines Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K, Masik, S., Behlau, J., Müller, C.: Virtual Underground Laboratory for Rock Salt – VIRTUS, WM2014 Conference, March 2.-6.2014, Phoenix, Arizona, USA.

Wieczorek, K, Masik, S., Behlau, J., Müller, C.: VIRTUS – Virtuelles Untertagelabor im Salz, 11. Fachtagung „Digital Engineering zum Planen, Testen und Betreiben technischer Systeme“, 17. IFF-Wissenschaftstage, Magdeburg, 24. – 26. Juni 2014.

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 10910
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 372.697,00 EUR	Projektleiter: Behlau	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen ein leistungsstarkes Instrument zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen bereitgestellt werden. Zu diesem Zweck bietet das Programmpaket innovative Werkzeuge zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager. Die Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und die darauf aufbauende Entwicklung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen ist ein weiteres wesentliches Ziel im Projekt VIRTUS. Das Projekt leistet somit einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen. Insgesamt sollen die Erkenntnisse bei der zeitnahen Entwicklung eines fundierten Sicherheitsnachweises nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation helfen.

Das Vorhaben wird als Gemeinschaftsprojekt von GRS (Projektleitung), BGR und DBE TEC durchgeführt, die Softwareentwicklung übernimmt IFF als Unterauftragnehmer der GRS.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung der Softwareplattform für ein Virtuelles Untertagelabor/Endlagersystem im Steinsalz (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP2: Erstellung, Dokumentation und Pflege der VIRTUS-Datenbank(en) mit Auswertung der vorhandenen Primärliteratur und Erzeugung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für PLC-Simulationen (GRS (IFF), BGR, DBETEC)
- AP3: Service-orientierte Architektur (GRS (IFF) in Abstimmung mit BGR, DBETEC)
- AP4: Erarbeitung und Modifizierung des geologischen Standortmodells (BGR)
- AP5: Prototypische THMC-Modellierung ausgewählter Experimente zur Strecken- und Bohrlochlagerung bzw. entsprechender HAW-Endlagerkonfigurationen (GRS, BGR, DBETEC)
- AP6: Abschlussbericht und VIRTUS-Präsentation in einer Fachveranstaltung (GRS (IFF), BGR, DBETEC)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Arbeiten zur Umsetzung der VIRTUS-Schnittstelle (XML) sind weitgehend abgeschlossen. Letzte Testungen dauern noch an.
Das gemeinsam erarbeitete Hot-Spot-Konzept wurde von IFF softwaretechnisch umgesetzt.
- AP2: Die Arbeiten an der Datenbank sind für eine exemplarische Version abgeschlossen. Für den gekoppelten Betrieb an der VIRTUS-Software läuft die Compilierung der Datenbank.
- AP4: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP5: Die Arbeiten zur prototypischen Modellierung des BGR-Experiments „Streckenkonvergenz mit detaillierter Geologie“ unter Einhaltung des VIRTUS-Workflows laufen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Test und Korrektur von VIRTUS-Funktionen
- Implementierung von Hot-Spots in das bestehende geologische Modell
- Integration der THM & Literaturdatenbank in der VIRTUS-Software
- Abschluss der prototypischen Modellierungen
- Erstellung einer Rückschreibemöglichkeit der Ergebnis- und Attributdaten nach openGEO
- Einrichtung eines web-basierten Systemzugangs

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., S. Masik, J. Behlau, M. Jobmann: VIRTUS - Virtuelles Untertagelabor im Salz, 11. Fachtagung „Digital Engineering zum Planen, Testen und Betreiben technischer Systeme“, 17. IFF-Wissenschaftstage, Magdeburg, 24.-26. Juni 2014

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2011 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 852.100,00 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 Arbeitspakete 1 und 3 werden diejenigen Methoden identifiziert und ggf. weiterentwickelt, die für die Anwendung bei der Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern besonders geeignet erscheinen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden die vorgesehenen inhaltlichen Arbeiten zu allen Arbeitspaketen weitgehend zu Ende gebracht. Der Schwerpunkt lag auf der Zusammenstellung der erzielten Ergebnisse und deren Präsentation in Form von Konferenzbeiträgen und Veröffentlichungen sowie der Vorbereitung der Abschlussdokumentation. Folgende Konferenzbeiträge wurden ausgearbeitet:

2 Beiträge PSAM12, 1 Beitrag SIAM-UQ 2014, 1 Poster UCM 2014

Weiterhin wurde auf der Basis des Beitrags zur SAMO2013 eine Zeitschriftenveröffentlichung vorbereitet und eingereicht. Der Reviewprozess ist noch nicht abgeschlossen (siehe 5.).

AP1: Die Verfolgung internationaler Aktivitäten im Rahmen der IGD-TP wurde weitergeführt und die weitere Planung aktiv vorangetrieben.

AP3: Im Zusammenhang mit den Dokumentationsarbeiten wurden noch einige ergänzende Untersuchungen durchgeführt:

Es wurden einige Rechnungen unter Anwendung verschiedener Output-Transformationen durchgeführt und im Hinblick auf eine mögliche Verbesserung der Aussagekraft von Sensitivitätsanalysen ausgewertet.

Um die Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen zu dem Modellsystem für ein fiktives Endlager für schwach- und mittelaktive Abfälle, das ein quasi-unstetiges Modellverhalten zeigt, besser interpretieren zu können, wurden die Rechenläufe in solche mit „niedrigen“ und „hohen“ Ausgabewerten separiert und durch Berechnung verschiedener Sensitivitätsmaße getrennt analysiert.

Es wurden einige numerische Experimente zur Zahl der mit dem EASI-Verfahren sinnvollerweise zu berücksichtigenden harmonischen Ordnungen durchgeführt.

AP4: Der Fremdauftrag wurde bezüglich der Anforderungen detailliert definiert und erteilt. Die erste Bearbeitungsphase ist erfolgreich verlaufen, eine erste vorläufige Programmversion wurde ausgeliefert. Die Arbeit wird bis zum 30.09. abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im verbleibenden Zeitraum soll die Dokumentation der Arbeiten abgeschlossen werden. Der Fremdauftrag wird bis zum Ende der Projektlaufzeit begleitet. Dabei sind technische Arbeiten zum Implementieren und Testen der gelieferten Programmkomponenten erforderlich. Es ist zudem geplant, das Projekt zu verlängern und aufzustocken, um weitere Arbeiten zu Sensitivitätsanalysen durchzuführen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Spiessl, S., Becker, D.-A.: Experience with selected methods for sensitivity analysis of a computational model with quasi-discrete behavior. Presentation at 2014 SIAM Conference on Uncertainty Quantification, Savannah 31.03. – 03.04. 2014.

Spiessl, S., Becker, D.-A.: Investigation of Different Sampling and Sensitivity Analysis Methods Applied to a Complex Model for a Final Repository for Radioactive Waste. Presentation and Conference Paper, PSAM12, Honolulu, 23.06. – 27.06. 2014

Becker, D.-A.: Improvement of the Reliability and Robustness of Variance-Based Sensitivity Analysis of Final Repository Models by Application of Output Transformation. Presentation and Conference Paper, PSAM12, Honolulu, 23.06. – 27.06. 2014

Spiessl, S. and Becker, D.-A.: Sensitivity Analysis of a Final Repository Model with Quasi-Discrete Behaviour Using Quasi-Random Sampling and a Metamodel Approach in Comparison to Other Variance-Based Techniques. Submitted for publication: RESS xxx, Elsevier 2014

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10951
Vorhabensbezeichnung: Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2011 bis 31.05.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 588.400,00 EUR	Projektleiter: Dr. Flügge

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Projekt DIKOSA soll die Abhängigkeit des Porendiffusionskoeffizienten von der Porosität von Salzgrus experimentell mit Hilfe von sogenannten „through-diffusion“-Experimenten untersucht werden. Die Experimente werden zur Bestimmung der Gesetzmäßigkeit der Abhängigkeit bei unterschiedlicher Porosität des Salzgruses und mit unterschiedlichen Tracern durchgeführt. Die experimentell ermittelte Abhängigkeit soll in das Nahfeldmodul LOPOS für langzeitsicherheitsanalytische Rechnungen für Endlager im Salz implementiert und die Auswirkungen auf den Radionuklidtransport aus dem Endlager gezeigt werden. Dazu soll eine existierende sicherheitsanalytische Rechnung aus dem Projekt ISIBEL unter Berücksichtigung der verbesserten Beschreibung der Diffusion wiederholt werden.

Neben der direkten Bestimmung der Abhängigkeit des effektiven Porendiffusionskoeffizienten von der Porosität des Salzgruses lassen sich durch die durchgeführten Experimente auch Rückschlüsse auf die Struktur des Porenraumes im kompaktierten Salzgrus ziehen, wie z. B. auf dessen Porenraumvernetzung, d. h. auf das Vorhandensein oder Nichtvorhandensein von unverbundenen Poren. Diese Informationen liefern einen wichtigen Beitrag zur Klärung der Fragestellung, ob die Kompaktion von Salzgrus in den Zugangsstrecken des Endlagers das Transportpotenzial für Lösung und Schadstoffe im Salzgrus herabsetzt und eine potenzielle Freisetzung von Radionukliden verringert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Planung, Durchführung und Auswertung der Diffusionsexperimente
- AP2: Integration der Ergebnisse in das langzeitsicherheitsanalytische Modell LOPOS (Implementierung in LOPOS und illustrative Rechnungen)
- AP3: Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Der im zweiten Halbjahr 2013 begonnene Diffusionsversuch Gorleben-6 wurde im Januar 2014 beendet. Der Versuch konnte nicht bis zum Erreichen des stationären Zustands durchgeführt werden, weil Ausfällungen von Salzen in den Leitungen aufgetreten sind und infolgedessen die Zelle advektiv durchströmt worden ist. In diesem Versuch wurden die Tracer Cäsium ($1 \cdot 10^{-3} \text{ mol l}^{-1}$), Selenat ($1 \cdot 10^{-3} \text{ mol l}^{-1}$), Iodid ($1 \cdot 10^{-3} \text{ mol l}^{-1}$) und Neodym ($5 \cdot 10^{-4} \text{ mol l}^{-1}$) eingesetzt. Obwohl der Versuch vorzeitig abgebrochen wurde, liegen ausreichend Daten vor, dass der Wert für den Diffusionskoeffizienten der verwendeten Tracer für diesen Versuch eingegrenzt werden kann. Eine erste Abschätzung ergibt Werte im Bereich von 10^{-11} bis $10^{-10} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, die im Folgenden noch bestätigt werden müssen.

Die Ortsverteilung der Tracer im Probekörper wurde analysiert. Dazu wurden entlang des Probekörpers mittels eines Bohrers mit 2 mm Durchmesser Proben entnommen. Auf Grund der geringen Porosität des Bohrkerns enthalten die dabei entstehenden Proben allerdings nur geringe Mengen an Tracern. Die Konzentrationen von Selenat und Iodid lagen unter der Nachweisgrenze. Cäsium zeigte eine Abnahme der Konzentration über die Länge des Probekörpers in einem von drei Profilen. Für Neodym konnte dies in zwei von drei Profilen beobachtet werden. Die Abnahme verläuft nicht linear und unterliegt stärkeren Streuungen.

Die folgenden Versuche (Gorleben-8 und Gorleben-9) werden unter den gleichen Randbedingungen durchgeführt wie der Diffusionsversuch Gorleben-6. Dies betrifft z. B. den Einsatz von Teflonscheiben, die Konfiguration der Leitungen und der Pumpe und die Anordnung des Versuchsaufbaus. Die Temperatur im Versuchsraum wird kontinuierlich aufgezeichnet, um weitere temperaturbedingte Störungen registrieren, bzw. vermeiden zu können.

Ein weiterer Versuchskörper (Gorleben-8), wurde bis zu einer Porosität von 2 % kompaktiert, aufgesättigt, seine Kennwerte ermittelt und die Laugenpermeabilität bestimmt. Es werden die gleichen Tracer in den gleichen Konzentrationen verwendet wie im Versuch Gorleben-6. Der Diffusionsversuch wurde am 23.06.2014 begonnen.

Um zu überprüfen, ob der nun verwendete Versuchsaufbau reproduzierbare Ergebnisse liefert, wurde ein weiterer Versuchskörper mit 2 % Porosität kompaktiert (Gorleben-9). Dieser Probekörper wurde ebenfalls aufgesättigt und charakterisiert. Die Versuchsdurchführung, inklusive Herstellung der zu verwendenden Tracerlösung, wurde vorbereitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fortsetzung des Versuchs Gorleben-8, Analyse der gewonnen Proben, Auswertung der Ergebnisse

Beginn und Durchführung des Diffusionsversuchs Gorleben-9, Analyse der gewonnen Proben, Auswertung der Ergebnisse

Kompaktion von zwei weiteren Probekörpern mit ca. 4 % Porosität, Vorbereitung und Beginn der Diffusionsversuche

Auswertung der Versuche, ggf. Anpassung der Versuchsbedingungen

AP2: Vorbereitung der Arbeiten zur Integration der Ergebnisse in das Modell LOPOS

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10961
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 674.049,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marquardt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Untersucht werden relevante geochemische Aspekte der Rückhaltung von Np, Pu, Am und Cm im Tongestein. Die Schwerpunkte werden auf Untersuchungen der Sorption, Diffusion, Komplexierung und Redoxprozesse von Actiniden bei höheren Ionenstärken und Temperaturen liegen. Als Tongestein werden der natürliche Opalinuston, der natürliche Callovo-Oxfordian-Ton und das reine Tonmineral Illit untersucht. Zusätzlich werden Aspekte des Einflusses von mobiler Tonorganik und Behälterkorrosionsprodukten auf die Sorption und Diffusion einbezogen. Neben den Diffusionsversuchen mit Actiniden werden Diffusionsversuche mit Tonorganik durchgeführt. Daran gekoppelt sind Untersuchungen zur Stabilität von kolloidaler Tonorganik bei höheren Ionenstärken. Die Komplexierung von Np(V) mit niedermolekularen organischen Komponenten (LWOC) wird ebenfalls bei höheren Ionenstärken und höheren Temperaturen bis 90 °C untersucht. Weiterhin wird die Relevanz von Fe-Mineralphasen aus der Behälterkorrosion für eine Rückhaltung in einigen Sorptionsuntersuchungen geklärt werden. Zusammenarbeiten laufen mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, der Universität Mainz, Potsdam, Heidelberg, Köln, Universität des Saarlandes sowie der TU München.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Sorptionsuntersuchungen: Cm(III)/Eu(III), Np(V), Pu(V) auf Opalinuston, Illite und Eisenphasen: Ionenstärkeabhängigkeit und Temperaturabhängigkeit, Einfluss von Tonorganik.
- AP2: Diffusionsuntersuchungen: Cm(III)/Eu(III) (eventuell Np(IV, V), Pu(IV, V)), ³H-markierter Fulvinsäure mit kompaktiertem Illit.
- AP3: Komplexierungsuntersuchungen: Np(V) mit LWOC (Propionat, Lactat, Kerogen und Huminstoffen) bei höheren Ionenstärken (NaCl) und höheren Temperaturen.
- AP4: Redox-Untersuchungen: Redoxverhalten von Neptunium und Plutonium in NaCl-Lösungen
- AP5: Stabilität von Huminstoffkolloiden bei hohen Ionenstärken.
- AP6: Löslichkeitsuntersuchungen: Einfluss von Borat auf An(III)/Ln(III)-Löslichkeiten.
- AP7: Themen, die für das Projekt „THEREDA“ Datenlücken schließen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Komplexbildung von Np(V)-Propionat: Die Untersuchungen der Komplexbildung von Np(V) mit Propionat im NaCl-System als Funktion der NaCl-Konzentration, der Propionat-Konzentration bzw. der Temperatur wurden abgeschlossen. Mit Hilfe der Steigungsanalyse wurde ein 1:1 Np(V)-Propionat-Komplex bestimmt. Die Struktureigenschaften des Komplexes wurden mittels EXAFS untersucht, wobei ein Np-C-Abstand (2.83-2.91 Å) auf eine bidentate Bindung zwischen der Carboxyl-Gruppe des Propionats und dem Np(V) deuten, und eine Koordinationszahl des Kohlenstoffs von 0.7-1.1 den 1:1-Komplex bestätigt. Mittels der SIT (specific interaction theory) wurde aus der Ionenstärkeabhängigkeit der konditionellen Komplexbildungskonstante $\log \beta$ im NaCl-System die Komplexbildungskonstante bei einer Ionenstärke $I = 0$ ($\log \beta_0(25^\circ\text{C})$) von 1.24 ± 0.04 für die Reaktion $\text{NpO}_2^+ + \text{Prop}^- = \text{NpO}_2\text{Prop}$ abgeleitet. Die Komplexbildungskonstante erhöht sich mit zunehmender Temperatur (20 – 85 °C) und korreliert linear als Funktion der reziproken Temperatur. Die Werte für $\Delta_r H_m^0$ und $\Delta_r C_{p,m}^0$ wurden aus der van't Hoff-Gleichung erhalten: $\Delta_r H_m^0 = 13.8 \pm 1.6 \text{ kJ mol}^{-1}$, $\Delta_r S_m^0 = 70 \pm 6 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$. Die Komplexbildungsreaktion läuft damit endotherm und entropiegetrieben ab.

Sorption von Np(V) an Illit: Im Rahmen der bereits vorgestellten Np(V)-Illit-Sorptionsexperimente (s. Zwischenbericht 1. Halbjahr 2013) wurden ergänzend XAFS-Untersuchungen und thermodynamische Speziationsrechnungen mittels PhreeqC durchgeführt. Die Sorption von NpO_2^+ an Illit wurde im pH-Bereich 3-10 und bei einer Np(V)-Konzentration von 10^{-8} bis $10^{-4} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ in 0.1 M NaCl und bei einem Fest-zu-Flüssig-Verhältnis von 2 g/L in einer Argon-Atmosphäre untersucht. Die Experimente lieferten höhere Verteilungskoeffizienten von $\log K_d \sim 3 - 4 \text{ (L/kg)}$ für $[\text{Np}] < 10^{-6} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ als vergleichbare Literaturdaten. Des Weiteren wurde für $\text{pH} = 7.2 \pm 0.2$ eine nicht-ideale Np Sorption an Illit bei niedrigen Beladungen ($< 10^{-3} \text{ mol/kg}$) erhalten, die widersprüchlich zu dem idealen Verhalten von anderen Metallkationen wie (Eu(III), U(VI), Ni(II), Sr(II)) sind. Für einen konstanten pH-Wert können wir aus einer pe-K_d Beziehung annehmen, dass Np(V) teilweise zu Np(IV) an der Illit-Oberfläche reduziert wird, obwohl der in Lösung gemessene E_h -Wert auf dominierendes Np(V) hinweist. Mittels XANES konnte allerdings eine signifikante Menge an Np(IV) an der Illit-Oberfläche nachgewiesen und quantifiziert werden. Basierend auf einem Quasi-Gleichgewichtszustand nach 7 Tagen und einer heterogenen Np(V)-Reduktion können die experimentellen Daten gut mit einem Oberflächenkomplexierungs-Modell (2 SPNE SC/CE) nach Bradbury und Baeyens beschrieben werden. Hierbei wurden die unbekanntes Oberflächenkomplexierungskonstanten $\log K_{\text{surf}}$, wie $\equiv\text{SO-Np}(\text{OH})_2^+$, $\equiv\text{SO-Np}(\text{OH})_3$, und $\equiv\text{SO-Np}(\text{OH})_4^-$, aus den vorhandenen Daten gefittet. Die modellierte pH-Kante für Np(IV)-Illit stimmt gut überein mit den pH-Kanten anderer vierwertiger Kationen wie Th(IV) und Sn(IV). Durch die starke Sorption von Np(IV) an die Illit-Oberfläche wird im Vergleich zu einer homogenen Lösung das Stabilitätsfeld von Np(IV) um 0.2 bis 0.3 V – entspricht etwa 3 bis 5 pe-Einheiten – vergrößert. Damit vergrößert sich auch das Stabilitätsfeld des immobileren Np(IV) gegenüber dem mobileren Np(V).

4. Geplante Weiterarbeiten

Durchführung von Np(V)-Diffusionsexperimenten;
 Endauswertung der Sorptionsexperimente von Np, Pu an OPA/COx-Ton;
 Endauswertung der Laktat-Komplexierungsexperimente bei erhöhten Temperaturen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aleksandr N. Vasiliev, Nidhu L. Banik, Rémi Marsac, Daniel R. Froehlich, Christian M. Marquardt, Jörg Rothe, Stepan. N. Kalmykov: Np(V) complexation with propionate in saline solutions at variable temperatures, Poster, 16th ISSP Conference, Karlsruhe, 2014.

Rémi Marsac, Nidhu Lal Banik, Johannes Lützenkirchen, Christian Michael Marquardt, Kathy Dardenne, Dieter Schild, Joerg Rothe, Alexandre Diascorn, Tomas Kupcik, Thorsten Schäfer and Horst Geckeis: Neptunium redox speciation at the illite surface, eingereicht bei Geochim. Cosmochim. Acta

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10971
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.117.537,00 EUR	Projektleiter: Dr. Schmeide	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge für zuverlässige Prognosen zur Ausbreitung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen in Abwesenheit und Gegenwart von Organika. Es sollen neue Erkenntnisse zum Einfluss von Ionenstärke, Salzmedium bzw. Temperatur auf das Komplexbildungs-, Redox-, Sorptions- und Diffusionsverhalten der Radionuklide im System Radionuklid/Tonorganika/ Tongestein/Aquifer erhalten werden. Diese Arbeiten zielen auf ein besseres Verständnis der ablaufenden Prozesse sowie auf eine Erweiterung der thermodynamischen Datenbasis und sollen zeigen, inwieweit die bisher in Gegenwart von Porenwässern geringerer Ionenstärke erhaltenen Erkenntnisse zum Migrationsverhalten von Radionukliden im natürlichen Tongestein auf potentielle Tonstandorte in Norddeutschland, deren Grund- und Porenwässer höhere Salinitäten aufweisen, übertragbar sind. Die Ergebnisse liefern somit einen Beitrag zur kontinuierlichen Verbesserung der Kenntnisse und des Instrumentariums zur Prognose der langfristigen Entwicklung untertägiger Entsorgungseinrichtungen. 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

- Untersuchung der Komplexbildung von Np, U und Pu in ausgewählten Oxidationsstufen mit endlagerrelevanten organischen Liganden in salinaren Lösungen
- Untersuchung der Stabilität von Huminstoff-Kolloiden in Abhängigkeit von der Ionenstärke (Na^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+}) und vom pH-Wert
- Radiotracer-Untersuchungen zur Dynamik von Komplexbildungsgleichgewichten mit huminstoffartigen Liganden
- Untersuchung der Np(V)-Sorptions aus salinaren Lösungen variierender Ionenstärke an synthetischen Behälterkorrosionsprodukten bei 25 °C
- Untersuchung der U(VI)-Sorptions aus salinaren Lösungen variierender Ionenstärke an Tonmineralen und natürlichem Tongestein (Opalinuston). Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika
- Untersuchung der U(VI)-Diffusion im Opalinuston bei erhöhter Ionenstärke bei 25 °C
- Ortsauflösende Untersuchung von Diffusionsprozessen in Tonen mittels Positronen-Emissions-Tomographie (PET)
- Untersuchung des Transports im gestörten Barrierengestein und der Auflockerungszone
- Untersuchung der Wechselwirkung von Actiniden/Lanthaniden mit Ton-Bakterien

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Für die U(VI)-Propionat-Komplexierung wurden mittels UV/Vis- und IR-Spekt. sowie DFT-Rechnungen drei $\text{UO}_2(\text{Prop})_n^{(2-n)+}$ Komplexe identifiziert ($n=1-3$). Der Einfluss der Ionenstärke ($I = 1.5 - 4 \text{ mol/kg NaClO}_4$) wurde mittels UV/Vis-Spekt. (Kapillarzelle 250 cm Pfadlänge) untersucht. Anstieg von $\log \beta$ mit der I und der Anzahl der Propionat-Liganden.
- U(VI)-Sorption an Montmorillonit in CaCl_2 in Abh. von I und pH (Ausschluss von CO_2). Ergebnis: I -Einfluss im sauren pH-Bereich, Maximum bei pH 7 (ähnlich zum NaCl-System); im alkalischen pH-Bereich wird die U(VI)-Sorption bei hohen I wiederum durch Sekundärphasenbildung erhöht. In gemischtem Elektrolyten (2.39 M NaCl, 0.11 M CaCl_2 , 0.045 M MgCl_2) zeigten Sorptionsisothermen nichtlineare Sorption: $n_F < 1$ für pH 5.3, 6.5 und $n_F > 1$ für pH 8.5. Bei pH 5.3 und 6.5 ist U-Aufnahme etwas geringer als in NaCl u. CaCl_2 ; bei pH 8.5 erhöht sich die U-Aufnahme stark. Speziationsrechnungen zeigen Bildung Mg-haltiger Ausfällungen, die für die Erhöhung der U-Aufnahme bei hohen pH-Werten verantwortlich sind. Best. von Selektivitätskoeffizienten für U(VI) an Montmorillonit: $K_C = 3.1$ in NaCl.
- Zur Aufklärung des Einflusses hoher Salinitäten auf das Mobilisierungsvermögen von höhermolekularen Tonorganika gegenüber Actiniden wurde die Wechselwirkung von Na^+ , Mg^{2+} und Ca^{2+} mit Fulvinsäure mittels Ultrafiltration untersucht. Bisherige Ergebnisse deuten auf einen reinen Elektrolyteffekt ohne direkte Konkurrenzreaktionen hin. Isotopenaustausch-Studien an Tb-Humat-Komplexen bei sehr geringer Metallkonzentration erbrachten Hinweise, dass die Reversibilität der Wechselwirkung – anders als bei hohen Metallbeladungen – stark eingeschränkt ist und kinetischen Stabilisierungsprozessen unterliegt.
- Zur Materialcharakterisierung von Tonproben wurden μCT -Aufnahmen erstellt, die eine merkliche Auflockerung am Kontakt zum freien Fluid zeigen. Mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen wurde die Streustrahlung bei PET-Aufnahmen charakterisiert und ein Korrekturalgorithmus implementiert. Die Arbeiten zur Wasserglasinjektion wurden abgeschlossen.
- Beginn der Untersuchungen zur Wechselwirkung des Salz-Referenzstamms *Halobacterium noricense* mit Eu(III) mittels TRLFS sowie mit U(VI) mittels Batch-Experimenten (10–100 μM U(VI), pH 6, 3 M NaCl, 0–89 h). Unabhängig von der [U(VI)] waren nach 48 h stets über 90 % des U(VI) an die Zellen gebunden. Gegenwärtig erfolgt die Auswertung der TRLFS-Daten

4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung der U(VI)-Propionat-Komplexierung im NaCl-Medium (1.5 – 4 mol/kg) und in Abh. der Temperatur (bis 60 °C). Anwendung von UV/Vis-, IR- und EXAFS-Spektroskopie.
- U(VI)-Sorption an Montmorillonit bei 60 °C; U(VI)-Diffusion in kompaktiertem Montmorillonit in NaCl und in gemischtem Elektrolyten.
- Kinetische Studien zum Isotopenaustausch an Tb-Humat-Komplexen und Radiotracer-Untersuchungen zur Desorptionskinetik an Tb-Humat-Komplexen in Abh. der Kontaktzeit.
- Verifizierung von Wechselwirkungsstudien am System Metallion/Fulvinsäure/Opalinuston mittels Radioisotopen von Na und Ca sowie mittels Am/Cm anstelle des Analogtracers Tb.
- Weiterführende PET-Diffusionsuntersuchungen mit $[^{22}\text{Na}]\text{Na}^+$ an ausgewählten Proben. Korrektur und Verbesserung der Quantifizierung der bisherigen PET-Diffusionsbeobachtungen. Neuberechnung der Modellsimulationen anhand der korrigierten Daten.
- Charakterisierung der U(VI)-Zell-Komplexe (mit *Halobacterium noricense*) mittels TRLFS und IR-Spektroskopie. Unters. der Eu(III)-Zell-Komplexe bei hohen I mittels TRLFS.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Lippold, H., Lippmann-Pipke, J.: New insights into the dynamics of adsorption equilibria of humic matter as revealed by radiotracer studies. *Geochim. Cosmochim. Acta* 133, 362-371 (2014).
- Harzmann, S., Braun, F., Zakhnini, A., et al.: Implementation of cascade gamma and positron range corrections for I-124 small animal PET. *IEEE Transact. Nucl. Sci.* 61, 142-153 (2014).
- Bittner, L.: Prozessbeobachtung von Vergütungsmaßnahmen im Salzgestein mittels Positronen Emissions Tomographie (GeoPET). Masterarbeit, Hochschule Zittau/Görlitz (2014).

Zuwendungsempfänger: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 10981
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 498.000,00 EUR	Projektleiter: Prof. Reich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Wechselwirkung von Np und Pu mit natürlichem Tongestein wird bei höheren Salinitäten als Funktion des pH-Wertes in An- und Abwesenheit von gelöstem Fe(II) untersucht. Für die Sorption von Np(V) an Montmorillonit werden Sorptionsisothermen bei hohen Ionenstärken gemessen und mit Berechnungen verglichen, die auf einem für niedrige Ionenstärken entwickelten Sorptionsmodell beruhen. Der Einfluss der Temperatur auf die Sorption und Diffusion bei hohen Salinitäten wird schwerpunktmäßig für das System Np-Ton untersucht. Darüber hinaus werden das Sorptionsverhalten und die Speziation von Tc in Tongestein studiert. Die Speziation von Np, Pu und Tc erfolgt mittels XPS, EXAFS/XANES in festen Proben und mit der CE-ICP-MS bzw. CE-RIMS in Lösungen. Diese Untersuchungen sollen die thermodynamische Datenbasis zum Verhalten von Np, Pu und Tc in einem Tongestein bei höherer Salinität erweitern und damit wichtige Informationen für die Modellierung des Langzeitverhaltens dieser Radioelemente in einem möglichen Endlager mit Ton als Wirtsgestein liefern. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Institut für Ressourcenökologie des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf, dem Institut für Nukleare Entsorgung des Karlsruher Instituts für Technologie, der Universität des Saarlandes und der TU München zusammengearbeitet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Batchexperimente zur Sorption von Np an Montmorillonit und von Np und Pu an natürlichem Tongestein bei höheren Salinitäten in Abhängigkeit des pH-Wertes
- Untersuchung des Einflusses von gelöstem Fe(II) auf das geochemische Verhalten von Np und Pu in natürlichem Tongestein
- Speziation von Np und Pu bei der Wechselwirkung mit natürlichem Tongestein unter hohen Salinitäten
- Diffusionsexperimente mit Np in natürlichem Tongestein bei höheren Salinitäten und Temperaturen von 25 und 60 °C
- Sorption und Speziation von Tc bei der Wechselwirkung mit natürlichem Tongestein.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Überprüfung der Anwendbarkeit des Modells 2SPNE SC/CE für die Modellierung der Sorption von Np(V) an Tonmineralien bei höheren Salinitäten wurde die Datenbasis durch zusätzliche Batchexperimente erweitert. Dazu wurden eine Sorptionskurve für 8 µM Np(V) und 10 g/l Na-Montmorillonit (STx-1) in 0,1 M NaCl im pH-Bereich 3-10, eine Sorptionsisotherme bei pH 8 im Bereich von 10^{-12} - 10^{-6} M Np(V) in 0,1 M NaCl sowie die Ionenstärkeabhängigkeit der Sorption von Np(V) bei pH 8 in 0,1-3 M NaCl gemessen. Dabei wurde der bereits früher im pH-Bereich 7-8,5 beobachtete unterschiedliche Verlauf der Sorption in 0,1 M NaCl und 0,1 M NaClO₄ bestätigt. Das Modell 2SPNE SC/CE berechnet für diesen pH-Bereich eine zu hohe Np-Sorption in 0,1 M NaCl, die eher dem experimentellen Verlauf in 0,1 M NaClO₄ entspricht.

Zum Vergleich mit OPA und zur Überprüfung des Modells 2SPNE SC/CE wurde die pH-Abhängigkeit der Sorption von 4×10^{-7} M Am(III) an Na-Illit in 0,1 M NaCl untersucht. Dabei zeigte sich ein ähnlicher Sorptionsverlauf wie mit OPA, d. h. die Sorptionskante liegt bei pH 4, und bei $\text{pH} \geq 6$ wird Am(III) vollständig sorbiert. Der Einfluss der Temperatur (≤ 80 °C) auf die Sorption von 8 μM Np(V) an OPA wurde bei den Ionenstärken 0,1 und 3 M NaCl untersucht. Dabei konnte kein signifikanter Temperatureffekt beobachtet werden.

Bei Messungen an der Synchrotronstrahlungsquelle SOLEIL konnte die Speziation von Tc nach der Sorption von 12 μM Tc(VII) an OPA in synthetischem Porenwasser (pH 7,6) in Gegenwart verschiedener Reduktionsmittel bestimmt werden. Bei Anwesenheit von gelöstem Fe(II) (0,1 M FeCl_2 , $E_h \approx -50$ mV SHE) waren 80-90 % des Tc(VII) zu Tc(IV) reduziert worden. Die Detektion von Tc-Tc und Tc-Fe Wechselwirkungen in den Tc K-Kante EXAFS-Spektren deuten einerseits auf eine Ausfällung von TcO_2 und andererseits auf die Ausbildung eines Oberflächenkomplexes hin. Bei den Experimenten mit 1 mM Na-Dithionit als Reduktionsmittel ($E_h \approx -450$ mV SHE) ergab die Analyse der Tc K-Kante XANES-Spektren eine vollständige Reduktion zu Tc(IV). Der Einfluss der Redoxbedingungen zeigt sich auch bei den Diffusionsexperimenten mit Tc(VII). Unter anaeroben Bedingungen war nach sechs Monaten noch kein Tc durch einen 11 mm dicken OPA-Bohrkern (Orientierung senkrecht zur Schichtung) hindurch diffundiert. Als mobile Phase diente dabei synthetisches Porenwasser mit pH 7,6. Bei einem analogen Diffusionsexperiment mit 10 μM Tc(VII) an Luft konnte Tc bereits nach einer Woche auf der Sekundärseite der Diffusionszelle nachgewiesen werden. Die dabei ermittelten Diffusionsparameter betragen $D_e = 1,3 \times 10^{-11}$ m^2/s und $\alpha = 0,93$, wobei die Schichtung des Tons parallel zur Diffusionsrichtung war.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Untersuchungen zum Einfluss der Temperatur auf die Sorption von Np(V) an OPA.
- Abschluss der Batchexperimente zur pH- und Ionenstärkeabhängigkeit der Sorption von Np(V) in NaCl- und CaCl_2 -Lösungen.
- Batchexperimente zur Sorption von Pu(III) und Am(III) an OPA sowie zur deren Desorption in CaCl_2 - und MgCl_2 -Lösungen.
- Verbesserung der Modellierung der Sorptionsdaten von Np(V) an Montmorillonit in NaCl-Lösungen mit Hilfe des Modells 2SPNE SC/CE.
- Diffusionsexperimente mit Tc(VII) in OPA bei 60 °C an Luft und Vergleich mit Experimenten bei Raumtemperatur.

5. Berichte, Veröffentlichungen

R. Scholze, Sorption von Pu(III) an Tonmineralien in Abhängigkeit der Ionenstärke, 2014 (Diplomarbeit).
 P.J.B. Rosemann, S. Amayri, J. Drebert, U. Kaplan, D. Grolimund, T. Reich, Speciation of neptunium along diffusion pathways in Opalinus Clay using μ -XAFS and μ -XRF, Poster bei "TRPro III 2014 - A workshop on Modelling of Coupled Transport Reaction Processes", 04.-07.03.2014, Karlsruhe.

M. Lübke, S. Amayri, J. Drebert, T. Reich, Speciation of Tc after sorption and diffusion in Opalinus Clay, Vortrag auf der 17th Radiochemical Conference, 11.-16.05.2014, Mariánské Lázně, Tschechische Republik.

T. Reich, S. Amayri, J. Drebert, D.R. Fröhlich, D. Grolimund, U. Kaplan, J. Rosemann, Synchrotron radiation study of actinide sorption and diffusion in natural clay, Vortrag auf dem 7th Workshop on Speciation, Techniques, and Facilities for Radioactive Materials at Synchrotron Light Sources – AnXAS 2014, 20.-22.05.2014, Villigen, Schweiz.

P.J.B. Rosemann, S. Amayri, J. Drebert, U. Kaplan, D. Grolimund, T. Reich, Micro-scale study of Np speciation during diffusion in natural clay, Poster auf dem 7th Workshop on Speciation, Techniques, and Facilities for Radioactive Materials at Synchrotron Light Sources – AnXAS 2014, 20.-22.05.2014, Villigen, Schweiz.

S. Amayri, J. Drebert, D.R. Fröhlich, U. Kaplan, J. Rosemann, D. Grolimund, T. Reich, Speciation of neptunium and plutonium after interaction with Opalinus Clay, Vortrag auf dem 1st TALISMAN Plenary Meeting, 19.-20.06.2014, Marcoule, Frankreich.

Zuwendungsempfänger: Universität des Saarlandes, Campus der Universität des Saarlandes, 66123 Saarbrücken		Förderkennzeichen: 02 E 10991
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 583.573,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kickelbick	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Forschungsvorhabens ist die Untersuchung des geochemischen Verhaltens (Sorption bzw. Desorption, Migration sowie Komplexierung bzw. Kolloidbildung) von Uran (U(VI)) und Lanthaniden (Eu(III), Gd(III)) als deren Stellvertreter für dreiwertige Actiniden, vor allem unter dem Einfluss von Grundwasserbedingungen mit höheren Salinitäten in natürlichem Tongestein zu untersuchen. Hierbei wird auch der Einfluss von unterschiedlicher Tonorganik auf die Sorption bzw. Desorption von U(VI) und Lanthaniden berücksichtigt. Zusätzlich wird ein Teil dieser Untersuchungen bei höheren Temperaturen und höheren Ionenstärken durchgeführt, um die noch vorhandenen Datenlücken zu verringern. Ein zweiter Projektschwerpunkt beschäftigt sich mit dem Komplexierungsverhalten von Uran und Lanthaniden (Eu, Gd) mit organischen und anorganischen Komplexliganden (Tonorganik, Borat) im Übergang von wässrigen Lösungen auf salinare Systeme. Durch Anwendung neuer (NMR) bzw. Anpassung vorhandener Verfahren zur Metall-Speziation (CE- bzw. LC-ICP-MS) an salinare Systeme sollen insbesondere Komplexbildungskonstanten bei höherer Ionenstärke bestimmt werden. Die im Vorgängerprojekt entwickelten LC-Miniatur-Säulenversuche werden eingesetzt, um den Einfluss der Temperatur sowie anderer relevanter geochemischer Parameter auf die Mobilität der Metalle im kompakten Tongestein zu untersuchen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter (Metall-Konzentration, pH, Temperatur, Salinität) auf die Sorption von Eu(III), Gd(III) und U(VI) in Opalinuston mit Hilfe von Batch-Versuchen (binäres System)
- AP2: Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter (Metall-Konzentration, pH, Temperatur, Salinität) auf die Desorption von Lanthanoiden und Radionukliden (Eu, Gd und U) in natürlichen Tonformationen mit Hilfe von Batch-Versuchen (binäres System)
- AP3: Bestimmung der Einflüsse von Tonorganik (Lactat, extrahierte Tonorganik bzw. Huminsäure) und anorganischer Komplexliganden (Borat) auf die Sorption von Lanthanoiden und Radionukliden (Eu, Gd und U) an Tongestein bei Grundwasserbedingungen mit hohen Salinitäten (ternäres System bei salinaren Bedingungen)
- AP4: Untersuchungen zum Komplexierungsverhalten von Uran und Lanthanoiden (Eu, Gd) mit organischen Komplexliganden (Lactat, ^{13}C -Lactat, extrahierte Tonorganik und Aldrich-Huminsäure zum Vergleich mit vorhandenen Ergebnissen) und mit anorganischen Komplexliganden (Borat) im Übergang von wässrigen Lösungen auf salinare Systeme durch Speziation mittels ^{11}B NMR, ^{13}C NMR, CE- und LC-ICP-MS; Anpassung der vorhandenen Tools zur Metall-Speziation in salinaren Systemen
- AP5: Einfluss von unterschiedlicher Salinität sowie anorganischer Komplexliganden auf die Speziation der untersuchten Metalle mit Fulvin- bzw. Huminsäure (Metall-NOM-Komplexe) mit Hilfe der entwickelten Nachweis- und Speziations-Methoden und Vergleich mit der Speziation von Modellorganika (z. B. Lactat, bzw. Aldrich-Huminsäure)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden dynamische Sorptions-/Desorptions-Experimente in Form von Miniatur-Säulen-Experimenten (MSE) mit Kaolinit durchgeführt. Hierzu kamen, nach der Sicherstellung sowohl der Reproduzierbarkeit als auch der Inertheit des Kopplungssystems, zwei verschiedene experimentelle Modi (Injektion diskreter Probenzonen sowie Frontalchromatographie) zum Einsatz:

Bei der Injektion kleiner Volumina, wobei diskrete Peaks erwartet wurden (z. B. Injektion von 90 ng Europium zusammen mit 12 ng Iod als Referenzmarker in 2 μ L Reinstwasser) eluiert Europium weder bei einmaliger Injektion nach langem Warten (100 min), noch bei mehrfach wiederholter Injektion von der Säule. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass das injizierte Europium vollständig auf der Säule sorbiert bleibt. Aus diesem Grund wurde anhand von Frontalanalysen mit kontinuierlichem Zustrom von Europium gearbeitet bis ein Durchbruch des Europiums beobachtet werden konnte. Ziel ist es, mit diesem Versuchsaufbau die Sorption am Kaolinit zu quantifizieren. Bisher konnte ein Retardationsfaktor von $R_f = 650$ bestimmt werden. Aus diesem R_f -Wert lässt sich dann anschließend ein $\log K_d$ -Wert von 2,4 errechnen.

Ferner wurden im Berichtszeitraum Vorbereitungen zur Durchführung von MSE mit hochsalinaren Eluenten getroffen. Hierbei kann, wegen der hohen Salzfrachten im Eluenten, keine direkte online-Kopplung zur ICP-MS durchgeführt werden. Abhilfe schafft die automatisierte Sammlung einzelner Fraktionen mithilfe eines programmierten Fraktionensammlers und deren offline Messung mit dem bereits etablierten transienten ICP-MS-Messmodus.

Im Bereich der Batch-Versuche konnten Sorptionsisothermen von Europium bei verschiedenen Ionenstärken (0,01 bis 5,0 mol/L), pH-Werten (pH 5 und 7) und Temperaturen (25 und 60 °C) aufgenommen werden. Dabei zeigt sich bei pH 5 und 25 °C, dass die Ionenstärke einen starken Einfluss auf die Sorption hat. Durch die erhöhte Natrium-Ionen Konzentration, welche in starker Konkurrenz zu den Europium-Ionen steht, wird die Sorption über die gesamte Europium-Konzentration hinweg verringert. Es ergibt sich eine Abnahme des $\log K_d$ um etwa eine Größenordnung (von $\log K_d = 3,0$ bei 0,01 mol/L NaCl auf $\log K_d = 2,0$ bei 5,0 mol/L NaCl). Der Temperatureinfluss ist ebenfalls deutlich wahrnehmbar. Die Erhöhung von 25 auf 60 °C führt zu einer starken Sorptionszunahme ($\log K_d = 3,2$ für 60 °C und 0,01 mol/L NaCl). Bei pH 7 fallen die Einflüsse von Ionenstärke und Temperatur deutlich geringer aus. Im pH-neutralen Bereich liegt eine annähernd quantitative Sorption vor, welche auch kaum von dem Überschuss an Na-Ionen oder einer erhöhten Temperatur beeinflusst wird.

4. Geplante Weiterarbeiten

Während der dreimonatigen kostenneutralen Verlängerung soll die MSE-Frontalanalyse für Uran an Kaolinit durchgeführt werden. Zudem soll mit Hilfe von post-mortem Analysen von Europium (Uran) belegten Säulen die Konzentration des auf der Säule sorbierten Metalls bestimmt werden. Dabei soll eine Verdrängung des Metalls durch einen Überschuss an Konkurrenzionen (z. B. Al^{3+}) oder einem starken Komplexligenanden erfolgen. Die von den Verbundpartnern übernommene Borat-Speziation mittels NMR wird durch ergänzende Untersuchungen unsererseits vervollständigt.

Im Aufstockungszeitraum sollen folgende Themen behandelt werden:

- Bestimmung des Komplexierungsverhaltens von Eu und U(VI) mit natürlichen organischen Komplexligenanden (z. B. Elliot Soil-HA; Aldrich-HA; Suwannee River-NOM; Gorleben-HA) in Gegenwart von Ca bzw. Mg bei verschiedenen pH-Werten (binäres System: Me - NOM)
- Untersuchung des Einflusses zweiwertiger Ionen (Ca bzw. Mg) auf das Sorptionsverhalten von Eu und U(VI) an Opalinuston in Gegenwart bzw. Abwesenheit organischer Komplexligenanden (z. B. Elliot Soil-HA; Aldrich-HA; Suwannee River-NOM; Gorleben-HA) bei verschiedenen pH-Werten (binäres und ternäres System: Me - OPA und Me - OPA - NOM)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kautenburger, R. (2014): A new timescale dimension for migration experiments in clay: proof of principle for the application of miniaturized clay column experiments (MCCE). *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 300, 255-262.

Kautenburger, R., Hein, C., Sander, J.M. & H.P. Beck (2014): Influence of metal loading and humic acid functional groups on the complexation behavior of trivalent lanthanides analyzed by CE-ICP-MS. *Analytica Chimica Acta* 816, 50-59.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München	Förderkennzeichen: 02 E 11001
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 566.966,00 EUR	Projektleiter: Dr. Krüger

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Actinidenspezies an Tonmineraloberflächen.
- Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung von Actiniden mit Tonorganika und in salinaren Lösungen

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen“.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete:

- Adsorption von Actiniden an Tonmineralien
- Komplexierung von Actiniden in Lösung.

Arbeitspaket 1 (AP) umfasst quantenmechanische Berechnungen periodischer Modelle von Tonmineralien sowie die Untersuchungen der Adsorption von Actinidenspezies auf Tonmineraloberflächen. In AP2 werden computerchemische Untersuchungen zu Komplexen von Actiniden in wässriger Lösung durchgeführt. Schwerpunkte sind die Modellierung der Komplexierung durch Tonorganika und in salinärer Lösung sowie insbesondere organische und anorganische Americiumkomplexe.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.2: Adsorption von U(VI) und Np(V); AP1.5 Bedeckungsabhängigkeit; AP1.6 Methodische Untersuchungen; AP2.1 Komplexe in salinärer Lösung; AP2.2: Anorganische Am(III)-Komplexe; AP2.3 Wechselwirkung von Am(III) mit Tonorganika

Bei der Untersuchung der Adsorption von U(VI) auf Kantenflächen von Tonmineralen (AP1.2) mit Modellen mit expliziter Oberflächensolvatisierung erschwert die variable Struktur der Wasserschicht den Vergleich von Bindungsenergien mittels einfacher Optimierung. Als Alternativen wurden zwei Vorgehensweisen entwickelt (AP1.6): Zum einen wird die

Wasserschicht durch simulierte Abkühlung equilibriert, zum anderen lassen sich verschiedene Mineralmodelle besser vergleichen, wenn diese durch Substitution bei starrem Gitter erzeugt werden. Ergebnisse mit simulierter Abkühlung an U(VI)-Komplexen auf (110)-Kantenflächen von Pyrophyllit, Montmorillonit und Beidellit bestätigen die Mehrheit der in Optimierungen erhaltenen Komplexe und deren Geometrie, liefern jedoch stabilere Komplexierungsenergien mit leichter Präferenz zur Adsorption an Oberflächensubstitutionen. Auch Substitutionen in einem optimierten Montmorillonitgitter bei gleicher Struktur der Wasserlage zeigen für die Plätze AlOOH und SiOO auf der gleichen Oberfläche eine schwache Präferenz für Adsorption an Oberflächensubstitutionen, die für ein Beidellitgitter bestätigt wird. Mit simulierter Abkühlung wurde auch die Deprotonierung an Montmorillonit-Kantenfläche als Referenz bei höherem pH sowie die Bedeckungsabhängigkeit der Adsorption (AP1.5) untersucht. In Übereinstimmung mit der Literatur werden zuerst SiOH-Gruppen, deprotoniert. Der Vergleich von (2×1)- mit (4×1)-Oberflächeneinheitenzellen zeigt für zwei Adsorptionskomplexe eine Tendenz zu stärkerer Adsorption bei geringerer Bedeckung.

Untersuchungen zur Komplexierung mit Carbonsäuren (AP2.1) wurden für U(VI)-Formiat fortgeführt und für Np(V)-Acetat aufgenommen. Betrachtet wurden Di- und Triformiatkomplexe sowie mögliche ternäre Chloridkomplexe in Salzlösung. Wie für Monoformiat so ist auch die Bindung an Uranyl für zwei und drei Liganden schwächer als für Acetat in Übereinstimmung mit dem Experiment. Unsere derzeitigen Ergebnisse legen nahe, dass Formiat auch in diesen Komplexen bevorzugt monodent koordiniert, wobei bevorzugte Koordinationszahlen noch zu bestimmen sind. Im Gegensatz zu Acetat koordiniert Formiat nur geringfügig stärker als Chlorid, so dass eine Verdrängung nicht ausgeschlossen erscheint. Uranylformiatchloridkomplexe mit inner- und außersphärisch koordiniertem Chlorid sind nahezu energetisch entartet, was das Gleichgewicht dieser Spezies weiter kompliziert. Eine geringere Dielektrizitätskonstante der Lösung (z. B. Salzlösung) hat keinen Einfluss auf die relative Energetik der verschiedenen Uranylformiat- und Uranylformiatchlorid-Komplexe. Erste Ergebnisse zu Np(V)-Acetat zeigen gleiche Präferenzen der Koordination wie bei U(VI), jedoch geringere Bindungsenergien der Aqualiganden, so dass vierfach koordinierte Komplexe möglich sind. Im Gegensatz zu U(VI) wurden stabile außersphärische Acetatkomplexe für Np(V) erhalten.

Untersuchungen zur Stabilität von Boratkomplexen (AP2.2) wurden durch einen expliziten Vergleich von mono- und bidentatem Am(III)-Borat, -Acetat und -Perchlorat ergänzt. Für Borat und Acetat wurden ähnlich stabile Komplexe erhalten, während Perchlorat wie zu erwarten keine stabilen Komplexe liefert und damit das verwendete Modell qualitativ gut bestätigt. Modellierungen zu Am(III)-Monoformiat (AP2.3) ergaben wie für U(VI) eine bevorzugt monodentate Koordination des Liganden im Gegensatz zu anderen Carboxylaten.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1: Adsorption von Np(V);
 AP2.1: Komplexe einfacher Carboxylate;
 AP2.3: Boratkomplexe

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 11011
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 340.296,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kumke	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist die weiterführende Charakterisierung der Wechselwirkungen von Lanthanoid-Ionen (als natürliche Analoge der Actinide) mit endlagerrelevanten Systemkomponenten bei hohen Ionenstärken und erhöhten Temperaturen zur Erweiterung des molekularen Prozessverständnisses im natürlichen Tongestein bzw. in salinaren Systemen. Zur Erreichung dieses Ziels werden verschiedene laserbasierte Methoden – zeitaufgelöste und stationäre Lumineszenzspektroskopie sowie Transientenabsorptionsspektroskopie – eingesetzt, die mit weiterführenden Methoden wie der konfokalen Raman-Mikroskopie als bildgebendem Verfahren ergänzt werden.

Das geförderte Projekt 02 E 11011 ist ein Teilvorhaben des Verbundprojektes „Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen“, das gemeinsam mit den Universitäten Dresden, Heidelberg, Mainz, München, Saarbrücken sowie des Karlsruher Institutes für Technologie (KIT) und dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) durchgeführt wird. Eine thematische Verknüpfung besteht vor allem zu den Projektpartnern an der TU Dresden, der TU München und der Universität Heidelberg sowie dem HZDR und dem Institut für Nukleare Entsorgung (KIT).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Speziationsuntersuchungen unter besonderer Berücksichtigung von Ion-Ion-Wechselwirkungen bei hohen Ionenstärken
- AP2: Photophysik von Eu(III)-Komplexen mit Modellliganden bei hohen Ionenstärken bzw. erhöhten Temperaturen
- AP3: Komplexierung von Eu(III) durch Polymere und natürliche organische Liganden bei hohen Ionenstärken unter Berücksichtigung der Kationen- bzw. Anioneneigenschaften
- AP4: Photophysik von Eu(III)-Komplexe mit Tonmineralphasen in An- und Abwesenheit von Modellliganden bei hohen Ionenstärken bzw. erhöhten Temperaturen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Im letzten Berichtszeitraum lag der Fokus der Untersuchungen auf der Wechselwirkung von Huminstoffen, hier Fulvin- und Huminsäuren, mit Mineraloberflächen. Ausgangspunkt ist hierbei Kaolinit. Als Huminstoffe wurden Fulvin- und Huminsäuren aus dem Gorleben Aquifer (Gohy 573) verwendet. Für die Sorptionsuntersuchungen wurden die Konzentration des Huminstoffs (0 bis 20 mg/L) und Konzentration des Hintergrundelektrolytes (0.1 mol/L und 1.0 mol/L) variiert.
Die Huminstofflösungen vor und nach Zugabe von Kaolinit (nach Einstellung des Sorptionsgleichgewichts) wurden mittels Absorptionsspektroskopie untersucht. Von der Mineralphase wurden Reflexionsspektren aufgenommen. Zusätzlich wurden von der Mineralphase Raman-spektren mit Hilfe eines Raman-Mikroskops aufgenommen. In diesen Spektren wurde vor allem der Bereich der OH-Schwingung des Kaolinit untersucht. Diese Schwingungssignatur ist abhängig von den unterschiedlichen Wechselwirkungen der äußeren, inneren bzw. Grenzflächen-Hydroxylgruppen mit adsorbierenden Stoffen (s. u.)
- Bei höheren Temperaturen kann es in verschiedenen Tonmineralen zur Interkalation von kurz-kettigen aliphatischen Carbonsäuren kommen. Es wurde begonnen, gezielt eine Interkalation von Acetationen in Kaolinit zu untersuchen. Die Auswirkungen auf die Signatur der OH-Schwingungen des Kaolinit wurden mit Hilfe der Raman-Spektroskopie untersucht. So können Informationen zu Wechselwirkungen von organischen Molekülen und der Mineralphasen gewonnen werden. Mit Hilfe der Raman-Mikroskopie besteht zudem ein Zugang für eine ortsaufgelöste chemische Speziation dieser Mineralphasen.
- Gemeinsam mit dem Institut für Nukleare Entsorgung wurden die Messungen an kompaktierten Tonproben weitergeführt. Hier gibt es Ansätze, die Gegenstand der Aufstockungsphase sind, mit denen die Experimente weiter verbessert werden können.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Arbeiten zum Einfluss der Ionenstärke und Temperatur ($0\text{ °C} < \vartheta < 70\text{ °C}$) auf die Komplexierung von dreiwertigen Lanthanoidionen durch niedermolekulare organische Liganden in H_2O und D_2O . Hier werden weitere Lanthanoidionen (Dysprosium, Samarium, Gadolinium) in die Untersuchungen eingebunden. Das Ziel ist die Aufklärung der verschiedenen Intrakomplex-Deaktivierungskanäle.
- Aus den gewonnen Erkenntnissen unter Punkt 1) werden einige ausgewählt, für die im Temperaturbereich $< 0\text{ °C}$ die photophysikalischen Parameter der Lanthanoid-Komplexe durch direkte beziehungsweise indirekte Anregung bestimmt werden.
- Der Brechungsindex hat einen Einfluss auf die quantitative Auswertung von spektroskopischen Messungen. Es werden Temperatur- und Ionenstärkeeffekte auf den Brechungsindex für den interessierenden Bereich recherchiert und gegebenenfalls bestimmt.
- Die Kooperation mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf bezüglich der Messungen bei ultra-tiefen Temperaturen von Eu(III)-Borat-Komplexen wird fortgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Max Schütte, Konkurrenz von Metallionen um Bindungsstellen in natürlicher organischer Materie, Bachelorarbeit, Universität Potsdam (2014).

Katja Burek, Temperatur- und Ionenstärke-Einflüsse auf die Lumineszenz von Lanthanoiden in Komplexen mit niedermolekularen organischen Liganden, Diplomarbeit, Uni. Potsdam, in Vorber. (2014)
J. Schott, J. Kretschmar, M. Acker, S. Eidner, M.U. Kumke, B. Drobot, A. Barkleit, S. Taut, V. Brendler, T. Stumpf "Formation of a Eu(III) borate solid species from a weak Eu(III) borate complex in aqueous solution" Dalton Transactions, The Royal Society of Chemistry 43, 11516-11528 (2014)

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 11021
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.11.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 315.249,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Stumpf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel der Arbeiten ist die Ableitung thermodynamischer Daten zur Wechselwirkung von Am(III) mit endlagerrelevanten Liganden in (hoch)salinaren Medien. Das Hauptaugenmerk liegt auf Untersuchungen zur Komplexbildung von Am(III) mit Borat und kleinen organischen Liganden, die als Modell für natürliche organische Materie (mobile Tonorganika, Huminstoffe) fungieren.

Die ermittelten thermodynamischen Daten (Komplexbildungskonstanten, Enthalpien und Entropien, Wechselwirkungskoeffizienten) sollen zu einer wirklichkeitsgetreuen Modellierung der Wechselwirkung von Am(III) in realen salinaren Medien beitragen und vorhandene Lücken in den thermodynamischen Datenbasen schließen. Erstmals sollen Am(III)-Boratspezies in Lösung direkt spektroskopisch und thermodynamisch charakterisiert werden.

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Einsatz der Mikrotitrationskalorimetrie (ITC):

Direkte Bestimmung der thermodynamischen Daten (Enthalpie, Entropie) zur Wechselwirkung von Eu(III)/Am(III) mit Borat und organischen Modellliganden mittels Mikro-Titrationskalorimetrie in Abhängigkeit verschiedener Untersuchungsparameter (pH, I, T und Medium)

AP1: Untersuchung im System Am(III)-Borat-salinare Lösung

Spektroskopische Charakterisierung von Am(III)-Boratspezies in Lösung u. a. mittels TRLFS, UV-Vis, FT-IR und Ramanspektroskopie sowie Bestimmung der thermodynamischen Daten zur Komplexbildung von Am(III) mit Borat unter Standardbedingungen ($T=25\text{ °C}$, $I<0.1\text{ M NaClO}_4$) und in salinaren Medien unter Variation von Ionenstärke (bis 3 M), Salzmedium (NaCl, MgCl_2) und Temperatur (bis 80 °C) bei $\text{pH} > 7$

AP2: Untersuchungen im System Am(III)-NOM-salinare Lösung

Bestimmung der thermodynamischen Daten zur Komplexbildung von Am(III) mit sauerstoffhaltigen Modellliganden (u. a. von Salicyl-, Propion-, Wein-, Pyromellitsäure) unter Variation von pH (2-9), Ionenstärke (bis 3 M), Salzmedium (NaCl, MgCl_2) und Temperatur (bis 80 °C).

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

- Mittels ^{11}B -NMR-Spektroskopie wurde die Bildung von Salicylatoborat und Lactatoborat untersucht und die entsprechenden Bildungskonstanten ($\log K_{\text{Salicylatoborat}} = 1,10 \pm 0,14$, $\log K_{\text{Lactatoborat}} = 0,57 \pm 0,22$, Fehler: 2σ) bestimmt.
- Die Wiederholung der Komplexyierungsuntersuchungen mittels ^{11}B -NMR und Neuauswertung alter ^{11}B -NMR Daten im Eu(III)-Salicylat-B(OH)₃ System ergab eine Komplexyierungskonstante für den Eu(III)-Salicylatoborat-Komplex (1:1) von $\log \beta = 2,03 \pm 0,24$ (2σ). Diese stimmt sehr gut mit der durch TRLFS bestimmten Komplexyierungskonstante $\log \beta = 1,93 \pm 0,48$ (2σ) (nach Neuauswertung von alten TRLFS Daten) überein. Für den Eu(III)-Lactatoborat Komplex wurde mit ^{11}B -NMR eine Komplexyierungskonstante von $\log \beta = 2,05 \pm 0,24$ (2σ) bestimmt.
- Mit DFT-Rechnungen zum Eu-Borat-System wurde begonnen. Erste vorläufige Ergebnisse ergeben, dass alle Borate (Polyborate, Organoborate) ein ähnliches (schwaches) Komplexyierungsverhalten gegenüber An(III)/Ln(III) zeigen.

AP2:

- Untersuchungen zur Komplexyierung von Am^{3+} , Nd^{3+} , Eu^{3+} mit Oxalsäure in Abhängigkeit der Ionenstärke an NaCl wurden mittels TRLFS, UV-Vis-Spektroskopie und ITC durchgeführt. Für den 1:1 Komplex wurden mittels SIT-Extrapolation Werte für $\log K_{11}^0$, $\Delta \varepsilon_{11}$ sowie $\Delta_r H_{11}^0$ bestimmt, die derzeit noch validiert werden.
- Die Komplexyierung von Nd(III) mit Malonsäure wurde mittels ITC in Abhängigkeit der Ionenstärke an CaCl_2 , NaCl und NaClO_4 untersucht. Mittels SIT wurden für den 1:1 Komplex folgende thermodynamische Daten für das NaCl-Medium bestimmt:
 $\log \beta_{11}^0 = 5.47 \pm 0.09$ mit $\Delta \varepsilon_{11} = - (0.20 \pm 0.02) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$, $\Delta H^0 = 17.2 \pm 0.2 \text{ kJ/mol}$ mit $\Delta \varepsilon_{L1} = (1.17 \pm 0.3) \cdot 10^{-3} \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. Die Daten für NaClO_4 und CaCl_2 befinden sich in der Auswertung.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Erweiterung der Untersuchungen zur An/Ln(III)-(Poly)borat-Komplexyierung ($I = 0,1 \text{ M}$) auf Am(III)/Nd(III) (mittels UV/Vis-Spektroskopie \rightarrow LWCC) und Cm(III) (mittels TRLFS), sowie hohe Ionenstärken (NaClO_4 , NaCl).
- Erweiterung der Untersuchungen zur Eu(III)-Salicylatoborat-Komplexyierung ($I = 0,1 \text{ M}$) auf hohe Ionenstärken (NaClO_4) mittels ^{11}B -NMR-Spektroskopie. Der Einfluss der Ionenstärke auf die Bildung von Salicylatoborat wird untersucht.
- Fortführung der mikro-titrationskalorimetrischen Untersuchungen im System Ln(III)/organischer Ligand in Abhängigkeit der Ionenstärke und Temperatur.

5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Barkleit, J. Kretzschmar, S. Tsushima, M. Acker, G. Bernhard: „Americium(III) and Europium(III) Complex Formation with Lactate at Elevated Temperatures Studied by Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations”, Dalton Transaction, 2014, 43 11221-11232. DOI: 10.1039/C4DT00440J

J. Schott, J. Kretzschmar, M. Acker, S. Eidner, M. U. Kumke, B. Drobot, A. Barkleit, S. Taut, V. Brendler and T. Stumpf: „Formation of a Eu(III) borate solid species from a weak Eu(III) borate complex in aqueous solution“, Dalton Transactions, 2014, 43, 11516-11528

M. Müller, F. Taube, M. Acker, S. Taut: “Thermodynamic Quantities of Complex Formation of Nd(III) and Am(III) with Small Organic Acid as a Function of Ionic Strength and Temperature, Poster, 17th Radiochemical Conference, 11.-16. May 2014, Marianske Lazne

Zuwendungsempfänger: Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg		Förderkennzeichen: 02 E 11031
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2011 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 196.296,00 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 nieder- und makromolekularer Organik (Huminstoffe, Tonorganika) bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen. Die Arbeiten innerhalb dieses Teilprojektes beschäftigen sich mit dem Komplexierungsverhalten niedermolekularer tonorganischer Substanzen wie Propionat, Laktat etc. sowie makromolekulare Tonorganik und Kerogen mit dreiwertigen Actiniden im Temperaturbereich bis 90 °C. 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 Sicherheitsanalyse zur Langzeitsicherheit 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, Köln, Universität des Saarlandes sowie der TU-München.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bestimmung der temperaturabhängigen pK_s -Werte der verwendeten Ligandensysteme und pH-Wert-Messungen bei erhöhten Temperaturen
- AP2: Komplexierung von Cm(III) mit niedermolekularen organischen Substanzen bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen
- AP3: Komplexierung von Cm(III) mit Humin-/Fulvinsäuren/Kerogen bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen
- AP4: Strukturelle Untersuchungen von Ln(III)/Am(III)-Komplexen mit (ton)organischen Liganden mittels Hochtemperatur-EXAFS-Spektroskopie

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Erste Untersuchungen zur Komplexbildung von Cm(III) mit Formiat in NaCl Lösung als Funktion der Temperatur ($T = 20 - 90 \text{ }^\circ\text{C}$) wurden durchgeführt. Die $\log K_n^0(T)$ Werte für die Bildung des 1:1 und 1:2 Komplexes zeigen einen kontinuierlichen Anstieg mit steigender Temperatur von 2.1 ($20 \text{ }^\circ\text{C}$) auf 2.5 ($90 \text{ }^\circ\text{C}$) bzw. von 1.1 ($30 \text{ }^\circ\text{C}$) auf 2.1 ($90 \text{ }^\circ\text{C}$). Diese Werte sind kleiner als die entsprechenden Konstanten für die Komplexbildung mit Acetat oder Propionat. Dieser Trend ist im Einklang mit Literaturdaten bei Raumtemperatur für die entsprechenden Eu(III) Komplexe. Aufgrund der niedrigeren thermodynamischen Stabilitätskonstanten ist keine Bildung eines $[\text{Cm}(\text{Form})_3]$ Komplexes zu beobachten. Die Bildung der $[\text{Cm}(\text{Form})_n]^{3-n}$, ($n = 1, 2$) Komplexe ist endotherm und Entropie-getrieben ($\Delta_r H_m^0$ und $\Delta_r S_m^0 > 0$).

Die Komplexbildung zwischen Am(III) und Acetat ($[\text{Am}^{3+}] = 1 \text{ mM}$, $[\text{Ac}^-] = 0.2 \text{ M}$) wurde mittels EXAFS Spektroskopie als Funktion des pH-Wertes ($\text{pH} = 1-7$) untersucht. Bei pH 1-2 wurde keine Komplexbildung zwischen Am(III) und Acetat beobachtet. Zwischen pH 3.4 und 5.9 ist eine kontinuierliche Zunahme der Koordinationszahl (0.4-2.0) von Kohlenstoff in der Koordinationssphäre von Am(III) zu beobachten. Die Abstände des carboxylischen und distalen Kohlenstoffs betragen $2.78-2.84 \text{ \AA}$ und $4.39-4.41 \text{ \AA}$ und liegen in einem ähnlichen Bereich wie mittels EXAFS bestimmte Strukturdaten zur Komplexbildung anderer Actiniden mit Acetat. Zudem wurden die experimentellen EXAFS Daten durch thermodynamische Speziationsrechnungen und Faktorenanalyse der EXAFS Spektren (ITFA) komplementiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Laserspektroskopische Untersuchungen zur Komplexbildung von Cm(III) mit Propionat und Lactat als Funktion des pH-Wertes ($\text{pH} = 3 - 7$) bei erhöhten Temperaturen.
- NMR-Untersuchungen zur Komplexbildung von Cm(III) mit Oxalat als Funktion der Temperatur und des pH-Wertes.
- EXAFS-Untersuchungen zur Komplexbildung von Am(III) mit Lactat in Abhängigkeit des pH-Wertes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Fröhlich, D.R., Skerencak-Frech, A., Bauer, N., Rossberg, A., Panak, P.J., The pH dependence of Am(III) complexation with acetate – An EXAFS study, in preparation.

Fröhlich, D.R., Skerencak-Frech, A., Gast, M., Panak, P.J., Fulvic acid complexation of Eu(III) and Cm(III) at elevated temperatures studied by time-resolved laser fluorescence spectroscopy, submitted.

Fröhlich, D.R., Skerencak-Frech, A., Panak, P.J., A spectroscopic study on the formation of Cm(III) acetate complexes at elevated temperatures, Dalton Trans., 2014, 43, 3958-3965.

Skerencak-Frech, A., Fröhlich, D.R., Rothe, J., Dardenne, K., Panak, P.J., Combined time-resolved laser fluorescence spectroscopy and extended x-ray absorption fine structure spectroscopy study on the complexation of trivalent actinides with chloride at $T = 25-200 \text{ }^\circ\text{C}$, Inorg. Chem., 2014, 53, 1062-1069.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11041
Vorhabensbezeichnung: Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten in Tongestein unter Endlagerbedingungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2011 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 707.587,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen der Suche nach einem geeigneten Wirtsgestein für die Endlagerung radioaktiver Abfälle wird in Deutschland seit nunmehr etwa einem Jahrzehnt die Erforschung von Tongestein verstärkt vorangetrieben. Dabei liegt der Fokus auf der wissenschaftlichen Erfassung der Beziehungen zwischen den dort ablaufenden thermischen, hydraulischen und mechanischen (THM) Prozessen. Derartige gleichzeitig auftretende THM-Prozesse im Tongestein können sowohl das mechanische Verhalten wie auch die hydraulischen und die thermischen Eigenschaften sehr stark verändern. Daher muss im Hinblick auf eine das Langzeitverhalten eines Endlagers im Tongestein behandelnde Sicherheitsanalyse das gekoppelte thermisch-hydraulisch-mechanische Verhalten des Tongesteins beobachtet sowie physikalisch modelliert werden.

Die wissenschaftliche Erfassung der THM-Prozesse umfasst neben in situ- und laborativen Analysen auch die Formulierung und rechnerische Implementierung THM-gekoppelter physikalischer Modelle sowie deren Validierung anhand von In-situ-Messdaten. Vor diesem Hintergrund besteht das Hauptziel des Vorhabens darin, die EDV-Programme *FLAC3D* und *TOUGH2* im Hinblick auf die Simulation von mechanisch-hydraulisch-thermischen Prozessen im Tonsteingebirge unter Endlagereinflüssen zu koppeln. Ausgangspunkt ist dabei das EDV-Programm *FLAC3D*, da die geomechanische Simulation in ihrer Beeinflussung durch die geohydraulischen Prozesse im Vordergrund stehen soll. Anhand entsprechender experimenteller Untersuchungen sollen noch fehlende physikalische Grundlagendaten ermittelt werden. Darüber hinaus soll mit Blick auf das zeitabhängige Gesteinsverhalten die in den Vorhaben 3607R02596 (BfS) und 02E10427 (BMW) erarbeitete In-situ-Messdatenbank erweitert und als ein Fallbeispiel (von mehreren) zur Validation des neuen Prognoseinstrumentariums herangezogen werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Datenaufarbeitung zu FLAC3D (F) und TOUGH2 (T),
- AP2: Aufarbeitung laborativer Kenntnisse zu HM-Tongesteinseigenschaften,
- AP3: int. Literaturrecherche zum THM-Materialverhalten von Tongestein / offene Fragen,
- AP4: Erarbeitung einer F-T-Schnittstelle für Modellgitter und Randbedingungen,
- AP5: Erarbeitung von F-T-Kopplungsroutinen zur Übertragung der H \leftrightarrow M-Einflüsse,

- AP6: Erarbeitung von Referenzbeispielen,
- AP7: Durchführung von ersten Testsimulationen,
- AP8: Identifizierung und Charakterisierung implementierter Stoffmodelle,
- AP9: Organisation des In-situ-Untersuchungsprogramms,
- AP10: Ergänzung des In-situ-Equipments,
- AP11: Abstimmung und Durchführung einer Bohrkernbeschaffungskampagne,
- AP12: Durchführung der In-situ-Untersuchungen Mont Terri & Tournemire,
- AP13: Erstellung eines Laborprogramms / Anpassung bestehender laborativer Ausrüstung,
- AP14: Durchführung eigener laborativer Untersuchungen,
- AP15: Ableitung von standortbezogenen repräsentativen Materialdaten,
- AP16: Durchführung von numerischen Simulationen / Qualitäts- und Effizienzüberprüfung,
- AP17: Validierung von physikalischer Modellierung und numerischer Simulation,
- AP18: Vorstellung und Diskussion der Arbeiten,
- AP19: Dokumentation der Arbeiten, Generalisierung der Befunde, Abschlussbericht.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Begleitende Befassung mit der vorliegenden Literatur.
- AP4/5: Wissenschaftlicher Erfahrungsaustausch mit dem LBNL (Entwicklungsstätte von T) → Erweiterung des Kenntnisstandes zu T (Vertiefung des Codeverständnisses) → Verbesserung der bestehenden F-T-Schnittstelle und -Kopplungsfunktionen: Überarbeitung der internen Darstellung von Quellen und Senken sowie der internen Phasenzustandsbeschreibung, Behebung von Fehlerquellen in Randfällen (Steigerung der Robustheit).
- AP6: Ergänzung der Referenzbeispiele um ein weiteres Zweiphasenflussbeispiel.
- AP7: Durchführung von Zweiphasenfluss-Testsimulationen am Beispiel aus AP6 (→ Verifikation).
- AP12: Abschluss des In-situ-Untersuchungsprogramms.
- AP14: Abschluss des laborativen Untersuchungsprogramms.
- AP16/17: Durchführung von F-T-Zweiphasenflussberechnungen zum vorbereiteten In-situ-Beispiel aus AP6 und Vergleich mit CODE_BRIGTH-Simulationen der GRS Braunschweig (Mont Terri, BDM-B1).
- AP19: Dokumentation / Fortführung der Verfassung des Abschlussberichts.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP4/5: Erweiterung nach Bedarf.
- AP15: Auswertung der Ergebnisse der laborativen Untersuchungen.
- AP19: Fortführung der Dokumentationsarbeiten und des Abschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11051
Vorhabensbezeichnung: Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2011 bis 30.09.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 183.075,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Röhlig	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziele des Vorhabens sind die Erfassung und gegebenenfalls Weiterentwicklung numerisch effizienter Methoden der Sensitivitätsanalyse. Die numerische Effizienz soll anhand von Testfällen mit Praxisbezug überprüft und bewertet werden. Weiterhin ist geplant, methodische Grundlagen zur Sensitivitätsanalyse bei zeitabhängigen Simulationsergebnissen zu erarbeiten sowie die Wirkungsweise von Metamodellen und deren Potential hinsichtlich einer Verbesserung der numerischen Effizienz zu untersuchen.

Das Vorhaben wird in Zusammenarbeit mit der GRS Braunschweig in Anlehnung an das Forschungsvorhaben MOSEL durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Identifizierung numerisch effizienter Methoden zur Sensitivitätsanalyse und Herausarbeitung ihres theoretischen Hintergrunds
- AP2: Definition von Testfällen, bei denen die Überprüfung der numerischen Effizienz im Vordergrund steht
- AP3: Testen, Bewerten und Weiterentwickeln der numerisch effizienten Methoden im Rahmen der AP3 und 4 des Forschungsvorhabens MOSEL (02 E 10941)
- AP4: Theoretische und praktische Untersuchungen zum Einfluss von Zeitabhängigkeiten auf die Sensitivitätsanalyse
- AP5: Untersuchung der Wirkungsweise von Parameter-Transformationen auf die Sensitivitätsanalyse
- AP6: Untersuchung der Steigerungsfähigkeit der numerischen Effizienz durch Verwendung von Metamodellen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Untersuchung der Methoden wurde ergänzt und abgeschlossen. Die Auswirkung von Abhängigkeiten in den Eingangsparametern auf die Analyse wurde untersucht und muss in die Ergebnisbewertung einfließen. Vorzugsweise sind Abhängigkeiten in den Eingangsparametern zu vermeiden, wenn diese für die untersuchte Fragestellung nicht relevant sind.

Die Untersuchung zeitabhängiger Sensitivitätsanalysen wurde mit der Untersuchung von Transformationen kombiniert. Hierbei zeigt sich, dass eine Transformation in Abhängigkeit von Fragestellung und Datenlage zu betrachten ist. Für das LILW-Modell ist hier der Unterschied zwischen den Fragestellungen ‚Verhalten nach Verschluss‘ und ‚Verhalten nach Flutung‘, mit der zugehörigen Zeit-Transformation hervorzuheben. Generell ist bei einer zeitabhängigen Analyse der korrespondierende Zeitverlauf der Varianz zu beachten und in die Bewertung mit einzubeziehen. Die gilt ebenfalls für Rang-Transformationen, wenn ranggleiche Beobachtungen nicht durch alle zugehörigen Ränge abgebildet werden.

Die Erstellung des Abschlussberichtes wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für die verbleibenden drei Monate sind die Fertigstellung des Abschlussberichtes sowie die Darstellung der Ergebnisse in einem Seminarvortrag geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kuhlmann, S., Röhlig, K.-J., & Plischke, E. (2013). First results from the project: Numerical efficiency optimization of Sensitivity Analysis Methods with regard to analysis models of long term safety für nuvlara disposal sites. Proceedings of 3rd US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation (p. 17). Albuquerque, NM: Sandia National Laboratories.

Kuhlmann, S., Plischke, E., Röhlig, K.-J., & Becker, D.-A. (2013). Sensitivity analysis: Theory and practical application in safety cases. The Safety Case for Deep Geological Disposal of Radioactive Waste: 2013 State of the Art (pp. 169-176). Paris: OECD/NEA.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11061A
Vorhabensbezeichnung: Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2011 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 814.700,00 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 Szenarienentwicklung
- 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

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 12 Arbeitsgespräche mit den drei am Projekt beteiligten Organisationen durchgeführt. Die diskutierten Inhalte betrafen vor allem die Ausprägungen der Initial-FEP für das Endlagerstandortmodell Nord und die Struktur des FEP-Katalogs für das Endlagerstandortmodell Süd.

Die Arbeiten in den Arbeitspaketen waren:

- AP1: Diskussion des Endlagerstandortmodells Süd, der geowissenschaftlichen Langzeitprognose und des Endlagerkonzepts für das Endlagerstandortmodell Süd.
- AP2: Erstellung eines ersten Entwurfs des Berichts zum Sicherheits- und Nachweiskonzept.
- AP3: Szenarienanalyse für das Endlagerstandortmodell Nord mit der Erarbeitung und der Diskussion der Ausprägung der im FEP-Katalog betrachteten Initial-FEP. Beginn der Beschreibung des Referenzszenariums für das Nahfeld am Endlagerstandortmodell Nord.
- AP5: Fortführung der Diskussion des Konzepts zum radiologischen Nachweis für das Endlagerstandortmodell Nord einschließlich der Bewertung des Instrumentariums zur Sicherheitsanalyse, sowie der Datenlage für den Langzeitsicherheitsnachweis im Hinblick auf erste orientierende Analysen.
Durchführung von Abschätzungsrechnungen zur Wiederaufsättigung des Nahfeldes.
Durchführung von Abschätzungen zur Entwicklung der Gasproduktionsrate am Endlagerstandortmodell Nord. Durchführung von orientierenden Rechnungen zur Radionuklidausbreitung mit dem langzeitsicherheitsanalytischen Programm CLAYPOS.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fortsetzung der Diskussion des Endlagerkonzepts für das Endlagerstandortmodell Süd.
- AP2: Diskussion mit den Projektpartnern zum Bericht zum Sicherheits- und Nachweiskonzept.
- AP3: Fortführung der Szenarienentwicklung für das Endlagerstandortmodell Nord und Beginn der Bearbeitung des FEP-Katalogs für das Endlagerstandortmodell Süd.
- AP5: Weiterführung der Rechnungen zur Radionuklidausbreitung als Grundlage der Diskussion des Endlager- und Nachweiskonzepts.
Durchführung von Abschätzungen zur Entwicklung der Gasproduktionsrate am Endlagerstandortmodell Süd.
Durchführung von Modellierungen zum Gastransport im Grubengebäude am Endlagerstandortmodell Nord mit dem Programm TOUGH2 zur Abschätzung der Gasdruckentwicklung.

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		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2011 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 711.665,00 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 Szenarienentwicklung 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 Szenarienentwicklung
- 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 wurden basierend auf dem ersten FEP-Katalog für die Referenzregion Nord die Ausprägungen der sogenannten Initial-FEP abgeleitet. Initial-FEP sind wahrscheinliche FEP mit direkter Einwirkung auf die einzelnen Barrieren. Für jedes einzelne Initial-FEP wurden die Ausprägungen ihrer Entwicklung in einem gesonderten Dokument detailliert beschrieben. Folgende Initial-FEP wurden als wesentlich identifiziert:

- Alteration von Verschlussbauwerken
- Lageverschiebung von Schachtverschlusselementen
- Mikrobielle Prozesse
- Fluiddruck
- Spannungsänderungen und Umlagerungen
- Konvergenz
- Alteration von Tonmineralen und sonstigen Mineralen
- Radionuklidmobilisierung und Transport

Alle Ausprägungsdokumente wurden in mehreren Sitzungen intensiv unter den Projektpartnern diskutiert und fertiggestellt. Diese Dokumente dienen als Grundlage für die Entwicklung von Referenz- und Alternativszenarien für die Modellregion NORD. Ein erster Entwurf für das Referenzszenarium im Bereich des Nahfeldes der Modellregion NORD wurde entwickelt, diskutiert und befindet sich zurzeit in Überarbeitung.

Im Rahmen des Arbeitspaketes 2 wurde damit begonnen, einen beispielhaften Sicherheitsnachweis für eine geotechnische Barriere zu erarbeiten. Als Beispiel wurde der Verschluss der Einlagerungsbohrlöcher im Endlagerkonzept NORD herangezogen. In Vorbereitung für dieses Nachweisbeispiel wurde damit begonnen, die notwendigen Daten und Informationen für diesen Nachweis zusammenzutragen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung des Referenzszenarios für die Referenzregion NORD.

Entwicklung von Alternativszenarien für die Referenzregion NORD.

Fertigstellung des Einlagerungs- und Verschlusskonzeptes für die Referenzregion SÜD.

Beginn der Erstellung des FEP-Kataloges für die Referenzregion SÜD.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M. & Meleshyn, A. (2014): Evaluation of temperature-induced effects on safety-relevant properties of clay formations with regard to HLW disposal; IGD-TP Geodisposal 2014, Manchester, DBE TECHNOLOGY GmbH and GRS.

Jobmann, M., Mrugalla, S., Rübel, A. (2014): Methodological approach for a safety demonstration and verification concept for a HLW repository in claystone in Germany; IGD-TP Geodisposal 2014, Manchester, DBE TECHNOLOGY GmbH, BGR, GRS

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2012 bis 30.06.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 568.514,00 EUR	Projektleiter: Dr. Keller	

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

Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten zu 1.2 fortgesetzt und der Bericht zu 1.3 (Modell SÜD) wurde zunächst als interne Arbeitsgrundlage fertiggestellt. Die Veröffentlichung erfolgt nach der Übernahme der Informationen in den FEP-Katalog.

Die Berichte zur geologischen Langzeitprognose (3.1) für die Modelle NORD und SÜD liegen als Entwurf vor und befinden sich in der Endbearbeitung BGR-internen Qualitätskontrolle.

Die Zusammenstellung der Inhalte der geologischen FEP für das Modell NORD (3.2) und die Ausweisung der Abhängigkeiten zu anderen FEP wurden fertiggestellt. Der FEP-Katalog Bericht (NORD) liegt als Entwurf vor und durchläuft die Qualitätskontrolle.

Für die Szenarienentwicklung (3.3) wurden die Ausprägungen der FEP mit geologischem Schwerpunkt bearbeitet. Mit der Beschreibung der zukünftigen Entwicklung des Teilsystems Wirtsgestein im Referenzszenarium wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung der Berichte zur Unteraufgabe 1.2. und 1.3 (SÜD) sowie den Berichten zu 3.1 (Langzeitprognosen).

Fertigstellung des Berichts zum FEP-Katalog (NORD) im kommenden Halbjahr (3.2).

Beginn der Bearbeitung geologischer FEP für das Modell SÜD (3.2).

Fertigstellung der Szenarienentwicklung und Bearbeitung des Szenarienberichts (3.3, NORD).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11062A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d ³ f und r ³ t (H-DUR)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2012 bis 31.08.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.179.070,00 EUR	Projektleiter: Schneider	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d³f und r³t stehen Werkzeuge zur Modellierung der Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien (Projekte GRUPRO bzw. TRAPRO) mit expliziter Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen zur Verfügung (E-DuR). Mehrskalensätze ermöglichen ihre Anwendung auf dichte geklüftet-poröse Gesteine großer geologischer Formationen (A-DuR).

Ziele dieses Projektes sind eine deutliche Beschleunigung und eine wesentlich verbesserte Handhabung der Rechenprogramme d³f und r³t, ein verbesserter Umgang mit Modell- und Parameterungewissheiten sowie die Integration der Codes zu einem einheitlichen Werkzeug. Die Prä- und Postprozessoren werden den erweiterten Anforderungen angepasst. Damit wird die Einsetzbarkeit von d³f und r³t für Langzeitsicherheitsanalysen erheblich verbessert.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Universität Jena (Prof. Attinger) und der Universität Frankfurt (Prof. Wittum) durchgeführt. Das Steinbeis-Forschungszentrum „Technische Simulation“ (Dr. Heisig) ist über einen Unterauftrag eingebunden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP1: Leitung des Vorhabens

AP7: Entwicklung eines umfassenden graphischen Benutzerinterfaces

AP8: Simulation ausgewählter Systeme

AP9: Testrechnungen zur Verifizierung der Neuentwicklungen

AP10: Erstellung des gemeinsamen Abschlussberichtes und Erweiterung der Anwenderhandbücher

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am 17. März fand ein Arbeitsgespräch mit den Projektpartnern bei der GRS in Braunschweig statt. Das Gespräch diente zur Diskussion offener Fragestellungen und zur Abstimmung der laufenden Arbeiten zwischen den Gruppen.

Ein Katalog von Bilanzierungsmethoden, die für d^3f und r^3t für sinnvoll erachtet werden, wurde aufgestellt und an die Entwickler weitergegeben.

Am 8. Mai fand das vierte Projekt-Statusgespräch bei der GRS in Braunschweig statt. Die Arbeitsgruppen stellten die Ergebnisse ihrer bisherigen Arbeit vor und verständigten sich über das weitere Vorgehen.

Das geometrische Modell für einen Tracertest im Hard Rock Laboratory Äspö entsprechend der Beschreibung von Task 6 der Task Force on Groundwater Flow and Solute Transport (GWFTS), mit dem ein Teil der Bilanzierungsmethoden getestet werden soll, wurde erstellt.

Eine Testversion von UG4 wurde bei der GRS installiert und erste Tests durchgeführt. Dabei wurde zunächst die LUA-Skriptsprache benutzt. Die Anforderungen an das graphische Benutzerinterface wurden auf Basis erster Tests von VRL-Studio weiterentwickelt.

Das Konzept für die Implementierung einer Cauchy-Randbedingung für den Salztransport wurde weiterentwickelt und diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Das Modell für den Tracertest wird vervollständigt und eine Modellrechnung einschließlich Bilanzierung durchgeführt.
- Die Arbeit an den Randbedingungen und Bilanzierungsmethoden wird fortgesetzt.
- UG4 wird sowohl unter Benutzung der Skriptsprache als auch unter Benutzung des Benutzerinterfaces getestet.
- Die Arbeiten am Benutzerinterface werden weitergeführt.
- Die Gliederung des Abschlussberichtes wird an die Projektpartner verschickt.

Das zweite Statusgespräch wird voraussichtlich am 14. November 2014 in Frankfurt stattfinden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 11062B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 28.02.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 185.266,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Attinger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundvorhabens ist die grundlegende Erweiterung der numerischen Modelle d^3f und r^3t zur Einsetzbarkeit in Langzeitsicherheitsanalysen. Bisher simulierten d^3f und r^3t die Strömungs- und Transportmodellierung von Sedimentgesteinen in heterogenen porösen und geklüftet-porösen Medien.

Strömungs- und Transportmodelle im geologischen Untergrund und deren Vorhersagezuverlässigkeit sind mit Parameterungewissheiten behaftet, da meist zu wenig Informationen oder Messdaten, insbesondere der räumlichen Verteilung von hydraulischen Leitfähigkeiten oder der Porositäten, vorliegen. Vorhersagen sollten daher den Einfluss dieser Ungewissheiten berücksichtigen und die zu entwickelnden Modelle sollten Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die Schadstoffkonzentrationen im Untergrund liefern.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Universität Frankfurt (Prof. Wittum), dem Steinbeis-Forschungszentrum „Technische Simulation“ (Dr. Heisig) und der Gesellschaft für Reaktorsicherheit in Braunschweig (GRS, Frau Schneider) durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens wird folgendes Arbeitspaket von der Arbeitsgruppe Attinger (Universität Jena) bearbeitet:

AP4: Berücksichtigung von Ungewissheiten:

- Generierung räumlich verteilter Zufallsfelder mit bestimmten geologischen Eigenschaften (hydraulische Leitfähigkeiten, Porositäten)
- Simulation von Strömungs- und Schadstofftransportsituationen mittels Monte-Carlo-Simulationen
- Berechnung von Wahrscheinlichkeitsverteilungen von Schadstoffverteilungen mittels der Methode der „filtered probability density functions“
- Lösung der hochdimensionalen Transportgleichung & Vergleich mit Monte-Carlo-Simulationsergebnissen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Methoden der „filtered probability density functions“ (pdf-Methoden) wurden neben einer Monte-Carlo-Simulation implementiert. Das zugrundeliegende Geschwindigkeitsfeld wurde mittels Coarse Graining upgescaled, um Vergleiche zwischen Simulationen auf der Darcy-Skala und der Feld-Skala durchzuführen.

Des Weiteren wurde eine Literaturrecherche zum Thema Konzentrationsfluktuationen und insbesondere zu den Varianzen der mittleren Konzentrationen von gelösten Schadstoffen im Grundwasser durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Recherche helfen uns, die Ergebnisse der beiden Simulationstypen (Monte-Carlo und pdf-Methoden) zu interpretieren.

4. Geplante Weiterarbeiten

Zurzeit wird untersucht, wie sich fraktale Leitfähigkeitsfelder im Vergleich zu klassischen Gauß'schen Feldern auf die Konzentrationsfluktuationen auswirken.

Über die Ergebnisse der Vergleiche zwischen den Monte-Carlo-Simulationen und den pdf-Simulationen in klassischen und fraktalen Medien mit Fokus auf den Konzentrationsfluktuationen werden wir eine Veröffentlichung schreiben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Konferenzen:

Schüler, L., S. Attinger, 2014: Filtered density function methods applied to solute transport in heterogenous media, 20. CMWR, 10 June - 13 June 2014, Stuttgart, Germany, Talk

Suciu, N., P. Knabner, S. Attinger, C. Vamos, L. Schüler: Concentration PDF modeled by global random walk, 20. CMWR, 10-13 June 2014, Stuttgart, Germany, Poster

Zuwendungsempfänger: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt		Förderkennzeichen: 02 E 11062C
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2012 bis 31.05.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 653.031,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Wittum	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziele des Projekts sind eine deutliche Beschleunigung und eine wesentlich verbesserte Handhabung der Rechenprogramme d^3f und r^3t , ein verbesserter Umgang mit Modell- und Parameterungewissheiten sowie die Integration der Codes zu einem einheitlichen Werkzeug. Damit soll die Einsetzbarkeit von d^3f und r^3t für Langzeitsicherheitsanalysen erheblich verbessert werden. Hierzu soll im Projekt die Portierung auf Mehrkern- und Graphikprozessoren (AP2), die Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD-Mehrgitterlösers (AP3), die Kopplung von d^3f und r^3t (AP5) sowie Löser für hochdimensionale Probleme (AP6) eingebracht werden.

Im Rahmen des Projekts sollen Datenstrukturen und Methoden für strukturierte Gitter in einem eigenen Modul implementiert werden. Ferner soll die Speicherverwaltung neu organisiert werden, so dass Speicherzugriffe auf den Zielsystemen GPUs- und Multicore-Systeme optimal effizient sind. Außerdem soll das erstellte Modul auf Mehrkern- und Graphikprozessoren (OpenCL) und auf Multicore-Systeme (OpenMP) portiert werden. Diese Techniken sollen dann auf unstrukturierte Gitter übertragen werden. In einem weiteren Arbeitsschritt soll die grundlegende Gebietszerlegungsstruktur in einem eigenen Modul in UG 4 implementiert werden. Sodann soll in diesem Modul ein FETI-DP-Löser mit innerem parallelen Mehrgitterlöser implementiert werden. Anschließend sollen Löser für die Kopplungsoperatoren entwickelt und umgesetzt werden. Aufbauend auf diesen Arbeiten soll eine softwaretechnische Kopplung von d^3f und r^3t auf der Basis von UG 4 erfolgen. Ferner soll ausgehend von dem implementierten Modul für strukturierte Gitter die Kombinationstechnik für dünne Gitter aus SG2 in UG 4 umgesetzt werden. Dieses Dünngittermodul soll parallelisiert werden. Die Dimensionsreduktion soll mit Hilfe der Taylor-ANOVA-Entwicklung erfolgen.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Das Simulationssystem UG ist weltweit über 380-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, dem Department für Umweltinformatik des Helmholtz-Zentrums für Umweltforschung (UFZ), Leipzig und dem Institut für Geowissenschaften der Universität Jena.

Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der beiden BMBF-Projekte vom 01.10.2006 – 31.03.2011 (FKZ 02 E 10326) und vom 01.10.2008 – 30.09.2012 (FKZ 02 E 10568).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP2: Portierung auf Mehrkern- und Graphikprozessoren

AP3: Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD-Mehrgitterlösers

AP5: Kopplung von d^3f und r^3t

AP6: Löser für hochdimensionale Probleme

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Es wurde ein Finite-Volumen-Framework für Systeme von partiellen Differentialgleichungen auf strukturierten Gittern auf CPUs/GPGPUs entwickelt. Hierbei wurde genau auf die besonderen Anforderungen von GPGPUs geachtet: Da diese kein Speichermanagement pro Thread besitzen, wurde ein Verfahren entwickelt, das über einen 1. Durchgang die Besetztheitsstruktur der dünnbesetzten Matrix ermittelt, und diese dann in einem 2. Durchgang füllt. Dieses Vorgehen ist wichtig für die Effizienz, insbesondere bei Systemen mit vielen über Reaktionen gekoppelten Gleichungen. Weiterhin wurde auf geringen Speicherverbrauch bzw. Bandbreiten-Bedarf geachtet und das System für den Einsatz der Just-In-Time-Technik (erstellen von GPU-Code aus Modellbeschreibungen) bzw. den UG4-Linkern vorbereitet.

Als Beispielproblem wurde das Elder-Problem gewählt. Dabei muss auch der nichtlineare Defekt auf der Grafikkarte berechnet werden. Erste Tests mit einer Linearisierung verliefen erfolgreich. Zurzeit wird an der Lösung des nichtlinearen Problems gearbeitet.

AP3: Das FAMG-Verfahren wurde um die Methode des adaptiven Filterns erweitert. Hierbei wird FAMG mit einem zufälligen, geglätteten Vektor als Testvektor initialisiert. Falls die Konvergenzrate noch schlecht ist, wird (über $Ax = 0$) ein glatter Fehler der bisherigen Konstruktion ermittelt und einem weiteren FAMG als Testvektor übergeben. Dann werden diese FAMGs hintereinandergeschaltet und das Verfahren weiter geführt. Dadurch können auch Probleme mit vielen Zero-Energy-Modes (= Vektoren x mit $Ax = 0$), wie z. B. 2d- oder 3d-linear Elasticity mit guter Konvergenzrate gelöst werden.

AP5: Die Implementierung von d^3f in UG4, wo die in AP2 und AP3 entwickelten Verfahren zur Verfügung stehen, hat große Fortschritte gemacht. Es wurde in umfangreichen Tests überprüft, dass die Ergebnisse von UG3 und UG4 übereinstimmen. Ein besonderes Augenmerk wurde dabei auf die Handhabung der Klüfte gelegt. Sowohl eine d- als auch eine (d-1)-dimensionale Darstellung sind möglich.

Zudem wurde im Modul r^3t für den Transport und den Zerfall von radioaktiven Schadstoffen die korrekte Berücksichtigung von Fluidquellen und -senken aus d^3f implementiert. Es gibt jetzt keine künstlichen Fluidquellen/-senken mehr in r^3t . Fluidquellen werden explizit als Frischwasserquellen betrachtet, Fluidsenken ziehen den lokal vorhandenen Schadstoff mit ab.

AP6: Die Arbeiten in AP6 wurden entsprechend dem im Antrag angegebenen Zeitplan fortgesetzt.

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 11072A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K _d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 30.11.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.189.335,00 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 angewandt werden sollte. 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: Weiterführung von Modellrechnungen zu den in AP1 ausgewählten Testfällen.
- AP2: Überarbeitung/Erweiterung des konzeptionellen Modells: Erstellung der Pitzer-Datenbasis für die relevanten Elemente sowie Definition und Durchführung erster Rechnungen von Testfällen zum Vergleich der Ionenstärkekorrektur nach Pitzer bzw. nach dem Erweiterten Debye-Hückel-Ansatz.
- AP3: Durchführung von Säulenversuchen mit Quarz unter variierenden geochemischen Bedingungen (pH 3,5 – 5,5, Hintergrundlösung Na_2SO_4 , NaClO_4 , adaptiertes Formationswasser). Auswertung und Durchführung von Modellrechnungen mit PhreeqC und STANMOD für die Quarz-Säulenversuche.
Ermittlung von Oberflächenkomplexparametern zur Sorption von Eu an Uhry Quarzsand.
Entwicklung einer Methode zur Charakterisierung der räumlichen Verteilung von U(VI) Oberflächenkomplexen mittels TRLFS und CSLM in einer Quarzsäule.
Weiteruntersuchung des Memory-Effekts bei der Bestimmung von Aluminium-Konzentrationen mittels ICP-MS. Reduktion der Zählrate durch Verwendung destillierter HNO_3 für Spül- und Messvorgänge.
Beginn der Batch-Hauptversuche mit Nickel an Quarz, Muskovit und Orthoklas.
- AP7: Durchführung von zwei Projekttreffen mit dem Verbundpartner HZDR in Braunschweig und Dresden. Vorstellung von Ergebnissen auf den Konferenzen TrePro- und FHDGG. Erstellung einer Projekt-Internetseite.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weiterführung und Dokumentation von Modellrechnungen zu den in AP1 ausgewählten Testfällen.
- AP2: Erweiterung des konzeptionelles Modells: Durchführung von Löslichkeitsrechnungen für Anhydrit in hochsalinaren Lösungen zur Ermittlung von Randbedingungen von r^3t für die Eingangskonzentrationen von Ca und SO_4 .
- AP3: Abschluss der Säulenexperimente mit Quarz und Start der Säulenexperimente mit der Reinmineralphase Orthoklas. Weitere Auswertung von Säulenversuchen mittels PhreeqC, STANMOD und Vergleich mit bereits ermittelten K_d -Werten aus Batch-Experimenten.
Weiterführung und Auswertung der Batch-Hauptversuche mit Ni an Quarz, Orthoklas und Muskovit. Beginn mit begleitenden PhreeqC-Modellrechnungen.
- AP7: Durchführung weiterer Projekttreffen mit dem Verbundpartner HZDR und Vorstellung von Projektergebnissen auf der Tagung ATAS (Advanced Techniques in Actinide Spectroscopy).

5. Berichte, Veröffentlichungen

- A. Schulze: Spatial distribution of uranium(VI) surface complexes in quartz columns. Master Thesis. Technische Universität Braunschweig, June 2014.
- S. Britz, U. Noseck, V. Brendler, W. Durner, D. Zachmann: A wrap up of modelling sorption processes of Eu under varying geochemical conditions. International Conference on Transport Reaction Processes (TrePro), Book of Abstracts, Karlsruhe, Germany, March 2014.
- S. Britz, U. Noseck, V. Brendler, W. Durner, D. Zachmann: Column experiments for reactive transport models. Poster contribution for FHDGG conference, Bayreuth, May, 2014.

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2012 bis 30.11.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
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 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

AP2:

- Präzisierung der Festlegung weiterer Konkurrenzionen / Komplexbildner auf Basis der Konsultation mit BGR: Mangan, Magnesium, Eisen, Aluminium, Sulfat
- Festlegung von Anhydrit als bestimmende Phase zur Sulfat-Löslichkeit
- Erstellung einer ersten Version einer Pitzer-Datenbasis
- Literaturrecherche, Datenbewertung und Erstellung einer umfassenden Datenbasis der wässrigen Europium(III)-Spezies

AP3:

- Experimente zur U(VI)-Sorptions an Muskovit und Orthoklas (Ionenstärkeabhängigkeit)
- Erfassung und Charakterisierung des Einflusses von Mikroben auf die Uransorption, mittels Spektroskopie und Sequenzierung
- Experimente zur U(VI)-Sorptions an Orthoklas und Muskovit (Ca^{2+} als Konkurrenzion)
- Bestimmung von Ortsverteilung und Speziation des Urans in Säulenfragmenten

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Vergleichsrechnungen für komplexere Systeme

AP2:

- Datenbewertung und Erstellung einer Datenbasis der Eu-Festphasen
- Erweiterung der Datenbasis bezüglich Fe und Mn

AP3:

- Experimente zur Np-Sorption an Muskovit und Orthoklas
- Experimente zur Nd-Sorption an Muskovit und Orthoklas
- TRLFS zu Oberflächenkomplexen des U(VI) an Orthoklas und Muskovit

AP4:

- Verbesserung der Konvergenz bei K_d -Berechnung mit Variation des Redoxpotentials

5. Berichte, Veröffentlichungen

Britz, S., Noseck, U., Brendler, V., Durner, W. Zachmann, D.: A wrap up of modeling sorption processes of Eu^{3+} under varying geochemical conditions. TRePro III, workshop, Karlsruhe, Germany, 2014.

Noseck, U., Britz, S., Flügge, J., Mönig, J., Brendler, V., Stockmann, M.: New Methodology for Realistic Integration of Sorption Processes Safety Assessments. WM2014 Conference, Phoenix, Arizona, USA, 2014.

Richter, C.: The influence of naturally occurring microorganisms on the sorption of uranium, presentation at LLNL, 23.6.2014, Livermore, USA.

Richter, C., Großmann, K., Brendler, V.: The Influence of Mineral-Originated Microorganisms on the Sorption of Uranium. Goldschmidt 2014 Conference, Sacramento, USA, 2014.

Richter, C., Fahmy, K.: Investigation of contaminated soil. ISBC Meeting, Lund, Sweden, 2014.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11082
Vorhabensbezeichnung: Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) Phase II – Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone im Korngrößenmaßstab und Überführung der Ergebnisse auf die Makroebene zur Simulation eines Injektionsvorganges		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2012 bis 31.01.2015		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 713.390,00 EUR		Projektleiter: Dr. Müller

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der Schwerpunkt in dem Vorhaben VerA Phase II liegt in der Entwicklung einer Modellierungsstrategie, mit dem Ziel, den Injektionsprozess zur Abdichtung der Auflockerungszone rechen-technisch abbilden zu können. Auf dieser Grundlage soll der Nachweis für eine qualitätsgesicherte und dauerhafte Abdichtung der an ein Verschlussbauwerk anliegenden Auflockerungszone erbracht werden.

Üblicherweise werden kontinuumsmechanische Modelle zur Modellierung der Auflockerungszone verwendet. Eine kontinuumsmechanische Beschreibung lässt jedoch eine explizite Darstellung der in der Auflockerungszone vorkommenden Rissysteme nicht zu, da die relevanten Verformungen über ein Mittlungsvolumen homogenisiert werden. Aus diesem Grund wurden in der ersten Phase von VerA Strukturmodelle verwendet, die sich an der Kornstruktur von Steinsalz orientieren, um die auf der Kornebene stattfindenden hydraulischen und mechanischen Prozesse einer Auflockerungszone modellhaft abbilden zu können. In der aktuellen Phase soll dieses Strukturmodell hinsichtlich der Leistungsfähigkeit optimiert werden. Die numerischen Entwicklungsarbeiten sollen durch ein umfassendes Laborprogramm ergänzt werden, um die Modelle zu verifizieren. Anschließend soll ein Transfer der aus den kleinräumigen Modellen abgeleiteten Informationen auf eine größere Ebene erfolgen, mit dem Ziel, die Modellierungen mit der Simulation eines Injektionsprozesses abzuschließen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Weiterentwicklung der Polyederstrukturen
- AP2: Validierung des generellen Verformungsverhaltens von Steinsalz und damit verbundener Bruchprozesse
- AP3: Transfer der kleinräumigen Informationen auf großräumige Modelle
- AP4: Mikrostrukturelle Untersuchungen zum Rissystem einer vergüteten Auflockerungszone
- AP5: Abschließende Untersuchungen zur Langzeitstabilität
- AP6: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1:

Ziel ist eine geometrische Optimierung der Polyederstrukturen, um die Entstehung kleinster Polyederkanten/ -flächen zu verhindern und somit die Rechenzeiten zu verringern. Durch die Verwendung einer weiteren Softwarebibliothek, die neben der Geometrieerzeugung auch eine Geometrieverbesserung bietet, konnten deutliche Fortschritte erzielt werden. So konnte das minimale Zonenvolumen bei der Diskretisierung um 2-3 Größenordnungen vergrößert werden. Des Weiteren konnten die hydraulischen Rechenzeiten durch ein Programmupdate von 3DEC und der damit verbundenen Implementierung zusätzlicher Funktionalitäten deutlich gesteigert werden. Allerdings zeigt sich insgesamt, dass bei einer Nutzung von 3DEC weiterhin nur Modelle im Labormaßstab praktisch lösbar bleiben.

AP1.2:

Ziel ist die Kalibrierung von Stoffmodellparametern des in VerAI genutzten Stoffmodells, um das Verformungsverhalten von Steinsalz abzubilden. Die in diesem Zusammenhang durchgeführte Sensitivitätsanalyse wurde abgeschlossen und es konnte eine gute Anpassung mit den Messkurven der Spannungs-Dehnungs-Linien für die Längs- und Querdehnung hergestellt werden. Im Rahmen einer weiterführenden Sensitivitätsanalyse soll abschließend das Bruchverhalten bewertet und durch eine Parameteranpassung mit den in AP2 durchgeführten akustischen Emissionsmessungen abgeglichen werden. Da für derartige Analysen eine große Anzahl an Rechendurchläufen benötigt werden, soll zunächst im Rahmen einer Kurzstudie überprüft werden, inwieweit ein alternativer Rechencode hier zum Einsatz kommen kann.

AP3.1 / 3.2:

Ziel dieses Arbeitspaketes ist die Erstellung eines Kontinuumsmodells, das aus den Polyederstrukturen abgeleitete Reduktionsfaktoren der Permeabilität beinhaltet. Das generelle Vorgehen sieht dabei die Ermittlung des Permeabilitätstensors der geschädigten Polyederstrukturen vor. Im Berichtszeitraum wurde vorwiegend an der Sichtung der entsprechenden theoretischen Grundlagen und deren praktischer Umsetzung gearbeitet. Der entwickelte methodische Ansatz zur Berechnung des Tensors erfolgt durch Rotation der Randbedingungen und somit durch Variation des hydraulischen Gradienten. Erste Tests an einfachen Modellen wurden bereits erfolgreich durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.2: Durchführung weiterführender Sensitivitätsanalysen zum Abgleich der Informationen aus den in AP2 durchgeführten akustischen Emissionsmessungen.

AP3.1/3.2: Ermittlung des Permeabilitätstensors für komplexe, d. h. geschädigte Polyederstrukturen. Dazu soll ein Kontinuummodell erstellt werden, um Spannungsinformationen aus diesem abzuleiten und auf die Polyederstruktur übertragen zu können. Ziel ist die Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone. Anschließend soll überprüft werden, ob die ermittelten hydraulischen Informationen auf einen Kontinuumscode übertragen werden können, um die Modellierungen mit der Simulation eines Injektionsprozesses abzuschließen.

AP2.2: Die Probekörper der in AP2 durchgeführten akustischen Emissionsmessungen sollen mit einem Harz getränkt und es sollen daraus Dünnschliffe angefertigt werden. Ziel sind zusätzliche Informationen zum Bruchverhalten auf Mikrostrukturebene.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 11092
Vorhabensbezeichnung: Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 30.04.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 307.098,00 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: Abschluss Etappe I

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Es wurden für die Rezepturfestlegung die Parameter Verarbeitungstemperatur, Lösungsgehalt, Mahlfineinheit der reaktiven Zusätze sowie Art des Calciumsulfathalbhydrates untersucht. Als Ergebnis werden 30 °C bei der Verarbeitung und 25 M.-% MgCl₂-Lösung im Bindemittel festgelegt. Des Weiteren sind sowohl α- als auch β-Halbhydrat geeignet und eine separate Aufmahlung der reaktiven Substanzen nicht notwendig.
- AP2: Unter Verwendung der festgelegten Bindemittelrezepturen wurden Probenkörper hergestellt. Diese wurden röntgendiffraktometrisch überwacht und es zeigte sich ein systematischer Zuwachs an Polyhalit unter Abbau der zwischenzeitlich gebildeten Primärphasen (Syngenit).
- AP3: Aktuelle Versuche zeigen, dass auf Basis der bisherigen Auswertung das Kompaktionsverhalten von GESAV-Material und von Salzgrus ähnlich sind aber die Permeabilitätswerte signifikant niedriger sind als Salzgrus mit vergleichbarer Kornverteilung. Nach Optimierung der isostatische Kompaktionszelle können größere Messbereiche des GESAV Materials erfasst werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weitere Untersuchungen an der festgelegten Bindemittelrezeptur werden durchgeführt:
- Polyhalitbildung
 - Erstarrungsverhalten
 - Festigkeitsentwicklung
- AP2: Überprüfung der Polyhalitbildung in GESAV-Probenmaterial bei unterschiedlichen Herstellungsbedingungen.
- AP3: Isostatische Kurzzeitkompaktionsversuche zur Bestimmung der Transporteigenschaften sowie Kriechversuche mit Probenkörpern verschiedener Einbaudichten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Becker, S., Gruner, M., Mischo, H.: „Möglichkeiten der Gefügestabilisierung von Salzgrusversatz“ in Bergbau, Zeitschrift für Rohstoffgewinnung, Energie, Umwelt; Offizielles Organ des RDB e.V.; ISSN-Nr.: 0342-5681 – Veröffentlichung zugesagt

Geplante Veröffentlichung Februar 2015 in: Tagungsband SME 144th SME Annual Meeting and Exhibit

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11102
Vorhabensbezeichnung: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2012 bis 31.12.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.249.329,00 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 Bentonit-haltigen Buffermaterialien im Hinblick auf die Aufsättigungsdynamik bei begrenztem Wasserangebot.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung des RWMC und des Salt Club in Paris.
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog und zum Salt Archive mit SANDIA.
- Teilnahme an den Aktivitäten der IGSC zum NEA-FEP-Katalog sowie Aktualisierung des IGSC-Positionspapiers zum Thema Gase.
- Arbeitsgespräch mit NAGRA zu einem abgestimmten Inventar-Datensatz für CSD-V Abfälle und Vorbereitung einer gemeinsamen Veröffentlichung.

- Beitrag zum AP6-Bericht des EU-Projekts CAST zum Status der Behandlung von C-14 in aktuellen Langzeitsicherheitsanalysen (Zusammenstellung der Arbeiten in der VSG).
- Teilnahme an der 78. Sitzung des Arbeitskreises HAW-Produkte.
- Teilnahme an dem MODARIA-Halbjahrestreffen in Bristol.
- Vorbereitung der Working Group zum Thema „Uncertainties“ auf dem kommenden Exchange-Forum der IGD-TP.

TA2:

- Teilnahme am Meeting der EBS Task Force in Tokio.
- Weiterführung des nicht-isothermen Aufsättigungsversuchs. Wegen des Verdachts auf Leckage infolge Quellung des Bentonits wurde eine Zelle versuchsweise konstruktiv so verändert, dass größere Einspannkkräfte erreicht werden konnten.
- Weiterführung des isothermen Aufsättigungsversuchs mit eingeschränkter Wasserzufuhr. Eine neue Messreihe über 5 Wochen zeigt vorher aufgetretene Diskrepanzen nicht mehr. Es wurde allerdings deutlich, dass die Behinderung des Wasserflusses durch die vorgeschalteten Granitscheiben die erwartete Versuchsdauer erheblich verlängert.
- Präsentation der Arbeiten zur Bentonitaufsättigung auf der PEBS-Abschlusskonferenz und Erstellung eines Berichtsentwurfs über die Arbeiten zur Bentonitaufsättigung im Rahmen von Task 8 b-d. Der Bericht ist im Reviewprozess.
- Weiterführung der Arbeiten zum Erfahrungsbericht über die Arbeiten am Standort Ruprechtov. Durchführung von vier Arbeitstreffen in Berlin und Prag.

4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme an der IGSC-Sitzung, dem Treffen der NEA FEP Task Group und der NEA Conference Constructing Memories.
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog und zum Salt Archive mit SANDIA. Teilnahme am nächsten Deutsch-Amerikanischen Workshop in Santa Fe.
- Gemeinsame Veröffentlichung mit NAGRA zu Radionuklidinventaren in CSD-V Abfällen.
- Weiterführung der Arbeiten zur Bildung und Ausbreitung von C-14 in einem Endlager im Salz in Kooperation mit dem CAST Projekt. Teilnahme am nächsten Treffen in Brüssel.
- Leitung der Arbeitsgruppe zum Thema „Uncertainties“ auf dem IGD-TP Exchange-Forum in Kalmar, Schweden.

TA2:

- Teilnahme am nächsten Treffen der EBS Task Force zusammen mit der Grundwasser Task Force in Berkeley. Weiterführung der laufenden Aufsättigungsversuche: Wiederholung des nicht-isothermen Versuchs mit 16 Wochen Laufzeit zur Überprüfung der möglichen Veränderung im Verlauf des Wassergehalts.
- Fertigstellung des Erfahrungsberichts über die Arbeiten am Standort Ruprechtov und Präsentation bei der RAWRA.

5. Berichte, Veröffentlichungen

NEA-OECD: Natural Analogues for Safety Cases of Repositories in Rock Salt. Salt Club Workshop Proceedings 5.-7 September 2012, Braunschweig, Germany. Radioactive Waste Management NEA/RWM/R(2013)10, March 2014.

A. Meleshyn: Meleshyn A. (2014): Microbial processes relevant for the long-term performance of high-level radioactive waste repositories in clays. In: Norris, S., Bruno, J., Cathelineau, M., Delage, P., Fairhurst, C., Gaucher, E. C., Höhn, E. H., Kalinichev, A., Lalieux, P. & Sellin, P. (eds) Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement. Geological Society, London, Special Publications, 400, <http://dx.doi.org/10.1144/SP400.6>

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 443.525,00 EUR		Projektleiter: Dr. Herbert	

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 diffusionsbestimmte, als auch und advektionsbestimmten 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. Dadurch soll am Ende der beiden Vorhaben ein konsistenter Datensatz für THMC-Modellierungen zum Langzeitverhalten von Dichtbauwerken aus Sorelbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen vorliegen.

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: 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
- AP1.6.1: Matrixproben
- AP1.6.2: Schnittflächenproben
- AP1.6.3: Proben mit realen Kontaktflächen
- 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 Rissen 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

AP1.3:

Ein Kaskadenversuch mit Sorelbeton und NaCl-Lösung wurde bis auf die Analyse der Festkörper mittels XRD abgeschlossen. Die Auswertung der chemischen Analysen der Reaktionslösungen wurde mit den Ergebnissen der geochemischen Modellrechnung verglichen. Es zeigte sich eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen Experiment und Modellierung.

Im abgeschlossenen Berichtszeitraum wurde ein weiterer Kaskadenversuch mit IP21-Lösung und Sorelbeton durchgeführt. Die Auswertung der Versuchsergebnisse erfolgt im folgenden Berichtszeitraum. Die Ergebnisse der Kaskadenversuche sowie der geochemischen Modellrechnungen werden im Jahresbericht 2014 dargestellt werden.

AP1.4:

In diesem AP wurden vorbereitende Arbeiten durchgeführt, die dazu dienen, das Fortschreiten der Korrosionsfront beim Eindringen von Lösung zu erfassen. Dafür werden in den Korrosionsversuchen die Korrosionslösungen mit Tracern (Li, Cs, J) versehen.

Zur Bestimmung der Diffusion wurden zunächst die Proben zur Aufsättigung in ungetracerte Lösung gestellt. Anschließend werden die Diffusionsversuche in wasser- und gasdichten Gefäßen als in-Diffusionsversuche durchgeführt.

Es wurden zylindrische Salzprobekörper aufgeschnitten und mit Gießharz in die Metallzylinder der Permeationsapparatur vergossen. Des Weiteren erfolgt die Permeation mit NaCl- und IP21-Lösung.

AP1.5:

Die Versuche zur Matrixkorrosion wurden begonnen. Die Probekörper wurden hierfür bereits in AP1.1 hergestellt. Die Diffusionsversuche erfolgen an den aufgesättigten Proben (s. AP1.4).

Zur Bestimmung des advektiven Transportes wurden ungestörte Sorelbetonproben in die Permeationsapparatur eingebaut und mit 5 MPa Druck beaufschlagt. Die Probenahme und Ermittlung der Tracerkonzentration über der Zeit erfolgt nach 10 bzw. 20 Monaten. Die Schnittflächenproben Salz-Salzbeton wurden in AP1.4 hergestellt und werden im Folgenden mit 5 MPa Druck beaufschlagt.

AP3.1:

Geochemische Modellrechnungen zur Ermittlung des Reaktionspfades von Salzbeton mit NaCl-Lösung wurden mit der neuen thermodynamischen Datenbasis aus THEREDA durchgeführt (AP2.1) und mit den Ergebnissen des Kaskadenversuches verglichen (s. AP1.3).

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Arbeiten zur Herstellung von Probekörpern mit Schnittflächen (Salzbeton-Salzbeton sowie Salzbeton-Salz) mit definierter Ausgangspermeabilität und Beginn der Korrosionsversuche mit diesen Proben (AP1.4 – AP1.7).

Abschließender Vergleich der geochemischen Modellrechnungen mit Ergebnissen der abgeschlossenen Kaskadenversuche (AP2.1/AP3.1). Durchführung von Modellierungen des Korrosionsfortschritts und der Permeabilitätsänderungen in der Matrix sowie Fortführung der Arbeiten in AP2.2 – 2.4.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Herbert, H.-J. (2014): Long-Term Behavior of Salt Concrete - a Material for Engineered Barriers in Final Repositories in Salt Formations - Development of Reactive Transport Models for Matrix Corrosion and Corrosion on Cracks – Paper No. 14177, WM2014 Conference, March 2 – 6, 2014, Phoenix, Arizona, USA.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11132	
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA			
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 491.350,00 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

Im Jahr 2013 wurde mit klassischen einaxialen Kriechversuchen an 5 Proben parallel begonnen, bei denen neben der axialen und radialen Deformation zusätzlich die axiale Beanspruchung, die Temperatur sowie die Luftfeuchte aufgezeichnet werden. Unter einer axialen Beanspruchung von 5 MPa zeigen alle Proben über einen Zeitraum von mehreren Wochen eine quasi stationäre Kriechdeformation in der Größenordnung von 10^{-10} 1/s. Nach einer Versuchsdauer von 107 Tagen wurde die axiale Spannung zunächst auf einen Wert von 10 MPa erhöht. Bereits nach wenigen Wochen zeigten alle Proben wieder eine quasi stationäre Kriechdeformation in der Größenordnung von 10^{-10} 1/s. Daraufhin wurde dann 68 Tage nach der ersten Spannungserhöhung das aktuelle Niveau von 20 MPa angefahren, worauf ein deutlich beschleunigtes viskoses Materialverhalten beobachtet wurde.

Im ersten Halbjahr 2014 sind an 5 Proben triaxiale Kompressionsbruchversuche durchgeführt worden. Es wurde neben der Messung von Deformation und Spannung auch ein kontinuierlicher Gasdruck aufgebracht. Bei allen 5 Proben konnte bei unterschiedlich angesetztem Manteldruck im Bereich von 1 MPa bis 5 MPa durchweg zu Versuchsbeginn kein Wert für eine Gasdurchlässigkeit ermittelt werden. Auch mit einsetzender dilatanter Deformation (Überschreitung des Bereichs maximal möglicher Kompaktion) konnte noch kein Gasfluss nachgewiesen werden. Erst unmittelbar mit Erreichen der Bruchfestigkeit konnten Werte für die Gaspermeabilität in der Größenordnung von $5 \cdot 10^{-19}$ m² bis $5 \cdot 10^{-20}$ m² abgeleitet werden. Die im Nachbruchbereich durchgeführte Messung zur Anwendung der Klinkenberg-Korrektur ergab Werte um $5 \cdot 10^{-17}$ m². Die so geschädigten Proben wurden daraufhin im Autoklaven unter stufenweise erhöhter Minimalspannung (1/ 2/ 3/ 4/ 5 MPa) rekompaktiert und dabei jeweils die Gaspermeabilität gemessen, um die Beziehung zwischen der Gasdurchlässigkeit und Minimalspannung zu ermitteln. In einem weiteren Schritt sollen dann an diesen Proben Lösungspermeabilitäten im Autoklaven ermittelt werden.

Am 03.04.2014 hat auf Einladung der ANDRA bei der GRS in Berlin ein DOPAS WP3 Treffen stattgefunden, um die aktuellen Arbeitsergebnisse zu präsentieren und mit den Projektpartnern zu diskutieren.

Am 18.06.2014 hat auf Einladung des BfS in Salzgitter ein Fachgespräch stattgefunden, bei dem vorläufige Arbeitsergebnisse der GRS zum Vorhaben LASA vorgestellt und diskutiert wurden. Dort ist auch die Möglichkeit angesprochen worden, der GRS ausgewähltes Probenmaterial aus Sorelbeton für experimentelle Untersuchungen zur Verfügung zu stellen, das über die in situ relevanten Eigenschaften verfügt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung experimenteller Untersuchungen an Salzbetonproben
- Beschaffung von Probenmaterial aus Sorelbeton (soweit verfügbar)
- Durchführung modelltheoretischer Untersuchungen, Vergleich mit Messbefunden
- Dokumentation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Czaikowski, O.: GRS experimental activities within the DOPAS Project. DOPAS WP3 Meeting, 03.04.2014, GRS Berlin, Germany.

Czaikowski, O.: National activities related to the DOPAS Project. Fachgespräch zur Stilllegung ERAM, 18.06.2014, BfS Salzgitter, Germany.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11142	
Vorhabensbezeichnung: Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS			
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 216.801,00 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 und Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

AP4: Projektleitung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Zuarbeit, Kommentierung und Diskussion für die unter der Federführung von SKB durchgeführten Arbeiten im AP2 von DOPAS zum Thema „Designbasis und Kriterien“ der in DOPAS betrachteten Verschlussbauwerke.
- AP2: Fortentwicklung eines erweiterten mathematischen Modells zur Berücksichtigung der EDZ und der Betonkorrosion bei der langzeitsicherheitsanalytischen Modellierung von Schachtverschlusselementen.
- AP3: Auswertung eines Fragebogens im WP5 von DOPAS zur Erfassung der Relevanz der durchgeführten Arbeiten für den Safety Case.
Durchführung erster deterministischer Rechnungen zur Überprüfung des in AP2 entwickelten mathematischen Modells. Berechnung des Lösungsstroms durch ein Schachtverschlusselement mit Berücksichtigung der EDZ und der Salzbetonkorrosion am Beispiel eines in der Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) entworfenen Schachtverschlusselements. Durchführung von Parametervariationsrechnungen zur Überprüfung des Einflusses einzelner Parameter auf das Modell. Als Ergebnis der durchgeführten Rechnung wird das Modell als geeignet erachtet, um in das Programm LOPOS implementiert zu werden.
- AP4: Teilnahme am DOPAS Management Team Meeting und der WP3 und WP4 Meetings am 02.04. und 03.04.2014 in Berlin.
Erstellung der WP5-Dokumente für das von der Europäischen Kommission durchgeführte Review von DOPAS nach 18 Monaten Projektlaufzeit.
Beginn der Erstellung des Berichts „Full scale demonstration of plugs and seals (DOPAS) Deliverable D5.6 - Status report on conceptual and integrated modelling activities“.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weitere Mitarbeit bei den unter „Durchgeführte Arbeiten“ genannten Arbeiten im AP2 von DOPAS zur Design-Basis.
- AP2: Analyse der bisher in DOPAS bei den experimentellen Arbeiten erzielten Ergebnisse im Hinblick auf die Kompatibilität mit den bereits vorhandenen Kenntnisstand bzw. Ermittlung der Notwendigkeit von Erweiterungen am bisherigen konzeptuellen Modell.
- AP3: Erstellung eines ersten Strukturmodells zur Durchführung zukünftiger integrierter Rechnungen auf Basis des Endlager- und Verschlusskonzeptes der VSG.
Beginn der Implementierung der zu berücksichtigenden Prozesse in ein Segmentmodell von LOPOS.
- AP4: Organisation des WP5 in DOPAS als Arbeitspaketleiter.
Durchführung eines WP5 Arbeitstreffens im September.
Fertigstellung des Deliverable D5.6 „Status report on conceptual and integrated modelling activities“.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
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. Abschließend wird die langfristige Kompaktion des Materials unter In-situ-Spannungsbedingungen simuliert und die Entwicklung relevanter Materialparameter wie z. B. die Porosität charakterisiert.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Materialoptimierung

AP2: Verfahrensoptimierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Planungsgrundlagen zur Errichtung von Abdichtbauwerken sowohl für In-situ-Tests als auch für tatsächliche Bauwerke in einem Endlager sollen dokumentiert werden. In diesem Zusammenhang wurde die vom Projektpartner GSL vorgelegte Entwurfsfassung bezüglich der jeweiligen Anforderungen, die an die zu installierenden Testbauwerke (DOMPLU, SKB; POPLU, POSIVA; EPSP, SÚRAO; FSS, ANDRA; ELSA, DBETEC/TUBAF) gestellt werden, detailliert überarbeitet. Der Bericht wurde unter dem Namen „Design Basis and Criteria“ fertiggestellt.

Die modelltheoretischen Arbeiten in diesem Vorhaben liefern grundlegende Informationen zur Material- und Einbauspezifikation einer Füllsäule als Stütz- und Abdichtkomponente. Es wurde ein Partikelmodell entwickelt, mit dessen Hilfe unterschiedliche Partikelverteilungen sowie Kornformen generiert und ein Verdichtungsprozess simuliert werden kann.

Nach erfolgreichem Test des Modells wurden Verdichtungen mit drei unterschiedlichen Kornformen simuliert, wie sie auch aus Dünnschliffuntersuchungen an Salzgrußproben bekannt sind. Es handelte sich dabei um kleine plattig-runde, flachstängelige und stängelige Partikel. Die beste Verdichtung wurde bei einer einheitlichen plattig-runden Partikelform erreicht. Hier beträgt die Restporosität nach der Verdichtung knapp 7 %. Mit steigender Ungleichförmigkeit der Körner steigt die Restporosität. Einzelne unregelmäßige Partikel verankerten sich ineinander, so dass ein höherer Druck nötig wird, um die einzelnen Körner zu brechen und das Material weiter zu verdichten. Bei einer stängeligen Geometrie ist es lediglich möglich die Probe bis zu einer Porosität von ca. 12 % zu verdichten. Kornformgemische mit unterschiedlichem Verhältnis pendeln sich bei einer Porosität im Bereich von ca. 8-10 % ein. Das sind auch Größenordnungen von Porositäten, wie sie auch aus kurzzeitigen Verdichtungsversuchen aus Laborversuchen bekannt sind, die keine viskosen Anteile der Materialverformung beim Verdichtungsprozess beinhalten.

Die entwickelten Modelle zur Simulation unterschiedlicher Verdichtungsmethoden (Impulsverdichtung und Rüttelverdichtung) wurden erfolgreich getestet. Ergebnisse liegen noch nicht vor.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Modellentwicklung zur Analyse der beiden unterschiedlichen Verdichtungsmethoden (Impulsverdichtung und Rüttelverdichtung) auf den erreichbaren Verdichtungsgrad einer Probe.

5. Berichte, Veröffentlichungen

White, M., Doudou, S., Neall, F. (2013): Design Basis and Criteria, DOPAS Work Package 2, Deliverable D-2.1, GSL, UK

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 31.01.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
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 Technologie (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 Radionuklid Ausbreitung
- 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

Es wurden im Berichtszeitraum organisatorische Arbeiten zur Projektplanung durchgeführt. Da sich der Beginn der von russischer Seite vorgesehenen Arbeiten bzgl. eines Endlagers im Leningrader Gebiet verzögert, wurden auch die wissenschaftlichen Arbeiten der GRS bisher nur in geringem Umfang durchgeführt.

AP5: Es wurden grundsätzliche Fragestellungen über den Einfluss der Endlagertiefe und der Gasdruckentwicklung auf die Integrität des Wirtsgesteins im Hinblick auf das Sicherheitskonzept des Endlagers diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Es ist geplant, die Arbeiten zum Sicherheitskonzept auszuweiten und jene zur Nachweisführung zu beginnen. Dies umschließt die Zusammenstellung der Daten zum Standortmodell, der Abfallspezifikation und dem Endlagerkonzept, sowie die Erarbeitung einer Liste für das Endlager relevanter Eigenschaften und Prozesse (FEP).

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 31.01.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
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

Auf Grund von öffentlichen Diskussionen in der Region des potenziellen Endlagerstandortes in Russland konnten von russischer Seite die Projektarbeiten noch nicht aufgenommen werden. Aus diesem Grund wurden die Projektarbeiten auf deutscher Seite weiter auf Planungsarbeiten beschränkt.

Im Berichtszeitraum wurde bekannt, dass die Öffentlichkeitsbeteiligung in der Region Leningrad erfolgreich abgeschlossen werden konnte. Die fortführenden Arbeiten sollen im Spätsommer aufgenommen werden.

Nach jetziger Planung soll gegen Ende dieses Jahres ein erstes Treffen mit den russischen Auftragnehmern in St. Petersburg erfolgen. Die vorbereitenden Arbeiten auf deutscher Seite sollen im September aufgenommen werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Aufnahme der Projektarbeiten.

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2013 bis 31.12.2015		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.293.954,00 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 entspricht dem Schwerpunkt 3 der Technologie-Plattform (IGD-TP): "Plugging and Sealing".

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.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Das Schachtverschluss-Basiskonzept für die Option Salinar besteht aus Schotterwiderlagern und Bentonitdichtelementen und wird durch zusätzliche diversitäre Verschlussselemente aus Asphalt und Salzgrus-Ton-Gemisch erweitert.
- AP2: Die Planungen für alle halbtechnischen Versuche des AP4 sind abgeschlossen. Die In-situ-Versuche finden in der Grube Sondershausen (GSES) statt. Für die Option "Ton" steht kein Versuchsstandort zur Verfügung.
- AP3: Der optimale Ton- und Wassergehalt des Salzgrus-Ton-Gemisches hängt von der jeweiligen Verdichtungsenergie ab. Durch Laborversuche mit einer Verdichtungsenergie von 15,4 MJ/m³ (bezogen auf das Feststoffvolumen) wurde mit einem Salzgrusgemisch mit 7,8 Vol.-% Friedländer Ton und 6,2 Vol.-% Wasser eine Restporosität (Gesamtporen) von 7,7 % erreicht.
- AP4: Verdichtungsversuche mit Salzgrus-Ton-Gemisch wurden in zwei Versuchsnischen in der Grube Sondershausen mit unterschiedlichen Rüttelplatten und einer Grabenwalze durchgeführt.
 Ein MgO-Ortbeton-Pfropfen der Rezeptur C3 (3-1-8-Bindemittelphase) wurde in ein Großbohrloch (D = 1 m, L = 2 m) eingebaut. Die maximale Kerntemperatur betrug 65 °C bis 70 °C. Die maximalen Expansionsdrücke betragen > 22 bar.
 Der Versuch HTV-4 zum Test eines Bentonitdichtelementes mit Äquipotentialsegmenten wurde instrumentiert und die Flüssigkeitsdruckbelastung gestartet. In den Versuchsaufbau des Dichtsegmentes wurden Sandlinsen und eine simulierte ALZ aus Sand als zusätzliche "Schwächezonen" eingebaut.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Teilbericht zur Konzeptentwicklung.
- AP2: Arbeiten abgeschlossen.
- AP3: Versuche zur Entwicklung einer neuen Asphaltrezeptur für Schachtverschlüsse.
- AP4: Einbau und Beginn von je zwei In-situ-Bohrlochversuchen mit Bitumen- und Asphalt-dichtelementen.
 Durchführung eines Technikumsversuchs zur Kalibrierung der Parameter einer Schotter-schüttung.
 Versuch zur dynamischen Impulsverdichtung von Salzgrus-Ton-Gemisch in einem Gesenk mit 8,5 m³ Volumen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

U. Glaubach, M. Hofmann, M. Gruner, W. Kudla: New Progress in Crushed Salt Compaction for Shaft Sealing Elements. International Conference on the Performance of Engineered Barriers. February 6-7, 2014. Hannover. Proceedings p. 455 - 474

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2013 bis 31.12.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 597.233,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

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

Für das AP1 wurden im Berichtszeitraum zunächst geeignete Dichtelemente und Widerlager für einen Schachtverschluss im Tongestein festgelegt und charakterisiert. Als wesentliche Module für einen Schachtverschluss wurden Bentonitdichtelemente, Widerlagerdichtelemente aus Bitumenschottersäulen und als reine Widerlager Verfüllsäulen aus Schotter sowie Betonwiderlager bestimmt. Anschließend wurden zwei Konzepte für Schachtverschlüsse erarbeitet. Als Referenzgeologien dienten die im F+E-Projekt AnSichT erarbeiteten geologischen Standortmodelle.

Im Rahmen des AP5.1 wurde ein zweidimensionales Partikel-Modell für eine Schottersäule mit Hilfe des Particle Flow Codes (PFC2D) entwickelt. Basierend auf der CPA-Analyse von 773 Schotterpartikeln wurde Kornform und Korngrößenverteilung der Partikel für das numerische Modell bestimmt. Die prozentualen Anteile der Partikel mit der jeweiligen Partikelform wurden auf Basis der CPA-Analyse statistisch ermittelt. Die Schotterpartikel wurden in PFC als sogenannte Clumps erstellt. Clumps stellen eine Zusammensetzung von mehreren kugelförmigen Partikeln in unterschiedlicher geometrischer Form dar. Zum Zwecke der Kalibrierung wurde ein Modell für einen Schüttversuch erstellt, der in analoger Form auch im Labor der TU Bergakademie Freiberg durchgeführt wird. Der wesentliche Kalibrierungsparameter ist der Reibungswinkel zwischen den Schotterpartikeln. Durch die Parametervariation lassen sich unterschiedliche Böschungswinkel für einen Schüttkegel erzielen. Dieser Böschungswinkel muss mit dem im Laborversuch erzielten Böschungswinkel in Übereinstimmung gebracht werden. Die Durchführung des Versuches und die entsprechende Modellkalibrierung sind für das kommende Quartal vorgesehen.

Im Rahmen des AP5.2 wurde ein Modell zur Simulation einer Erdbeben-induzierten Setzung in der generierten Schottersäule entworfen. Der Einfluss eines Erdbebens wurde als Geschwindigkeitsrandbedingung angesetzt. Aktuell wird das Modell bei unterschiedlichen Geschwindigkeits- oder Beschleunigungsrandbedingungen getestet.

Im AP5.3, Simulation von Bitumen und Asphalt, wurden mit dem erarbeiteten Modell Simulationen im relevanten Temperaturbereich durchgeführt. Die Simulationen zeigten mit steigender Temperatur eine wachsende Ungenauigkeit des Modells. Daraufhin wurde die numerische Umsetzung des Krafteintrages angepasst, die Modellparameter überprüft und die Zonierung verfeinert. Mit den Anpassungen kann das Temperaturverhalten und auch die Strukturviskosität nun genauer abgebildet werden. Die noch verbleibende Abweichung zwischen Messung und Modell kann durch die verwendete Näherungsfunktion der Temperaturabhängigkeit der Modellparameter erklärt werden. Dazu erfolgt gegenwärtig eine Anpassung.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterentwicklung der prinzipiellen Schachtverschlusskonzepte.

AP5: Fortführung der Arbeiten zur rechnerischen Simulation des Materialverhaltens von Bitumen und Asphalt sowie der Setzung einer Schottersäule.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11203A
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 266.200,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Während der Kenntnisstand zur aquatischen Chemie der Radionuklide mittlerweile große Fortschritte gemacht hat, sind bei der Kolloidproblematik generell noch viele Fragen offen. Die Mechanismen der Kolloidentstehung in einem Endlager sind noch nicht ausreichend verstanden und der kolloidgetragene Radionuklidtransport in einem Endlagersystem ist für ein bestimmtes Szenario derzeit schwer zu quantifizieren. Die Bentonitbarriere gilt in vielen Endlagerkonzepten als eine relevante Kolloidquelle. Je nach den geochemischen Gegebenheiten können kolloidale Tonpartikel aus dem Bentonit freigesetzt werden.

Hauptziel des Vorhabens ist es, ein verbessertes Verständnis der Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen Wechselwirkung und der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erreichen 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. Der Beitrag des INE konzentriert sich auf experimentelle Arbeiten im Labor und in Untertagelabors sowie die begleitende Erstellung von Strömungs- und Transportmodellen. Die Arbeiten der GRS fokussieren sich auf die Anwendung und Qualifizierung von Rechenprogrammen für die Langzeitsicherheitsanalyse. Im vorliegenden Bericht werden die Arbeiten der GRS beschrieben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (INE)
- AP1.1: Mechanismen der Kolloid-RN-Kluftmineral-Wechselwirkung
- AP1.2: Kolloidgetragene Radionuklid-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/INE)
- AP2.1: Simulationsrechnungen für weitere CFM Homolog/RN Experimente (GRS)
- AP2.2: Simulationsrechnungen für Mock-Up Test und integriertes CFM Experiment (GRS)
- AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP2.5: Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen im Kristallingestein (INE)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS/INE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Durchführung von 2D-Simulationsrechnungen mit dem Transportcode r^3t für das zweite Radionuklidfeldexperiment CFM RUN13-05 anhand einer Geometrie, bei der beide Bohrlöcher und der Pinkel auf eine Achse projiziert werden.
Durchführung von 1D-Simulationsrechnungen mit dem neu im Projekt ADEMOS entwickelten Transportcode COFRAME (Doppelporositätsmodell). Ermittlung von Wechselwirkungsparametern für Radionuklide, Kolloide und Kluftfüllmaterial anhand von Rechnungen zu den Feld-Dipolexperimenten CFM RUN 10-01 und 12-02. Durchführung von Simulationsrechnungen zur Vorhersage des Transports im Feldexperiment CFM RUN 13-05 auf Basis der Ergebnisse zu CFM RUN 10-01 und 12-02 und des Verhaltens des idealen Tracers.
Weiterführung der langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für ein Endlager in Granit (für ausgewählte Szenarien des neuen Safety Case von POSIVA) mit dem Rechenprogramm COFRAME. Implementierung von diskreten Kolloideinträgen zu den Zeitpunkten des Abschmelzens von Inland-Eisbedeckungen.
- AP3: Dokumentation der Modellgrundlagen und der Simulationsergebnisse des Tracer- und Homologtransports für die Versuche 08-02, 10-01, 10-03 und 12-02 gemeinsam mit allen Modellierer-Gruppen.
Teilnahme am CFM Modeller Group Meeting in Birmingham zur Präsentation und Diskussion der bisherigen Ergebnisse.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Vergleich der Ergebnisse der Vorhersagerechnungen für CFM RUN13-05 mit den experimentellen Daten. Überprüfung der Kurvenverläufe und Wiedererhaltungsraten und ggf. Diskussion von Abweichungen und entsprechende Modifikation der Wechselwirkungs-Parameter von Radionukliden, Kolloiden und Kluftmatrix.
Ableitung von Bentoniterosionsraten aus den experimentellen Ergebnissen des KIT-INE und anderer Institutionen und Durchführung von Rechnungen für das im Frühjahr gestartete integrierte Experiment mit Freisetzung von Kolloiden und Radionukliden aus einer eingebauten, dotierten Bentonitquelle.
Weiterführung der langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für ein Endlager in Granit. Anpassung von Parameterwerten nach Diskussion mit POSIVA, Durchführung weiterer Parametervariationen (auf Basis der Bandbreiten der vorliegenden Ergebnisse aus allen verfügbaren Labor- und Feldexperimenten) und Dokumentation.
- AP3: Durchführung eines Kolorado-e Arbeitstreffens mit Verbundpartner KIT-INE, Diskussion der Ergebnisse und Abstimmung, wie die experimentellen Ergebnisse in die langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen einfließen.
Erstellung einer Veröffentlichung zu den Simulationsergebnissen für die Homolog- und Radionuklidexperimente in einer Fachzeitschrift.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 11203B
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.030.253,00 EUR	Projektleiter: Dr. Schäfer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der Kenntnisstand zur Kolloidproblematik, speziell zur Prognostizierbarkeit des Kolloidquellterms, der Kolloidstabilität und Kolloid- Mineraloberflächen- Wechselwirkung unter Einbezug der Oberflächenrauigkeit hat in den letzten Jahren nicht zuletzt durch das Vorgängerprojekt KOLLORADO-2 sehr große Fortschritte gemacht. Neben der Beschreibung der Kolloidstabilität mittels elektrostatischer Ansätze sind quantitative Daten zur Erosion der Bentonitbarriere generiert worden. Alle Daten zum kolloidgetragenen Radionuklidtransport weisen auf eine starke Abhängigkeit der Kolloidmobilität von der Kluftgeometrie/Oberflächenrauigkeit hin, wobei die vollständige Dissoziation vierwertige Actinide von der Tonkolloidoberfläche nach wie vor eine offene Fragestellung ist. Hauptziel des Anschlussvorhabens ist es weiterhin, das mechanistische Verständnis der Erosion des kompaktierten Bentonits und der Radionuklid-Kolloid Wechselwirkungen unter naturnahen Bedingungen zu verbessern und die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation zu bewerten. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Der Beitrag des INE, auf den sich der vorliegende Bericht bezieht, konzentriert sich auf experimentelle Arbeiten im Labor und im Untertagelabor Grimsel sowie die begleitende Erstellung hydraulischer und kleinskalig reaktiver Transport- Modelle. Diese INE Arbeiten sind auch in das EU-Projekt CP BelBaR eingebunden (www.belbar.eu). Die Arbeiten der GRS fokussieren auf die Weiterentwicklung und Anwendung von Rechenprogrammen für die Langzeitsicherheitsanalyse.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Folgende Arbeiten wurden im Berichtszeitraum durchgeführt:

AP1.1: Status: Die Erosionsversuche als Mock-up Test des „Long term In-situ-Test“ (LIT) unter Verwendung der identen kompaktierten Bentonitringe wurden fortgeführt. Die durch Quellung des Bentonits ausgebildete Halo-förmige Struktur innerhalb der Imm Apertur wurde detailliert mineralogisch charakterisiert. Röntgenographisch ließen sich kaum Unterschiede zwischen Ringmaterial und Halo feststellen, lediglich Carbonate waren in den äußeren Halo-Bereichen nicht mehr nachzuweisen und deuten Mineral-Auflösungsvorgänge an. Ein weiterer, seit Oktober 2013 laufender Erosionsversuch wurde fortgeführt. Diese Versuchsanordnung ist in eine Ar-

gon-Handschuhbox überführt, um den Effekt von anoxischen Bedingungen und dem Einfluss von CO_2 auf das Erosionsverhalten zu untersuchen. Die zuvor unter atmosphärischen Bedingungen beobachtete pH-Drift von pH 9.3 (Grimsel Grundwasser) zu pH-Werten von ~ 8.0 ist durch diese Maßnahme minimiert. Die gesamten bei diesem Versuch generierten Kolloidsuspensionen (Kolloidkonzentration $\sim 1\text{mg/L}$) werden gesammelt und im 2. Halbjahr 2014 zu startende Radionuklidadsorptions- und Reversibilitätsexperimente verwendet.

Zusätzliche Aktivitäten im AP1.1 fokussierten sich auf die Fortführung von Untersuchungen zu Wechselwirkungskräften zwischen Kolloiden (Al_2O_3 und SiO_2) und Mineraloberflächen mittels AFM unter Grimsel Grundwasser Bedingungen. Die exakte Quantifizierung der ermittelten Kräfte und deren Vergleich mit Modellansätzen wurden fortgeführt und sind nun fast abgeschlossen. Parallel wurden Labor-Kolloidmigrationsstudien in einer neu konstruierten Fließzelle aus Plexiglas mit definierter Apertur begonnen. Die transparente Fließzelle ist modular konstruiert, so dass verschiedene Kollektormaterialien (z. B. Plexiglas unterschiedlicher Rauigkeit, Granitscheiben) eingesetzt werden können und weiterhin kompatibel zur Fluoreszenzmikroskopie. Dies ermöglicht die quantitative Analyse der (Mineral-)spezifischen Kolloidanlagerung. Erste Transportversuche mit konservativen Farbtracern (Amino-G und Rhodamin-B) wurden durchgeführt, um das experimentelle Setup und die Reproduzierbarkeit zu testen. Im nächsten Schritt sollen synthetische, fluoreszierende Kolloide zum Einsatz kommen.

AP1.2: Status: Schwerpunkt der Arbeiten im 1. Halbjahr 2014 lag (a) in der Analytik und Interpretation des zweiten Radionuklidmigrationsexperimentes im Grimsel- Felslabor (Run 13-05) und (b) Vorbereitung und Start des „Long term In-situ-Test (LIT)“.

- Die Analytik des Radionuklidexperimentes Run 13-05 ist weitgehend abgeschlossen und die Daten zusammengefasst. Alle eingesetzten Radionuklide waren mobil und konnten im Eluat gemessen werden. Die quantitative Analyse (Wiedererhalte) der Kolloidmessungen via LIBD und s- Kurven LIBD ist weitgehend abgeschlossen. Weitere Messungen mittels AMS an VERA (Vienna Environmental Research Accelerator) an reinen Grimsel Grundwasser wurden durchgeführt. Die Messungen dieser Proben zeigten, dass durch Atombombentests in die Umwelt eingebrachtes U-236 im Gegensatz zu Pu im Grimsel-System mobil ist.
- Das Packersystem mit einem Intervall bestehend aus kompaktierten Bentonitringen bestückt mit Glasampullen gefüllt mit Radionuklid-gespickter Bentonitpaste wurde im May 2014 installiert und der LIT Versuch somit gestartet. Das Monitoring- Programm wurde gestartet.

AP2.4: Status: Erste Arbeiten zur numerischen Simulation der Strömungs- und Transportprozesse von Fließzellenexperimenten unter Verwendung der Finite Elemente Software COMSOL Multiphysics© wurden durchgeführt. Die bisherigen Ergebnisse der Modellierung unter Variation der Apertur und Fließgeschwindigkeit zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten konservativen Tracer (Amino-G) Versuchen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1+2: Die geplanten Arbeiten sind im KOLLORADO-e Antrag ausführlich dargelegt und das neue Laborprogramm ist mit GRS abgestimmt. Schwerpunkt des nächsten ½ a wird neben den laufenden Laborversuchen, vor allem die Probennahme, chemische Charakterisierung und In-situ-Kolloiddetektion mittels der mobilen LIBD im Rahmen des LIT im Felslabor Grimsel sein.

AP3: Der Abschlussbericht zu KOLLORADO-2 wurde als KIT Scientific Report #7645 im Februar 2014 veröffentlicht (open Access) und für KOLLORADO-e wird weiterhin auf Publikationen in wissenschaftlichen Zeitschriften mit peer-review Verfahren fokussiert (siehe Berichte & Veröffentlichungen).

5. Berichte, Veröffentlichungen

Peer-reviewed eingereicht bzw. in Bearbeitung:

Fischer, Kurganskaya, Schäfer, Lüttge (2014) "Variability of crystal surface reactivity: What do we know?" Appl. Geochem. 43, 132

Huber, Heck, Truche, Bouby, Brendlé, Hoess, Schäfer (2014, under review), "Radionuclide desorption kinetics on synthetic Zn/Ni-labelled montmorillonite nanoparticles" Geochim. Cosmochim Acta

Blechschildt, Lanyon, Kontar, Schlickerieder, Schäfer, Trick, Martin, Steiner, Baik, Iijima, Gylling, Koskinen, Nakata, Whittleston (2014, to be submitted) "Simulating repository hydraulic boundary conditions for in situ colloid migration tests - the Colloid Formation and Migration Project (CFM) at the Grimsel Test Site, Switzerland" Eng. Geol.

Schäfer, Lagos, Hauser, Heck, Huber, Geckeis, Degueldre, Kontar, Blechschildt (2014, to be submitted) „Pu, Np, Am transport under near-natural flow conditions at the Grimsel Test Site (Switzerland)“ ES&T

Reiche, Noseck, Blechschildt, Schäfer (2014, to be submitted) „Migration of contaminants in fractured-porous media in the presence of colloids: effects of kinetic interactions“ J. Contam. Hydrol.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11213
Vorhabensbezeichnung: Qualifizierung der Rechenprogramme d^3f und r^3t , Kurztitel Quader		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 732.700,00 EUR	Projektleiter: Schneider	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d^3f und r^3t stehen Werkzeuge zur Modellierung der dichteabhängigen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien (Projekte GRUPRO bzw. TRAPRO) mit expliziter Berücksichtigung von Wärmetransport, Klüften und Kluftsystemen zur Verfügung (E-DuR). Mehrskalensätze ermöglichen ihre Anwendung auf dichte geklüftet-poröse Gesteine großer geologischer Formationen (A-DuR). Ziele eines aktuellen Projektes sind eine deutliche Beschleunigung und verbesserte Handhabung von d^3f und r^3t , ein verbesserter Umgang mit Ungewissheiten sowie die Integration zu einem einheitlichen Werkzeug (H-DuR).

Ziel dieses Projektes ist die Modellierung von Grundwasserströmung und Schadstofftransport für verschiedene reale geologische Situationen und damit die Erhöhung des Vertrauens in die Modellierung großräumiger, heterogener Modellgebiete. Zur Anwendung und Überprüfung der Neuentwicklungen aus dem Projekt E-DuR sollen Modelle mit expliziter Berücksichtigung von Klüften und des Wärmetransportes, Problemstellungen mit freier Oberfläche und Rechnungen mit r^3t , gekoppelt mit PhreeqC bearbeitet werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Strömung und Transport im Kluftgestein
- AP2: Wärmetransport
- AP3: Freie Grundwasseroberfläche
- AP4: Modellierung des reaktiven Stofftransportes mit r^3t
- AP5: Dokumentation
- AP6: Modellerstellung und Fehlerbehebung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Zusammenarbeit mit der TF GWFTS wurde fortgesetzt:
Die Arbeiten an Task 8d wurden erfolgreich abgeschlossen. Die Modellierung der einphasigen Strömung ohne mechanische Effekte lieferte nach Einführung einer schmalen Zone reduzierter Permeabilität an Strecken- und Bohrlochwänden befriedigende Ergebnisse bezüglich der beobachteten Ausflussraten. Ein Berichtsentwurf über die Arbeiten zur Grundwassermodellierung in Task8 b–d wurde erstellt und befindet sich zurzeit im Reviewprozess.
Mit einer Teilaufgabe von Task 8e – der thermohydraulischen Strömung um das Prototype Repository in Äspö in der Vorinstallationsphase – wurde begonnen. Das geometrische Modell ist weitgehend erstellt.
- AP2: Die Arbeiten am 3d-Wärmetransportmodell des Testfalls Borden Site wurden zu Ende geführt und dokumentiert. Die Cauchy-Randbedingung für die Temperatur wurde dabei getestet.
- AP3: Im Rahmen eines Benchmarkprojektes auf Basis der bei der BGR im Rahmen des FLIN-Projektes durchgeführten quasi 2d Laborexperimente zur Entstehung und die Rückbildung einer Süßwasserlinse wurden weitere Vergleichsrechnungen durchgeführt. Die Ergebnisse werden durch die BGR veröffentlicht. Im Vergleich mit FEFLOW, HydroGeosphere, OGS und Spring konnte d^{3f} die präzisesten Ergebnisse erzielen.
Das vorgesehene 3d-Modell des Ems-Ästuares soll durch ein Modell der WIPP-Site ersetzt werden. Eine zeitnahe Übermittlung der notwendigen Daten wurde durch Sandia zugesagt.
- AP4: Wurde noch nicht bearbeitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- AP1: Fortsetzung der Arbeiten am thermohydraulischen Strömungsmodell für das Prototype Repository in der Vorinstallationsphase.
Teilnahme am Joint-Meeting der Task Forces GWFTS und EBS in Berkeley.
- AP3: Mit der Erstellung des Modelles für die WIPP-Site wird begonnen.
- AP4: Beginn der Arbeiten am Testfall Cape Cod.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11223
Vorhabensbezeichnung: Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Vorprojekt zur Kalkulation und Qualifizierung der Forschungsarbeiten		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2013 bis 31.07.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 149.057,00 EUR	Projektleiter: Dr. Düsterloh	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Konstruktion und angebotsbasierende Kalkulation eines Technikumsprüfstandes zur Analyse des mechanischen und hydraulischen Verhaltens von Abdichtungselementen aus Salzschnittblöcken mit Fugenfüllung sowie Durchführung kleinmaßstäblicher Voruntersuchungen zur Herstellung zylindrischer Prüfkörper aus Salzschnittblöcken mit Fugenfüllung.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konstruktion des Technikumsprüfstandes
- AP2: Angebotsbasierende Kalkulation des Technikumsprüfstandes
- AP3: Untersuchungen zur Profilierung von Salzschnittblöcken unter Berücksichtigung eines kreiszylindrischen Schachtquerschnittes, variierter Fugenbreiten und der Vermeidung axial durchschlägiger Fugen
- AP4: Herstellung kleinskaliger Verbundsysteme zur Erprobung der Schleif- und Sägetechniken
- AP5: Voruntersuchungen zur Herstellung von Fugenmaterial aus Salzpaste / Salzschmelze / SVV
- AP6: Berichtsfassung mit Stellungnahme zur technischen Machbarkeit mit Kostenkalkulation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Maschinenbautechnische Detailkonstruktion (Festlegung erforderlicher Passungen, Dichtungen, Maßhaltigkeiten, Sicherheitseinrichtungen, etc.) für den konstruierten Technikumsprüfstand.
- Erarbeitung von Konstruktionszeichnungen (Detailkonstruktion) für diejenigen mechanischen Komponenten des Technikumsprüfstandes, die durch Dritte zu fertigenden sind und nachfolgende Einholung von Angeboten zur Kostenkalkulation. Kalkulation der Material- und Herstellungskosten für die in Eigenbau zu erstellen Anlagenkomponenten.
- Einholung von Angeboten für die hydraulischen und die mess- und regelungstechnischen Komponenten des Technikumsprüfstandes.
- Raumplanung für Anlagenkonfiguration, Hebezeuge und Versuchsbetrieb (infrastrukturelle Anforderungen an die Machbarkeit und Funktionalität des Technikumsprüfstandes in den vorhandenen Räumlichkeiten).
- Theoretische Untersuchungen zur Stereometrie von Salzschnittblöcken unter der Zielsetzung einer Vermeidung axial durchschlägiger Fugen im Verbundsystem. Validierung der Stereometrie durch Herstellung kleinskaliger Verbundsysteme aus Salzschnittblöcken (→ Modell aus Salzschnittblöcken).

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11233
Vorhabensbezeichnung: Status Quo der Lagerung C-14-haltiger Abfälle aus deutschen Hochtemperatur- und Forschungsreaktoren und Strategie (Lösungsansatz) zu deren künftigen Endlagerung (Carbon-ForeSt)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2013 bis 31.12.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 141.583,00 EUR	Projektleiter: Dörr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ist es, den Graphit/Kohlestein aus den Hochtemperaturreaktoren und der Forschungsreaktoren, der in Deutschland zu entsorgen ist, Mengen- und Aktivitätsmäßig zu erfassen und unter Berücksichtigung der rechtlichen Rahmenbedingungen zur Zwischenlagerung, zum Transport und zur Endlagerung ein geeignetes Konditionierungs- und Verpackungskonzept zu erstellen. Für den Graphit/Kohlestein aus dem THTR 300 und den Forschungsreaktoren sowie den im Porenleichtbeton eingebundenen Kernbrennstoff und Graphitstaub aus dem AVR soll ein Entsorgungskonzept im Hinblick auf eine Einlagerung in das Endlager Konrad erstellt werden. Für den Graphit/Kohlestein des AVR sollt aufgrund des hohen Aktivitätsinventars an C-14 dieser radioaktiven Abfälle die Entsorgung in einem zukünftigen Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle erfolgen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Aktuelle Bestandsaufnahme und Beschreibung des in Hochtemperatur und Forschungsreaktoren verwendeten Graphits/Kohlesteins
- AP2: Beschreibung der rechtlichen Regelungen/Rahmenbedingungen für die Zwischenlagerung, den Transport und der Endlagerung der graphit-/kohlesteinhaltigen Abfälle
- AP3: Abgleich der ermittelten Massen bzw. Aktivitäten des Graphits/Kohlesteins mit den rechtlichen Rahmenbedingungen im Hinblick auf eine mögliche Einlagerung im Endlager Konrad
- AP4: Entwicklung und Beschreibung von möglichen Konditionierungsverfahren und Behälterkonzepten
- AP5: Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die aktuelle Bestandsaufnahme der Inventare (Massen, Aktivitäten) des in Deutschland zu entsorgenden Graphits/Kohlesteins wurde abgeschlossen. Die Beschreibung der Massen und Aktivitäten erfolgte anhand der Angaben der Ablieferungspflichtigen sowie einer Literaturrecherche.
- AP2: Die zusammenfassende Beschreibung der in Deutschland geltenden rechtlichen Regelungen und Rahmenbedingungen für die Zwischenlagerung, den Transport und die Endlagerung der graphit-/kohlesteinhaltigen Abfälle wurde abgeschlossen. Die Beschreibung erfolgte anhand der identifizierten Anforderungen und Regelungen im AtG, in der StrlSchV, in der ADR/RID und aus dem Planfeststellungsbeschluss zum Endlager Konrad.
- AP3: Mit dem Abgleich der ermittelten Massen bzw. Aktivitäten des Graphits/Kohlesteins mit den rechtlichen Rahmenbedingungen wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Der in diesem Arbeitspaket geplante Abgleich der ermittelten Massen bzw. Aktivitäten des Graphits/Kohlesteins mit den im Arbeitspaket 2 beschriebenen rechtlichen Rahmenbedingungen im Hinblick auf eine mögliche Endlagerung im Endlager Konrad wird weitergeführt.
- AP4: Basierend auf den Ergebnissen des Arbeitspaketes 3 wird mit der Beschreibung der möglichen Konditionierungsverfahren und die Behälterkonzepte für die Entsorgung des Graphits/Kohlesteins begonnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2013 bis 31.12.2016		Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 952.430,00 EUR		Projektleiter: Dr. Czaikowski	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens LASA-EDZ besteht in der gezielten Bereitstellung von Laboraten für die hydro-mechanisch gekoppelte modelltheoretische Analyse des Langzeitdicht-vermögens der Auflockerungszone. 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 für ein Endlager in Salzformationen zur Verfügung zu stellen. Das Gesamtziel des Vorhabens wird durch unterschiedliche Projektbeiträge erreicht:

- Laboruntersuchungen zum Langzeitverhalten der EDZ für verschiedene Belastungs-szenarien (z. B. trockene Rekompaktion sowie Rekompaktion bei flüssigkeitsgefülltem Porenraum).
- Prozessanalytische Modellrechnungen zur Validierung der THM gekoppelten Stoffmodelle und zur Verbesserung des Verständnisses der gekoppelten hydraulisch-mechanischen Prozesse im Bereich der Auflockerungszone.

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

Im Autoklav wurde an 3 Gesteinsproben aus der Auflockerungszone die Beziehung zwischen der Gasdurchlässigkeit und Minimalspannung während der Rekompaktion der Proben ermittelt. Der Versuchsablauf wurde in 2 Phasen unterteilt:

- In der ersten Phase wurden die Proben unter stufenweise erhöhter Minimalspannung (1/ 2/ 3/ 4/ 5 MPa) rekompaktiert und dabei jeweils die Gaspermeabilität gemessen. Nach Abschluss der Messungen zur Gasdurchlässigkeit in der 5. Laststufe nach ca. 7-10 Tagen wurde die Beanspruchung von 5 MPa konstant gehalten.
- In der zweiten Phase wurde bei einer unveränderten Minimalspannung von 5 MPa im wöchentlichen Abstand die Gasdurchlässigkeit bestimmt. Hierzu wurde der Differenzdruck für alle Folgemessungen gleich gewählt.

Bei der ersten Probe konnte in der Versuchsphase (a) eine mit der Beanspruchung deutlich abnehmende Gasdurchlässigkeit von $2 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ auf $4 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ ermittelt werden. Dieser Wert nahm im Laufe der Phase (b) bis auf einen Wert von $2 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ ab. Nach einer Versuchszeit von 100 Tagen wurde die Minimalspannung stufenweise reduziert und die Gaspermeabilität bestimmt. Nach 115 Tagen im Autoklav zeigte die Probe bei 1 MPa Minimalspannung eine verbleibende Gaspermeabilität von $4 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ und liegt damit eine Größenordnung unterhalb des Ausgangswertes.

Bei der zweiten Probe wurde in der ersten Laststufe eine Gasdurchlässigkeit von $2 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ ermittelt. Dieser Wert verringerte sich bereits in der zweiten Laststufe auf $3 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$. In der dritten Laststufe mit 3 MPa Minimalspannung konnte mit dem Gasdruck von 0,7 MPa kein Gasfluss durch die Probe beobachtet werden. Auch bei der anschließenden Reduzierung der Minimalspannung auf 1 MPa nach 35 Tagen Versuchszeit konnte keine Gaspermeabilität aus den Messwerten abgeleitet werden.

Eine Optimierung der Messmethodik im Bereich geringer Permeabilität für die dritte Probe bestätigte das vorstehend beschriebene Verhalten der zweiten Probe. Auch hier konnten bei einem Ausgangswert von $2 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ in der ersten Laststufe nach Erreichen der Phase (b) lediglich Werte für die Gaspermeabilität im Bereich kleiner 10^{-22} m^2 aus den Messwerten abgeleitet werden. Nach einer Versuchszeit von 75 Tagen wurde die Minimalspannung wieder auf 1 MPa reduziert und eine weitere Messung durchgeführt, um die verbleibende Rückbildung von Wegsamkeiten im Prüfkörper zu detektieren. Auch bei diesem geringen Druckniveau konnten aus den Messungen nur Werte kleiner 10^{-22} m^2 abgeleitet werden.

Zur Ermittlung des Langzeitverhaltens in Abhängigkeit der Minimalspannung bei Lösungszufluss wird ein radial gelochter Steinsalzprüfkörper verwendet werden, der im Inneren einen Salzbetonkern enthält. Bei beiden Probekörpern wird als Ausgangswert vor der Präparation die Gaspermeabilität in Abhängigkeit der Minimalspannung bestimmt. Nach Einbau der Probe im Autoklav wird zunächst die Gaspermeabilität des Verbundsystems wiederum in Abhängigkeit der Minimalspannung gemessen. In einem weiteren Schritt wird das verwendete Medium durch eine gesättigte Salzlauge ersetzt und Lösungspereabilitäten bestimmt. Bei einer unveränderten Minimalspannung von 5 MPa werden dann im wöchentlichen Abstand weitere Messungen durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung experimenteller Untersuchungen
- Durchführung erster orientierender modelltheoretischer Untersuchungen, Vergleich mit Literaturdaten
- Dokumentation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 11253
Vorhabensbezeichnung: Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung – Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 31.12.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 296.744,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Langefeld	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Untersuchungen sollen für Verschlusskonzepte im Bereich der Endlagerung für radioaktive, wärmeentwickelnde Abfälle (HAW) im Steinsalz durchgeführt werden, um die Methodik des Integritätsnachweises zu bereits vorliegenden Konzepten von Verschlussbauwerken durch geeignete In-situ-Testverfahren zu ergänzen. Dabei sollen die Testverfahren als Bausteine im Rahmen eines Integritätsnachweises einzelner Bauwerke zu verstehen sein, der Teil eines gesamten Langzeitsicherheitsnachweises ist.

Die Ergebnisse der Forschungsarbeiten sollen allgemeingültig auf jedwedes Endlager für HAW im Steinsalz nutzbar sein. Dabei wird auch darauf Augenmerk gelegt, dass die Endlagersicherheitsforschung derzeit einer der Themenbereiche ist, welche seitens des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie gefördert wird.

Innerhalb des Abschnittes „Geotechnische Barrieren“ ordnet sich das geplante Vorhaben in folgende Schwerpunkte des Förderkonzeptes ein:

- Konzeption, Bau und Erprobung langzeitsicherer Abschlussbauwerke bzw. deren Komponenten für Endlager im Steinsalz
- Entwicklung von Konzepten für Verschlussysteme im Bereich der Kontakt- und Auflockerungszone mit Nachweis der Barrierewirkung
- Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereichs
- Ingenieurtechnischer Nachweis der Langzeit-Barrierewirkung der geotechnischen Barrieren “

Weiter berühren die durchzuführenden Arbeiten den Themenbereich Systemverhalten und Systembeschreibung (6.2.) Abschnitt Wirtsgestein:

- Untersuchung und Modellierung des geomechanischen, geochemischen und thermohydromechanischen von Steinsalz und Tonsteinen

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Übersicht Verschlusskonzepte
- AP2: Formulierung der Anforderungen
- AP3: Katalog der Vergütungsmedien
- AP4: Strömungstechnische, chemische und rheologische Charakterisierung
- AP5: Berichtslegung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Während des Berichtszeitraumes wurden die im AP1 aufgezeigten Strömungsbereiche näher charakterisiert und Anforderungen formuliert. Zudem wurden die möglichen Vergütungsmethoden in Form eines Kataloges zusammengestellt und es wurde eine Auswahl an Injektionsmedien getroffen, die den Anforderungen aus AP1 entsprechen. Die Injektionsmedien wurden dann auf Ihre Kurz- und Langzeitbeständigkeit hin bewertet und zudem wurde die Behandlung der Fluide unter bergmännischen Gesichtspunkten beurteilt.

Am 11. und 24. Februar fanden Treffen mit den Projektpartnern statt. Die Ziele der Treffen waren die Vorstellung des Projektfortschritts sowie die Definition von Begrifflichkeiten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Berichtszeitraum sollen die ausgewählten Vergütungsmedien näher charakterisiert werden. Zudem sollen Permeabilitätsmessungen und Gefüge Untersuchungen an Bohrkernen aus dem Kontaktbereich Baustoff/Gebirge in der Firste des Assevordamms untersucht werden um hieraus dann Parameter für die laborative Charakterisierung der Injektionsmittel abzuleiten.

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-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 31.03.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
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 1000 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 Berichtszeitraum wurden im Rahmen des Arbeitspakets 2 (AP2) damit begonnen, die Methoden und Werkzeuge für probabilistische Sicherheitsanalysen (PSA) für Kernkraftwerke hinsichtlich ihrer Übertragbarkeit auf eine Schachtförderanlage für schwere Lasten bis 175 t zu analysieren und zu dokumentieren. Diese Analyse konzentrierte sich auf die 2005 veröffentlichten Methoden zur probabilistischen Sicherheitsanalyse für Kernkraftwerke des Bundesamtes für Strahlenschutz und ihrer Weiterentwicklung im Teilvorhaben: Methoden des Vorhabens "Entwicklung und Erprobung von PSA-Methoden und Werkzeugen (FKZ: RS1166)" durch die GRS.

Um die Übertragbarkeit der PSA Methoden und Werkzeuge für Kernkraftwerke auf die PSA für Schachtförderanlagen zu bewerten, wurden zuerst die Randbedingungen einer PSA, wie z. B. die verfügbaren Daten und die Organisation einer PSA, analysiert.

Im Folgenden wurden die am häufigsten verwendeten Werkzeuge (Fehlerbaumanalyse und Ereignisbaumanalyse), der Übergang von der PSA Stufe I zur PSA Stufe II und die Ermittlung der Unfallabläufe und Anlagenzustände analysiert und ihre möglichen Anwendungen bei einer PSA für Schachtförderanlagen beurteilt. Außerdem wurde auch die Übertragbarkeit der verwendeten Werkzeuge und Methoden auf die Analyse aller relevanten Aspekte der PSA Stufe I bzw. Stufe II wie z. B. abhängige Ausfälle, Personalhandlungen, anlageninternen Auswirkungen, etc. bewertet.

Anschließend wurden die verwendeten Methoden und Werkzeuge im Rahmen der Behandlung von Unsicherheiten in der PSA für Kernkraftwerke analysiert und hinsichtlich ihrer Übertragbarkeit auf die PSA für Schachtförderanlagen ausgewertet.

Es zeigte sich, dass eine Übertragbarkeit der Mehrzahl der in der PSA Stufe I und Stufe II für Kernkraftwerke verwendeten Methoden und Werkzeuge auf die PSA für Schachtförderanlagen gegeben ist.

Aufgrund der Unterschiede zwischen den Sicherheitssystemen und den Betriebsprozessen der Kernkraftwerke und der Schachtförderanlagen ist eine Anpassung notwendig. Mögliche Anpassungen werden in einem ersten Entwurf des AP2 Berichts vorgeschlagen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im 2. Halbjahr wird nach Vorlage und Auswertung des Berichtes "Fortschrittliche Methoden und Werkzeuge für probabilistische Sicherheitsanalysen" (GRS 1198) das AP2 abgeschlossen und die Bearbeitung des AP3 "Bewertung eines deterministischen Ansatzes zur Störfallanalyse" aufgenommen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11273
Vorhabensbezeichnung: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V)	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.12.2013 bis 30.11.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014
Gesamtkosten des Vorhabens: 93.918,00 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. Hauptziel des Vorprojektes ist es zu zeigen, dass neue Vorgehensweisen zur Untersuchung der Wechselwirkungen von Bentoniten mit Lösungen bei erhöhten Temperaturen durchführbar sind und zu messbaren Ergebnissen führen. Konkret soll festgestellt werden, ob Änderungen des Quellvermögens von Bentoniten infolge der Reaktion mit Lösungen bei verschiedenen Temperaturen quantifizierbar sind und ob diese zu messbaren Änderungen der Permeabilität hochkompakter Bentonite führen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Dieser Nachweis soll im Vorprojekt anhand der Untersuchung eines reaktiven Bentonits erfolgen, der mit einer NaCl-Lösung bei 60 ° und 90 °C sieben Monate reagiert hat, erbracht werden. Das durch die Reaktion veränderte Quellvermögen und die dadurch möglicherweise veränderte Permeabilität des Bentonits soll erfasst werden. Eine Ausweitung dieser Untersuchungen auf ein weiteres Formationswasser und weitere Bentonite sowie die detaillierte Analyse der Ursachen der gemessenen mechanisch-hydraulischen Parameter soll erst im Hauptprojekt mittels mineralogisch-chemischer Untersuchungen der Reaktionsprodukte und mittels quantenmechanischer Modellrechnungen erfolgen. Im Hauptprojekt sollen zudem die Versuche über einen längeren Zeitraum erfolgen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Dezember 2013 und Januar 2014 erfolgte ein Screening der in der BGR verfügbaren Bentonite. Als besonders geeignet für die im Vorprojekt vorgesehenen Untersuchungen wurde der bayerische Bentonit B11 mit den Kennzeichen Ca >> Na bei oktaedrischem Al > 1.45 und oktaedrischem Fe > 0.2 ausgesucht. Anfang Februar 2014 wurden 5 kg dieses Bentonits an die GRS geliefert, wo mit dem Untersuchungsprogramm begonnen wurde.

Zunächst erfolgte entsprechend der zwischen GRS, BGR und Universität Greifswald gemeinsam festgelegten Vorgehensweise die Dialyse des Bentonits, nach einer Vorschrift, die von der Universität Greifswald zur Verfügung gestellt wurde. Für die Dialyse mussten Dialysesläuche besorgt und Gefäße ausreichender Größe bereitgestellt worden war. Die Dialyse sollte nach Vorschrift bis zu einer Restleitfähigkeit des Wassers von 10 µS/cm fortgesetzt

werden. Dieser niedrige Wert wurde erreicht. Dafür war allerdings ein ständiger Austausch des Wassers über mehrere Monate erforderlich. Erst Mitte Juni 2014 standen ausreichende Mengen dialysierten Bentonits zur Verfügung, um die Versuche bei erhöhten Temperaturen zu beginnen.

Parallel dazu wurden Zellen für die Quelldruck- und Permeabilitätsmessungen beschafft. Mit den Arbeiten zur Bestimmung des Quelldrucks des dialysierten Materials vor der Reaktion bei erhöhten Temperaturen wurde begonnen.

Parallel zu den Dialysearbeiten wurden auch die Glasgefäße für die Durchführung der Reaktionen des Bentonits mit Salzlösung bei erhöhten Temperaturen konzipiert, getestet und beschafft. Am 20. Juni 2014 wurde mit den Versuchen in den Wärmeschränken begonnen. Die Glasgefäße wurden mit dialysiertem Bentonit und NaCl-Lösung befüllt, evakuiert und zugeschweißt. Je zwei Gefäße reagieren seither unter ständigem Drehen bei 60 °C und zwei weitere bei 90 °C.

Nach ursprünglicher Planung sollte die Reaktionszeit 7 Monate betragen, um die erwarteten Effekte (Veränderung des Quelldrucks und evtl. auch der Permeabilität) messtechnisch erfassen zu können. Wenn die 7 Monate tatsächlich abgewartet werden, kann der ursprüngliche Zeitplan, der vorsieht, die Ergebnisse des Vorprojekts bis Ende November 2014 vorzulegen, nicht eingehalten werden. Am 20. Januar erst würden die Reaktionen beendet und mit der erneuten Dialyse begonnen werden. Erst anschließend könnten die vorgesehenen Quelldruck- und Permeabilitätsmessungen erfolgen.

Aus Sicht der GRS ist es ratsam, die Mindestreaktionszeit von 7 Monaten einzuhalten, auch wenn das Vorprojekt dadurch verlängert werden muss. Kürzere Reaktionszeiten bergen die Gefahr, dass die Effekte der Reaktion zwar mineralogisch zu erkennen sind, aber ihr Einfluss auf Quelldruck und Permeabilität nicht quantifiziert werden kann. Gerade dieser Aspekt ist jedoch das Hauptziel des Vorprojekts. Das diesbezügliche weitere Vorgehen sollte mit dem Projektträger abgesprochen werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der Reaktionen bei 60 ° und 90 °C
- Abbruch der Reaktionen zu einem mit dem PT zu vereinbarenden Termin
- Erfassung von Quelldruck und der Permeabilität des dialysierten kompaktierten Ausgangsmaterials
- Erfassung von Quelldruck und Permeabilität des reagierten Bentonits nach Ende der vorgesehenen Reaktionszeit

5. Berichte, Veröffentlichungen

Nguyen Thanh Lan, Jörn Kasbohm, Horst-Jürgen Herbert, Hoang Thi Minh Thao (2014): Rate of Alteration"-Experiments on a Series of Bentonite – Poster auf der International Conference of Engineered Barriers, Feb., 02.07.2014, BGR, Hannover.

2.2 W-Vorhaben

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6263
Vorhabensbezeichnung: Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Kernmaterialüberwachung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2013 bis 30.09.2017	Berichtszeitraum: 01.01.2014 bis 30.06.2014	
Gesamtkosten des Vorhabens: 772.232,00 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 Technologie, 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

- Safeguards-Webportal: Betreuung des Webportals „safeguards.de“.
- Geologische Endlagerung: Leitung des Projekts zur 3-D-Modellierung seismischer Ausbreitung für verschiedene Quellen; Leitung des Projekts zur gerichteten Radartechnologie; Mitarbeit in der Safeguards-Expertengruppe ASTOR der IAEO.
- Datenfernübertragung: Mitarbeit bei der Vereinbarung für die Implementierung der Datenfernübertragung (DFÜ) von Safeguards-Daten aus den Standort-Zwischenlagern.
- ESARDA: Mitarbeit im Steering und Editorial Committee; Leitung der AG „Verification Technologies and Methodologies“; Mitarbeit in den AGn „Containment and Surveillance“, „Destructive Analysis“, „Training and Knowledge Management“ sowie „Implementation of Safeguards“.
- Safeguardsanalytik: Durchführung eines gemeinsamen Promotionsprojektes mit dem Safeguardslabor der IAEO zur Produktion und Charakterisierung von Referenzpartikeln; Beginn eines Promotionsprojekts zur

Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Qualifizierung Jülichs für das Netzwerk der IAEO-Analyselaboratorien (NWAL).

- Satellitenfernerkundung und Geoinformationstechniken: Leitung des Projekts zum Einsatz von Fernerkundung in der IAEO.
- Novel Technologies: Teilnahme am IAEO "Technology Evaluation Workshop of Core Components of an Autonomous Navigation and Positioning System for Safeguards"
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von „State-level Concept“ (SLC), „Acquisition Path Analysis“ (APA) und „Safeguards-by-Design“ (SBD).
- AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis: Mitarbeit und Teilnahme an den Sitzungen.
- Standing Advisory Group on Safeguards Implementation (SAGSI): SAGSI-Mitarbeit.
- 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; Erstellung von Vorlagen zur Einführung von Integrated Safeguards für spezielle Anlagen; Kommentierung von Entwürfen/Vorlagen Dritter.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Leitung eines Projekts zur Verbesserung der Kernmaterialüberwachung der IAEO unter Einbezug neuer analytischer Methoden aus Statistik, Operations Research und Spieltheorie.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen Verbreitung von Marschflugkörpern, bewaffnete Drohnen und Sicherheitsrisiken der Biotechnologie (15.05.14).

4. Geplante Weiterarbeiten

- Safeguards-Webportal: Betreuung des Webportals „safeguards.de“.
- Geologische Endlagerung: Fortsetzung der Arbeiten zur 3-D-Modellierung seismischer Ausbreitung für verschiedene Quellen sowie zur gerichteten Radartechnologie.
- Datenfernübertragung: Unterstützung bei der Implementierung der DFÜ von Safeguards-Daten aus den Standort-Zwischenlagern.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Arbeitsgruppen und -Gremien.
- Novel Technologies: Erweiterte Machbarkeitsstudie zu Navigations- und Positionierungstechniken.
- Safeguardsanalytik: Fortsetzung der Promotionsprojekte zur Produktion und Charakterisierung von Referenzpartikeln sowie zur Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Fortsetzung der Qualifizierung Jülichs für IAEO-NWAL.
- Satellitenfernerkundung: Weiterführung der Studie zum Einsatz von Fernerkundung.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von SLC, APA und SBD.
- Mitarbeit in den nationalen Gremien AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis.
- SAGSI: SAGSI-Mitarbeit.
- Unterstützung des BMWi bei Umsetzung des Zusatzprotokolls und Einführung und Bewertung von IS.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Wissenschaftliche Beiträge, Teilnahme an Sitzungen bei der IAEO.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: DGAP-Expertensitzungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Veröffentlichungen im Tagungsband des INMM Annual Meeting 2014, Atlanta, 21.-24. Juli 2014 (Abgabe Juni)

Dreicer et al.: Applying State-level Approaches to Arms Control Verification

Knott et al.: Towards Production of Monodisperse Reference Particles for Nuclear Safeguards Applications

Listner et al.: Evolution of Safeguards - What Can Formal Acquisition Path Analysis Contribute?

Murphy et al.: Evolution of Safeguards - An Expert-driven Approach to Acquisition Path Analysis

Niemeyer et al.: Integrated Analysis of Satellite Imagery for Nuclear Monitoring - Results from G-SEXTANT

Sevini et al.: ESARDA Contributions to IAEA State-level Concept

Stein et al.: The Evolution of International Safeguards - A View from Germany

3 Verzeichnis der Forschungsstellen

Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover

- | | | |
|--------------------|---|------|
| 02 E 10910 | Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS | 📖 58 |
| 02 E 11061C | Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT) | 📖 88 |

DBE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine
--

- | | | |
|--------------------|--|-------|
| 02 E 10729 | Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA) | 📖 22 |
| 02 E 10730 | Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager | 📖 24 |
| 02 E 10760 | Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausgabe zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen - Kurztitel: URSEL | 📖 30 |
| 02 E 10900 | Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS | 📖 56 |
| 02 E 11061B | Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein | 📖 86 |
| 02 E 11082 | Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) Phase II - Generierung von Rissystemen einer Auflockerungszone im Korngrößenmaßstab und Überführung der Ergebnisse auf die Makroebene zur Simulation eines Injektionsvorganges | 📖 100 |
| 02 E 11152 | Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD) | 📖 112 |
| 02 E 11182B | Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS | 📖 116 |
| 02 E 11193B | Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen | 📖 120 |
| 02 E 11233 | Status Quo der Lagerung C-14-haltiger Abfälle aus deutschen Hochtemperatur- und Forschungsreaktoren und Strategie (Lösungsansatz) zu deren künftigen Endlagerung (CarbonForeSt) | 📖 130 |
| 02 E 11263 | Sicherheitstechnische Untersuchungen zum Schachttransport schwerer Lasten bis zu 175 Tonnen Nutzlast (SULa) | 📖 136 |

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) | 📖 40 |
|-------------------|---|------|

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










- | | | |
|------------|---|-------|
| 02 E 10780 | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA) | 📖 34 |
| 02 W 6263 | Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden | 📖 142 |

Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena




- | | | |
|-------------|--|------|
| 02 E 11062B | Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR) | 📖 92 |
|-------------|--|------|

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mit beschränkter Haftung, Schwertnergasse 1, 50667 Köln
--


- | | | |
|-------------|---|------|
| 02 E 9944 | Goelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2 | 📖 10 |
| 02 E 10367 | Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen | 📖 12 |
| 02 E 10377 | Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen | 📖 14 |
| 02 E 10608 | Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa | 📖 16 |
| 02 E 10689 | Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS | 📖 18 |
| 02 E 10719 | Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA) | 📖 20 |
| 02 E 10740 | Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager | 📖 26 |
| 02 E 10750 | Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausgabe zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgesteinen - Kurztitel: URSEL | 📖 28 |
| 02 E 10770 | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA) | 📖 32 |
| 02 E 10890 | Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS | 📖 54 |
| 02 E 10941 | Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL | 📖 60 |
| 02 E 10951 | Diffusion in kompaktiertem Salzgrus – DIKOSA | 📖 62 |
| 02 E 11061A | Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein | 📖 84 |
| 02 E 11062A | Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR) | 📖 90 |
| 02 E 11072A | Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS | 📖 96 |

- 02 E 11102 Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern  104
- 02 E 11122 Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA  106
- 02 E 11132 Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA  108
- 02 E 11142 Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS  110
- 02 E 11182A Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS  114
- 02 E 11203A Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e  122
- 02 E 11213 Qualifizierung der Rechenprogramme d^3f und r^3t , Kurztitel Quader  126
- 02 E 11243 Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Re-kompaktionsverhalten der EDZ(LASA-EDZ)  132
- 02 E 11273 Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren – Vorprojekt (UMB-V)  138


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

- 02 E 10790X Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  36
- 02 E 10971 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf  66
- 02 E 11072B Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart- K_d -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR  98


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

- 02 E 10830 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)  44

Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz

- 02 E 10981 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz  68

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

- 02 E 11062C Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)  94

Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover

- | | | |
|------------|--|----|
| 02 E 10850 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB) | 48 |
|------------|--|----|

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

- | | | |
|------------|---|----|
| 02 E 11031 | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg | 78 |
|------------|---|----|

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

- | | | |
|-------------|--|-----|
| 02 E 10800 | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA) | 38 |
| 02 E 10840 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE) | 46 |
| 02 E 10961 | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie | 64 |
| 02 E 11203B | Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e | 124 |

Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg




- | | | |
|-------------|--|-----|
| 02 E 10880 | Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs | 52 |
| 02 E 11092 | Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1 | 102 |
| 02 E 11193A | Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen | 118 |

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


- | | | |
|------------|---|----|
| 02 E 10860 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS) | 50 |
|------------|---|----|

Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld


- | | | |
|------------|--|----|
| 02 E 10820 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC) | 42 |
| 02 E 11041 | Kopplung der Softwarecodes FLAC3D und TOUGH2 in Verbindung mit in situ-, laborativen und numerischen Untersuchungen zum thermisch-hydraulisch-mechanisch gekoppelten Verhalten in Tongestein unter Endlagerbedingungen | 80 |

- 02 E 11051 Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern  82
- 02 E 11223 Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken - Vorprojekt zur Kalkulation und Qualifizierung der Forschungsarbeiten  128
- 02 E 11253 Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke im Steinsalz und deren flüssigkeitsgestützte Abdichtung – Phase I (Konzeption von Funktionsnachweis und Abdichtungsmethoden, Testung und Auswahl von Behandlungsfluiden)  134


Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden

- 02 E 11021 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden  76


Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München

- 02 E 11001 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München  72

Universität des Saarlandes, Campus Saarbrücken, 66123 Saarbrücken

- 02 E 10991 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes  70

Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam

- 02 E 11011 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam  74