

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

PTE Nr. 45

BMW geförderte FuE zu
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Januar - 30. Juni 2013

Projektträger Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung
(PTKA-WTE)

August 2013

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 Technologie (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 III C7

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

(Die im Auftrag des BMBF betreuten FuE-Vorhaben zu den FuE-Schwerpunkten:
- Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle
- Sicherheitsforschung für Bergbauregionen
wurden zum 31.12.2011 beendet.)

BMBF Referat 724

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“
- KWA ⇒ „Hausvorhaben“ des BMWi

Im Teil 3 sind die FuE-Vorhaben den jeweils ausführenden 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>
1.3	<i>Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung</i>	<i>9</i>
1.4	<i>Kernmaterialüberwachung.....</i>	<i>11</i>
2	Formalisierte Zwischenberichte	13
2.1	E-VORHABEN	13
2.2	W-VORHABEN.....	157
2.3	BMW-HAUSVORHABEN	161
3	Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen	165

1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

1.1 Endlagersystem

02 E 10075	Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 16
02 E 10086	Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-	DBE Technology GmbH, Peine	📖 18
02 E 10689	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 32
02 E 10699	Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt FZK: Thermodynamische Datenbasis für Radionuklide	Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT) , Eggenstein-Leopoldshafen	📖 34
02 E 10709	Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 36
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	📖 38
02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 40
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	📖 46
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL	DBE Technology GmbH, Peine	📖 48
02 E 10880	Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 70

02 E 10921	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle -ELSA- (TV1)	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 78
02 E 10931	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle -ELSA- (TV1)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 80
02 E 11092	Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1	Technische Universität Bergakademie Freiberg	📖 124
02 E 11112	Auswirkungen der Sicherheitsanforderungen Rückholbarkeit auf existierende Einlagerungskonzepte und Anforderungen an neue Konzepte (ASTERIX)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 128
02 E 11132	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 132
02 E 11142	Performance Assessment of Sealing Systems - Kurztitel: PASS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 134
02 E 11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 136
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	📖 146
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	📖 148
KWA 9005	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	Projektträger Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE)	📖 162

1.2 Systemverhalten und Systembeschreibung

02 E 9944	Goelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 14
02 E 10367	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 20
02 E 10377	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 22
02 E 10558	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP1 - Kurztitel: A-DuR	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 24
02 E 10608	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 26
02 E 10639	Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 28
02 E 10659	Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 30
02 E 10730	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	DBE Technology GmbH, Peine	📖 42
02 E 10740	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 44
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	📖 50
02 E 10780	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	Forschungszentrum Jülich GmbH	📖 52

02 E 10790	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	 54
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	 56
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	 58
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	 60
02 E 10830	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	 62
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	 64
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	 66
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	 68
02 E 10890	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	 72
02 E 10900	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	DBE Technology GmbH, Peine	 74
02 E 10910	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	 76
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	 82

02 E 10951	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 84
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	📖 86
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	📖 88
02 E 10981	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	📖 90
02 E 10991	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes	Universität des Saarlandes, Saarbrücken	📖 92
02 E 11001	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München	TU München	📖 94
02 E 11011	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam	Universität Potsdam	📖 96
02 E 11021	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden	TU Dresden	📖 98
02 E 11031	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg	Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg	📖 100
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	📖 102
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	📖 104
02 E11061A	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 106
02 E11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 108

02 E11061C	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	110
02 E11062A	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	112
02 E11062B	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Friedrich-Schiller-Universität Jena	114
02 E11062C	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR)	Johann Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt am Main	116
02 E11072A	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	118
02 E11072B	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden	120
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	122
02 E11102	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	126
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	130
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	142
02 E11182B	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase - SAnToS	DBE Technology GmbH, Peine	144
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	150
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	152

02 E11213 Qualifizierung der Rechenprogramme d³f und r³t,
Kurztitel Quader

**Gesellschaft für An-
lagen- und Reaktor-
sicherheit (GRS)
mbH, Köln**

 154

1.3 Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung

02 E 11162	Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	DBE Technology GmbH, Peine	 138
02 E 11172	Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	Gesellschaft für An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) mbH, Köln	 140

1.4 Kernmaterialüberwachung

02 W 6259 Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden

**Forschungszentrum
Jülich GmbH**

 158

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 31.12.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 Auswertverfahren 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: Geoelektrische Messungen werden nur noch im Streckenversatz in Sektion I betrieben. Die Resistivitätsverteilung ist seit Jahren sehr homogen und hat sich in den letzten Jahren nicht signifikant verändert. Nachdem bereits Mitte 2007 überall im Messquerschnitt Werte unter $2 \Omega\text{m}$ (entspricht einem Wassergehalt von über 25 % und damit Vollsättigung) erreicht wurden, hat sich seit 2008 eine leichte Resistivitätserhöhung im oberen Bereich des Versatzes etabliert, vermutlich als Folge einer Verschlechterung der Ankopplung wegen des stetigen Abpumpens von zutretendem Wasser aus Sektion I. Die Messungen werden bis Jahresende abgeschlossen und die Anlage nach Braunschweig zurück transportiert.

AP2: Aus der aufgewältigten Sektion II des Prototype Repository erhielt GRS vereinbarungsgemäß rückgeholte Sensoren aus dem Versatz, Versatzproben sowie zwei Bohrkernkerne aus dem oberen Bereich des Buffers von Lagerbohrloch #5, in die jeweils ein Teil der Elektrodenketten im Buffer eingeschlossen ist. Die Ergebnisse der Untersuchungen an den Proben wurden bereits im letzten Projektstatusbericht sowie beim Projekttreffen im Januar in Tokio vorgestellt. Zurzeit wird der Beitrag für den Abschlussbericht zu den Prototype Repository Nachuntersuchungen vorbereitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Abschluss der In-situ-Messungen in Sektion I und Rücktransport der Messanlage.

AP1/2: Abschließende Auswertung und Bericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10075
Vorhabensbezeichnung: Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.06.2013		Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.072.091,00 EUR		Projektleiter: Dr. Moog

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel ist die Ermittlung von thermodynamischen Daten, die die geochemische Modellierung der Eisen(II)-Chemie bei Temperaturen zwischen 25 und 90 °C ermöglichen.

Ein weiteres Ziel ist die Erweiterung des bestehenden Parametersatzes für basische Fe(II)-Lösungen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

1. Literaturstudie
2. Dampfdruckmessungen
3. Löslichkeitsmessungen
4. Untersuchung fester Lösungen
5. Untersuchung metallischer Korrosionsprodukte in quinären, hochsalinaren Lösungen
6. Auswertung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Schreiben des Abschlussberichtes.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10086
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2006 bis 31.08.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.860.958,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Wesentliche Veränderungen einer potenziellen Endlagerformation entstehen durch die bergtechnische Auffahrung der untertägigen Hohlräume und durch die Einbringung einer großen Wärmemenge von den wärmeentwickelnden Abfällen. Es ist Ziel dieses Vorhabens, die Temperaturbelastung auf die geotechnische und geologische Barriere im Zusammenhang mit dem Isolationspotenzial der Wirtsformation sowie mit der ingenieurtechnischen Realisierbarkeit der untertägigen Bohrlochlagerung zu charakterisieren. Untersuchungen haben gezeigt, dass geeignete Endlagerkonzepte für Tonstein-Formationen in Deutschland erreicht werden können, wenn man die Wärmeleitfähigkeit des Barrierematerials durch Zusatzstoffe erhöht. Dadurch wird die eingebrachte Wärme besser in die Tonformation abgeführt. Um diese Konzepte zu prüfen, sind entsprechende Materialuntersuchungen vorgesehen. Die eingebrachte Wärme bedingt auch permanente temperaturinduzierte Spannungsveränderung, deren Einfluss auf die Stabilität von Einlagerungsbohrlöchern und auf die Entwicklung der EDZ analysiert werden soll. In diesem Zusammenhang ist auch die Beteiligung an den Erhitzerversuchen in Bure und Äspö zu sehen, die sowohl die geotechnische als auch die Wirtsformation signifikant thermisch belasten.

Bei organischen Bestandteilen führt eine Temperaturerhöhung zu einer Reifung im Hinblick auf eine Kohlenwasserstoffgenese. Die Reifung organischer Substanz wird anhand von Modellrechnungen quantifiziert. Auch Umwandlungsreaktionen werden durch Temperaturerhöhung beschleunigt und verändern so den chemisch/mineralogischen Stoffbestand des Gesteins. Diesbezügliche Untersuchungen sollen als Basis dienen, um abzuschätzen, mit welchen Veränderungen man durch den Temperaturimpuls rechnen muss.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Thermische Optimierung einer geotechnischen Barriere durch Zusatzstoffe
- AP2: THM-Gesteinsverhalten im Einlagerungsbereich / EDZ und Bohrlochstabilität
- AP3: Veränderung organischer Bestandteile
- AP4: Veränderung anorganischer Bestandteile
- AP5: Mine-by Test in Mont Terri
- AP6: TED-Experiment in Bure
- AP7: TBT-Versuch in Äspö
- AP8: Optimierungsverfahren zur Parameteridentifizierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP6 / AP8:

Im Berichtszeitraum wurde im Rahmen eines Unterauftrags seitens der Firma dynardo das 3D-thermo-hydro-mechanisch gekoppelte Modell weiter verbessert. Es soll damit eine bestmögliche Simulation der thermisch induzierten Porenwasserdruckentwicklung im Rahmen des TED-Versuches in URL in Bure im Modellgebiet erreicht und somit das Prozessverständnis verbessert werden. Das Modell enthält neue Stoffgesetze, die sowohl die spannungsabhängige Permeabilität als auch die Permeabilitätsänderung als Folge der plastischen Dehnungen berücksichtigen.

Aufgrund der Vielzahl der variablen Parameter ist die Anpassung der Simulationsergebnisse an die In-situ-Messwerte durch manuelle Variation der Eingangsparameter ein sehr zeitaufwendiges Verfahren. Aus diesem Grund wurde die Identifikation der hydro-mechanischen Gesteinsparameter mit dem Softwaretool „OptiSLang“ durchgeführt. OptiSLang übernimmt die gesamte Steuerung des Anpassungsprozesses dergestalt, dass OptiSLang die Eingangsparameter eigenständig statistisch variiert und anschließend einen neuen Rechenlauf startet.

Der Erhitzerversuch TED befand sich im Berichtszeitraum bereits in der Abkühlphase. Die Leistung der drei Erhitzer wurde sukzessive herunter gefahren. Es steht nunmehr ein Datensatz zur Verfügung, der sowohl den thermischen Belastungs- als auch den Entlastungspfad abdeckt. Mit Hilfe der oben beschriebenen Methode wird nun versucht, einen Parametersatz zu bestimmen, der beide Pfade in ausreichender Genauigkeit beschreiben kann. Zum Ende des Berichtszeitraumes waren die Berechnungen zu etwa 90 % abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschließende Auswertung der Berechnungen zum Erhitzerversuch TED.

Erstellung des Abschlussberichtes.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in fünf 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

Im Berichtszeitraum wurde im Wesentlichen an den Arbeitspaketen 2, 3, 4 und 5 gearbeitet.

Arbeitspaket 2

Das fachliche, mathematische und numerische Konzept für das Fernfeldmodul *GeoTREND-F* (Nachfolger von CHETMAD) des Programmpakets *RepoTREND* (Nachfolger von EMOS) zur Berechnung des Schadstofftransports in geklüftet-porösen Medien wurde basierend auf dem für CHETMAD entwickelten Konzept fertiggestellt. Das Model von *GeoTREND-F* unterscheidet sich von CHETMAD im Wesentlichen in folgenden Punkten:

- Alle für den Schadstofftransport relevanten Prozesse werden gleichzeitig in einem Transportschritt berücksichtigt (früher wurden der Transport, die Gesteinsmatrixdiffusion und der radioaktive Zerfall nacheinander gerechnet),
- Es wird ein implizites Zeitintegrationsschema zweiter Genauigkeitsordnung verwendet (Crank-Nicolson-Schema),
- Der Schadstoffzufluss wird als Randbedingung realisiert (früher als Schadstoffquelle innerhalb des Transportpfades),
- Ein neues Konzept für die Steuerung der Zeitschrittlänge (wie bei *GeoTREND-FC*) wurde entwickelt.

Das Modul *GeoTREND-F* wurde für die Benutzerumgebung XENIA konzipiert und als Module Description (im XML-Format) realisiert.

Folgende Modulbeschreibungen wurden weiterentwickelt:

- Fernfeldmodule *GeoTREND-SP*, *GeoTREND-F*, *GeoTREND-FC*,
- Nahfeldmodul *lopos*,
- Hilfsmodule für Globaldaten, Inventare und Elementdaten,
- Zahlreiche Segmentmodelle.

Arbeitspaket 3

Die Entwicklung des C++-Programmcodes für *GeoTREND-F* wurde weitgehend abgeschlossen.

Bei der Entwicklung wurde die letzte Version von C++ (C++11) verwendet, die u. a. eine neue Bibliothek für die Multithreading-Programmierung (Nebenläufigkeit) enthält. Auf Basis dieser Bibliothek wurden Programmstrukturen (ThreadSafeQueue, ThreadPool, JoinThreads) entwickelt, die universell für die Parallelisierung von Programmabläufen verwendet werden können. Der erste Einsatz dieser neuen Programmbausteine erfolgte bei der Umsetzung von *GeoTREND-F*: der Schadstofftransport für unterschiedliche Nuklidketten und Einzelnuclide wird von mehreren zur Verfügung stehenden Prozessoren parallel berechnet.

Die neue C++-Version stellt einige neue Konzepte zur Verfügung, die es ermöglichen, die Performance der Programme deutlich zu verbessern (speziell move-Semantik und neue Iterationskonzepte für Container). Die performance-kritischen Abschnitte des bereits vorhandenen Programmcodes (Module *GeoTREND-SP*, *GeoTREND-FC* und *BioTREND*) wurden auf diese neuen Konzepte umgestellt. Wie erhofft, wurde durch diese Optimierung eine deutliche Verkürzung der Rechenzeit erreicht.

Arbeitspaket 4

Von der Fa. BREDEX, die in dem extern vergebenen Auftrag die neue grafische Benutzeroberfläche XENIA entwickelte, wurden zwei neue Bugfix-Versionen zur Verfügung gestellt. Es wurden umfangreiche Tests der beiden Versionen durchgeführt.

Arbeitspaket 5

Es wurden Tests zur Verifikation des Fernfeldmoduls *GeoTREND-F* gegenüber analytischen Lösungen durchgeführt. Weitere Tests sind erforderlich.

4. Geplante Weiterarbeiten

Eine ausführliche Dokumentation zu den Modulen *GeoTREND-F*, *GeoTREND-FC* und *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-Phasenflusses durchgeführt und das Konzept dafür entwickelt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Poster für das GRS-Fachgespräch am 19.-20. Februar 2013: „RepoTREND – ein fortgeschrittenes Werkzeug zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern für radioaktive Abfälle“.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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 Untertagelabor 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:

- Triaxialversuche zur Schädigung und Verheilung bzw. entsprechende Permeabilitätsänderungen beim COX-Tonstein
- Quelldruck und -verformung von COX-Tonstein bei Luftbefeuchtung unter Begrenzung der Axialverformung und ohne Radialbeanspruchung
- Langzeitkriechen von COX-Tonstein unter einaxialen/triaxialen Spannungen und bei Raumtemperatur über 1 bis 7 Jahre
- Gasmigration vom vorgeschädigten und anschließend verheilten Tonstein mit Messungen von Gasdurchbruchdrücke bzw. Gaspermeabilitäten bei Manteldrücken von 2 bis 15 MPa
- Thermische Wirkung auf die mechanische Stabilität eines Bohrlochs in einem großen Tonkern bei Temperaturerhöhung von 30-90 °C und unter einem Manteldruck (15 MPa).

Laboruntersuchungen an Tonversatz:

- Quelldruck und -verformung von kompaktierten Mischungen aus Ausbruchstonstein (COX) und Bentonit (MX80) im COX/MX80-Verhältnis von 20/80 und 40/60
- Wasseraufnahme der kompaktierten Ton-Bentonit-Mischungen bei Luftbefeuchtung
- Wasser- und Gaspermeabilitäten der kompaktierten Mischungen
- Vorbereitung eines Bohrlochverschlusstests, wobei eine Bohrung in einem Großtonkern mit kompaktiertem COX-MX80-Gemisch gefüllt und die Dichtigkeit des Bohrlochverschlusses gegen Wassertransport untersucht wird.

Bohrlochverformung:

Die Messergebnisse von Sensor 2 & 3 zeigen auch im 1.Hj. einen stationärer Verlauf, der minimale Messbereichs für den Sensor 3 wird voraussichtlich Ende des 2.Hj. erreicht. Die Porendrucksensoren im Nahbereich der Dilatometersonde nehmen weiterhin zu, während die Sonde in größerer Entfernung ein konstantes Druckniveau von 1.35 MPa erreicht hat.

Bei einem *Fachgespräch* mit ANDRA im April wurden die aktuellen Ergebnisse der THM-Laboruntersuchungen am COX-Tonstein und Tonversatz diskutiert und weitere gemeinsamen Interessen bzw. notwendigen Untersuchungen identifiziert.

Dokumentation:

Erarbeitung eines ausführlichen Zwischenberichts für die Zeit von 05.2007- 05.2013.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des Bohrlochtests, Durchführung begleitender Modellierungen
- Weiterführung der Laborversuche am Tonstein sowie der Versatzuntersuchungen
- Entwicklung eines Stoffansatzes für Kriechen von Tonstein

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang C.L., Wiczorek K., Czaikowski O., Miede R.: Investigations on gas migration through undisturbed and resealed clay rocks, presented at the FORGE-Symposium and Workshop, 5th to 7th February 2013, Luxembourg.

Zhang, C.L.: Sealing effects on gas migration in damaged claystone, presented at the audition CNE-ANDRA, 25th April 2013, Paris.

Zhang, C.L.: Sealing of fractures in claystone, accepted for publication in the Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering (2013, in press).

Zhang, C.L.: Characterization of excavated claystone and claystone-bentonite-mixtures as backfill/seal material, accepted for publication in the proceedings of the 5th international clay meeting - Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement.

Czaikowski, O., Miede, R., Rothfuchs, T.: Self-sealing barriers of clay/sand mixtures – Lessons learnt from in-situ experiment and retrospective modelling, accepted for publication in the proceedings of the 5th international clay meeting - Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10558
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP1 - Kurztitel A-DuR -		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 31.03.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 31.03.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 971.750,00 EUR	Projektleiter: Schneider	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d^3f und r^3t stehen Werkzeuge zur Modellierung der Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien mit expliziter Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen zur Verfügung.

Die beiden Rechenprogramme sollen aber nicht nur für poröse Medien mit expliziten Klüften sondern auch für dichte geklüftet-poröse Gesteine großer geologischer Formationen Anwendung finden. Dies geschieht in integrierten sicherheitsanalytischen Modellen nur sehr vereinfacht. Der Schadstofftransport wird derzeit nur als Diffusionsprozess abgebildet. Da die bei allen potenziellen Wirtsgesteinen auftretenden Inhomogenitäten und Klüfte auf unterschiedlichen Skalenebenen auftreten, müssen Mehrskalensätze berücksichtigt werden. Diese berücksichtigen lokale Effekte bzw. steile Druck- bzw. Konzentrationsgradienten in hoher Auflösung, während für die großräumige Modellierung anderer Bereiche Mittelwerte benutzt werden. Auch die Präprozessoren zur Dateneingabe werden den erweiterten Anforderungen angepasst.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Uni Jena (Prof. Attinger), dem Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung-UFZ (Prof. Kolditz) und der Uni Frankfurt (Prof. Wittum) durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Auswahl von Datensätzen
- AP6: Geostatistische Methoden, stochastische und fraktale Modellierung
- AP9: Testrechnungen
- AP10: Entwicklung und Realisierung der Benutzeroberfläche
- AP11: Koordinierung des Vorhabens

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der gemeinsame Projekt-Abschlussbericht wurde weitgehend fertig gestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Endbearbeitung des Projekt-Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 31.12.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 Hintergrundsalsen (Nitrate 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

Mit Hilfe von ionenselektiven Elektroden (ISE) wurden die Aktivitätskoeffizienten von NaHS-Lösungen bestimmt. Hierfür wurde die Methode weiterentwickelt und dokumentiert. Für das System NaHS-NaCl-H₂O liegen nunmehr ausreichend viele Messreihen mit NaCl als Hintergrundsatz bei 25 °C und bei 40 °C vor. Die NaCl-Konzentration variierte dabei zwischen 0-6,08 [mol/kg H₂O].

Um die Entwicklung eines thermodynamischen Aktivitätsmodells für Hintergrundsätze auf eine breitere experimentelle Datenbasis stellen zu können, wurde die bereits zu Projektanfang durchgeführte Literaturlauswertung nun auch auf kalorimetrische Messungen ausgeweitet. Aufgrund der nun einbezogenen Daten und des weiterentwickelten Auswerteinstrumentes Wotan war es nun möglich, Modelle zur Beschreibung der Aktivitätskoeffizienten von Lösungen der Salze NaClO₄, NaNO₃, KNO₃ und LiClO₄ abzuleiten. Für NaClO₄ und LiClO₄ werden jedoch noch weitere experimentelle Stützstellen bei Temperaturen über 25 °C benötigt. Für ternäre Lösungen kann aufgrund eigener Messungen wie auch aufgrund von Literaturdaten in der Regel von einer idealen Mischung ausgegangen werden. Dadurch wird es möglich, ternäre Wechselwirkungskoeffizienten direkt aus Messungen einfacher Salzlösungen abzuleiten.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung von potentiometrischen Messungen am System Na₂SO₄-Na₂S-H₂O in der Glovebox bei 25 °C. Auswertung aller bisherigen Messdaten, Berechnung der Aktivitätskoeffizienten von NaHS.
- Abschluss der Arbeiten zu Hintergrundsätzen. Ergänzende isopiestic Messungen und Löslichkeitsuntersuchungen und Ableitung der Eigenschaften von Zweisalzsystemen durch theoretische Modelle. Zusammenfassende Bewertung experimenteller und theoretischer Daten und Ableitung eines polythermen Datensatzes für NaNO₃, NaClO₄, LiClO₄ und KNO₃.
- Abschluss der Arbeiten zur Entwicklung von Werkzeugen zur Unsicherheitsanalyse geochemischer Modellierungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10639
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2009 bis 31.10.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 283.149,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Arbeiten sollen als Ergebnis eine analytische Einschätzung der sicherheitstechnischen Relevanz und der praktischen Umsetzbarkeit aller relevanten Überwachungsaspekte liefern. Insbesondere die Konsequenzen, die sich aus möglichen, messtechnisch beobachteten, Abweichungen von Erwartungswerten ergeben, sollen diskutiert werden. Mögliche Folgerungen für den Einsatz von Überwachungssystemen, insbesondere als Datenlieferant für Entscheidungsprozesse, sollen aufgezeigt werden.

Als erster Schritt wird eine Auswahl repräsentativer Überwachungskontexte getroffen. Die Ziele und Strategien werden dann tatsächlichen Prozessen und Parametern zugewiesen, die überwacht werden müssen. Im Anschluss daran werden entsprechende Überwachungssysteme konzipiert und hinsichtlich ihrer Zuverlässigkeit, speziell im Hinblick auf die Signaldiagnostik untersucht. Zuletzt werden Nutzen und Konsequenzen der Überwachungsergebnisse charakterisiert und bewertet. Hierzu wird eine Reihe von Szenarien mit erwarteten und unerwarteten Überwachungsergebnissen analysiert, und es wird untersucht, wie solche Ergebnisse zum Entscheidungsfindungsprozess in einer gestuften Endlagerung beitragen können.

Dieses Vorhaben wird in engem Zusammenhang mit dem EU-Projekt MoDeRn (Monitoring Developments for safe repository operation and staged closure) durchgeführt, an dem 15 Europäische Partner sowie Sandia (USA) und RWMC (Japan) beteiligt sind. Das Projekt MoDeRn hat zum Ziel, einen gemeinsamen internationalen Rahmen bzw. eine übergreifende und umfassende Strategie zur Endlagerüberwachung verfügbar zu machen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Strategie und Ziele einer Endlagerüberwachung
- AP2: Fallstudien zur Endlagerüberwachung
- AP3: Techniken zur Endlagerüberwachung
- AP4: Szenarienanalyse zur Endlagerentwicklung unter Überwachungsaspekten

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Vom 19.-21.03.2013 fanden eine internationale Konferenz und ein Workshop zu dem Vorhaben in Luxemburg statt. Auf dieser Konferenz wurden die insgesamt erzielten Ergebnisse des Vorhabens von allen Partnern vorgestellt und diskutiert. Im Rahmen des Workshops wurden verschiedene, im Vorhaben bearbeitete, Schwerpunktthemen mit den Teilnehmern der Konferenz in unterschiedlichen Gruppen diskutiert. Die Diskussionsergebnisse werden in Conference Proceedings dokumentiert und auch in dem zu erstellenden Abschlussbericht entsprechend berücksichtigt.

Am 21. und 22.05.2013 fand ein weiterer projektinterner Workshop statt, der von NDA in London ausgerichtet wurde. Auf diesem Projekttreffen wurden die Struktur des Abschlussberichtes sowie die Fertigstellung der verschiedenen Fachberichte diskutiert. Es wurde ein Fahrplan erstellt, bis wann die Berichte im Entwurf vorliegen sollen, damit ein entsprechendes Review durch die Projektpartner termingerecht durchgeführt werden kann.

Folgende Berichtsstruktur wurde vereinbart:

Es wird einen übergeordneten Synthesebericht geben, in dem die wesentlichen Ergebnisse in übersichtlicher Form für die interessierte Fachöffentlichkeit zusammengefasst werden. Darüber hinaus wird es einen Bericht zur Rahmenrichtlinie (Monitoring Reference Framework Report) geben sowie einen Bericht über die technologischen Entwicklungen innerhalb des Projektes (Monitoring Technology Report). Komplettiert wird das Berichtswesen durch den Bericht über die Fallstudien (Case Study Report), einen Bericht über den technischen Stand von Mess- und Monitoringsystemen (State of the Art Report), den Bericht über die Untersuchungen zur Einbindung von Stakeholdern (Stakeholder Report) und die einzelnen Fachberichte über die Arbeiten in den einzelnen Arbeitspaketen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung der abschließenden Fachberichte.

Erstellung des Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M., Verstricht, J., Lesoille, S., Hermand, G., Schröder, T., Hart, J., Bárcena, I., Susuki, K., Lahdenperä, J. (2013) : MoDeRn - Case Studies, Monitoring in Geological Disposal of Radioactive Waste, International Conference, 19.-21.03.2013, Luxembourg.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 10659
Vorhabensbezeichnung: Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2009 bis 31.03.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 31.03.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 84.968,00 EUR	Projektleiter: Dr. Popp	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vor dem Hintergrund der Gasbildung in einem Endlager sind aus Sicht der Langzeitsicherheit die bisher vorliegenden Forschungsergebnisse zum Gastransport in Bentonit-Dichtelementen, die universell in verschiedenen Endlagerkonzepten vorgesehen sind, nicht ausreichend. Die generelle Zielsetzung dieses Vorhabens besteht in der Untersuchung der Gastransporteigenschaften (z. B. kapillarer Sperrdruck, relative Gas-Permeabilitäten) und der gekoppelten hydraulisch /mechanischen Eigenschaften von Trennfugen zwischen Bentonit-Formsteinen. Schwerpunktmäßig soll dabei die Entwicklung der Gaspermeabilität nach erfolgter (Teil-) Aufsättigung des Bentonits sowie deren Änderung in Abhängigkeit von der sich mit einer Quellung entwickelten Normalspannung bzw. unter Wirkung einer Scherspannung untersucht werden. Hierfür ist die Nutzung neuer Untersuchungsverfahren notwendig. Das Vorhaben wird im Rahmen des von der Europäischen Gemeinschaft über das 7te Euratom als „Collaborative Project“ geförderten Forschungsvorhabens „Fate of Repository Gases“ (FORGE) durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Darstellung des aktuellen Kenntnisstandes zum Gastransportverhalten von kompaktierten Bentonit-Formsteinen unter besonderer Berücksichtigung von Trennflächen
- AP2: Realisierung der technischen Rahmenbedingungen für Durchströmungsversuche an Bentonitprüfkörpern mit gleichzeitiger Messung des Quelldruckverhaltens
- AP3: Durchführung von Langzeitinjektionstests an Trennflächen zwischen Bentonit-Formsteinen mit Wasser bzw. nachfolgend Gas
- AP4: Durchführung von Langzeitinjektionstests an Kontaktflächen zwischen Bentonit-Formsteinen und Tonsteinoberflächen mit Wasser bzw. nachfolgend Gas - analog AP3
- AP5: Verformungsversuche im direkten Schergerät an Kontaktflächen zwischen Formsteinen aus Bentonit-Formsteinen einschließlich einer Wasser- bzw. Gasinjektion in der zweiten Versuchsphase
- AP6: Umsetzung der gewonnenen Materialparameter in ein für die Beschreibung der Kontaktflächeneigenschaften von Trennflächen geeignetes Stoffmodell und Validierung des Stoffmodells durch Nachrechnung der Laborversuche
- AP7: Zusammenstellung der Ergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP7: Aus den experimentellen Untersuchungen können folgende Aussagen abgeleitet werden:

- Unter ungesättigten Bedingungen (Einbauzustand - Labormaßstab) ist die integrale Gaspermeabilität für ein Bentonit-Dichtsystem (Dichtkörper ohne ALZ) mit technisch bedingten Trennfugen rund 4 Größenordnungen höher als die Matrixpermeabilität eines kompakten Bentonit-Formsteins, die in der Größenordnung von 10^{-16} m^2 liegt. Eine Erhöhung der Einspannung bis auf $\sigma_3 = 10 \text{ MPa}$ führt zu einer Verringerung der Durchströmbareit um mehr als eine Größenordnung (Risssschließung).
- Die kontrollierte Aufsättigung der Bentonit-Formsteine wurde in zwei Serien (unterschiedliche Probenanordnungen und Versuchsrandbedingungen) mit jeweils drei Proben über Zeiträume von mehr als einem Jahr durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass dieser Prozess weitgehend unabhängig von einer mechanischen Einspannung und nur wenig von technischen Trennfugen zwischen Bentonit-Formsteinen beeinflusst wird. Infolge der geringen Durchlässigkeit in der Größenordnung von 10^{-12} m/s war es nicht möglich, im Rahmen der Versuchszeit das Material vollständig auf zu sättigen. Die maximalen Quelldrücke bei Aufsättigung mit Wasser liegen in der Größenordnung von $\sim 8 \text{ MPa}$.
- Die durchgeführten Gasinjektionstests belegen, dass die Gaseindringdrücke für die Kontaktzone Granit/Bentonit deutlich niedriger als die wirkende kleinste Hauptspannung sind. In der Regel kam es knapp unterhalb oder bei Erreichen der wirkenden Axialspannung ($= \sigma_{\min}$) zu einem Gasdurchschlag, der auch mit einem Lösungsdurchtritt verbunden war. Dem gegenüber sind die Gaseindrücke für die reine wassergesättigte Bentonitmatrix deutlich höher (ca. $1 - 4 \text{ MPa}$ über σ_{\min}), womit nachgewiesen wird, dass die Kontaktzone zwischen Gebirge (ALZ) und Dichtmaterial der Hauptgasweg sein wird.

Das herausragende Ergebnis der Untersuchungen ist, dass sowohl mittels des Gasinjektionstests, wie auch den nachfolgenden Schertests an Trennflächen nachgewiesen wurde, dass technisch bedingte Trennflächen im Bauwerk bei Aufsättigung des Dichtkörpers verheilen. Dies wird eindeutig durch den mechanischen Nachweis des Vorhandenseins von Kohäsion zwischen ehemaligen Trennflächen in der Größenordnung von $C \approx 0,6 \text{ MPa}$ belegt.

Als offizieller Abschluss des FORGE-Vorhabens wurden die Ergebnisse einem weiteren Publikumskreis auf dem FORGE Final Symposium, Luxembourg, 5-7 February 2013 vorgestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Deliverables (2009 - 2013)

D3.1-R: Popp, T. (2009): State of the art report on gas transport through interfaces (5-12-2009), 48 pp.

D3.9: Popp, T., Naumann, D. & Fabig, T. (2011): Interim report on interface laboratory test state (15-08-2011), 33 pp.

D3.30-R: Popp, T., Rölke, C. & Naumann, D. (2013). Interface laboratory experiments – Final report (3-05-2013), 53 pp.

Conferences and Conference Proceedings

Popp T., Rölke, C., Salzer, K. & M. Gruner (2012). Hydro-mechanical and gas transport properties of Bentonite Blocks – Role of Interfaces. "Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement" (5th Int. Meeting, Montpellier, 22-25.10.2012), pp. 696/697.

Popp, T., Rölke, C. & Salzer, K. (2013). Role of Interfaces in Bentonite-Block Assemblies as favoured Pathways for Gas Transport. FORGE Final Symposium. Luxembourg, 5-7 February 2013.

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 31.12.2013		Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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: Für Sand-Bentonit-Granulat wurden Vergleichsmessungen der Permeabilität gegenüber Gas im Einbauzustand und gegenüber Wasser im gesättigten Zustand durchgeführt, die die bisherigen Ergebnisse bestätigt haben. Messungen der thermischen Parameter von Bentonit-Pellets in Abhängigkeit vom Sättigungsgrad laufen zurzeit. Für Sand-Bentonit-Granulat sind Messungen bei erhöhtem Wassergehalt in Vorbereitung. Mit Abschluss dieser Messungen ist das Laborprogramm beendet.
- AP2: Der Erhitzerversuch HE-E läuft seit 28.06.2011 weitgehend störungsfrei und die Messdaten werden laufend registriert.
- AP3/AP4: Beim WP23-Treffen im Januar wurde das Vorgehen zur Auswertung des Fragenkataloges zur Auswertung der experimentellen Daten und der Modellierungsfälle für die Langzeitsicherheitsbetrachtung festgelegt. Die bis Mai vorliegenden Antworten wurden vorausgewertet und beim Projekttreffen in La Coruña diskutiert. Die abschließende Auswertung findet beim geplanten WP234-Workshop im September statt, wenn auch die Ergebnisse der Langzeit-Simulationsrechnungen vorliegen.

Sonstiges:

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 startet einen 1:1 Versuch (Mont Terri Experiment FE) zur Streckenlagerung, der von GRS durch Messungen im Nahbereich im Gebirge und durch Modellierung begleitet werden soll. Hierzu wurden vier Bohrlöcher mit Minipiezometern und Temperatursensoren instrumentiert, weitere fünf Messbohrlöcher sind noch geplant. Außerdem wurden Prognoserechnungen für das FE-Experiment durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Laboruntersuchungen zu den wärmetechnischen Parametern von Buffermaterialien
- Weiterführung des Erhitzerversuchs in Mont Terri
- Modellierung des Erhitzerversuchs und Extrapolation auf lange Zeiträume; zusätzlich Koordinierung des Arbeitspakets Modellierung
- Analyse der Ergebnisse der experimentellen Arbeiten und der Prozessmodellierung hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Tonendlagers

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10699
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt KIT: Thermodynamische Datenbasis für Radionuklide		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2009 bis 31.03.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 31.03.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 444.095,00 EUR	Projektleiter: Dr. Marquardt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es wird eine einheitliche, umfassende und konsistente thermodynamische Referenzdatenbasis für ausgewählte Radionuklide entwickelt, die zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozesse eines Endlagers für radioaktiven Abfall eingesetzt werden soll. Es werden bereits bestehende, qualitativ hochwertige Datenbasen für Radionuklide zusammengeführt, auf Konsistenz geprüft, validiert und die Behandlung und Bewertung sorgfältig dokumentiert. Parallel dazu wird eine Datenbank entwickelt, in der die Daten integriert werden. Dieses Projekt läuft in Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), dem Institut für Radiochemie des Forschungszentrums Dresden-Rossendorf (FZD), der TU Bergakademie Freiberg und der AF Colenco AG.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Datenerfassung: a) Ableitung von Schätzwerten für unbekannte Komplexbildungs- und Löslichkeitskonstanten sowie Ion-Ion-Wechselwirkungsparametern nach dem Pitzer-Modell und der SIT; b) Zuverlässiger Satz an Gleichgewichtskonstanten für tetravalente Actiniden in carbonathaltigen Systemen; c) Erweiterung der Datenbasis um das Element Zirkonium; d) Datenbasis für Radionuklide: Erfassung der thermodynamischen Daten für die Radionuklide Tc, Th, Np, Pu, Am und Cm, die in der Phase I nicht berücksichtigt werden konnten.
- AP2: Datenbewertung: Die Zuordnung von Qualitätsstufen, insbesondere für Bildungsdaten, wird vertieft und vervollständigt. Qualitätsmanagement und Dokumentation: Erstellung von Qualitätsrichtlinien, Archivierung von Quellenangaben und Rechnungen zur Validierung von Daten.
- AP3: Qualitätsmanagement: Testrechnungen mit den Rechencodes Geochemists Workbench (GWB) und EQ3/6 zur Löslichkeit und Speziation von Actiniden in bekannten Salzlösungen. Ziel der Testrechnungen mit den THEREDA-Daten ist es zu prüfen, inwieweit verifizierte Rechencodes und mit Hilfe der erstellten Parameterdateien in der Lage sind, die Gleichgewichte in komplexen Lösungssystemen zu beschreiben.

AP4: Dokumentation: Erstellung und Pflege des Handbuchs bzw. Nutzerhandbuchs, einer Anleitung der Nutzer zur korrekten und effizienten Benutzung der Datenbasis. Das INE liefert dazu Beiträge z. B. zu den Richtlinien, Ableitung von Schätzwerten und anderen Kapitel. Eine kontinuierliche Pflege auf Grund zunehmender Resonanz der Nutzer ist notwendig.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Freigabe von weiteren Am(III) und Cm(III)-Daten – Sulfat- und Karbonatkomplexe - wurden die Test-Rechnungen mit dem Code EQ3/6 durchgeführt und federführend ein Dokument erstellt mit dem Titel: „Am(III) and Cm(III) carbonate solubilities in NaCl and sulphate speciation in NaCl/Na₂SO₄ solutions at 298.15K“. Die Testrechnungen zeigten, dass die Abweichungen der Rechnungen mit den Codes CHEMAPP, PHREEQC, GWB und EQ3/6 vernachlässigbar sind. So sind die Abweichungen in der Berechnung der Wasseraktivitäten bzw. $-\log[H^+]$ zwischen den verschiedenen Codes kleiner als 0.03 %. Die berechneten totalen Actinidenkonzentrationen weichen mit weniger als 0.05 % voneinander ab. Allerdings findet man auch hohe prozentuale Abweichungen für die Spezies $Am(OH)_3^0$, $Cm(OH)_3^0$ and $Am(OH)_4^-$ zwischen den Resultaten von PHREEQC und den anderen Codes. Allerdings sind die Konzentrationen dieser Spezies von kleiner 10^{-29} molal im Vergleich zur Gesamtkonzentration verschwindend gering. Allgemein lässt sich sagen, dass auftretende große prozentuale Abweichungen bei sehr kleinen Zahlen keinerlei Bedeutung für die Gesamtspeziation haben.

Weiterhin wurden Test-Rechnungen für die Löslichkeiten von tetravalenten Actiniden durchgeführt und ebenfalls ein Dokument erstellt mit dem Titel: „Th(IV), Np(IV) and Pu(IV) solubility in NaCl, CaCl₂, Na₂CO₃ and KHCO₃ solutions“. Die meisten Abweichungen liegen unterhalb 1 %. Abweichungen im Bereich 1 – 5 % treten auf bei für hohen Karbonatkonzentrationen. Unter diesen Bedingungen ist der Pentakarbonat-Komplex ($An(CO_3)_5^{6-}$) vorherrschend. Wegen der sehr hohen Ladung des Komplexes ist die Berechnung der Konzentration sehr empfindlich gegenüber der Ionenstärke. Daher treten etwas höhere Abweichungen bei den Ergebnissen der Berechnung mit den unterschiedlichen Codes auf. Die größte Abweichung gegenüber den anderen Codes findet man wiederum mit PHREEQC (~8%). Allerdings muss man hervorheben, dass die hier erhaltenen Abweichungen zwischen den Codes viel kleiner sind als die Unsicherheiten der berechneten Spezies-Konzentrationen die aus den höheren Unsicherheiten der Gleichgewichtskonstanten resultieren. Warum allerdings PHREEQC höhere Abweichungen im Vergleich zu den anderen Codes zeigt, ist zurzeit völlig unklar.

Des Weiteren wurden in diesem Projektzeitraum einzelne Kapitel des Abschlussberichts vorbereitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10709
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2009 bis 31.03.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 31.03.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 178.770,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Voigt	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundprojektes mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln und dem FZ Dresden/Rosendorf ist die Entwicklung einer einheitlichen, umfassenden und konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozessen für die derzeit in Deutschland diskutierten oder bereits realisierten Wirtsformationen untertägiger Entsorgungseinrichtungen. Hierzu bilden die beteiligten Projektpartner einen Kreis von Experten, der vorhandene thermodynamische Stoffgrößen sammelt, nach einheitlich vorher festgesetzten Kriterien bewertet und in einer Datenbank zusammenfasst. Besonderer Wert wird auf eine lückenlose Dokumentation und Rückverfolgbarkeit von Datenbankeinträgen gelegt. Es ist vorgesehen, den bereits in anderen Datenbasen vorhandenen Datenbestand zu integrieren. Die Datenbank hilft bei der Identifikation von Wissenslücken und beim Entwurf von Strategien zu deren Schließung.

Aufbauend auf dem bisher in Phase-I des Projektes THEREDA erstellten temperaturabhängigen (0 – 110 °C) Pitzer-Modell des 7-Komponenten-Systems bestehend aus dem hexären System der ozeanischen Salze einschließlich der sauren und basischen Lösungen (Na-K-Mg-Ca-SO₄-Cl-H-OH-H₂O) werden *in diesem Vorhaben auch die Carbonate der Alkali- und Erdalkalimetalle sowie die Gleichgewichte mit CO₂ im gleichen Temperaturbereich konsistent eingearbeitet. Dabei wird auch die Abhängigkeit der Lösungs-gleichgewichte vom CO₂-Partialdruck berücksichtigt.*

Im Ergebnis des Vorhabens wird eine einheitliche, konsistente thermodynamische Datenbasis für geochemische Modellierungen zur Verfügung stehen, mit der das geochemische Milieu in Salinargesteinen einschließlich angrenzender oder eingelagerter Carbonatgesteine im relevanten Temperatur- und Druckbereich behandelt werden kann. Darüber hinaus bildet die in diesem Teilvorhaben zu entwickelnde Datenbasis mit den Bestandteilen Na⁺-K⁺-Mg²⁺-Ca²⁺-SO₄²⁻-Cl⁻-H⁺-OH- HCO₃³⁻-CO₃²⁻-CO₂-H₂O die Grundlage für die Modellierung in den anderen Teilvorhaben, in denen diese Ionen bzw. Stoffe stets auch Lösungsbestandteile in unterschiedlichsten Konzentrationen darstellen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektmanagement (Berichtswesen, Treffen mit Projektpartnern, Intranet)
 AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation
 (Definition von Richtlinien, Testrechnungen mit vom DB-Generator entwickelten Parameterdateien, Konsistenzprüfungen, Nutzerhandbuch)
 AP3: Datenmanagement: Datenbank, Filter, Parameterdateien
 (Erstellung und Weiterentwicklung der Datenbankstruktur, Sicherstellung eines Archivierungsmodus, Interface zur Datenrecherche und -verarbeitung)

AP4: Datenbasis für Schwermetalle und Arsen (FZ Rossendorf, GRS Braunschweig)

AP5: Datenbasis für das System der ozeanischen Salze mit Carbonaten und CO₂ in Abhängigkeit von Druck und Temperatur (TU BAF). Die prinzipielle Vorgehensweise besteht in folgenden Arbeitsschritten:

- Selektion einer für die Datenbasis THEREDA geeigneten Form der Zustandsgleichung für reines CO₂ mit einer Gültigkeit von 0 °C bis 120 °C und Drucken bis 300 bar und ihre Implementierung in THEREDA.
- Erfassung und Systematisierung der Literatur zu thermodynamischen Daten und Phasengleichgewichtsuntersuchungen zu den angegebenen Systemen.
Systemkomplex 1: Reine Carbonat – CO₂ - Systeme
Systemkomplex 2: Chlorid - Carbonat - Systeme
Systemkomplex 3: Ternäre Sulfat - Carbonat - Systeme
Systemkomplex 4: Quaternär-reziproke Systeme Chlorid-Carbonat
Systemkomplex 5 + 6: Quaternär-reziproke Systeme Sulfat-Carbonat + Quaternäre Systeme mit gemeinsamen Carbonat- oder Hydrogencarbonat-Anion.
- Bewertung bereits publizierter Modelle von Carbonatsystemen und falls möglich Einarbeitung in THEREDA. Die Bewertung umfasst:
 - Das Nachrechnen der Modelle sowie publiziert, Vergleich mit exp. Daten,
 - die evtl. Extrapolation in Konzentrations-, T-p-Bereiche, die für THEREDA erforderlich sind,
 - die Prüfung auf Kompatibilität mit der existierenden Datenbasis von THEREDA für das hexäre System,
 - falls möglich, Einarbeitung in die Datenbasis.
- Modifizierung publizierter Modelle und Bestimmung fehlender Temperaturfunktionen für Wechselwirkungsparameter und Löslichkeitskonstanten.
- Nachrechnen von Gleichgewichten und thermodynamischen Eigenschaften von Lösungen in den höheren Systemen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Benchmarkrechnungen für Carbonatsysteme bei 25 °C mit CHEMSAGE / CHEMAPP.

AP3: Gemeinsam mit Kooperationspartnern der Test der Internet Bedienoberfläche durchgeführt.

AP5: Weiterführung der Nachrechnungen der Duan & Sun Löslichkeits-Modelle für CO₂ und CaCO₃ bis zu hohen Drucken und Temperaturen und Vergleich mit exp. Daten sowie Einarbeitung der IUPAC-Empfehlungen für die Calcitlöslichkeiten bis zu hohen Temperaturen Drucken.

Erstellung eines polythermen Datenfile für ChemApp der die Carbonatsysteme einschließt. Testrechnungen belegen die Anwendbarkeit für wesentliche Subsysteme des carbonathaltigen ozeanischen Systems wie NaCl-Na₂CO₃-CaCO₃-MgCO₃-CO₂-H₂O in einem Temperaturbereich zwischen 0 – 100 °C und CO₂-Drucken bis 300 bar. Für Lösungen mit wesentlichen Gehalten an Sulfat, Kalium und Calcium (hohe CaCl₂-Konzentrationen) fehlen experimentelle Daten zur Ableitung der Pitzer-Parameter.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Interne Technische Berichte - THEREDA.

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 31.08.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.293.390,00 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

GRS ist federführend für die Arbeitspakete 3, 4, 5 und 6.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Der Bericht zu den geochemischen Rechnungen wurde erstellt und diskutiert. Auf der Grundlage der Diskussionen wurde der Bericht überarbeitet und neue Inhalte in den Bericht aufgenommen. Die Ergebnisse der hydrogeologischen Rechnungen zum Deckgebirge über dem Salzstock Gorleben wurden ebenfalls diskutiert (u. a. auf dem Projektstatusgespräch von H-DuR am 31.05.13 in Braunschweig).
- AP4: Der Abschlussbericht zum AP4 wurde fertiggestellt und die Kommentare der Projektpartner eingearbeitet.
- AP5: Mit dem an XENIA angepassten Grubengebäude wurden erste Testrechnungen durchgeführt. Zusätzlich wurden in das Modell weitere Daten (z. B. neues Abfallinventar, Temperaturverteilung) implementiert. Eine Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums mit den im Projekt ADEMOS neu entwickelten Statistikwerkzeugen wurde begonnen.
- AP6: Die Auswertung der Literatur zu den identifizierten Natürlichen Analoga wurde abgeschlossen und daraufhin der Stand dieser Analoga bewertet. Auf der Grundlage dieser Bewertung wurde eine erste Entwurfsversion des Abschlussberichtes erstellt. Die Ergebnisse des Projektes wurden auf dem NAWG Workshop vom 12.-16. Mai in Nagoya vorgestellt.
- AP7: Es wurde eine erste Version eines englischsprachigen Abschlussberichtes des ISIBEL-Projektes erstellt (Projekttreffen mit DBE Technology und BGR am 19.04. und 24.05. in Peine).

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Die Berichte zu den geochemischen und hydrogeologischen Rechnungen werden im Laufe des zweiten Halbjahres 2013 überarbeitet und fertiggestellt.
- AP4: Endredaktion und Veröffentlichung des Abschlussberichts zum AP4. Weitere Bearbeitung des Positionspapiers der IGSC zum Thema „Relevance of gases in the post-closure Safety Case – An IGSC Position Paper“.
- AP5: Die Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums wird fortgeführt.
- AP6: Der Bericht zu den Natürlichen Analoga wird 2013 fertiggestellt.
- AP7: Der englischsprachige Abschlussbericht wird im Herbst 2013 fertiggestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- AP4: Ein Paper für den Tagungsband der EU-Tagung zum Projekt FORGE wurde gemeinsam mit NIRAS/ONDRAF erstellt. Der Titel des Papers lautet: „FORGE: General outcomes: A view from general rapporteurs“.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 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 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 Langzeitnachweis 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

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für die Arbeitspakete 2, 2A und 7 und bearbeitet im AP3 den Unterpunkt „thermomechanische Berechnungen“.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Schwerpunkt der Tätigkeiten bildete die Erörterung der Vorgehensweise zur Weiterentwicklung der Nachweismethodik für Verschlussbauwerke über lange Zeiträume mit dem Unterauftragnehmer TU Clausthal. Dazu wurden für Dichtelemente, die sich in ihrem Aufbau an das VSG-Verschlusskonzept anlehnen, für einzelne Grenzzustandsfunktionen Versagenswahrscheinlichkeiten ermittelt. Als praktisches Beispiel für die Überprüfung wurde der Asse-Vordamm gewählt, für den eine vergleichsweise umfangreiche Datenlage zu Verfügung steht. Die Versagenswahrscheinlichkeiten einzelner Grenzzustandsfunktionen wurden auf dem Niveau einer Vorbemessung mittels statistischer Variationsfunktionale behandelt, um eine Aussage über den Einfluss der Länge auf die Versagenswahrscheinlichkeit zu erzielen.

Die TUC hat mit der Erstellung der Abschlussberichte begonnen.

AP2A (Ergänzung des endzulagernden Inventars):

Der Berichtsentwurf über das Abfallmengengerüst der nicht-wärmeentwickelnden radioaktiven Abfälle, die die Annahmebedingungen für das Endlager Konrad möglicherweise nicht erfüllen, wurde fertiggestellt.

AP3 (Thermomechanische Berechnungen):

Die vorgesehenen thermomechanischen Berechnungen zur Modellierung der Prozesse in einem beladenen Einlagerungsbohrloch wurden abgeschlossen. Die Ergebnisse zur Untersuchung der Stoffmodelle zeigten, dass die vorhandene Datenbasis besser mit einem Potenzansatz als mit einem Exponentialansatz beschrieben werden kann. Weiterhin haben die Untersuchungen zur Gebrauchstauglichkeit eines teilverfüllten Bohrlochs ergeben, dass auch Stillstandzeiten in der Bohrlochverfüllung von z. B. 1 Jahr möglich sind, wenn eine Aufheizung im offenen Teil des Bohrlochs vermieden wird. Abhängig von der Stillstandzeit ist dazu die Überschüttung der zuletzt eingelagerten Kokille mit einer Salzgrusschicht erforderlich.

Die Ergebnisse der durchgeführten Berechnungen und die Ergebnisse werden im Abschlussbericht dokumentiert.

AP7 (Abschlussbericht):

Es ist vorgesehen, die Ergebnisse des Projektes KOMTESSA im Kontext mit einer Bestandsaufnahme zum Stand von Wissenschaft und Technik für die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle im Salz darzustellen. Der Bericht soll in Englisch verfasst werden, damit er auch dem internationalen Fachpublikum präsentiert werden kann. Zu diesem Zweck wurden mit den Projektpartnern BGR und GRS Textblöcke erstellt, inhaltlich diskutiert und abgestimmt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2, 3, 7: Berichtserstellung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Orzechewski, J., Plischke, E., Röhlig, K.J., Li, X., Krone, J. & Müller-Hoeppe, N.: Methods for assessing the long-term performance of geotechnical seals in a repository in rock salt. 3rd US/German Workshop on Salt Repository Research, Albuquerque, October 9, 2012.

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 30.04.2014		Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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 Berichterstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2.8:

In diesem Arbeitspaket wurde die Durchführung von Bildanalysen zur Visualisierung und Analyse des Porenraums im kompaktierten Salzgrus im Rahmen einer Machbarkeitsstudie untersucht. Die Untersuchungen wurden im Rahmen eines Unterauftrages an der Züricher Hochschule für Angewandte Wissenschaften (ZHAW) durchgeführt. Zum Einsatz kamen die

Röntgencomputertomographie (XCT) und die Focused Ion Beam Nanotomographie (FIB-nT). Die beiden Verfahren arbeiten in unterschiedlichen Auflösungsbereichen.

Beide Bildanalyseverfahren wurden an zwei unterschiedlich kompaktierten Salzgrusproben getestet. Die Salzgrusproben zeichneten sich durch eine deutlich unterschiedliche Porosität aus, die durch entsprechend unterschiedliche Kompaktionen generiert wurden. Diese unterschiedliche Porosität ließ sich durch die Bildanalyseverfahren deutlich visualisieren. Darüber hinaus konnte auch eine Porenradienverteilung erstellt werden, die die Häufigkeit verschiedener Porenradien verdeutlicht sowie eine Analyse des Vernetzungsgrades des Porenraums durchgeführt werden.

AP3:

Ziel des Arbeitspaketes ist es, die Nutzung alternativer Berechnungscodes zur Modellierung von Prozessen der Salzgruskompaktion zu testen. Zur Simulation eines Oedometersversuches auf Korngrößenebene liegen aktuell Strukturmodelle für die Diskrete-Element-Codes der Firma Itasca PFC3D und 3DEC vor. In PFC3D wurden die einzelnen Partikel durch sogenannte Cluster (Kugelgebilde) realisiert. In einem weiteren Schritt wurde über eine Exportschnittstelle die konvexe Hülle der Clustergebilde generiert, damit diese in 3DEC als Polyeder (Volumenkörper) eingelesen werden können. Somit stehen beiden Simulationscodes identische Strukturmodelle als Ausgangsstruktur zur Verfügung, was den Vergleich und die Prüfung ihrer Eignung zur Modellierung der Salzgruskompaktion (Oedometersversuch) erleichtert.

In PFC3D stellt die Bestimmung der Porosität derzeit noch eine Herausforderung dar, da einzelne Kugelelemente bei der Kompaktion aus dem Cluster gelöst werden und Probleme bereiten. In 3DEC sind hingegen aktuell hohe Rechenzeiten und eine Durchdringung der Polyeder (Kontakt detektion) problematisch. Auch eine geometrische Vereinfachung von kritischen kleinen Kanten führte noch nicht zu einer deutlichen Verbesserung.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2.8: Dokumentation der Ergebnisse der Machbarkeitsstudie zu den Bildanalysen in einem Bericht und einer Veröffentlichung.

AP3: Es soll überprüft werden, inwieweit die durch die TU-Bergakademie Freiberg entwickelte Analysesoftware „GrainGen“ zur Lösung der Cluster-Problematik Anwendung finden kann. Bezüglich der Polyederdurchdringung in 3DEC soll mit den Codeentwicklern geklärt werden, wie das Problem gelöst werden kann.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 30.04.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 Berichtserstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Die Langzeitkompaktionsversuche bei trockener Atmosphäre und unterschiedlicher Anfangsfeuchte verlaufen weiterhin zufriedenstellend. Die drei Proben mit unterschiedlicher Anfangsfeuchtigkeit (0 %, 0,1 % und 1 %) haben eine Porosität von 14 %, 11 % bzw. 3 % erreicht. Um den relativ langsamen Kompaktionsvorgang bei den beiden trockeneren Proben voran zu treiben, wurde die Last von 13 MPa auf 18 MPa angehoben. Einen Monat später wurde die Temperatur der ganz trockenen Probe auf 30 °C zurückgefahren, um ggf. Verhärtungseffekte in der Kristallstruktur feststellen zu können. Die Kompaktionsraten der feuchten Probe sind immer noch so hoch, dass eine Lasterhöhung zurzeit nicht infrage kommt.

Auf dem Treffen der Diskussionsrunde „Stoffmodelle“ wurde beschlossen, den Langzeitkompaktionsversuch als Benchmark für die verschiedenen Rechencodes der Projektpartner zu verwenden. Die Versuchsdaten für die ersten 500 Tage wurden zu diesem Zweck zusammengestellt und an die Projektpartner verteilt. Daneben sollen die über diesen Zeitraum hinausgehenden Versuchsrandbedingungen bekannt gemacht werden. Anhand dieser Daten können (a) die Salzgrusparameter aus dem BAMBUS-Projekt überprüft, (b) ggf. Stoffmodellparameter kalibriert und (c) Blindvorhersagen über den weiteren Verlauf des Versuchs gemacht werden. Der Versuch zur Langzeitkompaktion in verschiedenen feuchter Atmosphäre wurde beendet. Die Auswertung steht noch aus.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung des Langzeitkompaktionsversuchs in trockener Atmosphäre
- Auswertung des Feuchtekompaktionsversuchs
- Bearbeitung des Benchmarks „Langzeitkompaktionsversuch“

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 Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 31.01.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 323.370,00 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

Die sicherheitsanalytischen Rechnungen und die Modellierung der Grundwasserströmung und des Schadstofftransportes wurden auf der Basis der im Dezember 2012 von VNIPI PT zur Verfügung gestellten Daten aktualisiert. Für die hydrogeologischen Rechnungen wurde hierfür zunächst eine neue Modellgeometrie erstellt. Ergebnisse der im ersten Halbjahr 2013 durchgeführten Rechnungen wurden auf einem Projekttreffen am 03.06.13 in Peine vorgestellt und gemeinsam mit den Projektpartnern diskutiert.

Vom 25.06. bis 26.06.2013 fand ein Treffen zwischen dem Nationalen Operator (NO.RAO), Krasnojarsgeologia Co. und den deutschen Projektpartnern in Krasnojarsk, Sibirien statt. Details zu den Erkundungsarbeiten am Standort Jenisejskij und zu den hydrogeologischen Daten wurden diskutiert und Probenmaterial aus der Kernbohrung R12 an BGR/DBETec/GRS übergeben.

Das für die Modellrechnungen in URSEL eingesetzte EMOS-Nahfeldmodul CLAYPOS wurde an die neue Benutzeroberfläche XENIA angepasst. Das im Projekt ADEMOS (FKZ 02E10367) entwickelte Fernfeldmodul GeoTrend-F wurde in das sicherheitsanalytische Modell für den Standort Jenisejskij implementiert und umfangreich getestet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die von NO.RAO übergebenen Kernproben werden von GRS hinsichtlich der Porosität, Gesteinsdichte, Permeabilität, geomechanischen und wärmephysikalischen Eigenschaften analysiert.

Die im Juni 2013 von NO.RAO an die deutschen Partner übergebene Literatur wird gesichtet, ausgewertet und die sicherheitsanalytischen und hydrogeologischen Modelle aktualisiert. Insbesondere die Messergebnisse zur tiefenabhängigen Druckverteilung im Grundwasser und weitere hydraulische Daten sind hierbei von Interesse. Sobald erste Ergebnisse der Laborversuche an den Kernproben vorliegen, werden die Modelle entsprechend angepasst.

Die Ergebnisse aus dem Nahfeldmodul werden verwendet, um mit dem Transportmodell r^3t für dosisrelevante Radionuklide (z. B. Cs-135) realistische Ausbreitungsrechnungen auf Basis des in d^3f berechneten Strömungsfeldes durchzuführen.

Es werden probabilistische sicherheitsanalytische Rechnungen mit den im Projekt ADEMOS neu entwickelten Statistikwerkzeugen durchgeführt und ausgewertet.

Die Beschreibung der sicherheitsanalytischen Rechnungen und der Grundwassermodellierung für den Zwischenbericht, der im ersten Quartal 2014 vorgelegt werden wird, wird begonnen.

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 Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 31.01.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 506.233,00 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

Seitens des russischen Projektpartners wurde erneut ein überarbeitetes Konzept in drei Varianten bezüglich der geometrischen Situation der untertägigen Anlagen sowie der Wärmeleistung der Abfallbehälter übergeben. Basierend auf diesen Daten wurden erneut dreidimensionale thermische Berechnungen durchgeführt, um die thermische Belastung sowohl der geotechnischen Barriere Bentonit als auch des Wirtsgesteins als Folge der Behälterwärme bewerten zu können.

Im weiteren Umkreis des geplanten Endlagerstandortes ist das Auftreten von Erdbeben nicht unüblich. 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 weiter entwickelt, so dass jetzt auch reale Erdbebenaufzeichnungen als Geschwindigkeits- oder Beschleunigungsrandbedingung eingegeben werden können. Ein erster Test war erfolgreich.

Im Rahmen der Projektkoordination erfolgte die Vorbereitung und Durchführung eines weiteren deutsch-russischen Arbeitstreffens in Peine am 06.06.2013. Auf diesem Treffen wurde mit dem russischen Partner VNIPI PT der aktuelle Stand der Arbeiten diskutiert. Vom 24.-28.06.2013 fand ein weiteres Arbeitstreffen in Krasnojarsk, Russland statt. An diesem Treffen nahmen von russischer Seite der Nationale Betreiber NO.RAO. und das Geologische Institut Krasnojarsk teil. Auf diesem Treffen wurde seitens des Geologischen Institutes die hydrogeologische Situation detailliert vorgestellt und diskutiert. Diese Informationen fließen direkt ein in die numerischen Analysen zu den Strömungsverhältnissen in der Region, die von den Kollegen der GRS durchgeführt werden. Ebenfalls vorgestellt wurden die Ergebnisse der thermischen Berechnungen sowohl seitens der russischen Kollegen als auch seitens DBE TECHNOLOGY GmbH. Die Ergebnisse zeigen gute Übereinstimmungen. Erfreulicherweise wurden auf dem Treffen seitens NO.RAO. auch Bohrkernproben aus der Erkundungsbohrung R12 für Laboranalysen zur Verfügung gestellt. Die Proben stammen u. a. aus der geplanten Einlagerungstiefe, so dass nun erstmals Gesteinsparameter bestimmt werden können, die den Verhältnisse im Einlagerungsbereich entsprechen. Seitens der Russischen Kollegen wurde auch reale Erdbeben-Aufzeichnungen aus dem Gebiet Krasnojarsk übergeben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführung der Arbeiten zur Simulation der thermischen Entwicklung des Endlagers auf Basis der neu zu bestimmenden thermischen Gesteinsparametern an den seitens NO.RAO übergebenen Bohrkernproben nach deren Analyse im Labor.

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

Keine.

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: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2014		Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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

Literaturstudien:

Die Literaturstudie zu ^{14}C wurde fertiggestellt.

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Durchführung und Auswertung von 6 isopiesticen Töpfen bei 40 °C und 10 bei 60 °C. Herstellung von CaI_2 und MgI_2 Stammlösungen unter Vermeidung von Iod-Entstehung. Herstellung von K_2SeO_3 .

Herstellung von CaSeO_3 und CaSeO_4 und Ansetzen der Löslichkeitsversuche in NaCl -Lösungen bei 25, 40 und 60 °C.

Herstellung von hochreinen Hg_2SeO_3 , NaHSeO_3 und KHSeO_3 zur potentiometrischen Aktivitätsbestimmung in einer mit einer Multi-Elektroden-Apparatur.

Analysen der LDH-Mischkristalllösungen (Fe-, Ni- und Co-LDHs) und Bestimmung der Löslichkeitskonstanten.

Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis:

Die für Ausbreitungsrechnungen im Rahmen einer Langzeitsicherheitsanalyse in Betracht gezogenen Szenarien und Randbedingungen (u. a. Abfallmengen, radioaktives Inventar, Behältermassen, Korrosionsfortschritt, Lösungsmengen) wurden für die Wirtsgesteine Ton und Salz zusammengestellt und den Projektpartnern zu Verfügung gestellt.

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 6. Projekttreffens im Juni 2013 zum Verbundvorhaben VESPA.

4. Geplante Weiterarbeiten

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Fortführung der Isopiestic für die binären Systeme.

Ansetzen der Löslichkeitsversuche für CaSeO_3 und CaSeO_4 bei 90 °C und Beobachtung der Gleichgewichtseinstellung bei 25-90 °C.

Potentiometrische Messung und Modellierung der binären Systeme KHSeO_3 und NaHSeO_3 sowie der ternären Systeme $\text{KHSeO}_3\text{-KCl}$ und $\text{NaHSeO}_3\text{-NaCl}$ bei 25 °C bis 90 °C.

Ansetzen von Löslichkeitsversuchen mit $\text{K-Fe}^{\text{II}}\text{-hexacyanoferrat}$ und $\text{K-Fe}^{\text{III}}\text{-hexacyanoferrat}$.

Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis:

Auf Grundlage der von den Partnern bestimmten physikalisch-chemischen Parametern (Löslichkeitsgrenzen, Sorptionskoeffizienten) werden Vergleichsrechnungen zur Ausbreitung von Radionukliden im Nahfeld eines Endlagers durchgeführt.

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 7. Projekttreffens zum Verbundvorhaben VESPA in Jülich.

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: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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: Noch nicht begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP2: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP3: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP4: Beginn der Arbeiten im 2. Halbjahr 2013 geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Veröffentlichungen in Vorbereitung.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10790
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 305.803,00 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: Literaturrecherche
(aktueller Stand zur Se Geochemie)
- AP2: Komplexierung bei höheren Temperaturen
(Komplexbildung von Se mit kationischen Liganden bei $T > 25$ °C)
- AP3: Sorptionsversuche
(Batchversuche von Se an Alumosilikaten bei höheren Temperaturen, Feststoffanalyse der Sorbentien, spektroskopische Untersuchung der Oberflächenspezies)
- AP4: Modellierung und Datenbewertung
(Bestimmung thermodynamischer Daten, Einbindung in Datenbanken THEREDA und RES³T)
- AP5: Dokumentation
(Projektabschlussbericht)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Komplexierung von Se(IV) und Se(VI) mit Ca^{2+} und Mg^{2+}

IR- und NMR-spektroskopische Untersuchungen zur aquatischen Komplexierung des Selen zeigen in Abhängigkeit von der Oxidationsstufe qualitative Unterschiede. Für Se(VI) ist die Komplexbildung sowohl für Ca^{2+} als auch für Mg^{2+} nachweisbar, aber schwach. Im Falle des Se(IV) sind die Wechselwirkungen deutlich stärker. In Gegenwart von Ca^{2+} kommt es zur Präzipitation, mit Mg^{2+} zumindest partiell. Der Se(IV)-Ca-Niederschlag wurde umfassend (IR- und Festkörper-NMR-Spektroskopie, XRD, DTA/TG) charakterisiert. Entgegen des bei pH 5 in wässriger Lösung einzig dominierenden Hydrogenselenit-Ions (HSeO_3^-), liegt Selen im Calcium-Niederschlag als Selenit (SeO_3^{2-}) vor. Dieser weiße Feststoff ist kristallin und wahrscheinlich das Monohydrat des Calciumselenits. Die Festkörperbildung wurde bei Raumtemperatur beobachtet. Bei höheren Temperaturen wird prinzipiell gleiches Verhalten erwartet. Die von der GRS Braunschweig synthetisierte Calciumselenat-Lösung wurde mittels NMR bis 60 °C untersucht und zeigte keine temperaturabhängigen Änderungen in der Speziation bzw. Komplexierung.

AP3: Sorptionsversuche

Um der Oberflächenkomplexe von Se(VI) und Se(IV) an $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ zu erklären, wurden Proben mit EXAFS gemessen. Die Interpretation der Ergebnisse läuft zurzeit.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Komplexierung von Se(-II)

- Temperaturabhängige NMR-Messungen für Se(-II)
- NMR-Experimente zur Komplexbildung von Se(-II) mit Ca^{2+} und Mg^{2+}
- weitere Experimente zur Validierung der Dimerisierung des wässrigen Se(IV) mittels IR- und NMR-Spektroskopie unter Berücksichtigung der Ionenstärke

AP3: Sorptionsversuche

- Aufklärung der Oberflächenkomplexe von Se(IV) an Anatas mittels EXAFS.
- Aufklärung der Temperatur- und Ionenstärkeeffekte auf die Se(VI) und Se(IV) Sorption an $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ und $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$

AP4: Modellierung und Datenbewertung

- Bestimmung thermodynamischer Parameter für die Oberflächenkomplexierung von Se(VI) und Se(IV) an $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ und $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Jordan, N.; Müller, K.; Franzen, C.; Brendler, V. (2013): Temperature impact on the sorption of selenium(VI) onto anatase. *J. Coll. Int. Sci.* 390: 170-175.

Jordan, N.; Ritter, A.; Foerstendorf, H.; Scheinost, A. C.; Weiß, S.; Heim, K.; Grenzer, J.; Mücklich, A.; Reuther, H. (2013): Adsorption mechanism of selenium(VI) onto maghemite. *Geochim. Cosmochim. Acta* 103, 63-75.

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: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2010 bis 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 Spaltnuklide ^{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: Von Frau Ezgi Yalcintas wurden systematische Löslichkeitsexperimente mit Tc(IV) in verdünnten bis konzentrierten NaCl, MgCl_2 und CaCl_2 Lösungen durchgeführt. Die Proben wurden hinsichtlich wässriger Speziation und löslichkeitsbestimmender Festphase analysiert und aussagekräftige Löslichkeitskurven abgeleitet.

AP2: Status: Die Arbeiten zum Redoxverhalten von Tc(VII)/Tc(IV) in konz. NaCl und MgCl₂ wurden von E. Yalcintas zur Publikation vorbereitet.

AP3: Status: Die Arbeiten zur Tc(VII) Reduktionskinetik in Abhängigkeit der eingesetzten ⁹⁹Tc(VII) Konzentration an anoxischem Probenmaterial (Granodiorite aus Äspö, Schweden) und kristallinen Materialien (Nizhnekansk Granit Massiv, Russland) wurden von Herrn Yuri Totskiy durchgeführt. Für Sorptionsuntersuchungen unterhalb der Tc(IV) Löslichkeit ($< 10^{-9}$ mol/L) wurde in Kooperation mit der ZAG Zyklotron AG Molybdänfolie bestrahlt und das ^{95m}Tc am INE abgetrennt. Säulenversuche mit natürlichen Klüften aus dem Äspö Granodiorite wurden aufgebaut, die 3D Kluft- Geometrie mittels μ CT aufgenommen und diese Klüfte hinsichtlich ihrer hydraulischen Eigenschaften bzw. Matrixdiffusion (HTO, ³⁶Cl) charakterisiert. ^{95m}Tc(VII) Migrationsexperimente unter Variation der Verweilzeit sind durchgeführt und werden momentan analysiert.

Sorptionsisothermen zur Tc(VII) Magnetit- Wechselwirkung bei pH 7 und 8 wurden gestartet.

AP4: Status: Eine Veröffentlichung über die Struktur der Selenit Einbauspezies in Calcit (P-GIXAFS) und experimentell und theoretisch bestimmte thermodynamische Parameter zur Modellierung von Einbau und Adsorption ist eingereicht. Die Studien zur Wechselwirkung von Selenid mit Mackinawit sind abgeschlossen und ein Manuskript zu den spektroskopischen Daten (EXAFS/XANES) ist veröffentlicht. Die experimentellen Arbeiten zur Wechselwirkung mit Pyrit sind auf Grund technischer Probleme weiterhin verzögert.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Es wird eine abschließende Analyse der Löslichkeitsexperimente mit Tc(IV)-oxyhydroxid Festphase in carbonatfreien NaCl, CaCl₂ und MgCl₂ Lösungen durchgeführt und belastbare thermodynamische Modelle sowohl im Rahmen der SIT als auch des Pitzer-Modells vorgenommen. Die gewonnenen thermodynamischen Daten werden systematisiert und entsprechend den THEREDA Qualitätskriterien eingestuft.

AP2: Präsentation der Arbeiten von E. Yalcintas im Rahmen von Fachvorträgen beim IUPAC World Chemistry Congress (Istanbul) und Migration '13 (Brighton). Es erfolgt die Präparation von Proben für die EXAFS Studien zur Tc(IV)-Magnetit Wechselwirkung entsprechend der im Aufstockungsantrag detaillierten Arbeiten.

AP3: Weiterführung der Tc(VII) Sorptions- Untersuchungen an synth. Magnetit bei Konzentrationen unterhalb der Tc(IV) Löslichkeit mit ^{95m}Tc und synth. Eisenoxiden. Quantifizierung des isotopenaustauschbaren Fe mittels stabilem ⁵⁷Fe von kristallinen Materialien und Magnetit. Fortführung der ^{95m}Tc(VII) Säulenexperimente und Präparation von Proben für anstehende XAFS Messungen (August 2013).

AP4: Weitere Aragonitkristallisationsexperimente zur Überprüfung/Verbesserung des in der Publikation vorgeschlagenen thermodynamischen Modells laufen. Calcit Rekristallisationsversuche im Gleichgewicht in Gegenwart von ⁷⁹Se(IV) und ⁴⁵Ca werden im Rahmen einer Bachelorarbeit (Leonie Vogt, Uni KA) durchgeführt. Oberflächendiffraktionsexperimente zu Se(IV) Adsorption/Einbau in Calcit sind für Anfang 2014 geplant. Die Umwandlung von Mackinawit in Pyrit soll mit reinem FeS und mit Selenid-dotiertem Mackinawit untersucht werden. XRD und REM Messungen sollen zeigen, ob Se die Synthese beeinflusst, und ob sich eine separate Se-Phase bildet.

Arbeiten im Rahmen des Aufstockungsantrags 2013: Die im Rahmen der Projektaufstockung (2013-2014) durchgeführten Arbeiten zur Tc-Chemie werden in AP1 bzw. AP2 aufgeführt. Es werden Arbeiten zur Vorbereitung und Durchführung für „Analytische Arbeiten zur Bestimmung der Speziation von ¹⁴C“ und „Untersuchung der ¹²⁹I Rückhaltung an Sorelphasen im Salinar“ entsprechend dem Aufstockungsantrag durchgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die Publikation von T. Kobayashi et al. „Redox behavior of Tc(VII)/Tc(IV) under various reducing conditions in 0.1 M NaCl solutions“ ist erschienen (Radiochimica Acta 101(5), 323-332).

Manuskript von Yalcintas et al. zur Tc-Redoxchemie bei hoher Ionenstärke vorbereitet zur Einreichung bei Radiochimica Acta (AP2).

Heberling, et al. “A thermodynamic adsorption/entrapment model for selenium(IV) co-precipitation with calcite”, Geochim. Cosmochim. Acta (submitted).

Totskiy et al. (2013): “Tc(VII) sorption on natural granitic rocks and synthetic magnetite.” Final Workshop Proceedings, 7th EC FP CP-CROCK, KIT Scientific Reports.

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

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 schloss er die Modellberechnungen zur freien Konvergenz eines isothermen und eines erhitzten tiefen Bohrlochs in der Schachanlage Asse II ab und erstellte den zugehörigen Vergleich der Ergebnisse der Partner. Über diese Arbeiten und Ergebnisse verfasste er eine Veröffentlichung und präsentierte sie am 24.06.2013 auf dem 47th US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium der ARMA in San Francisco, CA, USA.

Ergebnisse der neuesten TUC-Laborversuche zur Verheilung von Steinsalz mit hochaufgelöster Dilatanzmessung zeigen, dass die volumetrische Verformung bereits weit oberhalb der Dilatanzgrenze abnimmt, sobald dort die Effektivspannung reduziert wird. Das bedeutet, dass ein Dilatanzrückgang bei allen Spannungen, und nicht erst unterhalb der Dilatanzgrenze, erfolgen kann. Um diesen Befund mit dem CDM modellieren zu können, begann der Zuwendungsempfänger im Berichtszeitraum mit der Weiterentwicklung der CDM-Modellierung der Verheilung, die auch eine Modifikation der Modellierung der Dilatanz- und Schädigungsentwicklung bedingt. Daneben führte er erste Berechnungen mit dem von S. Yildirim (LU Hannover) erstellten und zwischen den Partnern abgestimmten Modell des Asse-Dammjochs durch.

Gemeinsam mit den Partnern führte der Zuwendungsempfänger den 8. und 9. Projektworkshop am 19.-20.02.2013 in Hannover bzw. am 11.-12.06.2013 in Clausthal durch.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird die Weiterentwicklung der CDM-Modellierung der Verheilung von Steinsalz fortführen und damit Nachrechnungen der TUC-Laborversuche zur Verheilung und Modellberechnungen des Asse-Dammjochs durchführen. Außerdem wird er die Ergebnisse der Projektpartner vergleichen.

Die von den Projektpartnern beantragte 2,5-jährige Verlängerung des Verbundprojektes wurde im März 2013 bewilligt. In ihr werden vom IfG und der TUC zahlreiche spezifischer Laborversuche mit Steinsalz aus der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico (USA) durchgeführt. Der Zuwendungsempfänger wird – wie die anderen Partner – die Versuche nachrechnen und damit charakteristische Kennwerte für das WIPP-Steinsalz für sein Stoffgesetz ermitteln. Außerdem wird er mit der Erstellung des Modells für die geplanten Benchmark-Berechnungen von In-situ-Strukturen in der WIPP (Room B, Room D) beginnen.

Er wird gemeinsam mit den Partnern den 10. und 11. Projektworkshop am 04.-05.09.2013 in Hannover bzw. 16.09.2013 in Leipzig durchführen. Außerdem wird er Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes am 18.09.2013 auf dem 4th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operations in Berlin präsentieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Hampel (2012): The CDM constitutive model for the mechanical behavior of rock salt: Recent developments and extensions. In: P. Bérest, M. Ghoreychi, F. Hadj-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. Gärken, 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: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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 19./20. Februar 2013 in Hannover (veranstaltet vom IUB Hannover) sowie am 11./12. Juni 2013 (veranstaltet vom Zuwendungsempfänger) jeweils einen Projekt-Workshop durch.

Auf den Projekt-Workshops wurden von den Partnern numerische Simulationsergebnisse dargestellt und diskutiert. Diesbezüglich präsentierte der Zuwendungsempfänger numerische Simulationsergebnisse zum HFCP-Versuch sowie zur Untertagesituation „Dammjoch“. Diese bereits in einer früheren Projektphase berechneten Situationen wurden nun im Berichtszeitraum mit Berechnungsmodellen simuliert, die eine zuvor zwischen den Projektpartnern abgestimmte einheitliche Geometrie aufweisen, um den Einfluss der unterschiedlichen Stoffmodelle besser identifizieren zu können. Im Ergebnis ergaben diese Berechnungen (insbesondere bei dem HFCP-Versuch) beim Zuwendungsempfänger weitestgehend identische Ergebnisse zu den bereits durchgeführten Simulationen. Darüber hinaus sind numerische Re-Analysen von Verheilungsversuchen sowie Kriechversuchen bei unterschiedlichen Temperaturen zur Parameterbestimmung des Stoffmodells Lux/Wolters durchgeführt worden. Eine erneute Parameterbestimmung war aufgrund der eingearbeiteten Modifikationen des Stoffmodells Lux/Wolter in das Berechnungsprogramm Flac 4.0 der Firma Itasca erforderlich.

Von den vereinbarten Laborversuchen wurden beim Zuwendungsempfänger die beiden im 1. Halbjahr 2012 aufgesetzten Versuche (Ass-402 bei $T = 70\text{ °C}$ und Ass-432 bei $T = 50\text{ °C}$) im Berichtszeitraum beendet, die Versuchsergebnisse aufbereitet und den anderen Projektpartnern zur Verfügung gestellt. Mit Abschluss dieser beiden Versuche wurden alle vorgesehenen Versuche aus dem Versuchsprogramm durchgeführt. Da bei einigen der durchgeführten Versuche Messungenauigkeiten in der Dilatanzmessung während den langen Versuchszeiten von mehreren Monaten auftraten, wurden die Versuchsanlagen im Berichtszeitraum modifiziert. Diese Modifikationen umfassten sowohl mechanische und elektronische Umbauarbeiten als auch die Neuprogrammierung der komplexen Maschinensteuerung. Nach Durchführung von Probeversuchen stehen diese Anlagen ab sofort für vertiefende Untersuchungen zur Verfügung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird abschließende numerische Simulationen zur Situation „Dammjoch“ durchführen. Daneben werden Laborversuche aus dem geplanten laborativen Versuchsprogramm mit den neu modifizierten Anlagen wiederholt bzw. ergänzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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: 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: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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. 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 Stoffgesetzmöglichkeiten 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 19./20. Februar in Hannover und am 11./12. Juni in Clausthal, 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 thermo-mechanischen 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.

Das IfG hat den 8. Projekt-Workshop gemeinsam mit den Partnern am 19. und 20. Februar an der Universität Hannover sowie den 9. Projekt-Workshop am 11. und 20. Juni in Clausthal 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 dem 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 begonnen, die Prüfkörper aus dem sogenannten „clean salt“ der WIPP-site herzustellen sowie die zunächst geplanten triaxialen Druck- und Kriechversuche bei unterschiedlichen Manteldrücken und Temperaturen (30 °C, 60 °C und 90 °C) durchzuführen.

Außerdem hat das IfG weitere Verbesserungen bei der Nachrechnung der Asse-Laborversuche (triaxiale Druck- und Kriechversuche bei unterschiedlichen Temperaturen, Verheilungsversuche) sowie der Großbohrlochversuche erzielt.

Auf dem 47th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium vom 23.-26. Juni in San Francisco, California, USA wurde ein gemeinsamer Vortrag zu den am Stoffmodellvergleich beteiligten Stoffansätzen gehalten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2013 werden die zunächst geplanten gesteinsmechanischen Laborversuche am Probenmaterial „clean salt“ aus der WIPP-site weitgehend abgeschlossen. Aus dem Großkernmaterial aus „argillaceous salt“, das im Juli/August dem IfG zugestellt werden soll, werden die Prüfkörper für die an der TU Clausthal geplanten Laborversuche ebenfalls am IfG hergestellt. Außerdem sind weitere Verbesserungen bei der Nachrechnung der Laborversuche an Asse-Steinsalz mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zu den IfG-Stoffgesetzen:

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., GÄHRKEN, A., MISSAL, C. & STAHL-MANN, J. (2013): Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project Presentation at the 47th US Rock Mechanics / Geomechanics Symposium held in San Francisco, CA, USA, 23-26 June 2013.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 zwei Themen:

- Im ersten Halbjahr 2013 wurden weitere Simulationsrechnungen zum Dammjochmodell durchgeführt und die Ergebnisse sollen auf dem nächsten, für September geplanten Workshop mit den Verbundpartnern verglichen und diskutiert werden. Eine detaillierte Darstellung der Rechenergebnisse wurde bereits bei dem neunten Workshop am 11. und 12. Juni 2013 in Clausthal präsentiert. Zurzeit werden die Rechenergebnisse für den Vergleich mit denen von Projektpartnern in gewünschter Form (d. h. die zeitliche Entwicklung der Dehnungen, Spannungen und Verschiebungen) an den gefragten Positionen dargestellt. Die Flächenplots von erzielten Ergebnissen zu verschiedenen Zeitpunkten wurden ebenfalls fertiggestellt.
- Im Mittelpunkt der weiteren Arbeiten standen die ausführliche Modellierung der neueren Kriech- und Festigkeitsversuche an Asse Steinsalz bei höheren Temperaturen. Es stellte sich heraus, dass zusätzliche Arbeiten zur Anpassung der „Users-Subroutine“ im Adina-Programm zur genaueren Beschreibung der Schädigung mit anschließender Verheilung des Steinsalzes notwendig waren. Zur Beschreibung der im Labor beobachteten Verheilungsphänomene wurde zuerst ein Kriterium als Funktion der mittleren Spannung und der effektiven Dehnung implementiert. Parallel dazu wurden die neu vorhandenen Stoffmodelle in ADINA, Version 8.3 getestet. Diese neuen Stoffmodelle wurden ursprünglich zur Simulation von Beton entwickelt und erlauben die Berechnung von Kriechverformungen mit verschiedenen Formen von Schädigung des Materials bei erhöhten Temperaturen. Die Subroutinen sind als open Code vorhanden und können für unseren Zwecke eventuell erweitert werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2013 sollen zunächst weitere Modellrechnungen der ausgewählten Laborversuche durchgeführt und die Ergebnisse auf dem nächsten, für Anfang September geplanten Workshop mit den Verbundpartnern diskutiert werden. Außerdem wird die vorhandene Literatur zum Stoffverhalten des Steinsalzes aus der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico, USA ausgewertet. Anschließend wird programmgemäß mit der Anpassung bzw. Erweiterung der vorhandenen Stoffmodelle begonnen, um die geplanten Benchmark-Rechnungen der Untertagestrukturen „Room B“ und „Room D“ zu simulieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum Steinsalzstoffgesetz und zu den vorlaufenden Verbundprojekten:

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.

Hampel, A., 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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 Stoffgesetzmöglichkeiten 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 Berechnungen für die ECN und HFCEP Versuche wurden weitestgehend abgeschlossen. Für das Dammjoch-Modell wurden in den Projektworkshops weitere Ergebnisse vorgestellt. Das Berechnungsmodell wurde mit Absprache der Projektpartner weiter verfeinert. Die von uns erstellte Generierung wurde als Basismodell an alle Projektpartner weitergeleitet. Neue Berechnungen wurden durchgeführt. Weiterhin wurde an der Optimierung in den Formulierungen des Stoffgesetzes Lubby-MDCF gearbeitet. Insbesondere das thermische Materialverhalten des Steinsalzes lag hierbei im Focus.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Berechnung der Abkühlphase vom HFCEP Versuch mit freier Temperaturlausbreitung soll abgeschlossen werden. Die im letzten Workshop festgelegte Auswertungsmatrix für die Dammjoch-Berechnungsergebnisse soll fertiggestellt und an die Projektpartner weitergeleitet werden. Neue Berechnungsergebnisse aus den Dammjoch Simulationsrechnungen sollen vorgestellt und mit den Projektpartnern verglichen und diskutiert werden. Zugleich soll die Auswertmatrix besprochen und eventuelle Verfeinerungen durchgeführt werden. Die Optimierung vom Stoffgesetz soll weitergeführt werden. Weitere Details zur WIPP-Site sollen besprochen werden. Die Nachrechnung der projektspezifischen Versuche soll weiter ausgebaut und zusammengefasst werden. Die Parameterbestimmung anhand der Kriech- und Festigkeitsversuche soll abgeschlossen 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, Po- ckelsstr. 14, 38106 Braunschweig		Förderkennzeichen: 02 E 10860
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Mo- dellberechnungen 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: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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.

Der Wechsel im Programmsystem FLAC3D von Version 4.0 auf 5.0 wurde abschließend vollzogen. Im Zuge der notwendigen Anpassungen an die neuen Schnittstellen wurde der gesamte Stoffgesetz-Quellcode bzgl. Übersichtlichkeit und Programmablauf optimiert. Diese Optimierung wurde im Anschluss auch im Quellcode für ANSYS übernommen.

Am 19. und 20. Februar 2013 fand der 8. Workshop zum Stoffgesetzvergleich in Hannover statt. Hier wurden die ersten Ergebnisse der IFC und HFCP Berechnungen mit einem neuen Berechnungsmodell vorgestellt. Außerdem wurden erste Ergebnisse zur Modellbildung des Dammjochs gezeigt. Die Berechnung am Dammjochmodell konnten noch nicht abgeschlossen werden, da das Modell numerisch nicht stabil reagierte. Zurzeit wird versucht, die Ursache heraus zu arbeiten und zu beheben.

Für das Programmsystem ANSYS wurde die thermisch-mechanische Kopplung zur Nachrechnung der Versuche aus dem COSA II Report (IFC und HFCP) realisiert. Nach Rücksprache mit dem ANSYS-Support ist die thermische Berechnung eines Benutzer-Stoffgesetzes mit ANSYS nicht vorgesehen, die Kopplung wurde daher über die Programmierung einer eigenen Zeitschrittsteuerung ermöglicht. Erste Berechnungen des IFC- und HFCP-Versuches zeigen qualitativ gute Ergebnisse.

Diese Ergebnisse wurden zusammen mit aktuellen Nachrechnungen aller IfG-Kriech- und Festigkeitsversuche beim 9. Workshop in Clausthal vorgestellt.

Ein Schwerpunkt der Arbeiten im Berichtszeitraum lag in der Weiterentwicklung der Potentialfunktion des tertiären Kriechens, da die ursprüngliche Formulierung nach Döring zu einer Unterschätzung der Volumendehnungen im tertiären Kriechen führte.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die thermische-mechanische Kopplung in ANSYS sowie die Berechnungen der Versuche aus dem COSA II Report müssen noch weiter optimiert werden. In FLAC3D laufen weiterhin die Arbeiten an der Berechnung und Auswertung des Dammjochs.

Zudem sollen die Vorbereitung für Nachrechnungen von Room ‚B‘ und ‚D‘ in der WIPP-Site im Rahmen der Verlängerung des Vorhabens beginnen. Es ist zu untersuchen, ob das „Argillaceous Halite“ mit dem Stoffgesetz gut abgebildet werden kann.

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.; Gährken, 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

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 potentielles, 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 Sulfathaltigen 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)
- AP2: Einfluss von Sulfat und Calcium auf die Sorelphasenbildung
- AP3: Schlussfolgerungen für die Rezepturentwicklung
- AP4: Expansionsdruck von Sorelphasen
- AP5: Vorschlag für In-situ-Versuch

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Die Untersuchungen zu den Lösegleichgewichte im System $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ wurden für die Temperaturen bis 100 °C abgeschlossen. Es zeigt sich, dass die 3-1-8 Phase in MgCl_2 -haltigen Lösungen bis 80 °C thermodynamisch stabil. Ab 100 °C tritt die 9-1-4 als stabile Phase auf. In kochkonzentrierten MgCl_2 -Lösungen (>5,5 molal) tritt oberhalb 60 °C die 2-1-4 Phase neben der 3-1-8 bzw. 9-1-4 als zweite ternäre Phase stabil auf.

Kalorimetrische Messungen der R3a-Rezeptur zur Ermittlung der kinetischen Parameter für die Berechnung maximaler Abbinde Temperaturen sind abgeschlossen.

AP3/AP4:

Das temperaturabhängige Druckverhalten einhergehend mit der Phasenbestandentwicklung wurde für die Rezeptur R3a für das Temperatur-Zeitfenster (TZF) 90 °C und TZF 60 °C bestimmt. Dabei wurde die Entwicklung eines Kristallisationsdruckes jeweils beobachtet und korreliert mit der Kristallisation der 3-1-8 Phase innerhalb der Gefügematrix. Diese bildet sich in Abhängigkeit von der Abbinde Temperatur vorerst immer aus einer metastabilen Phase (5-1-8 und/oder 9-1-4) einschließlich einer verbleibenden Restporenlösung. Mit dieser Phasenbildung und weiteren Umwandlung in die 3-1-8 Phase korreliert die zusätzliche Bildung von Gefügaporen. Als Ursache davon wird eine Rückläufigkeit des zwischenzeitlich entstandenen Kristallisationsdruckes aufgrund von Spannungsrelaxation (wenn der Baustoff sich im eingespannten Zustand befindet) beobachtet. Unter sekundärem Lösungszutritt wird ein erneuter Druckanstieg beobachtet, was durch die Kristallisation amorpher Sorelphasenanteile verursacht wird.

Nach der Ermittlung mechanischer Parameter der Rezeptur R3a liegen die Festigkeiten im Bereich von 30 – 40 MPa (ohne Manteldruck) sowohl für die Mörtelbaustoffrezeptur wie auch für die Betonrezeptur gleichermaßen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1/AP2:

Die 120 °C Isothermen für die beiden Systeme $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ und $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ sind aus den laufenden Untersuchungen zu ermitteln. Es soll die Bestimmung der Löslichkeitskonstanten der 3-1-8 und 5-1-2 Phase im Sulfat-System aus den laufenden kalorimetrischen Messungen erfolgen.

Aus laufenden Versuchen zur Gleichgewichtseinstellung der Sorelphasen bei NaCl-Sättigung bei 25 °C (System $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-NaCl-H}_2\text{O}$) sollen die Lösungszusammensetzungen analysiert werden.

Auswertung und Berechnungen zur Abbinde Temperatur der R3a-Rezeptur aus den kalorimetrischen Messdaten.

AP3/AP4:

Ermittlung mechanischer Parameter der R3a-Rezeptur aus dem TZF 60 °C am IfG (Auftrag an Dritte). Ansatz und Messbeginn zum Druckverhalten der Spritzbetonrezeptur (5-1-8 Phase) aus dem abgeschlossenen Vorhaben „CARLA“, GV2, unter der Randbedingung des in-situ registrierten Abbinde Temperaturprofils (= TZF 40 °C) mit korrelierender Bestimmung der Phasenbestandentwicklung und anschließender Ermittlung mechanischer Parameter sowie des Druckverhaltens bei sekundärem Lösungszutritt.

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: Endlagersystem	
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.547.015,00 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: Im Bereich der Entwicklungen zur VIRTUS Softwareplattform wurden die Methoden zur Modellierung von Grubengebäuden und Einlagerungsbereichen fertiggestellt. Hierzu wurde die Definition von Einlagerungsbereichen (Streckenlagerung, Bohrlochlagerung, Einlage-

rungsbehälter) im Grubengebäudeeditor ergänzt. Die Methoden zur Kombination (Verschneidung) von Grubengebäude und Geologie wurden in diesem Kontext ebenfalls erweitert.

Die Algorithmen zur Validierung, Vereinfachung und Regularisierung der Dreiecksflächen der geologischen Modelle wurden im Hinblick auf Stabilität und Performance weiter optimiert, um die erfolgreiche Vernetzung der Modelle durch die PLC Simulatoren gewährleisten zu können.

Die Umsetzung der Virtus XML Schnittstelle zum Datenaustausch zwischen der VIRTUS Softwareplattform und den PLC Simulatoren wurde fertiggestellt.

AP2: Nach Abschluss der Definition der Struktur der Virtus THM-Datenbank wurde mit deren Umsetzung begonnen. Die Implementierung der Datenbank sowie die Entwicklung von Lese- und Schreibroutinen wurde bereits abgeschlossen, zurzeit erfolgt die Entwicklung einer entsprechenden Expertenoberfläche zur Eingabe und Pflege der Daten.

Im Rahmen der Literaturlauswertung wurden der Themenbereich „Hydraulische Parameter“ für Salzgesteine und für EBS-Materialien (Salzgrus, Sorelbeton, Salzbeton, Bentonit, Schotter usw.) und der Themenbereich „Dichte“ für EBS-Materialien ausgewertet. Die Expertendiskussion dazu findet im August statt.

AP3: Die Implementierung der Service-Architektur wurde weiter vorangetrieben. Hierzu wurden Services und Datenbanken zur Nutzer- und Projektverwaltung entwickelt und befinden sich aktuell in der Testphase. Sobald diese Testphase abgeschlossen ist, erfolgt die Portierung der Service-Architektur auf den von der GRS zur Verfügung gestellten VIRTUS Server.

AP5: Zur prototypischen Modellierung wurden drei Experimente definiert, die sich in Modellgröße und -komplexität unterscheiden, um damit die VIRTUS-Funktionen zur Visualisierung von Simulationsergebnissen zu demonstrieren. Jeder der Projektpartner übernimmt dabei die Modellierung eines Experiments.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Test und Korrektur von VIRTUS-Funktionen
- Implementierung des Hot Spot Konzepts
- Integration der THM & Literaturdatenbank
- Weitere Literaturlauswertung und Auffüllen der THM-Datenbank
- Simulation der definierten Experimente unter Einhaltung des Workflows
 - Ausschneiden des Experimentbereichs aus dem geologischen/geometrischen Modell
 - Aufbereitung und Export an den jeweiligen PLC
 - Export der benötigten THM-Daten an den PLC
 - FE-Netzgenerierung und PLC-Simulation (außerhalb VIRTUS)
 - Import der Ergebnisdaten
- Visualisierung von Vektor- und Tensor-Ergebnisdaten
- Fertigstellung der Servicearchitektur
- Einrichtung eines web-basierten Systemzugangs

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., J. Behlau, M. Jobmann, S. Masik: Virtuelles Untertagelabor für Salzgesteine – VIRTUS, Poster beim GRS-Fachgespräch, GRS, Köln, 19.&20. Februar 2013.

Wieczorek, K., S. Masik, J. Behlau, M. Jobmann: VIRTUS - Virtuelles Untertagelabor im Salz, 10. Fachtagung „Digital Engineering zum Planen, Testen und Betreiben technischer Systeme“, 16. IFF-Wissenschaftstage, Magdeburg, 18.-20. Juni 2013

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: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 190.969,00 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 (nur 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 eine intensive Nutzung der verschiedenen lauffähigen VIRTUS-Softwareversionen im Vordergrund. Ziel war es, das Einlesen geologischer Modelle, die Erstellung von Grubengebäuden sowie die komplexen Algorithmen zur Optimierung der Geologie-Modelle zu überprüfen, um hieraus einen Optimierungsbedarf im allgemeinen Arbeitsablauf abzuleiten. Eine Liste zur Optimierung bestimmter Arbeitsschritte wurde in einer Plenumsitzung diskutiert und dem IFF übergeben. Zum Ende des Berichtszeitraumes stand eine überarbeitete Softwareversion zur Verfügung; ein Testen aller Funktionen zur Erstellung geeigneter numerischer Modelle als Grundlage für die Simulation ausgewählter Experimente (AP5) steht aus.
- AP2: Die Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und die darauf aufbauende Erstellung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen ist ein Gegenstand dieses AP. Im Berichtszeitraum wurden wesentliche Parameter für Steinsalz und Salzgrus zusammengetragen und ausgewertet. Aktuell steht die Diskussion der Daten in der Expertengruppe an.
- AP5: Mit den Projektpartnern wurden drei Experimente definiert, die sich hinsichtlich der zu untersuchenden Prozessklasse in Größe und Komplexität unterscheiden. Ziel ist es, den Funktionsumfang in VIRTUS in einem repräsentativen Workflow zu demonstrieren. Die DBE TECHNOLOGY GmbH befasst sich mit der thermischen Wärmeausbreitung in einem Grubengebäude bei Einlagerung in vertikalen Bohrlöchern. Dazu wurde ein fiktives Grubengebäude mittels VIRTUS erstellt, welches auch den anderen Projektpartnern als Grundlage dient. Die Erstellung repräsentativer Modellausschnitte aus der Gesamtgeologie und eine anschließende Vereinigung mit dem Grubengebäude sowie das Testen der Exportroutine zum Präprozessor ANSYS bildeten die weitere Phase des Berichtszeitraumes. Des Weiteren wurde eine Importschnittstelle programmiert, welche die Ergebnisse aus den PLCs zur Visualisierung in VIRTUS exportiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der Auswertung der vorhandenen Primärliteratur mit Ableitung einer konsolidierten qualitätsgesicherten Datenbasis für die PLC-Simulationen
- Weiterentwicklung des Datenbankschemas, soweit erforderlich
- Dateneingabe nach Bereitstellung der finalen Datenbank seitens IFF
- Durchführung der mit den Projektpartnern vereinbarten Experimente zur Demonstration eines kompletten Workflows mit VIRTUS und den PLCs

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., Masik, S., Behlau, J., Jobmann, M. (2013): Projekt VIRTUS – Virtuelles Untertagelabor im Salz, 10. Fachtagung Digital Engineering zum Planen, Testen und Betreiben technischer Systeme, 18.-20.06.2013, Fraunhofer IFF, Magdeburg.

Wieczorek, K., Masik, S., Behlau, J., Jobmann, M. (2013): VIRTUS – Virtual Underground Laboratory in Rock Salt, Nuclear Engineering International magazine.

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: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2010 bis 31.10.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 (nur 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) wurden zu Beginn des Jahres an die Firma „Institut Faust & Fritsche“ (iff) in Berlin übergeben. Die unter der Firma srd (Sarfeld Research & Development) entstandenen Vorarbeiten wurden dabei vollständig übernommen. Im Rahmen des letzten Halbjahres konnten die restlichen Arbeiten zur Definition der Belastungsmuster (thermisch, mechanisch, etc.) weitestgehend abgeschlossen werden. Derzeit laufen noch kleinere Korrekturarbeiten. Dem IFF wurden Testdateien zur neuen XML-Schnittstelle geliefert. Die Testungen dauern noch an.
- AP2: Für die Dokumentation der mechanischen Eigenschaften von Steinsalz wurden die zuvor ausgewählten, über 400 Berichte und Veröffentlichungen der BGR auf Angaben zum elastischen sowie zum Kriechverhalten von Steinsalz geprüft.

Die elastischen Eigenschaften (z. B. E-Modul, Querdehnungszahl) von Steinsalz konnten als unabhängig von der stratigraphischen Zuordnung nachgewiesen und ihre Abhängigkeit von Temperatur und Druck plausibel aufgezeigt und durch entsprechende Parametrisierung quantitativ festgelegt werden. Auch für den Fall starker Misch-Fazies konnte ein allgemeiner Zusammenhang zwischen den Eigenschaften der individuellen Fazies und denen der Mischkristalle theoretisch hergeleitet werden.

Für die Kriecheigenschaften der Salze (inkl. des Carnallits) existieren unterschiedliche Ansätze. Diese wurden erläutert und in einen gemeinsamen Zusammenhang gebracht, so dass auch bei unterschiedlichen Ansätzen der PLCs deren Nutzung ermöglicht wird. Eine Diskussion der labortechnischen Hintergründe und Erfordernisse erlaubt eine Bewertung der Ergebnisse und des bisherigen Kenntnisstandes.

Für die thermischen Eigenschaften einschließlich des thermischen Ausdehnungskoeffizienten wurden ebenfalls theoretische Ansätze entwickelt und zur Verfügung gestellt, anhand derer sich aus individuellen Eigenschaften einzelner Fazies die Eigenschaften von Mischkristallen ermitteln lassen.

Des Weiteren wurden die Themenbereiche „Hydraulische Parameter“ für Salzgesteine, für EBS-Materialien (Salzgrus, Sorelbeton, Salzbeton, Bentonit, Schotter usw.) und „Dichte“ für EBS-Materialien ausgewertet. Die Expertendiskussion dazu findet im August 2013 statt.

- AP4: Ein valides geologisches openGEO-Modell ist von BGR übergeben und dient als Grundlage für die drei prototypischen geomechanischen Modellierungen. Die von bicad, unabhängig von VIRTUS, in openGEO implementierte Durchdringungsprüfung, einem abgewandelten Verfahren nach Devillers & Guigue folgend, hat zu einem validen geologischen Modell geführt. Dieses kann von Vernetzern, wie z. B. TetGen, der in der BGR als Vernetzer für OpenGeoSys (ehem. Rockflow) eingesetzt wird, fehlerfrei eingelesen und vernetzt werden.
- AP5: Zur prototypischen Modellierung wurden drei Experimente definiert, die sich in Modellgröße und –komplexität unterscheiden, um damit die VIRTUS-Funktionen zur Visualisierung von Simulationsergebnissen zu demonstrieren. Jeder der Projektpartner übernimmt dabei die Modellierung eines Experiments.

4. Geplante Weiterarbeiten

Test und Korrektur von VIRTUS-Funktionen

- Umsetzung der Binärausgabe für Berechnungsergebnisse
- Verbleibende Arbeiten zur Definition der Materialparameter in der XML-Schnittstelle

Implementierung des Hot Spot Konzepts

Integration der THM & Literaturdatenbank

Weitere Literaturlauswertung und Auffüllen der THM-Datenbank

- Angaben zur Dilatanz und zum Versagen von Steinsalz

Simulation der definierten Experimente unter Einhaltung des Workflows

- Ausschneiden des Experimentbereichs aus dem geologischen/geometrischen Modell
- Aufbereitung und Export an den jeweiligen PLC
- Export der benötigten THM-Daten an den PLC
- FE-Netzgenerierung und PLC-Simulation (außerhalb VIRTUS)
- Import der Ergebnisdaten

Visualisierung von Vektor- und Tensor-Ergebnisdaten

Fertigstellung der Servicearchitektur

Einrichtung eines web-basierten Systemzugangs

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., J. Behlau, M. Jobmann, S. Masik: Virtuelles Untertagelabor für Salzgesteine – VIRTUS, Poster beim GRS-Fachgespräch, GRS, Köln, 19. & 20. Februar 2013.

Wieczorek, K., S. Masik, J. Behlau, M. Jobmann: VIRTUS - Virtuelles Untertagelabor im Salz, 10. Fachtagung „Digital Engineering zum Planen, Testen und Betreiben technischer Systeme“, 16. IFF-Wissenschaftstage, Magdeburg, 18.-20. Juni 2013

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10921
Vorhabensbezeichnung: Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA- (TV1)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2011 bis 31.01.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 31.01.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 123.043,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kudla	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Teilvorhaben TV1 des Projektes beinhaltet alle Vorarbeiten für die Entwicklung bzw. die Weiterentwicklung eines Schachtverschlusskonzeptes für ein HAW-Endlager. Diese Arbeiten sind die Voraussetzung für die vorgesehene Abstimmung mit internationalen Partnern, die sowohl Interesse an einer anschließenden gemeinsamen Konzeptplanung, als auch an der Vorbereitung und Realisierung des Konzeptes im Rahmen von Labor- und In-situ-Versuchen auf Basis der internationalen Technologieplattform haben. Das zukünftige Schachtverschlusskonzept soll im Teil 2 parallel für Endlager in einer Salzformation und für mögliche Endlagerstandorte im Tonstein entwickelt werden. Es soll modular aufgebaut sein, damit es auf unterschiedliche lokale geologische Situationen und hydromechanische Randbedingungen angepasst werden kann. Schwerpunkte der Untersuchungen liegen in der Definition von Anforderungen und Randbedingungen für Schachtverschlüsse für HAW-Endlager in den Wirtsgesteinen Salz und Tonstein sowie in der Identifikation des FuE-Bedarfs für die nachfolgenden Teilvorhaben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Stand von Wissenschaft und Technik zu langzeitstabilen Schachtverschlüssen
- AP2: Sicherheitsnachweis - Konzept der Nachweisführung
- AP3: Randbedingungen für die Wirtsgesteine Salz und Tonstein
- AP4: Anforderungen
- AP5: Einbindung internationaler Partner
- AP6: Abschlussbericht

Die TU BAF ist federführend für AP1 und AP5. Bei AP2 und AP4 ist die DBE Technology federführend. Bei AP3 werden die Unterarbeitspakete jeweils federführend von TU BAF, DBE Technology, IBEWA bearbeitet.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP3: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP4: Arbeiten sind abgeschlossen.

Allg.: Redaktionelle Arbeiten am Abschlussbericht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss des Vorhabens.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10931
Vorhabensbezeichnung: Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA- (TV2)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2011 bis 31.01.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 31.01.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 240.168,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Teilvorhaben TV1 des Projektes beinhaltet alle Vorarbeiten für die Entwicklung bzw. die Weiterentwicklung eines Schachtverschlusskonzeptes für ein HAW-Endlager. Diese Arbeiten sind die Voraussetzung für die vorgesehene Abstimmung mit internationalen Partnern, die sowohl Interesse an einer anschließenden gemeinsame Konzeptplanung, als auch an der Vorbereitung und Realisierung des Konzeptes im Rahmen von Labor- und In-situ-Versuchen auf Basis der internationalen Technologieplattform haben. Das zukünftige Schachtverschlusskonzept wird parallel für Endlager in einer Salzformation und für mögliche Endlagerstandorte im Tonstein entwickelt und soll modular aufgebaut sein, damit es auf unterschiedliche lokale geologische Situationen und hydromechanische Randbedingungen angepasst werden kann. Schwerpunkte der Untersuchungen liegen in der Definition von Anforderungen und Randbedingungen für Schachtverschlüsse für HAW-Endlager in den Wirtsgesteinen Salz und Tonstein sowie in der Identifikation des FuE-Bedarfs für die nachfolgenden Teilvorhaben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Stand von Wissenschaft und Technik zu langzeitstabilen Schachtverschlüssen
- AP2: Sicherheitsnachweis - Konzept der Nachweisführung
- AP3: Randbedingungen für die Wirtsgesteine Salz und Tonstein
- AP4: Anforderungen
- AP5: Einbindung internationaler Partner
- AP6: Abschlussbericht

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für AP2 und AP4 und bearbeitet im AP3 die Unterpunkte Charakterisierung der EDZ und Ableitung von Kenntnisdefiziten.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im letzten Monat dieses Vorhabens wurde der Entwurf zum Abschlussbericht fertiggestellt.

Im Rahmen der Bearbeitung des Vorhabens wurden die seit 1994 geplanten und realisierten Schachtverschlüsse im Salinar bezüglich ihrer Übertragbarkeit auf ein HAW Endlager ausgewertet. Weiterhin wurden die internationalen Aktivitäten zur Entwicklung und Konzeption von Schachtverschlüssen recherchiert und sowohl deren technischer Stand, als auch die mögliche Übertragbarkeit für ein HAW Endlager in Deutschland ausgewertet.

Ein wesentlicher Punkt der Bearbeitung lag in der Einführung der Methodik der Teilsicherheitsbeiwerte als Kernpunkt des Nachweises der Barrierenintegrität für Schachtverschlusskomponenten. Im Ergebnis bleibt festzuhalten, dass die Anwendung des Konzeptes der Teilsicherheitsbeiwerte zur Nachweisführung an einem geotechnischen Verschlussbauwerk grundsätzlich möglich ist. Konstruktions- und funktionsbedingte Besonderheiten eines Strecken- oder Schachtverschlusses erfordern jedoch spezifische Anpassungen im Rahmen des Nachweiskonzeptes.

Anschließend an die allgemeine Einführung in das Nachweiskonzept wurden, die für einen Schachtverschluss notwendigen Einzelnachweise betrachtet und systembedingte Besonderheiten aufgezeigt. Anhand des beispielhaft gewählten Schachtverschlusskonzeptes der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) wurden zwei Einzelnachweise zur Erläuterung der Methodik geführt. Damit ist eine Einführung geschaffen, die eine spätere Nachweisführung der noch zu planenden Großversuche auf der Basis anerkannter Verfahren ermöglicht.

Abschließend wurden die Randbedingungen zur Konzeption sowie die Anforderungen an zukünftige Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle zusammengefasst.

Der Entwurf des Abschlussberichtes wurde dem Projektträger zur Prüfung übersandt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kudla, W., Bollingerfehr, W., Gruner, M., Herold, P., Jobmann, M., Müller-Höppe, N., Schreiter, F. (2013): Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle, Abschlussbericht FuE-Vorhaben ELSA-Phase-1, Freiberg (im Druck).

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 30.04.2014		Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 numerische Untersuchungen mit dem Modellsystem für ein Endlager für schwach- und mittelaktive Abfälle im Salzgestein durchgeführt. Dieses Modellsystem zeigt im Vergleich zu demjenigen für ein Endlager für hochaktive Abfälle im Tongestein, welches bei den bisherigen Untersuchungen verwendet wurde, ein Verhalten, das durch deutlich stärker ausgeprägte Nichtlinearitäten und sogar Quasi-Unstetigkeiten bestimmt wird. Auf dieses System wurden einige der früher untersuchten Ziehungs- und Auswerteverfahren mit verschiedenen Parameterzahlen und Stichprobenumfängen angewandt. Dabei zeigte sich, dass solche Methoden, die ein speziell zugeschnittenes und nicht auf Parameterraumabdeckung optimiertes Ziehungsverfahren benötigen (FAST, EFAST, RBD), weniger robuste Ergebnisse liefern. Ergebnisse, die mit einer ziehungsunabhängigen Auswertemethode in Verbindung mit einem Niedrigdiskrepanz-Ziehungsverfahren (LpTau) gewonnen wurden, erwiesen sich bei gleichen Stichprobenumfängen als zuverlässiger. Hieraus lässt sich die Erkenntnis ableiten, dass gerade bei endlagertypischen, stark nichtlinearen Modellsystemen eine gleichmäßige Parameterraumabdeckung von großer Wichtigkeit ist. Eventuelle methodische Vorteile von ziehungsabhängigen Auswertemethoden treten dagegen in den Hintergrund.

Fremde und eigene Ideen zur Problematik von Sensitivitätsanalysen bei korrelierten Eingangsparametern wurden weiter verfolgt. Die Notwendigkeit, mit korrelierten Eingangsparametern zu arbeiten, kann prinzipiell aus zwei Situationen resultieren:

- Vorhandene Messwerte für die Parameter zeigen eine Korrelation, die nicht unmittelbar auf einen gemeinsamen Einfluss zurückgeführt werden kann. Eine solche Situation ist meist ein Zeichen für unvollständiges Systemverständnis.
- Qualitativ bekannte physikalische oder systembedingte Zusammenhänge legen eine Korrelation nahe, die dann allerdings meist schwer zu quantifizieren ist.

Zum adäquaten Umgang mit Korrelationen kann noch keine substantielle Aussage gemacht werden. Es wurden weiterhin Literaturrecherchen sowie wissenschaftlicher Austausch betrieben.

Für die Konferenz SAMO 2013 wurde ein Beitrag zum Thema „Sensitivity Analysis of Final Repository Models Using Quasi-Random Sampling and a Metamodel Approach“ ausgearbeitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die bisherigen numerischen Untersuchungen werden dokumentiert und weitere werden durchgeführt. Dabei ist insbesondere das Modellsystem für ein Endlager für hochaktive Abfälle im Salzgestein, bei dem eine hohe Anzahl von Nullrechenläufen auftritt, von Interesse.

Die Untersuchungen zur Handhabung von Parameterkorrelationen sollen konkretisiert werden. Dazu sind numerische Experimente geplant. Ebenso sollen die Möglichkeiten der Verbesserung der Aussagen von Sensitivitätsanalysen durch Transformation des Modelloutputs weiter untersucht werden.

Zur Bereitstellung eines neuen Werkzeuges zur benutzerfreundlichen und problemangepassten Durchführung von Sensitivitätsanalysen soll in der zweiten Jahreshälfte 2013 ein Fremdauftrag vergeben werden.

Die Konferenzen SAMO 2013 (Nizza, 01.07. – 04.07.) und IMACS Seminar on Monte Carlo Methods (Annecy, 14.07. – 20.07.) werden besucht. Zur abschließenden Präsentation der Projektergebnisse auf einer Konferenz im Jahr 2014 wird ein Abstract vorbereitet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 31.05.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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:

- Die Proben von drei im zweiten Halbjahr 2012 begonnenen Diffusionsversuchen wurden auf ihre Tracerkonzentration analysiert.
- Bei zwei Versuchen konnte keine Tracerkonzentration am Ablauf der Zellen nachgewiesen werden, obwohl die Versuche über mehrere Monate durchgeführt wurden. Dies deutet darauf hin, dass es zu Verstopfungen von Zuleitungen durch Ausfällungen von NaCl gekommen ist.
- Die Ergebnisse des dritten Diffusionsversuches wurden ausgewertet. Für diesen Versuch konnte am Ablauf der Zellen ein Tracerdurchbruch detektiert werden. Der ermittelte Diffusionskoeffizient war jedoch sehr hoch und deutete darauf hin, dass die Diffusionszelle in dieser Versuchsanordnung advektiv durchströmt wurde.
- Für den dritten Diffusionsversuch wurde die Versuchslösung im Quellenreservoir mit einem Farbstoff angefärbt. Nach weiteren sechs Tagen Versuchsdauer wurde der Versuch abgebrochen. Eine erste visuelle Überprüfung des Salzgrus-Probekörpers zeigte, dass die Stirnfläche des Probekörpers gleichmäßig im Kontakt mit der Quellenlösung stand und der Farbstoff gleichmäßig in den Probekörper eingedrungen ist.
- Der vierte der im zweiten Halbjahr begonnenen Diffusionsversuche wurde abgebrochen, da wiederholt Verstopfungen in den Zuleitungen auftraten und eine kontinuierliche Durchströmung des Quellen- und Senkenreservoirs nicht gegeben war.
- Als Konsequenz aus den vier durchgeführten Diffusionsversuchen wurde der Versuchsaufbau erneut angepasst. Der Durchmesser der Leitungen wurde vergrößert und die Temperaturregelung im Labor angepasst. Zudem wurde nach Durchführung von Vorversuchen zur Löslichkeit von den verwendeten Tracern in gesättigter Salzlauge die Tracerkonzentration im Quellenreservoir erhöht.
- Vorbereitung von zwei weiteren Diffusionsexperimenten mit angepasstem Versuchsaufbau und Ausgangskonzentrationen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Analyse der Ortsverteilung des Tracers im eingefärbten Probekörper
- Gegebenenfalls Herstellung und Auswertung von Dickschliffen
- Beginn von zwei weiteren Diffusionsexperimenten
- Vorbereitung von Salzgrusproben zur Durchführung weiterer Diffusionsexperimente
- Testen eines alternativen experimentellen Aufbaus

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 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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

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} mol·L⁻¹ in 0.1 M NaCl und bei einem Fest-zu-Flüssig-Verhältnis von 2 g/L in einer Argon-Atmosphäre untersucht. Gemäß der in Lösung gemessenen Eh-Werte ($p_e + \text{pH} = 11-12$; $E_h = 0.25 - 0.5$ V) und einer thermodynamischer Gleichgewichtsmodellierung sollte das Np im fünfwertigen Oxidationszustand in Lösung vorliegen. Die erhaltenen Np-Illit-Absorptionskanten verschieben sich mit steigender totalen Np-Konzentration (10^{-8} bis 10^{-4} mol·L⁻¹) um 2 pH-Einheiten zu höheren pH-Werten. Die Sorption von Np(V) an Illit zeigt ein nicht-ideales Verhalten (Steigung $n = 0.5$ nach Freundlich). Ein derartiges Sorptionsverhalten findet man gewöhnlich bei Kationen oberhalb einer Beladung von 10^{-3} mol/kg, unabhängig vom Kation und dessen Ladung (e.g. Eu(III), U(VI), Ni(II), Sr(II)). Die im Rahmen dieses Projekts bestimmten Np(V)-Sorptionisothermen weichen auch bei niedriger Beladung der Oberfläche (i.e. $\sim 10^{-5}$ - 10^{-4} mol/kg bei pH 7.3) von der Idealität ab. Allerdings wurden ähnliche Beobachtungen für die Sorption von Np(V) an Montmorillonit, Kaolinit sowie oxidischen Mineralien in der Literatur bereits berichtet. Modellmäßig lässt sich die Isotherme durch Postulation weniger stark bindenden funktionellen Gruppe auf der Ton-Oberfläche beschreiben. Allerdings wäre es auch möglich, dass durch Reduktion an der Oberfläche teilweise Np(IV) gebildet und damit an der Mineraloberfläche stark gebunden wird. Als Redoxpartner kommt z. B. Fe(II) infrage, welches strukturell im jeweiligen Mineral gebunden ist. Welcher Sorptionsmechanismus nun tatsächlich vorliegt, gilt es in zukünftigen Experimenten zu klären.

Die Sorptionsstudie von Np(V) an Illit wurde auf höhere Ionenstärken ausgedehnt (NaCl, 0.01 bis 3 M, pH 4-10, $[\text{NpO}_2^+]_{\text{tot}} = 10^{-8}$ - 10^{-4} mol·L⁻¹). Man kann keinen nennenswerten Einfluss der NaCl-Konzentration auf die Np(V)-Sorption beobachten, was im Einklang mit den Ergebnissen aus den früheren Eu(III)-Illit-Studien ist.

Die Diffusionsversuche von HTO und $^{36}\text{Cl}^-$ in kompaktiertem Na-Illit (Illite de Puy) wurden abgeschlossen. Die Versuche wurden mit 0.1 M bzw. 0.5 M NaCl als Hintergrundelektrolyt und in Gegenwart von 5mM MES als Puffer bei pH 5.5 bzw. 8.3 durchgeführt. Die Trockendichte des Na-Illits betrug 1.7 g/cm³. Aus den Experimenten wurde ein effektiver Diffusionskoeffizienten $D_e(\text{HTO})$ von $1.31 \pm 0.04 \cdot 10^{-10}$ m²/s abgeleitet. Für $^{36}\text{Cl}^-$ beträgt $D_e(\text{Cl}) = 7.07 \pm 1.28 \cdot 10^{-11}$ m²/s bedingt durch Anionenausschluss. Nachdem die hydraulischen Parameter des Na-Illits verlässlich bekannt sind, wurden nun Arbeiten mit tritium-markierter Fulvinsäure (^3H -FA, Tinnacher & Honeyman, 2007, ES&T, 41(19), 6776.) gestartet und laufen z. Z. bereits über einen Zeitraum von 1½ Monaten. Die bisherigen Ergebnisse zeigen einen leichten Anstieg der ^3H -Aktivität (Durchbruch) in Durchflusssdiffusionsexperimenten. Das Ergebnis deutet auf einen diffusiven Transport eines Teils der FA hin (experimentell bestimmter $D_e = 5,3 \cdot 10^{-12}$ m²/s). Hier muss die Frage geklärt werden, ob das detektierte ^3H aus der markierten FA abgespalten wurde oder wirklich als ^3H -FA-Molekül diffusiv transportiert wird.

4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführung der ^3H -FA Diffusionsexperimente.

Größencharakterisierung der diffundierten ^3H -haltigen Spezies mittels Ultrafiltration.

Beginn eines Np(V)-Diffusionsversuchs.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.019.574,00 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)-Sorption aus salinaren Lösungen variierender Ionenstärke an synthetischen Behälterkorrosionsprodukten bei 25 °C
- Untersuchung der U(VI)-Sorption 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

- U(VI)-Diffusion in Opalinuston in Ab- und Anwesenheit von Citronensäure (anaerobe Bed.): Auswertung der Diffusionsprofile mit COMSOL Multiphysics 3.5a. In Gegenwart von Citronensäure diffundiert U(VI) langsamer durch Opalinuston. Die diffundierende U(VI)-Citrat-Spezies ist noch unbekannt. Eine Reduktion von U(VI) zu U(IV) wurde nicht nachgewiesen.
- U(VI)-Sorption an Montmorillonit in KCl, CaCl₂ und MgCl₂ (1-3 mol/kg): Kein signifikanter Einfluss der Ionenstärke auf U(VI)-Sorption. Beobachtete Unterschiede der U(VI)-Sorption in CaCl₂ bzw. MgCl₂ sind auf CaCO₃- bzw. Magnesiumsilikat-Ausfällungen zurückzuführen.
- Wechselwirkung des Ton-Isolates *Paenibacillus* sp. (ohne Elektronendonator) mit Pu(VI)+Pu(IV)-Polymeren: moderate Wechselwirkungen von Pu mit den Zellen bei pH 6 (~ 54 mg Pu/gdry weight), höhere Pu-Bindungskapazität der abgestorbenen Biomasse, Effizienz der Pu-Entfernung abhängig von [Pu]_{initial}, weniger Pu akkumuliert als bei *Sporomusa* sp.
- U(VI) und *Sporomusa* sp.: mittels TEM/EDX Nachweis von intrazellulären nadelförmigen U-Akkumulaten (kristallin). U(VI) und *P. fluorescens*: mittels TEM/EDX Nachweis von extrazellulärem U als U-Phosphate, nur wenige intrazelluläre U-Akkumulate gefunden.
- An neu beschafften frischen Bohrkernen wurden Testmessungen durchgeführt. Entgegen den Erwartungen und wie vorher an gealterten Bohrkernen wiesen sie eine signifikante Saugspannung auf, die deshalb als relevante Antriebsgröße bestätigt wird. Den Ergebnissen dieser Tests entsprechend werden nun Teilstücke für Diffusionsexperimente präpariert und vorbereitet.
- An Schüttkörpern wurden vorbereitende Untersuchungen zur Vergütung mit Wasserglas durchgeführt, die eine Abschätzung der kinetischen Einflüsse auf die Verfestigung und die während der Injektion benötigte Mindestfließrate erlauben.
- In Adsorptionsstudien mit Opalinuston wurde der Einfluss hoher Salinitäten (≤4 M) auf die potentiell mobilisierende Wirkung von Tonorganika gegenüber Actiniden untersucht. ¹⁶⁰Tb dient als Analogtracer für An(III), Fulvinsäure (FS) als Modell für höhermolekulare Tonorganika. Durch deren konkurrierende, ladungsabschirmende Wirkung wird die Adsorption von Tb bei Salzkonz. >1 M weitgehend unterbunden (pH 5). Im Mg- und Ca-System zeigt die Gegenwart von FS in diesem Konz.-bereich keinen Effekt, da deren WW mit Tb gleichermaßen unterdrückt wird. Bei geringeren Konz. an Mg und Ca sowie im Na-System (gesamter Konz.-bereich) wirkt die FS auf Tb adsorptionsvermittelnd. Ein Mobilisierungspotential liegt demnach nicht vor.
- Lumineszenzspektroskopische Unters. der Tb-Fulvatkomplexbildung in Gegenwart von NaCl, MgCl₂ und CaCl₂ bestätigten die mittels Ultrafiltration gewonnenen Ergebnisse.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Unters. der U(VI)-Sorption an Montmorillonit in NaCl und CaCl₂ (0.1 u. 0.3 mol/kg), pH-abhängige Sorption unter Carbonatausschluss. Desorptionsunters. Modellierung der Sorption.
- Unters. der Komplexbildung von U(VI) mit Modellliganden in salinaren Lösungen.
- Fortführung der Unters. zur Wechselwirkung der Ton-Isolate mit Pu und TEM/EDX Analysen.
- Diffusionsunters. mit [¹²⁴I]I⁻ an orientiert präparierten Teilstücken frischer Bohrkern, je nach Prozessgeschwindigkeit und Versuchsbedingungen weiterführende Unters. mit [²²Na]Na⁺.
- Visualisierung von Laugentransport vor und nach der Vergütung in mechanisch belasteten Salinarbohrkernen sowie während der Injektion von Wasserglas.
- Radiotraceruntersuchungen zur Adsorption von FS an Opalinuston in Gegenwart von NaCl, MgCl₂, CaCl₂ bis 4 M zur Modellierung der Gesamtsysteme. Aufnahme von Bindungsisothermen für die Fulvatkomplexbildung von Na, Mg und Ca mittels Ultrafiltration.
- 3D-Untersuchungen mittels PET zum Einfluss von Organik auf das Transportverhalten von ¹³⁵La als Actiniden-Analogtracer in kompaktiertem Opalinuston bei hoher Ionenstärke (NaCl).

5. Berichte, Veröffentlichungen

- Joseph, C., Van Loon, L.R., Jakob, A., Steudtner, R., Schmeide, K., Sachs, S., Bernhard, G.: Diffusion of U(VI) in Opalinus Clay: Influence of temperature and humic acid. *GCA* 109, 74-89 (2013).
- Zakhnini, A., Kulenkampff, J., Sauerzapf, S., Pietrzyk, U., Lippmann-Pipke, J.: Monte Carlo simulations of Geo-PET experiments: 3D images of tracer distributions (18F, 124I and 58Co) in Opalinus Clay, anhydrite and quartz. *Computers & Geosciences* 57, 183-196 (2013).
- Joseph, C., Stockmann, M., Schmeide, K., Sachs, S., Brendler, V., Bernhard, G.: Sorption of U(VI) onto Opalinus Clay: Effects of pH and HA. *Appl. Geochem.* (DOI:10.1016/j.apgeochem.2013.06.016).

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 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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

In Batchversuchen wurde die Ionenstärkeabhängigkeit der Sorption von $\sim 8 \mu\text{M}$ Np(V) an Opalinuston (OPA), Illit du Puy und Montmorillonit (STx-1) untersucht. In 0,1-3 M NaCl konnte keine Abhängigkeit der Np-Sorption von der Ionenstärke beobachtet werden. Die K_d -Werte betragen: $93 \pm 10 \text{ L/kg}$ für OPA (anaerob, pH 7,6), $45 \pm 7 \text{ L/kg}$ für Illit (aerob, pH 7,6) und $47 \pm 10 \text{ L/kg}$ für STx-1 (anaerob,

pH 8,0). Für die Modellierung der Sorption von Np(V) an Montmorillonit wurden unter anaeroben Bedingungen die pH-Abhängigkeit der Sorption von 8 μM Np(V) im pH-Bereich 3-10 und eine Sorptionsisotherme bei pH 8,5 im Konzentrationsbereich von 10^{-11} - 10^{-4} M Np(V) in 0,1, 1 und 3 M NaCl gemessen. Diese Experimente zeigten ebenfalls keinen signifikanten Einfluss der Ionenstärke auf die Sorption von Np(V).

Bei Diffusionsexperimenten mit 1 und 3 M NaCl als mobile Phase waren die Diffusionsparameter D_e und ε für HTO in OPA unabhängig von der Ionenstärke. Für die Diffusion von $^{22}\text{Na}^+$ in OPA wurde eine leichte Abnahme von D_e und α mit zunehmender Ionenstärke beobachtet. Bei der Diffusion von Np(V) in OPA mit 1 M NaCl (pH 7,6) als mobile Phase war $D_e = 6,3 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$. Mit Porenwasser als mobile Phase war $D_e = 6,9 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ gemessen worden (Wu et al., 2009). Allerdings zeigte sich der Einfluss der mobilen Phase bei dem aus den Diffusionsexperimenten ermittelten K_d -Wert für Np(V). Dieser betrug $318 \pm 32 \text{ L/kg}$ in 1 M NaCl bzw. $100 \pm 10 \text{ L/kg}$ in Porenwasser.

Bei Batchversuchen mit OPA-Suspensionen in synthetischem Porenwasser bei pH 7,6 wurde der Einfluss von gelöstem Fe(II) (0,1 mM FeSO_4) auf die Sorption von 4 μM Tc(VII) unter anaeroben Bedingungen untersucht. Dabei konnte eine etwas erhöhte Tc-Sorption von bis zu ca. 20 % gegenüber den Experimenten ohne Fe(II)-Zugabe beobachtet werden. Bei ersten Diffusionsversuchen mit 4 und 7 μM Tc(VII) in synthetischem Porenwasser bei pH 7,6 unter aeroben Bedingungen, bei denen die Diffusion parallel zur Schichtung des Ton erfolgte, war Technetium innerhalb von wenigen Tagen durch den 10 mm dicken Tonzylinder hindurchdiffundiert. Bereits nach ca. zwei Wochen hatte die Tc-Konzentration einen stationären Zustand erreicht.

Bei Experimenten an der Diamond Light Source konnten mittels μ -XRF lokale Anreicherungen von Tc nach der Sorption an OPA beobachtet werden. Die μ -XANES-Spektren dieser Anreicherungen zeigten, dass das eingesetzte TcO_4^- durch die Wechselwirkung mit der Tonoberfläche zu Tc(IV) reduziert worden war.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung des Einflusses der Temperatur ($\leq 80 \text{ }^\circ\text{C}$) auf die Sorption von Np(V) an OPA bei unterschiedlichen Ionenstärken (0,1-3,0 M NaCl) unter aeroben Bedingungen.
- Untersuchung des Einflusses der Ionenstärke (0,1-3,0 M NaCl) auf die Sorption von Pu(III) an OPA unter anaeroben Bedingungen.
- Modellierung der Sorptionsdaten von Np(V) für Montmorillonit in 0,1, 1 und 3 M NaCl mit Hilfe des Modells 2SPNE SC/CE und Vergleich mit den Ergebnissen für 0,1 M NaClO_4 .
- Weitere Untersuchungen zur Diffusion von Tc(VII) (Raumtemperatur, Porenwasser) und Np(V) ($60 \text{ }^\circ\text{C}$, 1 M NaCl) in OPA unter aeroben Bedingungen.
- μ -XRF- und μ -XANES-Messungen an der Swiss Light Source zur Diffusion von Np in OPA.

5. Berichte, Veröffentlichungen

D. R. Fröhlich, S. Amayri, J. Drebert, T. Reich, *Influence of humic acid on neptunium(V) sorption and diffusion in Opalinus Clay*, Radiochim. Acta, DOI 10.1524/ract.2013.

N. Stöbener, *Elementspeziation von Neptunium im Ultraspurenbereich*, 2013 (Dissertation).

S. Amayri, *Interaction and transport of actinides in natural Opalinus Clay studied by using synchrotron radiation techniques*, Vortrag im Mitarbeiterseminar des Instituts für Radioökologie und Strahlenschutz (IRS), 18.04.13, Leibniz Universität Hannover (Vortrag).

T. Reich, *Sorption and diffusion of neptunium and plutonium in Opalinus Clay*, Vortrag im Earth Surface Science Institute, 26.04.2013, University of Leeds, UK.

T. Reich, *Application of synchrotron microprobe techniques to speciation of plutonium in argillaceous rocks*, Vortrag auf XXXVIII Colloquium Spectroscopicum Internationale, 17.-20.06.2013, Tromsø, Norwegen.

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 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 Radio-nukliden (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 Komplex-liganden (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 Untersuchungen zum Komplexierungsverhalten unterschiedlicher Huminsäuren mit Europium und Uran durchgeführt. Für diese Untersuchungen konnten kommerziell erhältliche Huminsäuren (IHSS, International Humic Substances Society, St. Paul MN, USA) verwendet werden, aber auch Huminsäuren aus Gorleben und von Moorböden und Gewässern des Erzgebirges (von Projektpartnern zur Verfügung gestellt). Mittels CE-ICP-MS Kopplung konnten $\log\beta$ -Werte bestimmt werden, welche sich je nach Huminsäure und Metall deutlich voneinander unterscheiden. Die bisher verwendete Aldrich-Huminsäure, welche vor der Handhabung noch aufgereinigt wird, zeigte dabei das schlechteste Komplexierungsverhalten. Beim Vergleich der unterschiedlichen Huminsäuren konnten deutliche Unterschiede in der Bindungsstärke für Eu(III) und U(VI) gefunden werden, was auf strukturelle Unterschiede der Huminsäuren je nach Entstehungsort schließen lässt. Des Weiteren unterscheiden sich die untersuchten Metalle Europium und Uran deutlich in ihrer Komplexierungsstärke. Für Europium konnten $\log\beta$ -Werte zwischen 6,1 und 6,6 ermittelt werden. Für U(VI) (Uranyl) liegen die Werte etwa zwei Größenordnungen niedriger im Bereich zwischen 4,3 und 4,8.

Als weiterführende Experimente wurde der Einfluss der Ionenstärke, aber auch der Einfluss von Opalinuston (ternäres System) auf die Komplexierung untersucht. Bei den Sorptionsexperimenten an Opalinuston (bei hohen Ionenstärken von bis zu 3,0 M NaCl) fallen die eingesetzten Metalle nahezu quantitativ in Form von Metall-Humaten aus. Dies ist auf ein Zusammenspiel von Verdrängung der untersuchten Metalle (Eu(III) und U(VI)) von der Tonoberfläche sowie Ausfällung der Huminsäure bzw. Metall-Humat-Komplexe in Gegenwart von ein- (insbesondere Na-Ionen aus eingestellter Ionenstärke) bzw. zwei- oder dreiwertigen Metallkationen (freigesetzte Kationen aus Opalinuston-Auflösung) im Überschuss zurückzuführen. In diesem Zusammenhang konnte eine neue (noch zu identifizierende) Metall-Spezies detektiert werden, welche während der CE-Trennung noch vor den freien (durch Acetat des Puffers stabilisierten) Metallkationen zur ICP-MS migriert.

Neben den Untersuchungen zur Komplexierung konnten erste pH-edges von Uran im ternären System aufgenommen werden. Dabei wurde Aldrich-Huminsäure als Modellorganik hinzugegeben. Ebenso wurden Desorptionsuntersuchungen im ternären System (Metall-Ton-Organik) begonnen, genaue Berechnungen von K_d -Werten stehen zurzeit noch aus.

Außerdem wurde im Berichtszeitraum das Messverfahren und die Instrumentation der LC-ICP-MS-Kopplung im Rahmen der dynamischen Sorptions-/Desorptionsexperimente mittels MSE (Miniatur Säulen-Experimente) weiter verfeinert: Es wurden vergleichende Experimente zwischen verschiedenen Zerstäuber-Kammern bzw. -Materialien durchgeführt. Weiterhin wurden der LC-Flussmarker, der LC-Injektionsmarker und die Zusammensetzung für eine ggf. notwendige Make-Up-Lösung optimiert. Die Optimierung erfolgte mit der Absicht, auftretende Memory-Effekte zu minimieren und eine schnelle Ansprechzeit bzw. geringe Totzeit zur gekoppelten ICP-MS-Messung zu gewährleisten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Berichtszeitraum werden die Sorptions- und Desorptionsuntersuchungen im ternären System mit Europium und Uran weitergeführt. Dabei kommen neben Aldrich-Huminsäure als Modellorganik auch andere Huminsäuren aber auch Borsäure zum Einsatz.

Die optimierten Bedingungen der dynamischen Sorptions-/Desorptionsexperimente (MSE) werden für die Untersuchung selbstgepackter Tonsäulen, auch unter Berücksichtigung von Uran, angewendet.

Darüber hinaus soll die Verwendung eines Fluoreszenzdetektors mit Durchflusszelle als weitere Detektionsmethode für die dynamischen Sorptions-/Desorptionsexperimente etabliert werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Sander, J.M., Hein, C., Kautenburger, R. & H.P. Beck (2013) Transient ICP-MS measurements in highly saline solutions (Poster). European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry, Krakow, Poland.

Kautenburger, R., Hein, C., Sander, J.M. & H.P. Beck (2013) Metal Mobility in Clay - From Batch Experiments to Miniaturised Column Experiments with Compacted Clay (Poster). European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry, Krakow, Poland.

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 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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

AP1.1: Oberflächen schichtgeladener Tonminerale; AP1.2: Adsorption von U(VI) und Np(V); AP2.2: Anorganische Am(III)-Komplexe

Untersuchungen zur Adsorption von Uranyl(VI) an solvatisierten Kantenflächen von schichtgeladenen 2:1 Tonmineralen (AP1.2) wurden um die Oberfläche (010) von beidellitischen und montmorillonitischen Modellmineralen (AP1.1) erweitert. Hierbei wurden analoge Oberflächenmodelle wie bei den bisherigen Modellierungen zu Phyllosilikat und der (100)-Oberfläche

der geladenen Modellminerale verwendet. Wie auf der (100)-Oberfläche wurden für die Oberfläche (010) Komplexe mit den Koordinationszahlen 4 und 5 erhalten, wobei die niedrigere Koordination bei Plätzen auftritt, wo das Adsorbat an O- bzw. OH-Liganden unterschiedlicher Kationen der Oberfläche bindet. Auf der Oberfläche (010) der schichtgeladenen Minerale wird wie auf Pyrophyllit der gemischte Platz SiO-AlO gegenüber AlOOH bevorzugt. Eine Ausnahme stellt die Adsorption von Uranyl auf dem SiO-AlO-Platz von Montmorillonit dar, wenn zugleich unter der Oberfläche ein Defekt liegt, wobei sich die Adsorptionsenergie beider Komplexe nur um 24 kJ/mol unterscheidet. Dieser Befund stützt die bisherige Arbeitshypothese, dass bevorzugte Plätze vor allem von Oberflächengruppen und nicht vom Mineral oder der Oberflächenorientierung bestimmt werden, auch wenn die energetischen Unterschiede zwischen verschiedenen Plätzen im Falle geladener Minerale tendenziell geringer ausfallen. Weiterhin bestätigen die Ergebnisse für schichtgeladene Modellminerale die bereits für Kaolinit und Pyrophyllit gefundene Korrelation der U-O-Bindungslängen zu Oberflächen und Liganden mit der formalen Ladung der O-Zentren, die für die Interpretation von EXAFS-Messungen nützlich ist. Die Untersuchungen zu AP1.2 werden derzeit mit der Modellierung von Adsorptionskomplexen von Uranyl auf der dritten häufigen Schichtsilikatantenfläche (110) abgerundet.

Modellierungen von Actinid-Borat-Komplexen (AP2.2) wurden weitergeführt, wobei sich die Arbeiten auf Uran(VI)- und Uran(VI)-Monohydroxidkomplexe der Borsäure und ihrer Anionen konzentrierten, die bei geringen Borsäurekonzentrationen und neutralem bis saurem pH zu erwarten sind. Neben dem etablierten Lewis-Borat-anion $B(OH)_4^-$ wird auch das Brønstedt-Anion $B(OH)_2O^-$ als Ligand untersucht, da für die entsprechenden Ionen in Lösung ähnliche freien Energien berechnet wurden. Uranyl-Borsäurekomplexe sind außersphärisch stabiler als monodentat-innersphärisch. Damit sind auch innersphärische Komplexe der Borsäure mit Uranylmonohydroxid unwahrscheinlich. Optimierungen außersphärischer Uranylmonoboratkomplexe ergaben bisher keine stabilen Spezies. Stattdessen wird gefunden, dass sich eine OH-Gruppe umlagert, was zu einem außersphärischen Uranylmonohydroxid-Borsäurekomplex führt, in Übereinstimmung mit dem niedrigeren pK_H -Wert des Uranyl-Aquakomplexes im Vergleich zur Borsäure. Innersphärische Boratkomplexe sind stabil und bevorzugt monodentat, allerdings ist ihre Existenz in gering konzentrierten Lösungen aufgrund des Zerfalls des außersphärischen Komplexes fraglich. Für Uranylmonohydroxid wurde ein außersphärischer Monoboratkomplex gefunden sowie stabilere innersphärische Komplexe. Bei diesen innersphärischen Komplexen ist eine bidentate Koordination des Boratliganden bevorzugt. Ein monodentater Uranylkomplex mit dem Liganden $B(OH)_2O^-$ erwies sich als nahezu isoenergetisch mit dem entsprechenden Boratkomplex.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.1: Oberflächen schichtgeladener Tonminerale;
- AP1.2: Adsorption von U(VI) und Np(V);
- AP1.3: Effekte hoher Ionenstärke;
- AP1.6: Methoden;
- AP2.2: Anorganische Am(III)-Komplexe;
- AP2.3: Wechselwirkung von Am(III) mit Tonorganika.

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 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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

- Stationäre und zeitaufgelöste Lumineszenzuntersuchungen von Eu(III) bei Ionenstärken $I < 3$ (NaCl, pH 5, in H₂O) wurden im Temperaturbereich $20\text{ °C} < T < 60\text{ °C}$ weitergeführt. In Anwesenheit von niedermolekularen organischen Säuren (NOS, zunächst Glykolsäure) wurden verschiedene spektroskopische Parameter (τ , R) bestimmt für weitere Ionenstärken bestimmt. Aus der Temperaturabhängigkeit der Daten wird eine Aktivierungsenergie der Lumineszenzlöschung bestimmt und auf den Einfluss der Ionenstärke untersucht. Referenzexperimente in D₂O werden derzeit für pD 5 durchgeführt.
- Ein verbesserter Probenhalter zur Durchführung temperaturabhängiger Messungen von Proben in kondensierter Phase wurde fertiggestellt und in die Messapparatur integriert. In dem verbesserten Aufbau können jetzt bei Bedarf auch mit zwei iCCD-Detektoren im T-Format gleichzeitig Lumineszenzkinetiken bzw. hochaufgelöste Emissionsspektren mit unterschiedlichen Detektionsbedingungen (z. B. Verzögerung bzw. Schrittweite der Messfenster) aufgenommen werden.
- Für D₂O als Lösungsmittel wurden Lumineszenzexperimente mit Eu(III) als Sonde bei unterschiedlichen Ionenstärken (NaCl: 0.01 M, 0.1 M, 1 M und 3.9 M; CaCl₂: 0.01 M, 0.03 M, 0.3 M und 1.3 M) und pD-Werten (pD = 2, 5, 7.4) gemacht. Als spektroskopischen Parameter wurden die Lage und Intensität des ⁷F₀-⁵D₀-Übergangs, das Asymmetrieverhältnis R sowie die Lumineszenzabklingzeit τ ausgewertet.
- Die Komplexierung von Eu(III) durch aquatische Huminstoffe (GohyFA bzw. GohyHA) bei Ionenstärken $I = 0.5, 1$ und 3 (für NaCl; weiter Experimente werden mit CaCl₂ durchgeführt wobei die maximale Konzentration auf 1 M eingestellt wird) sowie unter Variation der Temperatur ($T = 22\text{ °C}, 40\text{ °C}, 60\text{ °C}$) wird untersucht. Dazu werden die intrinsische Huminstofffluoreszenz sowie die sensibilisierte Eu(III)-Lumineszenz stationär und zeitaufgelöst für pH 5 und pH 7 gemessen und mit Hinblick auf die Bestimmung von konditionellen Bindungskonstanten ausgewertet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Arbeiten zum Einfluss der Ionenstärke und Temperatur auf die Komplexierung von Eu(III) durch kleine organische Liganden in H₂O und D₂O
- Erste vorbereitenden Untersuchungen der Temperaturabhängigkeit der Lumineszenz von Tb(III) in Komplexen mit kleinen organischen Liganden
- Fortsetzung von Untersuchungen zur Komplexierung von Eu(III) durch Modellpolymere bzw. Referenz-Huminstoffe bei hohen Ionenstärken bzw. erhöhten Temperaturen mittels stationärer und zeitaufgelöster Lumineszenzspektroskopie
- Weitere Lumineszenz-basierte Experimente zur Sorption von Eu(III) bzw. von niedermolekularen organischen Liganden auf Mineraloberflächen. Mittels Nd(III) wird über die Auswertung der Resonanzenergietransfer-Effizienz der mittlere Abstand zwischen Ionen auf der Oberfläche bestimmt werden.
- Fortsetzung der Kooperation im Bereich der hochauflösenden Lumineszenzmikroskopie mit dem KIT-INE und im Bereich der Interaktion von Aktinoiden (Lanthanoiden) mit Huminstoffen mit HZDR.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Stefanie Kuke: „Lanthanoide(III) in Komplexen mit niedermolekularen Säuren – Spektroskopische Betrachtung komplex-spezifischer Lösmechanismen in Eu(III)- und Tb(III)-Komplexen“, Dissertation, Potsdam 2013

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 30.06.2014		Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013
Gesamtkosten des Vorhabens: 315.249,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Bernhard

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 Datenbanken schließen. Erstmalig 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:

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:

- Analog zur Eu-Borat-Feststoffbildung (zeitliche Verfolgung der Bildung mittels TRLFS) im NaClO_4 -Medium wurden die Experimente für verschiedene NaCl -Konzentrationen durchgeführt. Es zeigte sich eine Hemmung der Feststoffbildung mit steigender Chlorid-Konzentration. Im Eu-Borat-Feststoff liegt ein B/Eu-Verhältnis von 5:1 vor, was auf eine Pentaboratspezies schließen lässt. IR-Untersuchungen zeigen, dass die Struktur des Eu-Borat-Feststoffes durch die Anwesenheit von ClO_4^- bzw. Cl^- auch bei hohen Salzkonzentrationen unbeeinflusst bleibt. Der Feststoff ist weitestgehend amorph, so dass sich keine Strukturaussagen aus XRD-Untersuchungen ergeben haben.
- Die Komplexierung von Eu^{3+} durch Borsäureester (Veresterung der Borsäure mit Salicylat bzw. Lactat) konnte mittels TRLFS und ^{11}B - und ^1H -NMR-Spektroskopie eindeutig nachgewiesen werden. Die Bindungsverhältnisse im $\text{Eu(III)-(Salicylato)-Borat-Komplex}$ können über ein Ionenpaar beschrieben werden (Resultat aus NMR- und IR-Untersuchungen). Für die Bestimmung der Stabilitätskonstante zwischen Eu(III) und Boraten wird ansatzweise die Struktur des (Salicylato)-Borats (tetrakoordiniertes Bor) als analoge Struktur für B(OH)_4^- angenommen. Mittels TRLFS-pH-Titration wurde für den $\text{Eu-(Salicylato)-Borat-Komplex}$ eine Stabilitätskonstante von $\log\beta = 2,5 \dots 2,6$ bestimmt.

AP2:

- Die Untersuchungen zur Ermittlung der thermodynamischen Parameter der Komplexbildung von Nd(III) mit organischen Liganden (im Berichtszeitraum hauptsächlich mit Malonsäure) mittels UV-Vis-Spektroskopie und isothermaler Titrationskalorimetrie (ITC) wurden fortgesetzt:
- 1. Zur Ermittlung des für die ITC optimalen Metallionen-Ligand-Verhältnisses wurde die Komplexierung bei konstanter Ionenstärke von 0,25 m an NaCl mit verschiedenen Nd(III) zu Ligand-Verhältnissen untersucht. Es wurden zwei $\text{Nd-Malonat-Komplexe}$ mit den vorläufigen Stabilitätskonstanten ermittelt: $\log\beta_1 = 3,6 \pm 0,1$ und $\log\beta_2 = 5,5 \pm 0,3$. Die ΔH -Werte betragen $14 \pm 0,1 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ für den 1:1 Komplex und $7 \pm 2 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ für den 1:2 Komplex.
- 2. In Hinblick auf die geplanten Untersuchungen mit Am^{3+} bei kleinen Konzentrationen ($< 1 \text{ mM}$) wurden ITC-Untersuchungen in Abhängigkeit von der Nd(III) -Konzentration (5 und 0,5 mM) bei einem konstantem Metall zu Ligand-Verhältnis von 1:4 (mit $I = 1 \text{ m NaCl}$) durchgeführt. Mit steigender Nd(III) -Konzentration wurden größere ΔH -Werte bestimmt. Dieser Befund muss hinsichtlich der Genauigkeiten und Fehler in den ΔH -Werten noch interpretiert werden. Im untersuchten Konzentrationsbereich wurden drei $\text{Nd-Malonat-Komplexe}$ mit folgenden (vorläufigen) thermodynamischen Werten bestimmt: $\log\beta_1 = 3,04 \pm 0,02$, $\Delta H_1 = 11,45 \pm 0,01 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta S_1 = 97 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ und $\log\beta_2 = 5,65 \pm 0,02$, $\Delta H_2 = 3,4 \pm 0,1 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta S_1 = 120 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ und $\log\beta_3 = 8,4 \pm 0,1$, $\Delta H_3 = 10,97 \pm 0,02 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $\Delta S_1 = 194 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$.
- 3. Die Ionenstärkeabhängigkeit ($I = 0.5$ bis 3 m NaCl) der Komplexierung wurde untersucht. In mehreren Messreihen mit gleichem Metall zu Ligand Verhältnis wurde untersucht, wie sich die Ergebnisse bei Verwendung verschiedener Nd(III) -Konzentrationen unterscheiden und ob die Anwesenheit eines pH-Puffers (MES) das Ergebnis verändert. Die gewonnenen Daten werden derzeit noch ausgewertet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der ITC-Experimente zur Bestimmung thermodynamischer Daten der Wechselwirkung Nd/Eu/Am mit kleinen organischen Liganden (speziell Malonsäure, Oxalsäure) unter Variation von I , Metallionenkonzentration, Metallion:Ligand-Verhältnis und T . Aus den Messungen wird ein notwendiges Parameterset definiert, mit dem die Komplexierung mit Am(III) untersucht werden soll.
- Fortgang der Arbeit zur Bestimmung der Komplexierung von dreiwertigen Actiniden und Lanthaniden mit Borsäure/Boraten in Anwesenheit von Organika (Salicylat, Lactat) mittels TRLFS
- Feststoff-TRLFS am Eu-Borat-Feststoff (Zusammenarbeit mit Universität Potsdam)

5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Schott et al.: Eu(III)-B(OH)_3 -Organic System at increased Salt Concentrations, ABC-Salt(III)-Workshop, 15.-17.4.2013, Santa Fee, USA, Vortrag

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 30.06.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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

Im Rahmen der Untersuchungen zur Cm(III)-Propionat-Komplexierung konnte erstmalig der $[\text{Cm}(\text{Prop})_3]$ -Komplex beobachtet und vollständig charakterisiert werden. Hierbei wurde sowohl die thermodynamische Stabilitätskonstante als Funktion der Temperatur als auch die entsprechenden Standardreaktionsenthalpien und -entropien ermittelt.

Aufbauend auf den Ergebnissen zur Komplexierung von Cm(III) mit Acetat in CaCl_2 -Lösungen, wurden die Untersuchungen auf das NaClO_4 -Medium ausgeweitet. Die in den beiden Elektrolyten ermittelten thermodynamischen $\log K_n^0([\text{CmAc}_n]^{3-n})$ -Werte ($n=1-3$; $T=20-90\text{ °C}$) zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Desweiteren stehen die hier ermittelten Daten auch in guter Übereinstimmung mit den analogen Lanthanidkomplexen. In Analogie zu den bisher untersuchten Propionat-Systemen zeigen sämtliche Komplexbildungsreaktionen positive $\Delta_r H_m^0$ - und $\Delta_r S_m^0$ -Werte.

Mittels TRLFS wurde die Komplexierung von Eu(III) mit Fulvinsäure in 0.1 m NaClO_4 im Temperaturbereich von $T = 20-80\text{ °C}$ untersucht. Die Ergebnisse zeigen eine einzelne Komplexspezies, deren konditioneller $\log \beta' = 6.02 \pm 0.24$ mit der Temperatur kontinuierlich um eine Größenordnung ansteigt. Die zugehörigen Werte für die Standardreaktionsenthalpie und -entropie sind somit positiv, wie sie auch für nicht chelatisierende organische Liganden wie z. B. Propionat und Acetat beobachtet wurden.

Erste Untersuchungen zur Wechselwirkung von Cm(III) mit Oxalat bei 25 °C zeigen, dass sich ausschließlich $[\text{Cm}(\text{Ox})_n]^{3-2n}$ Komplexe ($n = 1-3$) bilden. Eine Komplexierung von Cm(III) mit HOx^- und NaOx^- kann ausgeschlossen werden. Die ermittelten $\log \beta_{n,25^\circ\text{C}}^0$ -Werte sind in hervorragender Übereinstimmung mit den entsprechenden Werten für das analoge Am(III)-System. Bei erhöhten Temperaturen bildet sich ein vierter Komplex, welcher bisher in der Literatur nicht erwähnt ist. Die vorläufige Datenlage deutet darauf hin, dass es sich um einen $[\text{Cm}(\text{Ox})_4]^{5-}$ -Komplex handelt. Der Anteil dieser Spezies nimmt mit steigender Temperatur stark zu, was auf eine End-On-Koordination des vierten Oxalat-Liganden hindeutet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Komplexierung von Cm(III) mit Acetat in NaCl -Lösungen bei erhöhten Temperaturen.
- Fortführung der Untersuchungen zur Komplexierung von Cm(III) mit Oxalat in verschiedenen Elektrolytmedien und bei erhöhten Temperaturen.
- Komplexierung von Cm(III) mit Fulvinsäuren in verschiedenen Elektrolytmedien und bei erhöhten Temperaturen.
- EXAFS-Untersuchungen zur Komplexierung von Am(III) mit Acetat und Oxalat in Abhängigkeit des pH-Wertes, der Ionenstärke und der Temperatur.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Skerencak, A., Fröhlich, D.R., Panak, P.J., The thermodynamics of the complexation of Cm(III) with lactate at $T = 20-100\text{ °C}$: A combined TRLFS, UV/Vis and EXAFS study, in preparation.

Fröhlich, D.R., Skerencak, A., Panak, P.J., A spectroscopic study on the formation of Cm(III) acetate complexes at elevated temperatures, in preparation.

Fröhlich, D.R., Skerencak, A., Morkos, M., Panak, P.J., A spectroscopic study of Cm(III) complexation with propionate in saline solutions at variable temperatures, *New J. Chem.*, 2013, 37, 1520.

Bachelorarbeit: Maiwald, M., Spektroskopische Untersuchungen zum Komplexierungsverhalten von Cm(III) mit Oxalat, Bachelor-Arbeit, Universität Heidelberg, 2013.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 *FLAC^{3D}* und *TOUGH2* im Hinblick auf die Simulation von mechanisch-hydraulisch-thermischen Prozessen im Tonsteingebirge unter Endlagereinflüssen zu koppeln. Ausgangspunkt ist dabei das EDV-Programm *FLAC^{3D}*, 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 *FLAC^{3D}* (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

- AP1: Erweiterung des Kenntnisstandes zu T durch Kontakt zum LBNL.
- AP3: Begleitende Literaturrecherche und -einarbeitung.
- AP4/5: Ausbau der bestehenden F-T-Schnittstelle und -Kopplungsfunktionen, auch insbesondere hinsichtlich Zweiphasenfluss (→ Luftmassenanteile beider Phasen, andere Fluide/EOS-Module, numerisch stabilere Berechnung des M→H-Einflusses, Quellen und Senken); Implementierung des Stoffmodells BBM in F-T.
- AP6/16: Einarbeitung in ein weiteres komplexeres Modellbeispiel, Beginn der Implementierung.
- AP7: Durchführung weiterer Testsimulationen an Modellbeispielen aus AP6 zur Behebung von Unklarheiten.
- AP11: Abteufen von vier Observationsbohrlöchern im URL Mont Terri inklusive Bohrkernkonservierung ist im Januar 2013 erfolgt.
- AP12: Videoobservation, Kalibermessungen und Luftfeuchtigkeitsmessungen innerhalb der Bohrlöcher an bisher insgesamt neun Observationsterminen.
- AP14: Durchf. v. 15 Kurzzeitfestigkeitsversuchen und 2 einaxialen Dauerstandversuchen.
- AP17: Verif./Validierung 1-Phasenfluss durch Gegenüberstellung von F- & F-T-Resultaten. Praxisbezogene Anwendung: Simulation von BL-Tragverhalten im Streckennahfeld.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Beschaffung von Literatur zu laborativen Untersuchungen zum THM-Materialverhalten, Aufarbeitung eigener laborativer Befunde sowie Dokumentation.
- AP3: Weitere Einarbeitung in vorliegende Literatur, weitere Recherche und Identifizierung offener Fragestellungen.
- AP4: Erweiterung der Schnittstelle nach Bedarf.
- AP5: Erweiterung der Kopplungsroutinen hinsichtlich mechanisch beeinflusster Porositäten sowie nach Bedarf.
- AP7: Ggf. Durchführung weiterer Testsimulationen an Modellbeispielen aus AP6 zur Behebung von verbliebenen Unstimmigkeiten und Unklarheiten.
- AP12: Durchführung weiterer Bohrlochobservationsarbeiten im Mont Terri und in Tournemire im 3. Quartal 2013.
- AP14: Durchführung weiterer einaxialer und triaxialer Dauerstandversuche.
- AP16: Verifikation des neuen Modellbeispiels aus AP6 anhand von Vergleichsdaten (hydraulische Berechnung) sowie Durchführung von Variationssimulationen (inkl. HM).
- AP17: Verifikation/Validierung 2-Phasenfluss durch Berechnungen zum hydr.-mech. gekoppelten Verhalten von BDM-B1. Benchmark: F-T / Code Bright (TUC / GRS).

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 Sensitivanalyse. Die numerische Effizienz soll anhand von Testfällen mit Praxisbezug überprüft und bewertet werden. Weiterhin ist geplant, methodische Grundlagen zur Sensitivanalyse 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

Der Beitrag „Sensitivity Analysis: Theory and Practical Application in Safety Cases“ wurde für das OECD/NEA-Symposium „The Safety Case for Deep Geological Disposal of Radioactive Waste: 2013 State-of-the-Art“ eingereicht und angenommen.

Zur Untersuchung der Behandlung von korrelierten Eingangsdaten wurden Modellrechnungen durchgeführt, deren Eingangsdaten sich nur durch die Korrelation bestimmter Parameter unterscheiden.

Mittels EASI wurde eine varianzbasierte Sensitivitätsanalyse mit den bisherigen Ergebnissen des LLW/ILW-Modells durchgeführt.

Eine graphische Screening-Methode, welche die Abweichung der Parameterverteilungen von einer idealen Zufallsverteilung darstellt, wurde unter dem Projektcodennamen Testa entwickelt. Bisher untersuchte Methoden wurden an einem Modell für ein Endlager im Kristallin angewendet.

Graphische Methoden, die eine schnelle visuelle Einschätzung ermöglichen, wurden jeweils am gleichen Datensatz angewendet, um die als sensitiv eingeschätzten Parameter des visuellen Screenings zu vergleichen.

Zur Untersuchung zeitabhängiger Sensitivitätsanalysen wurden weitere Rechenläufe, mit und ohne unmittelbar zeitbeeinflussende Parameter, mit dem LLW/ILW-Modell durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Review-Anmerkung zum Beitrag für das OECD/NEA-Symposium sollen in diesen eingearbeitet sowie die Präsentation des Beitrags vorbereitet werden.

Untersuchung der Einflussnahme auf zeitabhängige Sensitivitätsanalysen durch Reduzierung unmittelbar zeitbeeinflussender Parameter sowie durch nachträgliche Zeitkorrektur der Simulationsergebnisse anhand verschiedener Bezugspunkte.

Das Simulationsmodell für ein HLW-Endlager in Salz soll fertiggestellt werden, damit daran alle vorherigen Analysen wiederholt und im Kontext des Modells erneut bewertet werden können.

Die bisher untersuchten Methoden sollen um Dichte basierte Analysen erweitert sowie alle Methoden an den drei zur Verfügung stehende Modellen angewendet und verglichen werden.

Die Wirkungsweise von Transformationen, insbesondere solche, die nicht rangbasiert sind, soll im Hinblick auf eine Steigerung der Aussagekraft der Analyseergebnisse untersucht werden.

Die Aussagekraft und Robustheit von Metamodellen zur Verwendung in der Sensitivitätsanalyse soll untersucht werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

S. Kuhlmann, K.-J. Röhlig, E. Plischke: First Results from the Project: Numerical Efficiency Optimization of Sensitivity Analysis Methods with Regard to Analysis Models of Long Term Safety for Nuclear Disposal Sites. Proceedings of 3rd US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation. Oct 8 – 11, 2012, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

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: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2011 bis 31.08.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 530.250,00 EUR	Projektleiter: Dr. Rübel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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 14 zum Teil mehrtägige Arbeitsgespräche mit den drei am Projekt beteiligten Organisationen durchgeführt. Dabei wurden vor allem FEP-Inhalte diskutiert. Weitere Themen waren die Charakterisierung des Endlagerstandortmodells Nord, das Endlager- und Sicherheitskonzept sowie die Konkretisierung der in den Sicherheitsanforderungen des BMU zu erfüllenden Anforderungen bezüglich der Ausbildung sekundärer Wasserwegsamkeiten, der Bewegung von Porenwasser im ewG und die Beeinflussung der Barrierenwirkung durch die Temperaturentwicklung. Weitere Arbeiten waren folgende:

AP1: Diskussion und Kommentierung der von der BGR verfassten Berichte zum geologischen Endlagerstandortmodell Nord.

AP3: Die verbliebenen 13 der GRS zugeordneten FEP für das Endlagerstandortmodell Nord wurden beschrieben und diskutiert. Die FEP wurden entsprechend der Diskussion überarbeitet und in die FEP-Datenbank eingetragen. Die von den anderen Organisationen vorgelegten FEP-Beschreibungen wurden jeweils kommentiert und auf den Projektsitzungen diskutiert.

AP5: Auf der Basis des Endlagerkonzepts wurden Abschätzungen zur Montmorillonitumsetzung in Chlorit durch die Fe(2+)-Freisetzung aus den Metallen im Nahfeld durchgeführt.

Weiterhin wurden Abschätzungen zum Schadstofftransport und zur advektiven Lösungsbewegung im ewG vorgenommen. Diese waren Basis zur Diskussion über die Sicherheitsanforderung des BMU bezüglich der Beschränkung der Bewegung von Porenwasser im ewG.

Es wurde die Erarbeitung des Nachweiskonzepts für den radiologischen Nachweis und die Bewertung der Datenlage der für den radiologischen Nachweis benötigten Daten begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Diskussion des Endlagerstandortmodells Süd und des dazugehörigen Endlagerkonzepts.

AP2: Anpassung des Sicherheitskonzepts an den Stand der Diskussion.

AP3: Abschluss der Beschreibung der FEP-Inhalte für das Endlagerstandortmodell Nord. Beginn der Szenarienentwicklung für das Endlagerstandortmodell Nord und Beginn der Bearbeitung des FEP-Katalogs für das Endlagerstandortmodell Süd.

AP5: Weiterführung der Rechnungen zur Radionuklidenausbreitung als Grundlage der Diskussion des Endlager- und Nachweiskonzepts.

Ausarbeitung des Nachweiskonzepts für den radiologischen Nachweis. Beurteilung der Qualität der existierenden Eingangsdaten für die Rechenprogramme für den radiologischen Nachweis. Beurteilung der Relevanz der bestehenden Ungewissheit der Daten im Hinblick auf den Schadstoffstrom aus dem ewG.

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: Systemverhalten und Systembeschreibung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2011 bis 31.08.2014	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 319.866,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Im Zusammenhang mit der Methodik zum Nachweis der Integrität der technischen und der geotechnischen Barriere, wurde zunächst das anerkannte Nachweiskonzept entsprechend der Methode der Teilsicherheitsbeiwerte zusammenfassend beschrieben. Das Nachweiskonzept für die geotechnischen Barrieren setzt sich aus mehreren Funktionsnachweisen zusammen. Ergänzend zur Nachweismethodik wurde auch das Vorgehen zur Ermittlung der relevanten Bemessungssituationen beschrieben. Für die Verschlussbauwerke wurde der Bemessungszeitraum für die Funktionsfähigkeit der Verschlüsse definiert. Aus den zu führenden Nachweisen, den auslegungs-bestimmenden Bemessungssituationen und dem Funktionszeitraum kann der notwendige Kenntnisstand für die Nachweisführung bestimmt werden. Alle Teilelemente der drei wesentlichen Verschlussbauwerke Schachtverschluss, Streckenverschluss und Bohrlochverschluss wurden im Weiteren auf die notwendigen Funktionsnachweise hin überprüft. Für die Teilelemente wird, entsprechend ihrer Konzeption, der vorhandene Wissensstand zu allen Einzelnachweisen beschrieben. Gegebenenfalls vorhandene Kenntnisdefizite werden aufgezeigt. Mit der Untersuchung der Nachweisführung wird die Grundlage geschaffen, um im Zuge einer endgültigen Auslegung die relevanten Nachweise zielgerichtet führen zu können.

Um den Integritätsnachweis der geologischen Barriere quantitativ führen zu können, ist es notwendig, die in den Sicherheitsanforderungen (BMU, 2010) beschriebenen Kriterien soweit zu quantifizieren, dass sie im Rahmen von rechnerisch zu führenden Nachweisen abgehandelt werden können. Aus diesem Grund wurde eine Recherche durchgeführt hinsichtlich verfügbarer Informationen aus Versuchen in Untertagelaboratorien und aus der einschlägigen Fachliteratur über Prozesse, die, bedingt durch ein Endlager, zu einer Veränderung des Wirtsgesteins führen können. Quantitativ formuliert wurden das Dilatanz-Kriterium, das Fluiddruck-Kriterium, das Advektions-Kriterium und das Temperatur-Kriterium. Die Ergebnisse wurden in einem Technischen Bericht im ersten Entwurf dokumentiert. Diese quantitative Formulierung ist als vorläufig anzusehen, da noch keinerlei Datenmaterial aus Standorterkundungen vorliegt. Bei Vorlage entsprechender Kenntnisse sind die Quantifizierungen zu verifizieren.

AP3:

Grundlage des Langzeitsicherheitsnachweises ist ein FEP-Katalog, der alle für die zukünftige Entwicklung des Endlagersystems relevanten Eigenschaften, Ereignisse und Prozesse beschreibt. Die Erstellung des ersten FEP-Kataloges für die Referenzregion Nord wurde weitestgehend abgeschlossen. Sämtliche FEP wurden in der Datenbank erfasst.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der Arbeiten zur Erstellung des FEP-Kataloges für die Referenzregion Nord.

Szenarienanalyse für das Referenzgebiet Nord.

Abschließende Diskussion und Fertigstellung des Kriterien-Berichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 28.02.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 386.642,00 EUR	Projektleiter: Dr. Keller	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Auf der Grundlage des derzeitigen Standes von Wissenschaft und Technik zur HAW-Endlagerung sowie unter Berücksichtigung international bewährter Konzepte für Sicherheitsnachweise in verschiedenen geologischen Formationen wird die Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tongestein erarbeitet und mit Bezug zu einem generischen Standort in Norddeutschland die Anwendbarkeit getestet. Die Übertragbarkeit der Ergebnisse auf einen möglichen Standort in Süddeutschland wird aufgezeigt und die Unterschiede zwischen den versch. Standorten werden beschrieben.

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 Szenarientwicklung
- 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.

Zu bearbeitende Unteraufgaben:

- AP1.1: Kriterien zur Auswahl von Referenzregionen und generischer Endlagerstandorte
- AP1.2: Zusammenstellung der Gesteinseigenschaften; Integritätsuntersuchungen
- 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
- AP3.3: Erarbeitung und Beschreibung der Szenarien

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten an den Unteraufgaben 1.2 und 1.3 (NORD) mit der Erstellung von drei Berichten abgeschlossen. Mit den Arbeiten zu 1.3 (Standort SÜD) wurde begonnen.

Die Berichte zur geologischen Langzeitprognose jeweils für die Endlagerstandortmodelle NORD und SÜD (3.1) liegen als Entwurf vor. Die geologischen FEPs für das Modell NORD (3.2) wurden zusammengestellt, ihre Abhängigkeiten untereinander diskutiert und beschrieben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung des Berichts zur Unteraufgabe 1.3 (SÜD) und den Berichten zu 3.1 (Langzeitprognosen). Ein vorläufiger FEP-Katalog zum Standort NORD soll im kommenden Halbjahr erarbeitet werden. Hinsichtlich der FEP-Abhängigkeiten wird der Katalog im Verlauf der weiteren Arbeiten angepasst, um die Ergebnisse der Szenarientwicklung konsistent abzubilden. Mit der Beschreibung der geologischen FEPs für das Endlagerstandortmodell SÜD wird begonnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11062A
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 31.08.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.179.070,00 EUR	Projektleiter: Schneider	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d^{3f} und r^{3t} 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). Mehrskalensansätze 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 d^{3f} und r^{3t}, 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 d^{3f} und r^{3t} 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 31. Mai fand das zweite Projekt-Statusgespräch bei der GRS in Braunschweig statt. Die Arbeitsgruppen stellten ihre Arbeiten zum Projekt vor und verständigten sich über das weitere Vorgehen.

Die Arbeiten am graphischen Benutzerinterface wurden fortgesetzt.

Die Funktion der Quellen und Senken in d^3f und r^3t wurde systematisch überprüft, insbesondere auch die Funktion verschiedener Arten von Wärmequellen in d^3f . Mehrere Fehler wurden behoben. Mit der Implementierung zusätzlich benötigter Arten und Kombinationen von Quellen wurde begonnen.

Anforderungen an die Bilanzierungsmethoden wurden spezifiziert.

Mit der Zusammenstellung der vereinfachten Testfälle für AP8 wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Mit der Erarbeitung der Konzepte für die Implementierung der Cauchy-Randbedingungen und der Bilanzierungsmethoden wird begonnen.
- Die Arbeiten an der Benutzeroberfläche werden weitergeführt.
- Testfälle zur Verifizierung der Neuentwicklungen werden ausgewählt.

Das zweite Statusgespräch wird voraussichtlich am 7./8. November 2013 am G-CSC in Frankfurt stattfinden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 11062B
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: 01.06.2012 bis 28.02.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 Generierung räumlich verteilter Zufallsfelder mit bestimmten geologischen Eigenschaften (hydraulische Leitfähigkeiten, Porositäten) wurde abgeschlossen.

Des Weiteren wurde eine Literaturrecherche zu den Methoden zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung für turbulente reaktive Strömungen durchgeführt. Es wurden die theoretischen Grundlagen zu diesem Thema erarbeitet und es wurde die Differentialgleichung, die die raumzeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte beschreibt, aufgestellt. Diese Differentialgleichung benötigt die explizite Berechnung von Parametern: einen Parameter, der die Verbreiterung der Fahne beschreibt, zum anderen einen Parameter, die die Mischung beschreibt. Der erste Parameter wurde berechnet. Ferner wurden verschiedene Mischungsmodelle für den unbekanntem zweiten Term untersucht.

Desweiteren wurde eine Literaturrecherche zum Themenkomplex Coarse Graining durchgeführt. Auch hier wurden die theoretischen Grundlagen erarbeitet und Überlegungen angestellt, wie die Filtermethode Coarse Graining mit der Formulierung der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung kombiniert werden kann.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die aktuelle Arbeit betrifft den zweiten Punkt des Arbeitsprogramms:

Simulation von Strömungs- und Schadstofftransportsituationen mittels Monte-Carlo-Simulationen

Zurzeit werden Ensemble-Simulationen zu Schadstofftransportprozessen in heterogenen porösen Medien vorbereitet. Mithilfe von Monte-Carlo-Verfahren soll ein Ensemble von Transportsituation gerechnet und statistisch ausgewertet werden. Des Weiteren soll die Gleichung für den Transport der Wahrscheinlichkeitsdichte von Konzentrationen numerisch gelöst und mit der statistischen Auswertung der Ensemble-Simulationen verglichen werden. Dies soll dazu dienen, ein Mischungsmodell auszuwählen bzw. zu verifizieren.

Diese idealisierten Schadstofftransporte ohne chemische Reaktionen sollen mit bekannten Ergebnissen aus der Literatur verglichen werden. Mittels dieser einfachen Testfälle werden die verschiedenen Mischungsmodelle getestet und verglichen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Ein wissenschaftlicher Artikel zum Thema Generierung räumlich verteilter Zufallsfelder mit bestimmten geologischen Eigenschaften (hydraulische Leitfähigkeiten, Porositäten) ist eingereicht worden.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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: Portierung auf Mehrkern- und Graphikprozessoren

Das Simulationssystem UG4 wurde um eine GPU-Algebra erweitert. Die Funktionsweise ist wie folgt: In UG4 können Matrizen und Vektoren angelegt werden. Diese sind zu Beginn auf der CPU (bzw. im RAM der CPU) gespeichert, wo die vorhandenen UG4-Diskretisierungsfunktionen auf sie wie bei der CPU-Algebra Zugriff haben. Nachdem die Diskretisierung beendet ist, wird die Matrix benutzt, z. B. als Matrix-Vektor-Produkt. Dabei "weiß" die Matrix, dass sie nur auf der CPU vorhanden ist, und kopiert sich auf die GPU, und kann dann dort verwendet werden. Gleiches gilt für die Vektoren. Mittels eines Zustandswertes (nur auf CPU; nur auf GPU; auf CPU und GPU) werden dabei die benötigten Kopieroperationen minimiert. Für alle Operationen, die auf der GPU stattfinden sollen, muss spezieller GPU-Code bereitgestellt werden. Wir haben hier für die beiden bekanntesten GPU-Programmierungsansätze CUDA und OpenCL eine gemeinsame Schnittstelle implementiert, so dass der Code nur einmal geschrieben werden muss, der dann auf CUDA und OpenCL funktioniert. Wenn eine Operation ausgeführt werden soll, für die kein GPU-Code bereitgestellt wurde, wird einfach der vorhandene CPU-Code verwendet (Fallback-Mechanismus). In ersten Tests konnte mit einem CG-Verfahren mit Jacobi-Vorkonditionierer eine 10-fache Beschleunigung erzielt werden. Im weiteren Verlauf des Vorhabens sollen weitere Glätter (Gauss-Seidel, ILU) und direkte Löser (LU) auf die Grafikkarte portiert werden, so dass die Algebra eines vollständigen algebraischen Mehrgitterverfahrens auf der GPU läuft.

Zudem wurden zur Anpassung der Rechenprogramme d^3f und r^3t für moderne Beschleuniger-Architekturen erste Experimente mit Intels neuer Co-Prozessor-Karte 'Xeon Phi' durchgeführt. Dabei handelt es sich um eine Steckkarte mit einer 60-Kern-CPU und 8 GB RAM. Als erster Ansatz wurde die Möglichkeit evaluiert, d^3f direkt als MPI-Code auf der 'Phi' auszuführen. Es hat sich jedoch gezeigt, dass so keine Beschleunigungswirkung zu erzielen ist: Das Verbindungsnetzwerk der 'Phi' scheint nicht auf die Bedürfnisse von MPI-Codes zugeschnitten, außerdem werden mit dem bestehenden Code die Vektor-Einheiten nicht optimal genutzt, was aber unabdingbar ist, um mit der 'Phi' gute Performance zu erreichen. Weitere Arbeitsschritte werden sich daher mit der Nutzung der 'Phi' als reiner Co-Prozessor zu befassen haben. Dabei werden nur einzelne, besonders gut auf die Architektur der 'Phi' passende Programmteile dort ausgeführt. Realisiert werden kann dieses Vorhaben entweder mittels OpenCL oder einer von Intel unterstützten Erweiterung von OpenMP mit Offload-Direktiven.

AP3: Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD-Mehrgitterlösers

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

AP6: Löser für hochdimensionale Probleme

Die Arbeiten in AP3, AP5 und 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 30.11.2015		Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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: - Vorbereitung der in AP1 zu modellierenden Testfälle. Auswahl eines Transportprogrammes für 2D Strömung und Transport gekoppelt mit geochemischem Rechenprogramm.
- AP2: - Beginn der Erarbeitung des erweiterten Konzepts zur Berücksichtigung von Einflussgrößen in r^3t . Auswahl der zu berücksichtigenden Prozesse.
- AP3: - Austausch der Doktoranden vom HZDR und der GRS. Teilnahme an einem Workshop zur Oberflächenkomplexierung von Europium und Abstimmung der Arbeiten der Doktoranden.
- Optimierung des Versuchsaufbaus der Säulenexperimente und erfolgreiche Durchführung erster Experimente.
 - Präparation der benötigten Reinmineralphasen (Sieben, Summenkurvenbestimmung, BET Messungen, Flusssäureaufschluss) sowie Beschaffung und erste Evaluation des natürlichen Gorleben-Sediments aus der hydrogeologischen Erkundung des Deckgebirges über dem Salzstock Gorleben.
 - Durchführung von Batch-Vorversuchen zur Untersuchung des Sorptionsverhaltens von ausgewählten Elementen an LDPE Gefäßen, zum Einfluss von Kolloiden und zur Bestimmung des geeigneten Masse/Löslichkeitsverhältnisses von Nickel.
 - Durchführung eines Workshops zur Erstellung von Titrationskurven sowie zur Vorgehensweise bei der Oberflächenkomplexparameterbestimmung.
 - Intensivierung der Zusammenarbeit mit der CTU (Prof. K. Stamberg) sowie mit der Universität des Saarlands (Prof. R. Kautenburger).
- AP7: - Durchführung von zwei Projekttreffen mit dem Verbundpartner HZDR in Leipzig und Braunschweig.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: - Beginn der Modellrechnungen zu den in AP1 ausgewählten Testfällen.
- AP2: - Weiterführung der Erarbeitung des erweiterten Konzepts zur Berücksichtigung von Einflussgrößen in r^3t .
- AP3: - Durchführung weiterer Säulenexperimente mit Quarz, aber auch mit natürlichen Sedimenten. Zeitgleich erfolgt eine Auswertung der Versuche mittels PhreeqC.
- Flusssäureaufschlüsse der natürlichen Sedimente zur exakten Charakterisierung der Mineralzusammensetzung.
 - Abschließende Klärung noch offener Fragestellungen in Bezug auf die durchgeführten Batch-Vorversuche. Vorbereitung und Durchführung von Batch-Hauptversuchen.
- AP7: - Durchführung weiterer Projekttreffen mit dem Verbundpartner HZDR.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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 30.11.2015	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 598.956,00 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

AP1:

- Festlegung auf reaktiven Transportcode PHAST gekoppelt mit PHREEQC für Vergleichsrechnungen zu r^{3t}, dazu eintägiger Workshop zu PHAST (Prof. Merkel, TU BA Freiberg, 13.06.13) und Absprache der geplanten GRS-Testrechnungen

AP2:

- Absprache zur Erweiterung des bisher in r^{3t} implementierten Konzepts um weitere Prozesse/Einflussgrößen (Redoxprozesse, Betrachtung weiterer Konkurrenzen und Komplexbildner sowie hohe Ionenstärken mit Pitzer Modell)

AP3:

- Vorversuche zur Bestimmung der geeigneten Sorptionszeit für die Sorption von U(VI) an Orthoklas sowie zum Leachingverhalten von Orthoklas und Muskovit
- Durchführung von Experimenten zur U(VI)-Sorption an Orthoklas (in Abhängigkeit von pH, fest-flüssig-Verhältnis und Urankonzentration)
- Erste spektroskopische Betrachtungen der U(VI)-Sorption an Orthoklas
- Teilnahme am Round-Robin-Test zur Analytik von Eu, Al, Fe und Ni

AP4:

- Zusammenstellung der Redoxpotentiale sowie aller redoxsensitiver Elemente für die hydrogeologischen Sedimenteinheiten Gorlebens und Abschätzung der Parametergrenzen für die E_H-Werte (Mean, Minimum, Maximum)
- Definition der E_H-Werte als pE-Werte in PHREEQC analog zur pH-Fixierung

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

- Erweiterung konzeptionelles Modell: Überführung des Konzeptes in konkrete Algorithmen, Absprachen zur Kodierung

AP3:

- Batchexperimente zur U(VI)-Sorption an Muskovit
- Fortführung Spektroskopie (TRLFS, IR) zu Oberflächenkomplexen des U(VI) an Orthoklas und Muskovit
- Teilnahme am Round-Robin-Test zur Analytik von Eu, Al, Fe und Ni
- Planung der Experimente mit Np(IV) und Einarbeitung im Umgang mit Np

AP4:

- Geplante Diskussion mit Herrn Klinge (BGR Hannover) am 12.07.13 zu den Redoxprozessen in Gorlebensedimenten (Fe²⁺/Fe³⁺, etc.)
- Kopplung PHREEQC und UCODE zur Parametervariation EH-Werte

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11082	
Vorhabensbezeichnung: Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) Phase II – Generierung von Rissssystemen 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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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: Ziel ist eine Optimierung der Polyedergeometrie, um kleinste Kanten zu beseitigen. Eine komplette Programmierung entsprechender Algorithmen stellte sich jedoch als zu aufwendig heraus, weshalb die Bestrebung unternommen wurde, die im FuE-Vorhaben VIRTUS entwickelte Software zu diesem Zweck einzusetzen. VIRTUS besitzt innovative Werkzeuge, mit denen geologische Modelle geometrisch optimiert werden können. Im Bearbeitungszeitraum wurden entsprechende Import- und Export-Schnittstellen programmiert.
- AP1.2: Ziel ist die Implementierung eines geeigneten Stoffmodells, mit denen Kriechprozesse realitätsnah abgebildet werden können. Es wurde versucht, mit bestehenden Werkzeugen ein in der Literatur beschriebenes Verformungsverhalten auf Korngrößenebene abzubilden. Das mit diesen Werkzeugen simulierte Verformungsverhalten wirft jedoch weitere Fragen auf, weshalb zeitnah ein Gespräch an einer universitären Forschungseinrichtung zur Entwicklung eines Stoffgesetzes geplant ist.
- AP1.3: Ziel ist die Anpassung der Polyederstruktur an natürliche Steinsalzgefüge. Die dazu benötigten Dünnschliffanalysen werden durch eine universitäre Forschungseinrichtung durchgeführt. Die Messungen dazu werden voraussichtlich im 3. Quartal 2013 starten.
- AP4: Ziel ist es, die aus VerAI injizierten Bohrerkerne aus einer Streckenkontur hinsichtlich des Rissystems und der Wasserglasinjektion zu untersuchen. Das Injektionsmittel ist mit einem fluoreszierenden Farbstoff (Uranin) vermischt und unter UV-Licht nachweisbar. An einer universitären Forschungseinrichtung konnte ein Fluoreszenz-Mikroskop genutzt und erste Analysen durchgeführt werden. Erste Ergebnisse lassen vermuten, dass das Uranin nicht vollständig in die Wasserglaspolymere eingebaut wird, sondern auch mit der sich bildenden wässrigen Lösung weiter in das Rissystem gepresst wird.
- AP5: Der experimentelle Teil des Versuchsprogramms zu ergänzenden Langzeituntersuchungen zur Si-Löslichkeit von Silikatgel in salinaren Lösungen ist abgeschlossen. Die Versuche werden derzeit ausgewertet. Die Sorptionsversuche von endlagerrelevanten Elementen an Silikatgel bzw. MOC-Phasen müssen wiederholt werden, da keine stabilen Randbedingungen bei der Durchführung der Experimente erreicht werden konnten.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.1: Intensive Prüfung ob die in VIRTUS implementierten Algorithmen hinsichtlich der beschriebenen Problemstellung (Optimierung Polyederstrukturen) genutzt werden können.
- AP1.2: Entwicklung und Implementierung eines Stoffmodells.
- AP1.3: Vergleich und Anpassung der Polyederstrukturen mit Hilfe der Ergebnisse aus den Dünnschliffuntersuchungen.
- AP2: Auswertung und Vergleich der Ergebnisse aus den akustischen Emissionsmessungen mit den simulierten numerischen Ergebnissen.
- AP3: Die Simulation eines Injektionsvorganges erfordert die Nutzung kontinuumsmechanischer Modelle. Ein entsprechender Workflow bzw. Modelle sollen dazu generiert werden.
- AP4: Weiterführende Untersuchungen mit Hilfe des Fluoreszenz-Mikroskops. Des Weiteren soll eine Vergleichsmessung an Dünnschliffen mit Hilfe der Mikrosonde durchgeführt werden.
- AP5: Wiederholung der Sorptionsversuche von endlagerrelevanten Elementen an Silikatgel bzw. MOC-Phasen. Das Experiment wird voraussichtlich Ende 2013 abgeschlossen sein.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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: Im Rahmen dieses Arbeitspaketes wurde eine Salzgruskörnung entwickelt, die über eine maximierte Einbaudichte sowie Raumausfüllung verfügt und somit als setzungsarm eingestuft werden kann. Als Bindemittelsuspension wurden magnesiumoxid- und calciumsulfatbasierende Stoffe genutzt. Die Bindemittelsuspensionen wurden hinsichtlich der Mischbarkeit mit Salzgrus beeinflussenden Eigenschaften untersucht. Es wurde eine Auswahl von 12 CaSO₄-Phasen bereitgestellt und durch das Unternehmen Knauf Gips KG mittels Röntgendiffraktometrie, Raman-Spektroskopie und Lasergranulometrie (Korngrößenverteilung) charakterisiert. Im Ergebnis daran wurden für weiterführende Untersuchungen ein alpha-Halbhydrat und ein beta-Halbhydrat bezüglich Reinheitsgrad und Reaktionsverhalten ausgewählt.
- AP2: Unter Verwendung der in AP1 ausgewählten Halbhydrate sowie Kaliumsulfat und Kieserit (alternativ entwässerter Epsomit) als Trockenmischung wurde die Polyhalitbildung unter verschiedenen Bedingungen, wie der Zusammensetzung der Anmischlösung, -lösungsmenge und Temperatur (25 °C, 40 °C) untersucht und auch prinzipiell nachgewiesen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Untersuchung weiterer Bindemittelsuspensionen hinsichtlich der Mischbarkeit und des Erstarrungsverhaltens über die Zeit. Feststellung der minimalen Bindemittelmenge zur Polyhalitbildung.
- AP2: Detaillierte Untersuchungen zur Kinetik der Phasenbildung (Polyhalitbildung über eventuelle Zwischenphasen in Abhängigkeit von der Reaktivität der Ausgangskomponenten der „Polyhalit-Trockenmischung“ im Zusammenhang mit der zeitabhängigen mechanischen Stabilisierung von Salzgrus.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.447.329,00 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.
- Teilnahme am internationalen Symposium „Gas generation & migration“ in Luxemburg und Vorstellung der Inhalte des IGSC Position Papers zum Thema Gase. Erstellung eines Beitrags für die Proceedings.

- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog und zum Salt Archive mit SANDIA.
- Teilnahme am 13. NAWG Workshop in Nagoya mit Beiträgen über den Natural Analogue Workshop in Braunschweig und aktuelle Ergebnisse zu Analoga für das deutsche Endlagerkonzept im Salz.
- Beginn der Arbeiten zur Bildung und Ausbreitung von C-14 in einem Endlager im Salz.
- Teilnahme an der 76. Sitzung des Arbeitskreises HAW-Produkte.
- Teilnahme am IAEA/ICTP Workshop in Trieste mit einem Vortrag über die Anwendung von Isotopen-Methoden zur Charakterisierung des Standorts Ruprechtov.
- Planung und Durchführung eines Treffens zur Initiierung eines EU-Vorhabens zum Thema „Uncertainties“ im Rahmen der IGD-TP.

TA2:

- Teilnahme am Meeting der EBS Task Force in London.
- Beginn eines isothermen Aufsättigungsversuchs mit eingeschränkter Wasserzufuhr.
- Teilnahme am Kick-Off Meeting der IGSC-Arbeitsgruppe zum Thema Sicherheit in der Betriebsphase.
- Beginn der Arbeiten zum Erfahrungsbericht über die Arbeiten am Standort Ruprechtov, Durchführung des Kick-Off Meetings in Prag.

4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung der IGSC.
- Erstellung der Proceedings für den Natural Analogue Workshop “Natural analogues for Safety Cases of repositories in rock salt”.
- Teilnahme am Safety Case Symposium mit einem Beitrag über Indikatoren.
- Weiterführung der Arbeiten zu einem gemeinsamen FEP-Katalog und zum Salt Archive mit SANDIA. Teilnahme am nächsten Treffen zum Salt Club und zur Deutsch-Amerikanischen Zusammenarbeit in Berlin.
- Teilnahme am Jahrestreffen zum EU-Vorhaben „First Nuclides“ in Antwerpen.
- Weiterführung der Arbeiten zur Quantifizierung der Einflüsse von Mikroben auf die relevanten Prozesse in einem Endlager im Tongestein.
- Mitarbeit und Koordinierung der TSWG zum Thema „Uncertainties“.

TA2:

- Beginn der Arbeiten zur Entwicklung methodischer Ansätze im Hinblick auf die Abwägung zwischen Sicherheit in der Betriebsphase und Langzeitsicherheit.
- Weiterführung der Aufsättigungsversuche.
- Weiterbearbeitung des Erfahrungsberichts über die Arbeiten am Standort Ruprechtov.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Noseck, U.; Capouet, M.; Sillen, X.; Rübél, A.: FORGE: General outcomes: A view from general rapporteurs. Contribution to the Proceedings of the International Symposium and Workshop on Gas Generation and Migration, 05.-07. February 2013, Luxembourg.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11112
Vorhabensbezeichnung: Auswirkungen der Sicherheitsanforderungen Rückholbarkeit auf existierende Einlagerungskonzepte und Anforderungen an neue Konzepte (ASTERIX)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 201.913,00 EUR	Projektleiter: Bollingerfehr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ist es, systematisch und wissenschaftlich fundiert die Umsetzung der Sicherheitsanforderung „Rückholbarkeit“ auf die Endlagerkonzeption zu untersuchen und die sicherheitstechnischen Konsequenzen herzuleiten und zu charakterisieren. Die Folgen für die Endlagerkonzeption und -auslegung sowie mögliches Konfliktpotenzial mit anderen Sicherheitsanforderungen soll identifiziert, explizit beschrieben und mögliche Widersprüche aufgezeigt werden. Zum anderen soll die Übertragung der Anforderungen der Rückholbarkeit auf die bereits existierende Einlagerungskonzepte für verschiedene Wirtsgesteine unter Berücksichtigung aktueller Forschungsergebnisse und Veröffentlichungen untersucht werden. Dabei kann auf erste Ergebnisse der Vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (VSG) für das Wirtsgestein Salz zurückgegriffen werden. Es sollen konzeptionelle Vorschläge für die Berücksichtigung der Rückholungsanforderung bei neuen Endlagerkonzepten erarbeitet sowie Anforderungen an Planung und Durchführung von entsprechenden Demonstrationsversuchen für Einlagerungstechniken hergeleitet werden. Die Möglichkeiten und technischen Grenzen der Rückholungsoption und der notwendige Entwicklungsaufwand sollen beschrieben werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konkretisierung der Sicherheitsanforderung „Rückholung“ und „Bergung“
- AP2: Wirtsgesteinsspezifische Umsetzung der Sicherheitsanforderung „Rückholung“
- AP3: Endlagerkonzeptspezifische Umsetzung:
 - 3.1 horizontale Streckenlagerung von POLLUX-Behältern
 - 3.2 vertikale Bohrlochlagerung von Kokillen
 - 3.3 horizontale Bohrlochlagerung von Transport- und Lagerbehältern
- AP4: Zusammenstellung weiterführender Planungs-, Entwicklungs- und Demonstrationsarbeiten
- AP5: Berichtswesen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Die Definitionen von Rückholung und Bergung in den Sicherheitsanforderungen des BMU wurden analysiert und verglichen mit international verwendeten und akzeptierten Definitionen (z. B. von OECD/NEA und IAEA). Darüber hinaus wurde eine rechtliche Einordnung der Sicherheitsanforderungen vorgenommen. Die Untersuchungen wurden abgeschlossen und dokumentiert.

AP2:

Die Betrachtungen zu wirtsgesteinsspezifischen Auswirkungen der Anforderung "Rückholbarkeit" wurden abgeschlossen. Die Umsetzung des Re-Mining-Konzeptes im Sinne der Sicherheitsanforderungen (BMU, 2010) ist im Salzgestein leicht an bestehende Endlagerkonzepte anzupassen. Die Gesteinseigenschaften begünstigen hier einen schnellen Einschluss der Abfälle. Durch die Eigenstabilität des Gebirges sind aufwendige Ausbausysteme nicht notwendig und eine Wiederauffahrung ist einfach umzusetzen. Für Tongestein sollte zunächst eine Überprüfung der Rückholungsstrategie durchgeführt werden. Eine Rückholung im Granitgestein ist auf Grund der günstigen gebirgsmechanischen Eigenschaften grundsätzlich möglich; nach dem heutigen Wissensstand sind in Betracht kommende Standortregionen in Deutschland nur schwer ausweisbar. Die Untersuchungsergebnisse wurden dokumentiert.

AP3:

Bekannte Endlagerkonzepte für die Wirtsgesteine Salz, Tonstein und Granit wurden untersucht hinsichtlich einer grundsätzlichen Umsetzung der Rückholungsanforderungen. Das Einlagerungskonzept der Streckenlagerung in Salz kann ohne wesentliche Veränderungen beibehalten werden; ähnlich verhält es sich auch bei der Einlagerung von TLB. Bei der Bohrlochlagerung wird die Rückholbarkeit durch eine Reihe von Anpassungen im Einlagerungskonzept erreicht. Für eine Umsetzung der Rückholungsanforderung im Tongestein ist zukünftig das Zusammenspiel von Ausbau und Wiederaufwältigung der Strecken näher zu untersuchen. Die Untersuchungsergebnisse wurden dokumentiert.

AP4:

Mit der Herleitung und Zusammenstellung von notwendigen FuE-Arbeiten sowie Demonstrationsversuchen wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP4: Abschließende Zusammenstellung von abgeleiteten FuE-Themen sowie notwendigen Demonstrationsversuchen

AP5: Fertigstellung des Abschlussberichtes

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 11122	
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA			
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 31.08.2016		Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 Korrosion durch die geringpermeable störungsfreie Sorelbeton-Matrix ebenso beschreiben, wie die Korrosion auf Kontaktfugen an der Kontaktfläche Dichtbauwerk-Salzgebirge.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Laborversuche

AP2: Modelltheoretische Arbeiten

AP3: Simulationsrechnungen

AP4: Dokumentation der Ergebnisse und Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zu AP1.1 Herstellung des Sorelbetons und der Salzlösungen:

Die Arbeiten konzentrierten sich auf die Herstellung von Proben mit Schnittflächen sowie von Proben mit künstlich provozierten Längsrissen mit vorgegebenen unterschiedlichen Permeabilitäten. Die erforderlichen Techniken wurden entwickelt und zur Anwendungsreife gebracht. Die Arbeiten waren wesentlich Zeit- und Geräte-intensiver als ursprünglich gedacht, aber erfolgreich.

Zu AP1.2 Ermittlung von Materialkenngrößen des unkorrodierten Sorelbetons:

Die Lösungspermeabilität der ungestörten Matrixproben wurde mit NaCl- und IP21-Lösung gemessen. Einheitliche Werte um $5 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ wurden, unabhängig von der Lösungszusammensetzung, ermittelt. Mit der Permeabilitätsmessung wurde auch die Entwicklung einer Prozedur vorangetrieben, die die Messung des lösungszugänglichen Lösungsvolumens erlaubt. Erste Ergebnisse werden in Kürze erwartet. Um die Ergebnisse abzusichern, wurde mit der Technischen Universität Hamburg Harburg (TH HH, Prof. Schmidt-Döhl) und mit dem Helmholtzzentrum Dresden-Rossendorf (HZDR, Dr. Lippmann-Piepke), Forschungsstelle Leipzig, Interdisziplinäre Isotopenforschung Kontakt aufgenommen und eine Kooperation vereinbart. An den gleichen Proben wird von GRS, der TH HH und dem HZDR, mit den je-

weils eigenen Methoden, die Matrixporosität bestimmt. GRS misst die Gesamtporosität über das Lösungsvolumen, das nach der Permeabilitätsmessung im Probekörper verbleibt. Die TH HH wendet dafür die Hg-Porosimetrie an, während das HZDR die Positronen-Emissions-Tomographie (PET) anwendet. Die Ergebnisse der unabhängigen Bestimmungsmethoden sollen miteinander verglichen und mit der Lösungsporeabilität korreliert werden.

Zu AP1.3 Kaskadenversuche, Versuche zur Ermittlung des Reaktionspfades der Korrosion mit NaCl-, IP9 und IP21-Lösungen:

Die Kaskadenversuche mit NaCl- und IP-21-Lösung wurden begonnen. In Vorversuchen wurden das geeignete Feststoff-Lösungsverhältnis und die Dauer einer Kaskade bestimmt.

Auf Versuche mit IP9-Lösung soll im weiteren Vorhaben verzichtet, da sich herausgestellt hat, dass der Mg-Gehalt dieser Lösung ausreichend hoch ist (1 Mol/kg H₂O), um einen Angriff auf die 3-1-8-Phase des Sorelbetons und damit eine Korrosion ausschließen zu können. Die bisherigen Versuche haben gezeigt, dass die Auswirkungen, der nichtkorrosiven, extrem Mg-reichen IP21- und der IP9-Lösung, mit geringerem, aber ausreichendem Mg-Gehalt, sich nicht messbar unterscheiden. Dieser Befund deckt sich mit dem, von der BA TU Freiberg in zwischen festgelegten Stabilitätskriterium von Sorelbeton. Danach soll die 3-1-8 Phase von Salzlösungen mit mehr als 0,5 Mol Mg/Kg H₂O nicht angegriffen werden. Die Ressourcen im vorliegenden Vorhaben sollten darauf konzentriert werden, die Aussagen zur Korrosion mit der sehr aggressiven NaCl- und der nicht angreifenden IP21-Lösung abzusichern. Für dieses Vorgehen wir hiermit das Einverständnis des Projektträgers erbeten.

Zu AP1.4 Vorbereitung der Versuchsreihen:

Die Beschaffungen der Druckgefäße für die Korrosionsversuche sowie der Verschraubungen für den Bau der zahlreichen Versuchsstände wurde vorgenommen. Es wurde auch eine neuartige Ti-Druckzelle entwickelt und in Auftrag gegeben, mit der es möglich ist, Korrosionsversuche auch im HZDR durchführen und mit der PET-Methode messen zu lassen. Es ist vorgesehen dort einen Versuchsstand aufzubauen und den Korrosionsfortschritt diskontinuierlich durch PET-Messungen zu verfolgen.

AP1.5 Durchführung der Versuchsreihen:

Die Versuche zur Matrixkorrosion wurden begonnen. Die weiteren Versuchsreihen werden in Kürze aufgenommen.

Die Arbeit in den weiteren Arbeitspaketen kann erst in Angriff genommen werden, wenn AP1.5 angelaufen ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Aufnahme der Arbeiten in AP1.5.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Das Konzept der Arbeiten wurde auf zwei Workshops des BfS vorgestellt. Ein Abstract mit den Ergebnissen bisheriger GRS-Arbeiten auf dem Gebiet der Matrixkorrosion von Sorelbeton und Salzbeton und die geplanten Arbeiten zur Erstellung eines Rechenmodells zur Prognose der Korrosion auf Klüften wurde vorbereitet und soll auf der WM-Tagung 2014 in Phoenix/Arizona vorgestellt werden.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013
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

Am 11.02.2013 konnte bei einer Befahrung des Kernlagers ERA Morsleben unter der Leitung der DBE Technology geeignetes Kernmaterial für experimentelle Untersuchungen aus dem Asse Vordamm (Salzbetonkerne sowie Kernmaterial aus der Kontaktzone zwischen Salzbeton und Auflockerungszone) identifiziert werden. Nach erfolgter Freigabe durch das BfS wurde der GRS am 23.04.2013 ausgewähltes Kernmaterial zur Verfügung gestellt. Im Nachgang erfolgte im geotechnischen Labor der GRS die Prüfkörperpräparation.

Parallel wurde die verfügbare Literatur zu abgeschlossenen Untersuchungen im Rahmen der Erstellung und Begleitung des Asse-Vordamms gesichtet und mit einer detaillierten Versuchsplanung begonnen.

Auf Einladung des BfS haben im 1.Hj. 2013 zwei Fachgespräche zu Streckenabdichtungen im Steinsalz im Rahmen der Stilllegung ERAM stattgefunden, bei denen die GRS aktiv teilgenommen hat.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung erster orientierender laborativer Untersuchungen
- Durchführung erster orientierender modelltheoretischer Untersuchungen
- Dokumentation

5. Berichte, Veröffentlichungen

Czaikowski, O.; Rothfuchs, T.: Deutsche Beiträge zum EU-Projekt DOPAS und ihre Verknüpfung mit dem Projekt ELSA. Ausgewählte Aspekte. Stilllegung ERAM – Streckenabdichtungen im Steinsalz aus Salzbeton. 1. Fachsitzung, 26.03.2013, Morsleben.

Czaikowski, O.; Experimentelle Untersuchungen an Salzbeton im Rahmen des DOPAS Projektes. Stilllegung ERAM – Streckenabdichtungen im Steinsalz aus Salzbeton. 2. Fachsitzung, 28.05.2013, Morsleben.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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: Teilnahme am DOPAS Arbeitstreffen zum Thema der Endlager- und Verschlusskonzepte sowie der regulatorischen Situation in den verschiedenen Partnerländern am 11. und 12. Februar in Stockholm. Diskussion der Beiträge zum ersten Teil des Fragebogens zum Thema „Design Bases, Reference Designs and Performance Demonstration of Plugs and Seals“, der von der GRS gemeinsam mit DBETec auf Grundlage der im Projekt VSG erarbeiteten Referenzdesigns beantwortet wurde.
Beantwortung des zweiten Teils des genannten DOPAS Fragebogens gemeinsam mit DBETec.
- AP2: Beginn der Zusammenstellung und Überprüfung der verschiedenen bestehenden konzeptuellen Modelle zur Berücksichtigung der EDZ und der Betonkorrosion.
- AP4: Teilnahme am DOPAS Management-Team Meeting am 18. und 19. Juni in Prag.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weitere Bearbeitung des unter „Durchgeführte Arbeiten“ genannten Fragebogens und Teilnahme am Workshop zur Design-Basis in Stockholm. Zwei weitere Teile des Fragebogens folgen im Laufe des Projektes.
- AP2: Fortführung der Zusammenstellung und anschließende Beschreibung der verschiedenen bestehenden konzeptuellen Modelle, zur Berücksichtigung der EDZ und der Betonkorrosion.
Beginn der Formulierung eines erweiterten mathematischen Modells zur Berücksichtigung der EDZ und der Betonkorrosion.
- AP3: Durchführung eines ersten Arbeitstreffens der internationalen Partner im Projekt DOPAS zum Thema Prozessmodellierung und integrierte Modellierung am 11. September in Berlin.
Erstellung eines Strukturmodells zur Durchführung zukünftiger integrierter Rechnungen auf Basis des Endlager- und Verschlusskonzeptes der VSG.

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: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
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 Anforderungen und Erfordernisse sind für Salz, Ton und Kristallin als Wirtsgestein unterschiedlich. Besondere nationale Bedingungen sind z. B. in solchen Fällen zu berücksichtigen, in denen die nationalen Vorschriften besondere Designanforderungen zur Folge haben. Die Planungsgrundlagen sollen dokumentiert und die Unterschiede analysiert werden. Der in diesem Zusammenhang seitens des Projektpartners GSL entwickelte Fragebogen wurde in erweiterter Form erneut an die Projektpartner versandt. In Zusammenarbeit mit der GRS wurden die erweiterten Fragen bearbeitet und zur weiteren Auswertung versendet. Der Inhalt der Fragen bezog sich auf das Referenzdesign eines Verschlusses und wie es entwickelt bzw. ausgewählt wurde, auf die Methode zur Implementierung und auf die bisherigen Erfahrungen, die diesbezüglich bestehen sowie auf die wesentlichen Unsicherheiten, die in diesem Zusammenhang zu berücksichtigen sind.

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 Korngrößen- bzw. Partikelverteilungen generiert und ein Verdichtungsprozess simuliert werden kann. Die Verdichtbarkeit von Schüttungen ist stark abhängig von der Korngröße bzw. der Korngrößenverteilung des Materials. Mit Hilfe der Diskreten Elemente Methode wurde ein Verdichtungsprozesses simuliert wobei unterschiedliche Korngrößen- bzw. Partikelverteilungen generiert wurden. Es wurde damit begonnen, zu ermitteln, bei welcher Verteilung eine bestmögliche Verdichtbarkeit von Salzgrus erreicht werden kann. Allererste Ergebnisse deuten an, dass sich ein Korngrößenspektrum mit einem Partikelverhältnis zwischen 20 und 10 am besten verdichten lässt.

Parallel dazu wurde begonnen, Partikel mit unterschiedlichen Kornformen zu generieren, um den Einfluss der Kornform auf die Verdichtbarkeit zu untersuchen. Zu diesem Zweck wurden ellipsoide Partikel mit unterschiedlichen Achsenverhältnissen generiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung der Analysen zum Einfluss des Korngrößenverhältnisses auf die Verdichtbarkeit des Materials.

Beginn der Analysen zum Einfluss der Kornform auf die Verdichtbarkeit des Materials.

Entwicklung eines Modells zu impulsartigen Verdichtung von Partikeln mit in der Praxis verwendeten Impulskräften.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 11162
Vorhabensbezeichnung: Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 15.10.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 30.838,00 EUR	Projektleiter: Bollingerfehr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In der Studie, die aus zwei Teile bestehen soll, werden im ersten Teil die wissenschaftlichen und technologischen Aspekte der Technologieoption Partitionierung und Transmutation (P&T), die einen Beitrag zum nuklearen Abfallmanagement leisten könnte, dargestellt. Parallel dazu, werden in einem zweiten Teil die sozialwissenschaftlichen, ökologischen und ökonomischen Gesichtspunkte analysiert und schließlich beide Teile zusammengeführt. Ziel der Arbeit ist es, erstens den Stand von Wissenschaft und Technik, zweitens das Potential sowie die Chancen und Risiken dieser Technologien detailliert herauszuarbeiten. Hierfür werden mehrere Szenarien entwickelt und miteinander verglichen. Ein wesentlicher Aspekt ist es, zu analysieren welche Relevanz und welche Auswirkungen P&T auf die Entsorgung und Endlagerung von ausgedienten Brennelementen haben kann, hier insbesondere gezielt auf deutsche Verhältnisse. Die Arbeiten werden in zwei Modulen durchgeführt. Das Modul A befasst sich mit den wissenschaftlichen und technologischen Aspekten im Zusammenhang mit P&T (von den Grundlagen bis hin zu der anwendungsorientierten Forschung und Entwicklung). DBE TECHNOLOGY GmbH soll dazu Beiträge zum Stand von Wissenschaft und Technik der Endlagerung für die Arbeiten zum Modul A liefern.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Ausgangspunkt und Randbedingungen
- AP2: Festlegung und Ausarbeitung der Szenarien
- AP3: Anforderungen und Herausforderungen für Partitionierung und Transmutation
- AP4: Stand der Grundlagen- und technologischen Forschung
- AP5: Sicherheitsaspekte
- AP6: Internationale Projekte
- AP7: Kompetenzen in Deutschland

DBE TECHNOLOGY GmbH liefert im Modul A Beiträge zum AP1, AP2 und AP5

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Der aktuelle Stand der Endlagerkonzeption/ -planung für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in Deutschland wurde zusammengefasst und beschrieben. Es gibt einen weit fortgeschrittenen Stand im Bereich der Auslegung von Endlagerbergwerken in Salz und der Planung und Erprobung von dafür vorgesehenen Maschinen und technischen Komponenten; u. a. dokumentiert in Berichten zur „Vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“ (VSG) und zu den Demonstrationsversuchen im Rahmen des FuE-Programms „Direkte Endlagerung ausgedienter Brennelemente“. Für ein HAW- Endlager in Tonstein kann z. B. auf konzeptionelle Arbeiten im Rahmen des Vorhabens ERATO verwiesen werden.

AP2:

Bei der Szenariendefinition inklusive Referenzszenario:

- P&T in Deutschland als Element einer Endlagerstrategie
- P&T wird gemeinschaftlich in Europa betrieben (regionaler Ansatz)
- P&T als nationale Forschung, Beteiligung an internationaler F+E
- P&T wird in Deutschland nicht weiter verfolgt

wurden begründete Beiträge hinsichtlich der eingeschränkten Relevanz von P&T für die Endlagerung in Deutschland geliefert und im Abschlussworkshop in Berlin am 17.05.2013 diskutiert.

AP5:

Bei der Untersuchung zu den Auswirkungen von P&T auf Konzepte für Endlager konnte u. a. festgestellt werden, dass ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle auch bei Einführung von P&T erforderlich ist für bereits heute existierende Wiederaufarbeitungsabfälle und abgebrannte Brennelemente aus Versuchs- und Prototyp-kraftwerken sowie Forschungsreaktoren. Außerdem müssen die wärmeentwickelnden Abfälle aus den für P&T erforderlichen Wiederaufarbeitungsanlagen sowie zusätzliche Hülsen und Strukturteile aus der Zerlegung der Brennelemente und aus der letzten Beladung des Transmuters endgelagert werden. Für die durch P&T anfallenden sogenannten Sekundärabfälle (radioaktiven Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung) wird ein zusätzliches Endlager erforderlich; ebenso für das abgetrennte Uran aus den Brennstäben, wenn es nicht industriell verwertet werden kann. Durch P&T nimmt der Footprint eines Endlagers mit wärmeentwickelnden Abfällen ab; etwa die Hälfte (bei Streckenlagerung) oder zwei Drittel (bei Bohrlochlagerung) der bisher z. B. in VSG ausgewiesenen Gesamtendlagerfläche bleibt von P&T gänzlich unberührt. Durch P&T werden nach GRS-Recherchen hauptsächlich Radionuklide transmutiert, die sich in bisherigen Transportrechnungen als für die Langzeitsicherheit von Endlagern in Deutschland weniger relevant gezeigt haben.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der Arbeiten, insbesondere in Form von Mitarbeit bei der Endredaktion des Projektberichtes und einer Kurzfassung durch acatech.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 11172
Vorhabensbezeichnung: Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung	
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2012 bis 15.10.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013
Gesamtkosten des Vorhabens: 40.072,00 EUR	Projektleiter: Dr. Mönig

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben sollen der Stand von Wissenschaft und Technik und das Potential sowie die Chancen und Risiken von P&T detailliert herausgearbeitet werden. Hierfür werden Szenarien entwickelt und miteinander verglichen. Ein wesentlicher Aspekt ist dabei die Analyse, welche Relevanz und welche Auswirkungen P&T auf die Entsorgung und Endlagerung von radioaktiven Abfällen haben kann, insbesondere bezüglich der deutschen Verhältnisse. Ferner soll betrachtet werden, welche Beiträge Deutschland in einem europäisch angelegten P&T-Forschungskonzept leisten könnte. In diesem Zusammenhang werden auch die Aspekte der Förderung und Erhaltung der Kompetenzen in der deutschen Nuklearforschung sowie der Transfer von P&T-Technologien in nicht-nukleare Anwendungsbereiche evaluiert und dargestellt. Die Machbarkeit großtechnischer Partitionierungs- und Transmutationsanlagen unter Berücksichtigung verschiedener Teilaspekte (Abtrennungungsverfahren, Brennstoffentwicklung, Beschleunigerkonzepte, usw.) soll beurteilt werden. Ferner ist die Bewertung dieser Technologie in Hinblick auf verschiedene Entsorgungsstrategien (mit Berücksichtigung von Aspekten wie mehrfache Wiederaufarbeitung der ausgedienten Brennelemente, entsprechende Transporte, erhöhtes Aufkommen von zusätzlichen Abfallformen, notwendige Zwischenlagerung und Endlagerung, etc.) Bestandteil dieses Vorhabens. Das Vorhaben wird von acht Institutionen in zwei fachlich unterschiedlich orientierten Modulen durchgeführt. Die GRS Braunschweig ist in die Arbeiten im Modul A und darin in die Bewertung von P&T bezüglich der Auswirkungen auf die langzeitsichere Endlagerung der radioaktiven Abfälle eingebunden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Ausgangspunkt und Randbedingungen
 AP2: Festlegung und Ausarbeitung der Szenarien
 AP3: Anforderungen und Herausforderungen für Partitionierung und Transmutation
 AP4: Stand der Grundlagen- und technologischen Forschung
 AP5: Sicherheitsaspekte
 AP6: Internationale Projekte
 AP7: Kompetenzen in Deutschland
 GRS Braunschweig ist bei den Arbeitspaketen 1, 2 und 5 beteiligt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die AP1-Beiträge der GRS zum Abschlussbericht wurden erstellt und mit den Projektpartnern abgestimmt. Dabei wurde der Ausgangszustand bezüglich der Endlagerung vor einer eventuellen Anwendung der PuT-Verfahren zusammengestellt. Am 05.04.2013 fand ein Arbeitstreffen (Modul-A-intern) in München statt, auf dem die Beiträge zu AP1 besprochen wurden. Am 17.05.2013 wurde der Stand des Projekts in Berlin gemeinsam mit Modul-A- und Modul-B-Teilnehmern diskutiert. Bis zum 25. Juni 2013 wurden die GRS-Beiträge revidiert und an den verantwortlichen AP-Leiter zur Aufnahme in den Gesamtbericht gesandt.
- AP2: Die zu betrachtenden Szenarien wurden von den Projektpartnern in Berichtsform zusammengestellt. Am 15.03.2013 fand in Stuttgart ein Workshop statt, bei dem mit Hilfe der Dephi-Methode die Bewertungen der Teilnehmer bezüglich der Relevanz der Deskriptoren vereinheitlicht wurden. Während der Sitzung des Gesamtprojekts am 17.05.2013 in Berlin wurden die Szenarien abschließend behandelt.
- AP5: Die AP5-Beiträge der GRS zum Abschlussbericht wurden erstellt und mit den Projektpartnern abgestimmt. Dabei wurden die zu erwartenden Änderungen der Anfangsinventare in einem Endlager nach einer eventuellen Anwendung der PuT-Verfahren zusammengestellt. Am 05.04.2013 fand ein Arbeitstreffen (Modul-A-intern) in München statt, auf dem die Beiträge zu AP5 besprochen wurden. Am 17.05.2013 wurde der Stand des Projekts in Berlin gemeinsam mit Modul-A- und Modul-B-Teilnehmern diskutiert. Bis zum 28. Juni 2013 wurden die GRS-Beiträge revidiert und an den verantwortlichen AP-Leiter zur Aufnahme in den Gesamtbericht gesandt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten der GRS Braunschweig für den Abschlussbericht sind beendet. Lediglich noch eine Durchsicht des Berichts vor Drucklegung ist geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

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: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 31.01.2016	Berichtszeitraum: 01.11.2012 bis 30.06.2013	
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 Radionuklidenausbreitung

AP6: Berichtswesen

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

AP5.1: Indikative Berechnungen mit generischen Modellen

AP5.2: Berechnungen mit präzisierten Modellen

AP5.3: Variationsrechnungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wurden im Berichtszeitraum organisatorische Arbeiten zur Projektplanung durchgeführt. Da die von russischer Seite vorgesehenen Arbeiten bzgl. eines Endlagers im Leningrader Gebiet zunächst zurückgestellt wurden, wurden auch die wissenschaftlichen Arbeiten der GRS noch nicht aufgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Es ist geplant die Arbeiten mit den Randbedingungen zum Sicherheitskonzept und der 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: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2012 bis 31.01.2016		Berichtszeitraum: 01.11.2012 bis 30.06.2013	
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

Da auf russischer Seite die Projektarbeiten noch nicht aufgenommen werden konnten, wurden die Projektarbeiten auf deutscher Seite zunächst auf Planungsarbeiten beschränkt.

Wesentlich für einen Sicherheitsnachweis ist insbesondere auch ein umfassender lokations-spezifischer FEP-Katalog, in dem alle für einen Nachweis relevanten Prozesse beschrieben sind. Es wurde daher diskutiert, inwieweit die Strukturierung der tonformations-spezifischen FEP-Kataloge, die im derzeit laufenden FuE-Vorhaben AnSichT für zwei Referenzregionen (Norddeutschland und Süddeutschland) erarbeitet werden, auch für den russischen Standort angewendet werden können, um die Prozesse zu selektieren, die für eine Endlagerung in diagenetisch überprägten Tonsteinformationen relevant sind. Diese Vorgehensweise würde es ermöglichen, die Übertragbarkeit der im Vorhaben AnSichT erarbeiteten FEP-Kataloge hinsichtlich der Erfassung aller relevanten Merkmale und Prozesse zu prüfen.

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: 01.05.2013 bis 30.06.2013	
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 Asphaltabdichtungen, 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: Relevanz der Anforderungen an einen zukünftigen Schachtverschluss für HAW-Endlager hinsichtlich der technischen Umsetzung.
- AP2: Planung von Technikumsversuchen zur Verdichtung von Salzgrus mit dem Verfahren der Impulsverdichtung der Firma TerraMix. Vorgespräche mit GSES und TS Bau zu einem Versuchsstandort im Steinsalz.
- AP3: Auswahl eines technisch reproduzierbaren Salzgrusgemisches im Korngrößen-bereich bis 10 mm. Vorversuche mit einem Gemisch aus Salzgrus und Friedländer Ton (vorzugsweise 15 % Zugabe): Bei einer Befeuchtung mit 4 % Wasser können bei spezifischen Verdichtungsenergien von ca. 6 bis 13 MJ/m³ Trockendichten von 1,97 g/cm³ bis 2,01 g/cm³ erreicht werden.
- Allg: Abschluss der Kooperationsvereinbarung mit dem Projektpartner DBE Technology GmbH. Vorbereitung der Verträge mit den Unterauftragnehmern.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Übertragbarkeit der Randbedingungen für Konzeptentwicklung und Versuchsorte. Berücksichtigung der Ergebnisse des Vorhabens AnSichT (02E11061A) als Referenz für die Standortoption "Ton".
Auswahl der Referenzgeologie für einen Standort "Steinsalz – Flache Lagerung".
- AP2: Abschluss der Vereinbarungen mit dem Bergwerk Sondershausen (GSES).
Suche eines geeigneten Versuchsstandortes in einem Tiefbaubetrieb im Tongestein.
- AP3: Bestimmung der erreichbaren Einbautrockendichte des Salzgrus-Ton-Gemisches in Abhängigkeit von der spezifischen Verdichtungsenergie, vom Tongehalt und vom Einbauwassergehalt. Vergleich der Untersuchungsergebnisse mit den Ergebnissen aus dem Vorhaben REPOPERM.
- AP4: Beginn der halbtechnischen In-situ-Versuche.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Gruner, M.; Einicke, O.: Zukünftige Herausforderungen bei der Errichtung von Schachtverschlüssen für Endlager. Vortrag zum 12. BergbauForum der DMT. 20. Juni 2013, Leipzig.

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: 01.05.2013 bis 30.06.2013	
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 Verschlusssystem 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 Bitumendichteelemente 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 zu den Arbeitsschritten 2.1 bis 2.6
- AP4: Halbtechnische Versuche zu den Arbeitsschritten 2.1 bis 2.6
- AP5: Modellierung
- AP6: Berichterstattung

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Mit dem Verbundpartner TU Bergakademie Freiberg wurde eine Kooperationsvereinbarung vorbereitet und abschließend unterzeichnet. Zum Start des Vorhabens fand am 04.06.2013 ein Kick-off Meeting aller Projektbeteiligten an der TU Bergakademie Freiberg statt. Auf diesem Treffen wurden die geplanten Arbeiten der Projektbeteiligten von den jeweiligen Institutionen erläutert und diskutiert. Es wurden folgende terminliche Festlegungen getroffen:

Alle Unterauftragnehmer wurden gebeten, ihr jeweiliges Arbeitsprogramm zeitlich detailliert zu planen und diesen Zeitplan der Projektleitung bis zum 05.07.2013 zur Koordination zu übermitteln.

In Sondershausen wurde für den 28.06.2013 ein Treffen vereinbart, auf dem die Modalitäten der dort geplanten In-situ-Versuche abgestimmt werden.

Im Rahmen der Diskussion wurde festgestellt, dass das ELSA-Vorhaben Anknüpfungspunkte an das derzeit laufende FuE-Vorhaben AnSichT (Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein - 02E11061A) besitzt. In diesem Vorhaben werden Referenzregionen für ein Endlager im Tonstein in Deutschland untersucht. Das Vorhaben ELSA-II könnte auf die dort entwickelten geologischen Modelle aufbauen und die geplanten Konzeptionen für Schachtverschlüsse daran orientieren. In diesem Zusammenhang wurde für den 10.07.2013 ein Treffen bei der TU Bergakademie Freiberg anberaumt, auf dem seitens DBETEC das AnSichT-Vorhaben mit dem derzeitigen Bearbeitungsstand vorgestellt und die Anknüpfungspunkte diskutiert werden sollen.

Für Schachtverschlüsse im Steinsalz ist geplant, neben der steilen Lagerung in einem Salzstock auch die „flache Lagerung“ in Betracht zu ziehen.

Für den weiteren Projektverlauf wurde beschlossen, möglichst im zweimonatigen Rhythmus Projekttreffen abzuhalten. Die ersten Termine wurden für den 11.10.2013 bei der DBETEC in Peine und für den 11.12.2013 bei der TUBAF in Freiberg anberaumt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Übernahme von Schachtprofilen aus den geologischen Modellen, die im Rahmen des Vorhabens AnSichT erstellt werden als Grundlage zur Konzeption von Referenz-Schachtverschlüssen im Tonstein in Deutschland.

Planung und Vorbereitung der ersten Labor- und Technikumsversuche.

Abstimmung zu den geplanten Modellierungsarbeiten.

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: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung			
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016		Berichtszeitraum: 01.03.2013 bis 30.06.2013	
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: Analyse der Vorhersagerechnungen zum Dipolexperiment 12-02 nach Erhalt der Datensätze für Kolloide und Radionuklide; Diskussion der wesentlichen Effekte und weiterführende Auswertung u. a. durch Simulationsrechnungen mit modifizierten Parametern.

Vergleich der Ergebnisse mit früheren Homolog-Experimenten. Alle Experimente lassen sich mit einem Parametersatz für die hydraulischen Bedingungen und für die Filtration der Kolloide beschreiben. Für die Desorptionsraten der Radionuklide von den Kolloiden ergibt sich eine Abnahme mit zunehmender Transportzeit.

Beginn der Erstellung eines neuen geometrischen Modells zur Simulation des zweiten Radionuklidfeldexperiments, das am 10. Juli gestartet wird.

AP3: Weiterbearbeitung des gemeinsamen Berichts zu den Grundlagen der Modelle, Ergebnissen und Interpretation der Simulationsrechnungen sowie Integration der Ergebnisse der Modellierer aus Schweden, USA und Deutschland, der hydraulischen Untersuchungen und der Labor-Untersuchungen.

Organisation und Durchführung eines CFM Modeller-Meetings bei der GRS in Berlin. Diskussion der bisherigen Ergebnisse und Abstimmung der weiteren Arbeiten.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Durchführung von Simulationsrechnungen zur Vorhersage des zweiten Radionuklidfeldexperiment 13-05 auf Basis der Informationen zum Verhalten eines idealen Tracers und der bisherigen Ergebnisse zu den Wechselwirkungen zwischen Radionukliden, Kolloiden und Kluffüllmaterial.

Durchführung von langzeitsicherheitsanalytischen Rechnungen für ein Endlager in Granit (für ausgewählte Szenarien des neuen Safety Case von POSIVA) mit dem neu entwickelten Rechenprogramm GEOTREND-FC, das den eindimensionalen, kolloidgetragenen Schadstofftransport durch offene Klüfte mit Matrixdiffusion der Schadstoffe berücksichtigt.

AP3: Fertigstellung des gemeinsamen Berichts zu den Grundlagen der Modelle und Simulationsergebnissen der Modellierer-Gruppen aus Schweden, USA und Deutschland.

Erstellung eines Papers zur Veröffentlichung der Simulationsergebnisse zu den Homolog- und Radionuklidexperimenten 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: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 29.02.2016	Berichtszeitraum: 01.03.2013 bis 30.06.2013	
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 Klufftgeometrie/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: Status: Ein neues Laborprogramm in Abstimmung mit GRS wird momentan gestartet. Es wurde ein geeigneter Postdoc Kandidat (Dr. Frank Friedrich, KIT) für die Arbeiten zur Bentonit-Erosion ausgewählt und eingestellt. Herr Dr. Darbha führt die in KOLLORADO-2 begonnen Arbeiten zum Einfluss der Oberflächenrauigkeit und der -ladung innerhalb von KOLLORADO-e weiter. Für die Doktorandenstelle zu Sorptionsreversibilitätsuntersuchungen konnte mit Herrn Franz Rinderknecht ein geeigneter Kandidat gefunden werden, der zum Sept./Okt. 2013 die Doktorandenstelle antritt.

API.1: Status: Die Arbeiten zum Einfluss von Oberflächenrauigkeit und Ladungs-Heterogenitäten auf die Kolloidmobilität wurden weitergeführt. Spezieller Fokus der Arbeiten von Herrn Dr. Darbha lag im 1. Halbjahr auf der Messung von AFM Kraft-Abstandskurven mittels der Kolloid-Probe Technik (Wechselwirkung mit Al_2O_3 Kolloiden), wobei die pH- abhängige Adhäsionskraft an verschiedenen Mineralphasen (u. a. Biotit, Feldspat, Quarz) gemessen und die Auswirkungen von Rauigkeiten des Kollektors und Kolloids auf die Wechselwirkung quantifiziert wurde. Die Ergebnisse werden momentan in einem Manuskript zusammengefasst, ein weiteres Manuskript zur Stabilität von Mineralphasen wurde eingereicht.

API.2: Status: Schwerpunkt der Arbeiten des 1. Halbjahres 2013 lag (a) in der Planung des zweiten Radionuklidmigrationsexperimentes im Grimsel- Felslabor (Run 13-05) und (b) Laborstudien zur Machbarkeit der Radionuklidmarkierung für die Platzierung des kompaktierten Bentonits im „long term in situ Test“. Die RN - Sorptionsexperimente zu synthetischem strukturell markiertem Montmorillonit (Zn, Ni) in Kollaboration mit Univ. Nancy und Univ. Mulhouse sind abgeschlossen. Ein Manuskript wird momentan unter den Autoren diskutiert und im 2. Halbjahr 2013 eingereicht.

- (a) Die Evaluation des Radionuklidexperimentes Run 12-02 ist abgeschlossen, die Daten zusammengefasst und eine Publikation in Präparation (Einreichung Ende 2013). Auf Grund der Wiedererhalte der eingesetzten Tracer ^{22}Na , ^{133}Ba , ^{137}Cs , ^{232}Th , ^{237}Np , ^{242}Pu und ^{243}Am wurde für das 2. Radionuklid-Migrationsexperiment entschieden, die ^{133}Ba und ^{243}Am Konzentration zu erhöhen und als zweites redox-sensitives Radionuklid neben $^{237}\text{Np(V)}$ $^{233}\text{U(VI)}$ einzusetzen. Das CFM- Konsortium entschied sich für das 2. RN-Experiment den CRR-Dipol unter einer um den Faktor 30 niedriger Fließgeschwindigkeit zu verwenden, um die Daten dieses Experiments direkt mit Geckeis et al. (2004) RCA 92, 765. vergleichen zu können. Die Kolloidmessungen werden „on-site“ in der Kontrollzone der GTS sowohl mit dem optischen LIBD Verfahren als auch mit der s-Kurven LIBD zur direkten Messung der Kolloidgrößenverteilung über einen Zeitraum von mindestens drei Wochen durchgeführt.
- (b) Die Arbeiten zum Einbringen einer Radionuklid-gespikten Bentonitpaste in einen kompaktierten Bentonitring mittels Glasampullen mit Sollbruchstellen wurden weiterverfolgt. Momentane Tests zeigen, dass der Bentonit- Quelldruck ausreicht um diese Ampullen frühzeitig zu zerstören und die RN bzw. deren Homologe freizusetzen, Optimierung des Design beziehen sich im Wesentlichen auf die direkte Messung des Quelldrucks in der Versuchsanordnung. Die momentan gewählte zylindrische Geometrie mit definierter Kluft- Apertur und direkter Messung der fluidgeschwindigkeitsabhängigen Kolloidfreisetzung mittels LIBD erlaubt einen direkten Vergleich mit dem CFM Langzeit- In-situ-Experiment (geplanter Start Nov. 2013) und Modellabschätzungen der Erosionsraten von SKB (Report TR-10-64).

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1 + 2: Die geplanten Arbeiten sind im KOLLORADO-e Antrag ausführlich dargelegt und das neue Laborprogramm wird momentan mit GRS abgestimmt.

AP3: Der Abschlussbericht zu KOLLORADO-2 wird als KIT Scientific Report # 7645 im 2. Halbjahr 2013 veröffentlicht 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 (2013, submitted) Appl. Geochem., “Variability of crystal surface reactivity: what do we know?”

Huber, Truche, Heck, Hoess, Bouby, Brendlé, Schäfer (2013, to be submitted), Appl. Clay Sci., “Zn-/Ni-Montmorillonite Sorption Reversibility”

Schäfer, Lagos, Hauser, Heck, Huber, Geckeis, Degueldre, Kontar, Blechschmidt (2013, to be submitted) ES&T, „Pu, Np, Am transport under near-natural flow conditions at the Grimsel Test Site (Switzerland)”

Peer-reviewed publiziert: (Postdoc G. Darbha, PhD/ Postdoc F. Huber)

Darbha, Fischer, Lützenkirchen, Schäfer (2012) ES&T. 46, 9378-9387.

Fischer, Michler, Darbha, Kanbach, Schäfer (2012) Am. J. Sci., 312, 885-906.

Huber, Enzmann, Wenka, Bouby, Dentz, Schäfer (2012) J. Contam. Hydrol., 133 40-52.

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: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.03.2013 bis 20.02.2016	Berichtszeitraum: 01.03.2013 bis 30.06.2013	
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. Dort wird derzeit Task 8d bearbeitet. Dafür musste das bestehende d³f-Modell stark modifiziert und um mehrere Bohrungen erweitert werden.
- AP2: Für den Testfall aus der Borden Site wurde ein erstes 2d Modell mit fester Grundwasseroberfläche erstellt. Hierbei wurden Probleme in der Umsetzung von Volumenquellen mit höherer Temperatur identifiziert, die durch die Entwickler behoben wurden.
- AP3: Die ersten beiden der im Rahmen des FLIN-Projektes durchgeführten quasi 2d Laborexperimente, die Entstehung und die Rückbildung einer Süßwasserlinse, wurden nachgerechnet und sind in die Vergleichsrechnungen – u. a. mit FEFLOW, OGS, GMS und Spring – eingeflossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Das Modell aus Task 8d wird weiter bearbeitet und gerechnet.
- Das Borden-Modell wird auf eine freie Grundwasseroberfläche erweitert. Zur vollständigen Umsetzung muss eine weitere Randbedingung für die Temperatur implementiert werden.
- Sobald die Daten zur Verfügung stehen, werden weitere Experimente der FLIN-Versuchsreihe nachgerechnet.
- Mit der Erstellung des Modelles für das Ems-Ästuar wird begonnen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

2.2 W-Vorhaben

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6259
Vorhabensbezeichnung: Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Kernmaterialüberwachung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2009 bis 30.06.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 707.361,00 EUR	Projektleiter: Dr. Niemeyer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der Vorhaben 02W6184, 02W6218 und 02W6243 auf und zielt ab auf Lösungsvorschläge zur Implementierung von Integrated Safeguards, Entwicklung von „State-Level-Approach“-spezifischen Kontrollmethoden sowie Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden hinsichtlich „Safeguards-by-Design“ für zukünftige Nuklearsysteme.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Weiterentwicklung von Safeguardstechnologien: Digitale Überwachungssysteme und Datenfernübertragung; Analyseverfahren für Fernerkundungsdaten
- Entwicklung neuer Safeguardstechnologien: Umweltbeobachtung; Lasertechniken
- Safeguards-by-Design
- Safeguards für Nuklearanlagen: Geologisches Endlager für abgebrannte Brennelemente; Zentrifugenanreicherungsanlagen
- Weiterentwicklung des „Staatskontrollansatzes“ auf europäischer Ebene
- Kooperation mit der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik (DGAP) zur technisch-politischen Schnittstelle der internationalen Safeguards
- Weiterentwicklung des nationalen Safeguards-Internet-Portals
- Entwicklung eines EURATOM-Auditierungsansatzes
- Weiterentwicklung von Safeguards-Überlegungen im Rahmen von „Triple-S“ (Sicherheit, Sicherung, Safeguards)
- Multinationale Ansätze
- Mitarbeit in der European Safeguards R&D Association (ESARDA)
- Kooperationen mit der International Safeguards Division des Institute of Nuclear Materials Management, mit dem King's College London und mit der Universität der Bundeswehr in München; Unterstützung von BMWi hinsichtlich der Beratungstätigkeiten in der Standing Advisory Group on Safeguards Implementation bei der IAEO.

Die Arbeiten erfolgen im internationalen Kontext nach vorgegebenen Zeitplänen von BMWi, Euratom und IAEO, parallel laufend und unter Einbeziehung in laufende internationale Diskussionen. Sie zielen ab auf die Bereitstellung von Arbeitspapieren, Techniken und Veröffentlichungen, den Bau von Geräten und die Übernahme der Ergebnisse durch BMWi, Euratom und IAEO.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Geologische Endlagerung: Projektleitung bei 3-D-Modellierung seismischer Ausbreitung für verschiedene Quellen; Mitarbeit in der Safeguards-Expertengruppe der IAEO.
- Datenfernübertragung: Abschluss und Dokumentation eines Feldtests zur Datenfernübertragung (DFÜ) von Safeguards-Daten aus kerntechnischen Anlagen in Abstimmung mit Euratom, Betreibern, BMWi und BSI.
- 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“.
- Safeguardstechniken: Projektleitung bei der Implementierung von NGSS, DMCA, HM-5 Software.

- Safeguardsanalytik: Durchführung eines gemeinsamen Promotionsprojektes mit dem Safeguardslabor der IAEO zur Produktion und Charakterisierung von Referenzpartikeln; Qualifizierung Jülichs für das Netzwerk der IAEO-Analyselaboratorien (NWAL); Projektleitung bei der LIBS Machbarkeitsstudie.
- Satellitenfernerkundung und Geoinformationstechniken: Projektleitung zweier Studien zum Einsatz von Fernerkundung und Geoprocessing in der IAEO.
- Novel Technologies: Vorbereitung einer Machbarkeitsstudie zur Verwendung der simultanen Lokalisierung und Kartenerstellung (Simultaneous Localization and Mapping, SLAM)
- 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): Beratung des SAGSI-Mitglieds.
- 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; Teilnahme an Besprechungen; 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 nukleare Abschreckung und nukleare Abrüstung (14.03.13).

4. Geplante Weiterarbeiten

- Safeguards-Web-Portal: Realisierung des Konzeptvorschlags.
- Geologische Endlagerung: Fortsetzung der Geomodellierung von möglichen Signalen und deren Ausbreitung; Vergleichende Analyse der seismischen Messungen an den Standorten Gorleben und Olkiluoto.
- Datenfernübertragung: Mitarbeit bei der Vereinbarung für die Implementierung der DFÜ von Safeguards-Daten aus den Standort-Zwischenlagern.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Arbeitsgruppen und -Gremien.
- Safeguardstechniken: Weitere Implementierung für NGSS, DMCA, HM-5 Software.
- Novel Technologies: Durchführung einer Feldstudie zum Einsatz von SLAM.
- Safeguardsanalytik: Fortsetzung des gemeinsamen Promotionsprojektes zur Produktion und Charakterisierung von Referenzpartikeln; Fortsetzung der Qualifizierung Jülichs für IAEO-NWAL; Erweiterung der LIBS Machbarkeitsstudie um Laserinduzierte Fluoreszenz (LIF).
- Satellitenfernerkundung: Weiterführung der Studien zum Einsatz von Fernerkundung und Geoprocessing.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von SLC, APA und SBD.
- Mitarbeit in den nationalen Gremien AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis.
- SAGSI: Beratende Begleitung des SAGSI-Mitglieds.
- 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

Proc. 35th ESARDA Annual Meeting, Brügge, 27.-30. Mai 2013

- M. Dreicer, G. Stein: Applicability of Nonproliferation Tools and Concepts for Future Arms Control Treaties
- Jussofie, W. Graf, K. van Bevern, I. Niemeyer, A. Reznicek, W. Trautwein, K. Schoop: Ahaus remote data transmission (RDT) field test – from the operators’ point of view

Proc. INMM 54th Annual Meeting, Palm Desert, 14.-18. Juli 2013

- M. Dürr, I. Niemeyer, B. Richter, G. Stein, W. Trautwein, A. Reznicek: Considering Integrated Safeguards and the State-Level Concept in the Development of Equipment and Techniques for Safeguards
- C. Listner, M. J. Canty, G. Stein, A. Reznicek, I. Niemeyer: Approaching Acquisition Path Analysis formally – experiences so far
- Niemeyer, M. Dürr, B. Richter, W. Trautwein: The German Support Programme to the IAEA: 35 Years of Technical Developments and Further Improvement of IAEA Safeguard

A. Knott, M. Dürr: Production of monodisperse uranium particles for nuclear safeguards applications; ESARDA Bulletin, 2013 (in print)

2.3 BMWi-Hausvorhaben

Zuwendungsempfänger: Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: KWA 9005
Vorhabensbezeichnung: Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine		
Zuordnung zum FuE-Programm: Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2011 bis 31.12.2013	Berichtszeitraum: 01.01.2013 bis 30.06.2013	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.101.993,00 EUR	Projektleiter: Dr. Pitterich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Entsorgungskonzept der Bundesregierung sieht die Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen vor. Von 2011 bis 2014 werden FuE-Arbeiten zu noch offenen Fragestellungen der Endlagerung im Steinsalz durchgeführt. Parallel dazu soll der wissenschaftlich-technische Kenntnisstand zur Endlagerung Wärme entwickelnder Abfälle in Tonsteinen auf einen möglichst hohen Stand gebracht werden. Fragestellungen zur Endlagerung in kristallinen Gesteinen werden ergänzend bearbeitet, der Schwerpunkt liegt auf FuE-Arbeiten zum Technischen Barriersystem (Engineered Barrier Systems).

Der überwiegende Teil dieser Untersuchungen wird im Rahmen internationaler Projekte in Untertagelabors in Schweden, der Schweiz und Frankreich durchgeführt. Ferner soll die Erweiterung des Kenntnisstands zu Endlagersystemen in alternativen Wirtsgesteinen durch die Unterstützung von Kooperationen auf der Basis bzw. in Anlehnung an bestehende WTZ-Abkommen, wie z. B. mit Russland, erfolgen.

Das Vorhaben hat zum Ziel Arbeiten deutscher Wissenschaftler, die im Rahmen internationaler Forschungsprogramme (z. B. Schweden, Schweiz, Frankreich) arbeiten, zu koordinieren und zu intensivieren.

Die von BMWi geförderten Vorhaben werden ausführlicher in den formalisierten Zwischenberichten in Kapitel 2.1 beschrieben. Die BGR und das KIT/INE beteiligen sich an Projekten in den URLs überwiegend auf der Basis ihrer jeweiligen Haushalts- bzw. Institutsmittel.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

FuE-Arbeiten zu Hartgesteinen/Granit im Felslabor Grimsel und im HRL Äspö
(Vorhaben 02E9944, 02E11203A, 02E11203B; GRS/ KIT-INE)

FuE-Arbeiten zu Tonstein in den Untertagelabors Mt. Terri, Tournemire und Bure
(Vorhaben 02E10086, 02E10377, DBE, GRS)

Schwerpunkte der Arbeiten, die sowohl In-situ-, Labor-Untersuchungen und Modellierungsarbeiten umfassen, betreffen Untersuchungen zur Migration, zum Transport und zur Rückhaltung kolloidaler und gelöster Radionuklidspesies in den technischen und natürlichen Barrieren, Untersuchungen an technischen Verschlussmaterialien (EBS) sowie Entwicklung und Test numerischer Modelle zur Beschreibung von THM(C)-Prozessen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Vorhaben sind eingebunden in internationale Projekte und wurden bzw. werden zum Teil von der Europäischen Kommission im Rahmen des FP7 kofinanziert. Innerhalb der Vorhaben wurden Arbeiten mit Bezug zu folgenden Projekten ausgeführt:

Hartgestein/Granit

Felslabor Grimsel (CFM); HRL Äspö (Projekte: Prototype Repository, EBS Task Force, Temperature Buffer Test, Microbe, LASGIT, Alternative Buffer Materials)

- Weiterentwicklung und Anwendung von Methoden zur Messung des Aufsättigungsverhaltens des technischen Barriersystems, Ermittlung der physikalischen und chemischen Parameter sowie Einsatz in gekoppelten numerischen Modellen
- Numerische Modellierung und Laboruntersuchungen zum THM-Verhalten von Buffermaterialien
- In-situ- und Labor-Untersuchungen zum Transport und zur Ausbreitung von Aktiniden im Gebirge unter dem Einfluss von Kolloiden und Mikroben

Tonstein

Bure (Teilnahme am Versuchsprogramm der ANDRA), Mont Terri (SB-Experiment)

- Ermittlung relevanter, zur Beschreibung des Materialverhaltens erforderlicher Gesteinsparameter
- Entwicklung von Modellen zur Simulation von gekoppelten THM-Prozessen
- Weiterentwicklung der Methoden zur Messung der thermischen und hydraulischen Effekte auf das Wirtsgestein

Die Ergebnisse sind in den jeweiligen Vorhaben dokumentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die in den Vorhaben vorgesehenen Untersuchungen sind aus den Berichten in Kapitel 2.1 zu ersehen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Siehe Berichte zu den einzelnen Vorhaben in Kapitel 2.1.

3 Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen

Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		
02 E 10910	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	76
02 E 11061C	Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)	110
DBE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		
02 E 10086	Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-	18
02 E 10639	Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)	28
02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	40
02 E 10730	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	42
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL	48
02 E 10900	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	74
02 E 10931	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA-(TV2)	80
02 E 11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein	108
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	122
02 E 11112	Auswirkungen der Sicherheitsanforderungen Rückholbarkeit auf existierende Einlagerungskonzepte und Anforderungen an neue Konzepte (ASTERIX)	128
02 E 11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	136
02 E 11162	Beteiligung an der Studie von KIT und Uni Stuttgart zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	138
02 E 11182B	Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS	144

- 02 E 11193B Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen  148

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)  58

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)  52

- 02 W 6259 Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden  158

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)  114

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

- 02 E 9944 Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2  14

- 02 E 10075 Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90  16

- 02 E 10367 Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen  20

- 02 E 10377 Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen  22

- 02 E 10558 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP1 - Kurztitel: A-DuR  24

- 02 E 10608 Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa  26

- 02 E 10689 Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS  32

- 02 E 10719 Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)  38

- 02 E 10740 Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager  44

- 02 E 10750 Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL  46

- 02 E 10770 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  50

- 02 E 10890 Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS 📖 72
- 02 E 10941 Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL 📖 82
- 02 E 10951 Diffusion in kompaktiertem Salzgrus – DIKOSA 📖 84
- 02 E 11061A Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein 📖 106
- 02 E 11062A Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d^3f und r^3t (H-DUR) 📖 112
- 02 E 11072A Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS 📖 118
- 02 E 11102 Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern 📖 126
- 02 E 11122 Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA 📖 130
- 02 E 11132 Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA 📖 132
- 02 E 11142 Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS 📖 134
- 02 E 11172 Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle 📖 140
- 02 E 11182A Sicherheitsanalytische Untersuchungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle in einer diagenetisch überprägten Tonformation in der Nachbetriebsphase – SanToS 📖 142
- 02 E 11203A Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e 📖 150
- 02 E 11213 Qualifizierung der Rechenprogramme d^3f und r^3t , Kurztitel Quader 📖 154

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

- 02 E 10971 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf 📖 88
- 02 E 11072B Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR 📖 120

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig

- 02 E 10790 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA) 📖 54

- | | | |
|---|--|-----|
| IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig | | |
| 02 E 10659 | Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge | 30 |
| 02 E 10830 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG) | 62 |
| 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 | 90 |
| 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) | 116 |
| 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) | 66 |
| Projektträger Karlsruhe Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen | | |
| KWA 9005 | Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine | 162 |
| 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 | 100 |
| Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen | | |
| 02 E 10699 | Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt FZK: Thermodynamische Datenbasis für Radionuklide | 34 |
| 02 E 10800 | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA) | 56 |
| 02 E 10840 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE) | 64 |
| 02 E 10961 | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie | 86 |
| 02 E 11203B | Verbundprojekt: Stabilität von kompaktiertem Bentonit zur Rückhaltung von Radionukliden in geklüfteten Systemen – Experimente und Modellierung, KOLLORADO-e | 152 |

Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg

- | | | |
|-------------|--|-------|
| 02 E 10709 | Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate | 📖 36 |
| 02 E 10880 | Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs | 📖 70 |
| 02 E 10921 | Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA-(TV1) | 📖 78 |
| 02 E 11092 | Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1 | 📖 124 |
| 02 E 11193A | Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen | 📖 146 |

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) | 📖 68 |
|------------|---|------|

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) | 📖 60 |
| 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 | 📖 102 |
| 02 E 11051 | Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern | 📖 104 |

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 | 📖 98 |
|------------|---|------|

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 | 📖 94 |
|------------|---|------|

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  92

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  96