

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

**PTE Nr. 44**

BMWf geförderte FuE zu  
„Endlagerung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Juli - 31. Dezember 2012

Projektträger Karlsruhe  
Wassertechnologie und Entsorgung  
(PTKA-WTE)

**Februar 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](http://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 B3

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

(Die im Auftrag des BMBF betreuten FuE-Vorhaben zu den FuE-Schwerpunkten:

BMBF Referat 724

- Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle
  - Sicherheitsforschung für Bergbauregionen
- wurden zum 31.12.2011 beendet.)

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

<b>1</b>	<b>Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen .....</b>	<b>1</b>
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>
<b>2</b>	<b>Formalisierte Zwischenberichte .....</b>	<b>13</b>
2.1	E-VORHABEN .....	13
2.2	W-VORHABEN.....	159
2.3	BMWl-HAUSVORHABEN.....	163
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....</b>	<b>167</b>



# 1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

## 1.1 Endlagersystem

<b>02 E 10075</b>	Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 16
<b>02 E 10086</b>	Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 18
<b>02 E 10669</b>	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 44
<b>02 E 10679</b>	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 46
<b>02 E 10689</b>	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 48
<b>02 E 10699</b>	Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt FZK: Thermodynamische Datenbasis für Radionuklide	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT) , Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 50
<b>02 E 10709</b>	Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 52
<b>02 E 10719</b>	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 54

<b>02 E 10729</b>	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 56
<b>02 E 10750</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 62
<b>02 E 10760</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 64
<b>02 E 10880</b>	Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 86
<b>02 E 10921</b>	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle -ELSA- (TV1)	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 94
<b>02 E 10931</b>	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle -ELSA- (TV1)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 96
<b>02 E 11092</b>	Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 140
<b>02 E 11112</b>	Auswirkungen der Sicherheitsanforderungen Rückholbarkeit auf existierende Einlagerungskonzepte und Anforderungen an neue Konzepte (ASTERIX)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 144
<b>02 E 11132</b>	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 148
<b>02 E 11142</b>	Performance Assessment of Sealing Systems - Kurztitel: PASS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 150
<b>02 E 11152</b>	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 152
<b>KWA 9005</b>	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	<b>Projekträger Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE)</b>	📖 164



## 1.2 Systemverhalten und Systembeschreibung

<b>02 E 9944</b>	Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 14
<b>02 E 10367</b>	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 20
<b>02 E 10377</b>	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 22
<b>02 E 10447</b>	Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung	<b>IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack &amp; Partner, Freiberg</b>	📖 24
<b>02 E 10548</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 26
<b>02 E 10558</b>	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP1 - Kurztitel: A-DuR	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 28
<b>02 E 10568</b>	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP2 - Kurztitel: A-DuR	<b>Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main</b>	📖 30
<b>02 E 10578</b>	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP3 - Kurztitel: A-DuR	<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>	📖 32

<b>02 E 10588</b>	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP4 - Kurztitel: A-DuR	<b>Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Leipzig</b>	📖 34
<b>02 E 10608</b>	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 36
<b>02 E 10618</b>	Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 38
<b>02 E 10639</b>	Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 40
<b>02 E 10659</b>	Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge	<b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>	📖 42
<b>02 E 10730</b>	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 58
<b>02 E 10740</b>	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 60
<b>02 E 10770</b>	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 66
<b>02 E 10780</b>	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	<b>Forschungszentrum Jülich GmbH</b>	📖 68
<b>02 E 10790</b>	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 70
<b>02 E 10800</b>	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 72
<b>02 E 10810</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)	<b>Dr. Andreas Hampel, Mainz</b>	📖 74



<b>02 E 10820</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 76
<b>02 E 10830</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)	<b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>	📖 78
<b>02 E 10840</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 80
<b>02 E 10850</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	📖 82
<b>02 E 10860</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)	<b>TU Carolus-Wilhelmina zu Braunschweig</b>	📖 84
<b>02 E 10890</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 88
<b>02 E 10900</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 90
<b>02 E 10910</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>	📖 92
<b>02 E 10941</b>	Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 98
<b>02 E 10951</b>	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 100
<b>02 E 10961</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 102

<b>02 E 10971</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 104
<b>02 E 10981</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz	<b>Johannes Gutenberg-Universität Mainz</b>	📖 106
<b>02 E 10991</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes	<b>Universität des Saarlandes, Saarbrücken</b>	📖 108
<b>02 E 11001</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München	<b>TU München</b>	📖 110
<b>02 E 11011</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam	<b>Universität Potsdam</b>	📖 112
<b>02 E 11021</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden	<b>TU Dresden</b>	📖 114
<b>02 E 11031</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg	<b>Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg</b>	📖 116
<b>02 E 11041</b>	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	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 118
<b>02 E 11051</b>	Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 120
<b>02 E11061A</b>	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 122
<b>02 E11061B</b>	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 124
<b>02 E11061C</b>	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>	📖 126

<b>02 E11062A</b>	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 128
<b>02 E11062B</b>	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)	<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>	📖 130
<b>02 E11062C</b>	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)	<b>Johann Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt am Main</b>	📖 132
<b>02 E11072A</b>	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 134
<b>02 E11072B</b>	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 136
<b>02 E11082</b>	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	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 138
<b>02 E11102</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 142
<b>02 E11122</b>	Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 146



### 1.3 Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung

<b>02 E 11162</b>	Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	 154
<b>02 E 11172</b>	Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	 156





## 1.4 Kernmaterialüberwachung

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

**Forschungszentrum  
Jülich GmbH**

 160



## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 E-Vorhaben**

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9944</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Goelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2004 bis 31.12.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 529.957,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Wieczorek	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: 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.
- 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. Eine Sichtkontrolle der Versatzelektroden zeigte oberflächliche Korrosionsspuren. Die Elektroden im Buffer zeigen nur geringfügige Korrosionsspuren. Die Ankopplung der Elektroden in ihren Bohrlöchern ist gut. Eine Überprüfung der im Buffer eingebetteten Elektroden zeigte bei allen einen Kabelabriss direkt oberhalb der Elektrode. Dies ist offenbar die Erklärung für den Elektrodenausfall im Buffer. Grund für den Kabelabriss ist die Quellung des umgebenden Bentonitblocks, die wegen der zu geringen Steifigkeit des darüber liegenden Streckenversatzes zu Höhenänderungen im Block von mehreren Zentimetern bis Dezimetern führte; eine solche Längung konnten die Kabel nicht aufnehmen. Wegen des Elektrodenabrisses konnten keine geoelektrischen Messungen mit den im Buffer eingebauten Elektroden durchgeführt werden. An Proben der Bufferkerne wurden Messungen des Wassergehalts durch Trocknung vorgenommen. Es wurden Wassergehalte zwischen 19.5 % und 23.5 % ermittelt, dabei ist der Wassergehalt des Kerns, der nahe der Bohrlochwand des Lagerbohrlochs gewonnen wurde, grundsätzlich höher als der des Zentralkerns. Dies deckt sich mit der Erwartung, da die Bufferaufsättigung vom Rand des Lagerbohrlochs her geschieht. Die ermittelten Wassergehaltswerte sind in guter Übereinstimmung mit Ergebnissen von Bufferproben, die von Clay Technology im Auftrag von SKB untersucht wurden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weiterführung der In-situ-Messungen in Sektion I
- AP2: Wassergehalts- und Resistivitätsbestimmung an Versatzproben aus dem Versuchsfeld

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10075</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 30.06.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.072.091,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

#### Literaturstudie

Die bereits vor längerem durchgeführte Literaturrecherche für Fe(II)-OH-H<sub>2</sub>O im System der ozeanischen Salze wurde ausgewertet sowie durch eine erneute Recherche noch einmal ergänzt.

#### Dampfdruckmessungen:

Zur Verringerung der Äquilibrierungszeiten für die isopiestic Messungen der sulfatischen ternären Systeme Fe(II) – Na,K,Mg – SO<sub>4</sub> – H<sub>2</sub>O bei 60 °C und 90 °C wurde eine Wippe entwickelt und eingesetzt. Leider wurden auch mit Wippe keine akzeptablen Äquilibrierungszeiten ( $\leq 6$  Wochen) erreicht. Ein Versuch mit Glaskolben und hoher Fe-SO<sub>4</sub>-Konzentration zeigte, dass eine Evakuierung auf 100 mbar bei Aufheizung auf 60 °C in der isopiestic Apparatur möglich sein sollte, ohne dass die Lösungen anfangen zu siedeln. Dies konnte leider in den isopiestic Töpfen nicht bestätigt werden. Die isopiestic Messungen wurden damit für die Systeme mit FeSO<sub>4</sub> bei 60 °C und 90 °C abgebrochen.

#### Löslichkeitsversuche

Weiterführung und Abschluss des Löslichkeitsversuches im System Fe(II)-K-Cl-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O (mit Arcanit bzw. Sylvin als eingesetztem Bodenkörper) bei 60 °C.

#### Auswertung / Thermodynamische Modellierung

Pitzer-Parameter für die binären Systeme FeCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O und FeSO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O sowie viele ternären Systeme der ozeanischen Salze mit FeCl<sub>2</sub> und FeSO<sub>4</sub> wurden bereits im Temperaturbereich 25-90 °C mit Hilfe von eigenen Dampfdruck- und Löslichkeitsdaten als auch mit Daten aus der Literatur modelliert

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### Auswertung / Eintrag der Daten in die THEREDA-Datenbasis

Eintrag der - mit Hilfe von eigenen erhobenen Daten und Literaturdaten - thermodynamisch modellierten Daten für die Fe-Systeme bei 25-90 °C.

#### Abschlussbericht

Erstellung des Abschlussberichtes.

#### Veröffentlichung

Verfassen einer Veröffentlichung zu den Ergebnissen der Korrosionsversuche in hochsalinaren Lösungen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10086</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2006 bis 31.08.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.860.958,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 Modellberechnungen 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 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.

Dieses Verfahren wurde zunächst dazu benutzt, um eine Sensitivitätsanalyse durchzuführen. Mit dieser Analyse ist es möglich, diejenigen Parameter zu identifizieren, die einen signifikanten Einfluss auf die simulierte Porenwasserdruckentwicklung haben, so dass man im Ergebnis einen reduzierten Satz relevanter Parameter erhält. Die Parameter mit nicht signifikantem Einfluss werden auf plausible Erfahrungswerte festgesetzt. Zur eigentlichen Anpassung variiert OptiSLang dann nur noch die als relevant identifizierten Parameter innerhalb vorgegebener plausibler Grenzen.

Dieser Prozess führte letztlich zu einem Parametersatz, der es ermöglicht, die aufgezeichneten Messwerte an allen Sensoren zufriedenstellend über alle drei Heizphasen im Modell nachzubilden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP6: Durchführung von THM-Prognoseberechnungen sowie Modellvalidierung anhand der Messwerte im Zuge der Abkühlphase des TED-Erhitzerversuches in Bure.

- Erstellung des Abschlussberichtes.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Jobmann, M. (2012): Analysis of temperature and pore pressure response of Callovo-Oxfordian claystone to heating, TED Experiment, Technical Report, Peine, Germany

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10367</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2007 bis 31.03.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.037.400,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

AP2: Folgende Module wurden für die neue Benutzerumgebung konzipiert bzw. weiterentwickelt und als Module Description (im XML-Format) realisiert bzw. angepasst:

- Modul GeoTREND-FC,

- Modul CLAYPOS,
- Segment-Modell für die Anwendungsfälle auf Basis vorhandenen Studien (ISIBEL-II),
- Auf CLAYPOS abgestimmte Hilfsmodule für Element- und Inventories-Daten.

Das Konzept zur automatischen Steuerung der Zeitschrittlänge wurde optimiert:

- Die zulässige maximale Zeitschrittlänge wird abhängig von der aktuellen Zeit berechnet. Ihre Änderung erfolgt dynamisch und stetig. Das neue Konzept ersetzt das alte, bei dem die Änderung der maximalen Zeitschrittlänge sprunghaft beim Dekadenwechsel erfolgte, was u. U. zu Oszillationen führen könnte.
- Es wurde eine untere Schranke für die Zeitschrittlänge eingeführt, die jedoch bei Bedarf abgeschaltet werden kann.
- Es wurden einige Steuerungsparameter eingeführt, durch die der Benutzer die Performance beeinflussen kann.

Es wurde eine Steuerungsroutine konzipiert und umgesetzt, die eine semantische Analyse der JSON-Eingabedatei durchführt und entsprechend der logischen Zusammenhänge die Abarbeitung der definierten Rechenmodule steuert.

AP3: Die Entwicklung des C++-Programmcodes für *GeoTREND-FC* (kolloidbeeinflussten Transport von Schadstoffen durch ein voll gesättigtes geklüftet-poröses Medium) Phase 1 (Basismodell zur Abbildung der im Vorhaben Kolorado-2 simulierten Experimente) wurde weitgehend abgeschlossen.

Die Anpassung des alten Fortran-Rechenmoduls CLAYPOS (Endlagerung im Granit oder Ton) an die neue Daten-Schnittstelle (JSON-Format) wurde weitgehend abgeschlossen.

AP4: In dem extern vergebenen Auftrag an die Fa. BREDEX wurden zwei neue Versionen der grafischen Benutzeroberfläche XENIA fertig gestellt. Folgende neue Funktionalitäten stehen in den neuen Versionen zur Verfügung:

- Erweiterung von Kopier-, Lösch- und Filterfunktionalitäten
- Neues Konzept für die Zuordnung von Standard- und User-Executables
- Erweiterte Fehlerbehandlung für Remote-Jobs
- Neue Ansicht zur Einstellung von Programmkonfigurationen
- Editierbarkeit in der Child-Parameter-Ansicht
- Excel-Export der Daten aus der Child-Parameter-Ansicht
- Sperren eines Rechenlaufs
- Neue Statistik-Attribute
- Neues Konzept für die Konfiguration von Queue-Parameter
- Neue Rolle „Entwickler“ mit entsprechend zugewiesenen Rechten, Anpassung der Rolle „User“.

Die Umstellung von der Oracle- auf die Postgresql-Datenbank sowie die erforderliche Migration der Daten wurden vorgenommen. Die neue Datenbank befindet sich in Braunschweig (früher in Garching). Durch diese Maßnahme konnte die Geschwindigkeit des Datentransfers um das Vielfache verbessert werden.

AP5: Es wurden umfangreiche Tests zur Verifikation des statistischen Rahmens *statistControl* durchgeführt. Das neu entwickelte Modul *GeoTREND-FC* und das angepasste Fortran-Modul CLAYPOS sind im Test.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Module *GeoTREND-FC* und CLAYPOS sollen fertiggestellt, ausführlich getestet und dokumentiert werden.

Die Abgabeversion von XENIA soll ausführlich getestet werden.

Weitere Fernfeldmodule – CHETMAD und TRAPIC – sollen an *RepoTREND* angebunden werden.

Des Weiteren sollen die Analyse für das Nahfeldmodul *NaTREND* unter der Berücksichtigung des Zwei-Phasen-Flusses durchgeführt und das Konzept dafür entwickelt werden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Poster für die EUROS SAFE-Konferenz am 5.-6. November 2012: „RepoTREND – An Advanced Modelling Tool for Performance Assessment of Radioactive Waste Repositories“

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10377</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2007 bis 30.06.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 4.681.465,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Zhang

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Dieses Ziel lässt sich untergliedern in:

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

Diese Ziele werden durch die Beteiligung am neuen ANDRA-Forschungsprogramm für das Untertage-labor Bure (ULB) in den Jahren 2007 bis 2011 und am Mine-By-Experiment im Mont Terri Rock Laboratory (MTRL) erreicht. Neben dem generellen Erkenntniszuwachs sollen die im Rahmen dieses Vorhabens erzielten Ergebnisse bei der Verbesserung von Prozessmodellen sowie bei der Weiterentwicklung des Instrumentariums für die Langzeitsicherheitsanalyse für Endlager in Tongesteinen genutzt werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: *In-situ-Untersuchungen* der mechanisch-hydraulischen Auswirkungen einer Tunnelauffahrung im MTRL auf das umgebende Tonsteingebirge. Diese Untersuchungen werden gemeinsam mit NAGRA, BGR und ANDRA durchgeführt, wobei GRS die Messung von Porenwasserdruck, Permeabilität und Sättigungsänderung übernimmt. Ein weiterer In-situ-Test hat die Untersuchung des Langzeitverformungsverhaltens des Opalinuston im MTRL zum Ziel.
- AP2: *Laboruntersuchungen* am Callovo-Oxfordian-Tonstein und Opalinuston zu Langzeitverformung, Quelldruck/Quellverformung, Schädigung und Verheilung sowie am Auffahrungsrückstand aus dem ULB als Versatzmaterial.
- AP3: *Modellierung* des Mine-By-Experiments, des Langzeitverformungsverhaltens eines Bohrlochs im MTRL und der THM-Laborversuche.
- AP4: *Modellentwicklung* für die Schädigung und Verheilung von Tonstein.
- AP5: *Ergebniszusammenführung und Berichterstattung*.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### *Laboruntersuchungen an Tonstein:*

- 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 naher verheilten Tonstein mit Messungen von Gasdurchbruchdrücke bzw. Gaspermeabilitäten bei Manteldrücken von 2 bis 15 MPa
- Thermische Wirkung auf die mechanische Stabilität vom Bohrloch in großem Tonkern bei Temperaturerhöhung von 30 bis 90 °C und unter einem Manteldruck von 15 MPa.

#### *Laboruntersuchungen an Tonversatz:*

- Quelldruck und -verformung von kompaktierten Mischungen aus Ausbruchstonstein (COX) und Bentonit (MX80) im COX/MX80-Verhältnis von 100/0, 20/80, 40/60, 50/50, 60/40 und 0/100
- Wasseraufnahme der kompaktierten Ton-Bentonit-Mischungen bei unterschiedlichen Luftfeuchten
- Wasser- und Gaspermeabilitäten der kompaktierten Mischungen.

#### *Bohrlochverformung:*

Nach 4-monatiger Ruhephase Wiederaufnahme der Deformation in der 2. Laststufe in 03/2012; stationärer Verlauf seit 04/2012 für Sensor 2 & 3, Problematik des geringen Messbereichs für den Sensor 3 weiterhin vorhanden. Fortführung der bereits in 2011 durchgeführten rechnerischen Untersuchungen zur Auslegung und Lage der MP. Die mit dem verwendeten HM gekoppelten Stoffmodellansatz erzielten Ergebnisse können das in 2012 aufgezeichnete, zeitabhängige Gebirgstragverhalten nicht hinreichend zuverlässig abbilden.

#### *Modellierung (TED-Exp.):*

Sichtung, Aufarbeitung und Dokumentation der vorhandenen Messbefunde zum thermo-hydro-mechanisch gekoppelten Verhalten im Nahbereich der 3 Erhitzerbohrlöcher TED 1201/1202/1203, Fortführung der modelltheoretischen Arbeiten mit einem 2D-Modell.

Bei einem Fachgespräch mit UPC/CIMNE im Dezember wurden die aktuellen Ergebnisse der Langzeitkriech-/Verheilungsversuche am Tonstein vorgestellt und über Vorgehensweise zur Modellentwicklung für Schädigung und Verheilung von Tonstein diskutiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des Bohrlochtests, Durchführung begleitender Modellierungen
- Weiterführung der Laborversuche am Tonstein sowie der Versatzuntersuchungen
- Entwicklung eines Stoffansatzes für Kriechen von Tonstein
- Fortführung und Dokumentation der durchgeführten modelltheoretischen Arbeiten

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang, C.-L.: Thermo-hydro-mechanical behaviour of clay rock for disposal of radioactive waste, presented on the 2nd Chinese-German workshop on radioactive waste disposal, Karlsruhe, Oct. 15-16, 2012.

Zhang, C.-L.: two poster presentations on the 5th international clay meeting, Montpellier, Oct. 22-25, 2012: (1) Experimental study of long-term deformation behaviour of clay rocks; (2) Investigations of excavated claystone as backfill/seal material.

Zhang, C.-L.: Self-sealing of fractures in clay rock for disposal of radioactive waste, presented on the EUROSAFE2012 Towards conference of technical nuclear safety practices in Europe, Brussels, Nov. 5-6, 2012.

Zhang, C.-L.: Characterization of excavated claystone and claystone-bentonite-mixtures as backfill/seal material (summitted for the proceedings of the 5th international clay meeting).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Depo- nietechnik Wilsnack & Partner, Lessingstr. 46, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10447</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2007 bis 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 324.108,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Wilsnack	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Entwicklung einer Versuchsmethodik und -apparatur zur Ermittlung der oberflächennahen Permeabilität von Gesteinsformationen und/oder Bauwerken.

Die Entwicklung des Verfahrens ist die Grundlage für die Ermittlung der Permeabilität an der Kontur von Gebirgsformationen. Die damit ermittelbaren Parameter bilden eine wesentliche Grundlage für die Konzipierung und Dimensionierung von hydraulischen Querschnittsabdichtungen für untertägige Hohlräume.

Entwicklung eines „verlorenen“, kabellosen Sensors für die Erfassung und Übertragung von Prozessparametern aus Verschlussbauwerken.

Test des kabellosen Sensors in einem Versuchsbauwerk aus kohäsivem Material (Schwerpunkt der Aufstockung im Zeitraum 01.06.2010 bis 31.12.2012).

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Erstellung eines Lastenheftes

AP2: Entwicklung eines Konzeptes für die Versuchsausrüstung und die Versuchsdurchführung

AP3: Konstruktion, Planung und Bau der Versuchsausrüstung

AP4: Entwicklung Auswertesoftware

AP5: Test und Korrektur der Versuchsausrüstung

Aufstockung:

AP6: Entwicklung und Bau der Messausrüstung (kabelloser Sensor)

AP7: Versuchseinbau

AP8: Test Messausrüstung und Auswertung

AP9: Berichtslegung

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

- mehrfaches Auslesen, Neukonfiguration und Auswerten der In-situ-Messungen im Salzbetonbauwerk der DBE am Standort Morsleben (ERAM)
- Durchführung und Auswertung von zwei Tests zur Batterielebensdauer zur Beurteilung der Leistungsfähigkeit der kabellosen Sensoren
- Vorbereitung einer Präsentation und Publikation:
- F. Grafe, Th. Wilsnack, A. Rössel, R. Mauke (2013): Wireless data transfer in salt rock. Monitoring in Geological Disposal of Radioactive Waste MoDern – Conference and Workshop, 19.-21.03.2013
- Vorbereitung patentrechtlicher Schutz für kabellose Sensoren
- Fortsetzung der Auswertung der Feldstärkemessungen
- Fortschreibung des Berichtes zum Vorhaben

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fortsetzung des Projektes entsprechend Arbeitsprogramm (Abschnitt 2) mit den Arbeitspaketen 8-9.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Wilsnack, Th.; Rössel, A.; F. Grafe, F. (2012): Kabellose Datenübertragung im Salinar. Kali und Steinsalz

F. Grafe, Th. Wilsnack, A. Rössel, R. Mauke (2013): Wireless data transfer in salt rock. Monitoring in Geological Disposal of Radioactive Waste MoDern – Conference and Workshop, 19.-21.03.2013 (im Druck)

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10548</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2008 bis 31.07.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.07.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.095.333,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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.
- Auswertung neuer wissenschaftlicher Ergebnisse und Aufbereitung zur Verwendung in Instrumentarien für Langzeitsicherheitsanalysen.

TA2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

- Untersuchung der Auswirkungen klimatischer Veränderungen auf Prozesse in der Geosphäre und Biosphäre und Abschätzungen des Einflusses auf die Langzeitsicherheit potentieller deutscher Endlager.
- Untersuchung natürlicher Analoga: Abschließende Arbeiten am Analog-Standort Ruprechtov zur Überprüfung des konzeptionellen Modells und des Einflusses von Veränderungen der Redox-Bedingungen.
- Weiterführende Untersuchungen zur Aufsättigung von Bentonit-haltigen Buffermaterialien.



### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Fertigstellung der Abschlussberichte von Teilaufgaben und des zusammenfassenden Abschlussberichtes.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Noseck, U. Meleshyn, A.; Becker, D.; Brassler, Th.; Flügge, J.; Fahrenholz, Ch.; Herbert, H.; Ionescu, A.; Kröhn, K.P.; Kull, H.; Meleshyn, A.; Mönig, J.; Röhlig, K.; Rothfuchs, T.; Wolf, J.: Scientific basis for a safety case of deep geological repositories. FKZ: 02E 10548 (BMW), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. GRS-298. Braunschweig 2012.

Semioshkina, N.; Staudt, Ch.; Kaiser, Ch.; Fahrenholz, Ch., Noseck, U.: Impact of different climates and climate transitions on biosphere modelling in long-term safety assessment. FKZ: 02E 10548 (BMW), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-299, Braunschweig 2012.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10558</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP1 - Kurztitel A-DuR -		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 31.03.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 971.750,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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**

Die Testfallbeschreibung für Task 8c wurde weiter um neue Messdaten aus Äspö aktualisiert. Ferner wurde sie um ein Kapitel ergänzt, das die theoretischen Grundlagen für die statistischen Klufdaten erläutert.

Am 7.11.2012 fand ein Arbeitsgespräch mit Sabine Attinger statt, in dem das Vorgehen in den noch offenen Fragen zu den Themen „Erzeugung kontinuierlicher Ersatzmedien“ (AP2) und „Entwicklung eines eindimensionalen Modells zur Durchführung von Szenarienuntersuchungen“ (AP6) abgesprochen wurde.

Mit der Erstellung des gemeinsamen Projekt-Abschlussberichtes wurde begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Beschreibung der Matrix im Testfall Task 8c einschließlich der Hintergrundklüfte durch ein äquivalent poröses Medium, sobald die Methoden zur Bestimmung eines äquivalenten Ersatzkontinuums bereitgestellt sind.
- Modellrechnungen zum Testfall Task 8c.
- Der gemeinsame Projektabschlussbericht wird erstellt.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10568</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP2 - Kurztitel A-DuR -		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 30.09.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 548.396,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Wittum	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projektes ist es, die Entwicklung eines numerischen Lösers für das mesoskalige Referenzmodell (AP3), die Implementierung eines adaptiven numerischen Mehrskalenslösers für das Gesamtsystem und die Implementierung in  $d^3f$  und  $r^3t$  (AP5) sowie Algorithmen und Softwarewerkzeuge zur inversen Modellierung und Schätzung der relevanten Parameter des Strömungsproblems (AP7) einzubringen. Gemeinsam mit den Projektpartnern werden Benchmarking-Tests sowie Vergleichsrechnungen (AP9) durchgeführt.

Es sollen Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung für die gemischt parabolisch-hyperbolischen Probleme entwickelt und in die Simulationssoftware umgesetzt werden. Dies soll auf der Basis von unstetigen Galerkin-Verfahren bzw. Finite-Volumen-Verfahren erfolgen. Für die so entstehenden Systeme sollen schnelle Lösungsverfahren auf der Basis von Mehrgittermethoden entwickelt werden. Entscheidend ist ferner die effiziente Umsetzung der Methoden auf massiv parallelen Rechnern. Basis der Implementierung werden die Software-Werkzeuge  $d^3f$  und  $r^3t$  sein.

Zur Schätzung von Parametern für diese Systeme werden effiziente numerische Verfahren entwickelt und programmtechnisch umgesetzt. Die Verfahren werden auf den Gauß-Newton-Techniken aufbauen, die mit Mehrgittermethoden kombiniert werden. Auch hier ist die effiziente Umsetzung auf Parallelrechnern entscheidend, da die Komplexität der inversen Probleme die der Simulation selbst leicht um eine Größenordnung übersteigen kann.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Das Simulationssystem UG ist weltweit über 350-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 01.10.1994 – 31.08.1998 (FKZ 02 C 0254 6 und 02 C 0465 0) und vom 01.10.1998 – 31.12.2003 (FKZ 02 E 9148 2).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP3: Entwicklung eines numerischen Lösers für das mesoskalige Referenzmodell

AP5: Adaptiver numerischer Mehrskalenslöser für das Gesamtsystem und Implementierung in  $d^3f$  und  $r^3t$

AP7: Algorithmen und Softwarewerkzeuge zur inversen Modellierung und Schätzung der relevanten Parameter des Strömungsproblems

AP9: Benchmarking und Vergleichsrechnungen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3: *Entwicklung eines numerischen Löser für das mesoskalige Referenzmodell*

AP5: *Adaptiver numerischer Mehrskalnlöser für das Gesamtsystem und Implementierung in  $d^3f$  und  $r^3t$*

AP9: *Benchmarking und Vergleichsrechnungen*

Die im Rahmen des Projekts angestellten Vergleiche zwischen Ergebnissen aus Simulationen mit  $d$ - und  $(d-1)$ -dimensionalen Kluftdarstellungen zeigen, dass unter bestimmten Strömungsverhältnissen und mit bestimmten Kluftweiten ein  $d$ -dimensionales Auflösen der Kluft nötig ist, allerdings bei sehr dünnen Klüften häufig eine  $(d-1)$ -dimensionale Darstellung zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Da die  $(d-1)$ -dimensionale Kluftdarstellung im Hinblick auf Speicheraufwand und Rechenzeit trotz verbesserter numerischer Methoden (dimensionsadaptives Mehrgitterverfahren) insbesondere in 3D einen deutlichen Vorteil besitzt, wurde ein Kriterium empirisch eingeführt, mit dessen Hilfe abhängig von Parametern wie der Kluftdicke und der Permeabilität und abhängig von Strömungsverhältnissen bestimmt werden kann, ob eine  $d$ -dimensionale Auflösung der Kluft notwendig ist. Dieses Kriterium wird während der Rechnung ausgewertet. In 2D kann mit dem zuvor eingeführten Gittertransfer während der Laufzeit der Simulation zwischen dem Gitter mit  $d$ -dimensionaler Kluft und dem mit  $(d-1)$ -dim. Kluft gewechselt werden und so getestet werden, inwiefern insgesamt der Fehler reduziert wird. Für die getesteten Henry-Beispiele liefert das aufgestellte Kriterium sehr gute Ergebnisse. Im Hinblick auf die effiziente Simulation auf parallelen Rechnern wurde die Umverteilung adaptiver Gitter überarbeitet. Mittels paralleler Lastverteilung kann nun ausgehend von einer bestehenden Verteilung eines Gitters eine neue, hinsichtlich Speicher und Rechenaufwand ausgeglichene Verteilung erstellt werden. Der implementierte Verteilungsalgorithmus ist dabei äußerst flexibel und stellt keine beschränkenden Anforderungen an vorgegebene Partitionierungen. Die Umverteilung ist insbesondere auch für adaptive unstrukturierte Gitterhierarchien bestehend aus unterschiedlichen Elementtypen (in 2D Dreiecke und Vierecke; in 3D Tetraeder, Hexaeder, Prismen und Pyramiden) möglich, wie sie sowohl bei Gittern mit niederdimensionalen Klüften als auch bei Gittern mit volldimensionalen Klüften auftreten.

AP7: *Algorithmen und Softwarewerkzeuge zur inversen Modellierung und Schätzung der relevanten Parameter des Strömungsproblems*

Einer der entscheidenden Parameter in Strömungsproblemen ist die Permeabilität. Es wurden deshalb zwei verschiedene Testprobleme mit jeweils konstanter Permeabilität aufgesetzt und diese sehr detailliert (hohe Auflösung und kleine Zeitschritte) gerechnet, wobei die Konzentration an wenigen ausgewählten Stellen gespeichert wurde. Schließlich wurde durch inverse Modellierung mit Hilfe der bekannten Konzentrationen die Permeabilität bestimmt. Hierzu wurde ein Optimierungsverfahren, basierend auf dem Newton-Verfahren, entwickelt. Die Untersuchungen haben gezeigt, dass das entwickelte Optimierungsverfahren in der Lage ist, mit nur wenigen Stellen an denen die Konzentration vorgegeben war, die Permeabilität korrekt zu bestimmen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Siehe 1. Halbjahresbericht 2012 (Berichtszeitraum 01.01.2012 - 30.06.2012)

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10578</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP3 - Kurztitel A-DuR -		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 30.09.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 290.377,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Attinger	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundvorhabens ist die grundlegende Erweiterung der numerischen Modelle  $d^3f$  und  $r^3t$  auf heterogen-porösen und klüftig-porösen Medien (adaptives numerisches Mehrskalmodell). Bisher simulierten  $d^3f$  und  $r^3t$  nur die Strömungs- und Transportmodellierung von Sedimentgesteinen und einzelnen Klüften.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der der Universität Frankfurt (Prof. Witum), dem UFZ Leipzig (Department für Umweltinformatik, Prof. Kolditz) und der Gesellschaft für Reaktorsicherheit in Braunschweig (Frau Schneider) durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP2: Herleitung eines mesoskaligen Referenzmodells zur Kompartimentierung des Rechengebiets und Modellierung der Prozesse in den einzelnen Kompartimenten

- Erzeugung der subskaligen Heterogenitäten
- Modellierung von Strömung und Transport auf der feinen Modellskala
- Skalierung (Filtermethode)

AP4: Konzepte und Kriterien für die Mehrskaladaptivität

AP6: Niederdimensionale Modellierung von Heterogenitäten und Klüften

- Entwicklung eines schnellen eindimensionalen Modells zur Durchführung von Szenarienuntersuchungen
- Geostatistische Methoden
- stochastische und fraktale Modellierung von Channeling

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Die Ergebnisse dieses Arbeitspaketes umfassen die Herleitung expliziter Ausdrücke für das zeitliche Verhalten von Transportkoeffizienten in tiefen Schichten geklüftet-poröser Medien (isotrop), deren Heterogenitäten durch eine fraktale Struktur gekennzeichnet sind. Solche Medien bestehen aus zahlreichen kleinen Haarrissen, in denen jedoch ein bemerkenswerter Teil des Lösungstransports durch das Medium stattfindet. Die Ergebnisse wurden in zwei Situationen unterteilt: In der ersten Situation wurden einzelne größere Klüfte vernachlässigt, wohingegen in der zweiten diese mittels der Skalierungsmethode Coarse Graining eingebettet wurden. Zu den Ergebnissen dieser beiden Situationen wurden zwei Veröffentlichungen vorbereitet, die sich zum aktuellen Zeitpunkt in der Korrekturphase befinden. Darüber hinaus wurden der Projektendbericht geschrieben sowie der 1. Entwurf der Dissertation, die innerhalb dieses Projekts angefertigt wird.

AP4 & AP6:

Die Algorithmen der 2- und 3-D-Versionen des fraktalen Zufallsfeld-Generators sind fertig, sie müssen aber noch in die bestehenden UG-Module eingefügt werden. Dabei liest der Generator als Parameter die cutoff-Längen, die Transformationswinkel, den Hurst-Koeffizienten, die Varianz und den Mittelwert des K-Feldes aus einer Text-Datei ein.

Der Newton-Raphson Algorithmus (NR) wurde verwendet, um die Spektraldichtefunktion (SDF) von gleichmäßig verteilten Zufallsvariablen auf einem Intervall  $[0,1]$  zu invertieren. Der implementierte NR-Algorithmus wurde modifiziert, um die 2. Ableitung zur Anpassung der Lösung  $x_1$  im ersten Iterationsschritt zu verwenden, falls die eingesetzte 1. Ableitung in der Anfangs-Approximation der Lösung  $x_0$  sehr klein ist, da die herkömmliche NR-Methode in solchen Fällen versagt. Das Ergebnis der Invertierung der SDF ist der Wellenzahl-Vektor in den erforderlichen räumlichen Dimensionen. Die Anisotropie und Transformation der fraktalen Struktur werden an den Komponenten des Wellenzahl-Vektors durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

Die Dissertation wird korrigiert und abgeschlossen. Die Veröffentlichungen sollen korrigiert und eingereicht werden. Eventuell wird eine dritte Veröffentlichung zum zeitlichen Verhalten der Transportkoeffizienten im oberflächennahen Bereich (anisotrop) erstellt.

AP4 & AP6:

Es werden außerdem zwei normalverteilte Zufallsvariablen mithilfe des Box-Muller-Algorithmus erzeugt. Diese werden als die Amplituden der Fluktuationen in dem erzeugten Feld eingesetzt. Anschließend wird die Randomisierungs-Methode aus Kurbanmuradov und Sabelfeld (2010) verwendet, um das Zufallsfeld abzuschließen. Sobald die Übertragbarkeit auf UG abgeschlossen ist, wird der Code an die Arbeitsgruppe in Frankfurt übergeben.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Musuuzza, J. L., Radu, F. A. and S. Attinger (2012): Predicting predominant thermal convection in thermohaline flows in saturated porous media, *Advanced Water Resources*, **49**: 23-26, doi:10.1016/j.advwatres.2012.07.020.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10588</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP4 - Kurztitel A-DuR -		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 30.09.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 209.743,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. Kolditz	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundvorhabens ist die Weiterentwicklung von Berechnungsmethoden für reaktive Transportprozesse in heterogenen porösen und klüftig-porösen Medien.

Gegenstand des Teilprojekts AP8 beschäftigt ist die Unsicherheitsanalyse. Dabei geht es um eine Quantifizierung der Unsicherheiten, d. h. Vorhersagegenauigkeit von Modellprognosen.

Im Rahmen des Teilprojekts AP9 wird eine systematische Sammlung von Testbeispielen für Kluftgesteine entwickelt, um Genauigkeit und Stabilität der numerischen Modelle zu prüfen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Jede Prozesssimulation in Kluftgesteinen ist a priori mit Unsicherheiten behaftet. Daher ist es vor allem für sicherheitsrelevante Fragestellungen, wie Endlagerung, CO<sub>2</sub>-Speicherung und Tiefe Geothermie von großer Bedeutung, Modellfehler abschätzen zu können. Ursachen für Unsicherheiten können unterschiedlicher Natur sein: keine genaue Kenntnis der struktureologischen Bedingungen (Kluftsyste-me, Heterogenitäten) aufgrund geringer Erkundungsdaten, Parametrisierungs- und Skalenprobleme. Für die Unsicherheitsanalyse sollen Methoden für Kluftgesteine entwickelt werden. Im AP8 sollen daher neben numerischen Lösern auch sog. Random-Walk/Particle-Tracking (RW/PT) Verfahren weiterentwickelt und angewendet werden. Für die Bewertung der Genauigkeit und der Zuverlässigkeit numerischer Modelle ist die Entwicklung von systematischen Benchmark-Tests im AP9 von großer Wichtigkeit (Kolditz et al. 2012).

Im Rahmen dieses Vorhabens ist folgende Systematik für das Benchmarking vorgesehen.

- Kluft-Matrix Systeme: Kluft-Matrix Interaktion, Kluftsyste-me (z. B. Grimsel-Scherzone), Porenraummodelle,
- Kopplung von Prozessen (systematisch zunehmende Komplexität): Hydraulik, insbesondere für Klufttrahigkeiten (stark heterogene Kluftöffnungs- und Permeabilitätsverteilungen, Konservativer Transport, Transport mit Zerfallsprozesse, Transport mit Sorptionsprozessen, Matrix-Diffusion, Matrix-Diffusion mit Zerfalls- und Sorptionsprozessen in der Matrix.
- Methoden-Vergleiche: Verschiedene numerische Verfahren (FVM, (X)FEM, MFEM, hybride Methoden), Numerische (PDE-basierte) und Partikel-Methoden.



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP8: Unsicherheitsanalyse - Strömungsmodelle

Bei Strömungsprozessen in klüftigen Medien ist die Annahme der Darcy-Bedingung oftmals fraglich, daher wurde die Genauigkeit von Strömungsmodellen in der Unsicherheitsanalyse untersucht. Drei Strömungsmodelle wurden verglichen, Darcy-, Forchheimer- und Navier-Stokes-Modelle, um die entsprechenden Grenzen für die Modellanwendungen zu bestimmen. Das Forchheimer-Modell wurde in OpenGeoSys implementiert und mit der Random-Walk-Partikel-Tracking Methode gekoppelt (Sun 2013). Für die Simulation von Navier-Stokes-Strömungen wurde das Programm OpenFOAM benutzt. Für die Navier-Stokes Simulationen war eine massive Parallelisierung erforderlich, die Modellläufe wurden auf einem Linux-Cluster mit bis zu 1000 CPUs ausgeführt (Naumov 2013). Für die Parallelisierung von OGS wurde eine Schnittstelle zur PETSc-Bibliothek implementiert.

#### AP9: Benchmarking

Für die in AP8 erfolgten Modellerweiterungen wurden weitere Benchmarktests entwickelt.

Die im A-DuR Vorhaben erarbeiteten Testbeispiele wurden auf mehreren Konferenzen und Workshops der Fachwelt vorgestellt und diskutiert, einige der Veranstaltungen wurden vom UFZ initiiert wie z. B. der DECOVALEX Workshop im Oktober 2012 in Leipzig. Weitere Veranstaltungen, die sich speziell mit Benchmarking numerischer Modelle beschäftigen und auf denen Ergebnisse des A-DuR Vorhabens präsentiert wurden, waren SSBench II (in Taiwan) sowie ein Adhoc Workshop von DoktorandInnen, die im Bereich reaktive Transportprozesse in porösen Medien ihre Doktorarbeiten anfertigen.

Insgesamt stehen nunmehr 17 Testbeispiele zur Verfügung, die verschiedene Strömungs-, Deformations- und Transport-(HMC) Prozesse in porösen und klüftigen Medien abbilden. Das A-DuR Benchmarking-Konzept wurde weiter konsequent systematisiert und hat Eingang in eine Buchpublikation für thermo-hydro-mechanisch-chemische (THMC) Prozesssimulationen gefunden (Kolditz et al. 2012). Eine erste Version des Abschlussberichtes für die Arbeitspakete AP8 (Unsicherheitsanalyse) und AP9 (Benchmarking) wurde erstellt und an die Projektleitung übergeben (Sun et al. 2012).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

In der abschließenden Projektphase wird der Abschlussbericht zum A-DuR Vorhaben fertiggestellt. Ein Teil der Projektergebnisse finden Eingang in die Doktorarbeiten von Frau Sun und Herrn Naumov. Die wissenschaftliche Verwertung der Projektergebnisse wird fortgeführt, in dem die Resultate auf Workshops präsentiert (z. B. DECOVALEX-2013, SSBench-III, CO2BENCH) und in Fachzeitschriften veröffentlicht werden. Eine zweite Auflage des Benchmark-Buches ist geplant, um die Ergebnisse des Vorhabens einem breiten Publikum in der Systematik des Buches (THMC Prozesse) zugänglich zu machen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kolditz O, Shao H, Görke U-J, Wang W (eds) (2012): Thermo-hydro-mechanical/chemical processes in porous media. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Vol. 86, Springer, Heidelberg, ISBN 978-3-642-27176-2.

Sun YY, Taron J, Watanabe N, Park C-H, Radu F, Kolditz O (2012): Abbildung von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung. 6<sup>th</sup> A-DuR Progress Report. Helmholtz Centre for Environmental Research UFZ.

Sun YY (2013): Random-Walk-Particle-Tracking (RWPT) methods for non-linear flows in porous and fractured media, PhD thesis, TU Dresden, Faculty of Environmental Science, submitted.

Naumov V (2013): Fluid flow in porous media: Numerical porescale modelling and visualization, PhD thesis, TU Dresden, Faculty of Environmental Science, to be submitted.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10608</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2008 bis 30.06.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.324.900,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 H<sub>2</sub>S und Hydrogensulfid in salinaren Lösungen bei 15 - 40 °C. Untersuchung der thermodynamischen Stabilität ausgewählter Schwermetallsulfide und –sulfidokomplexe.
- Kritische Literaturlauswertung zu kolligativen Eigenschaften von Hintergrundsalzen (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

Zur Bestimmung von  $\text{HS}^-$ -Aktivitätskoeffizienten in salinaren Lösungen wurde ein potentiometrisches Verfahren entwickelt, welches mit Hilfe von ionenselektiven Elektroden für Hydrogensulfid und Natrium die mittlere Aktivität von Natriumhydrogensulfid misst. Die Bestimmung der Zellkonstanten (Steigung, Standardzellpotential) erfolgt in verdünnten Natriumsulfidlösungen. Die Zelle kann dann zur Untersuchungen in konzentrierten Mischlösungen wie  $\text{NaHS-NaCl-H}_2\text{O}$  verwendet werden. Erste Messreihen mit  $\text{NaCl}$  als Hintergrundsalz bei  $25\text{ }^\circ\text{C}$  wurden bereits durchgeführt. Die  $\text{NaCl}$ -Konzentration variierte dabei zwischen  $0\text{-}5,89\text{ mol/kg}$ .

Zur Bestimmung temperaturabhängiger Ionenwechselwirkungskoeffizienten für Hintergrundsalze wurde das Programm Wotan ausgebaut, so dass nun auch Versuche zur Bestimmung von Auflösungs-, Verdünnungs- und Mischenthalpien ausgewertet werden können. Außerdem ist es nun möglich, die Messungen aus verschiedenen Versuchstypen (z. B. isopiestiche Messungen, thermische Messungen, Löslichkeitsversuche) automatisch anhand ihrer Messunsicherheiten zu gewichten, so dass sie mit gleichem relativem Gewicht in die Parameterbestimmung eingehen.

Im Rahmen der inhaltlichen Erweiterung des Projektes wurden Arbeiten zur Weiterentwicklung der thermodynamischen Datenbasis THEREDA vorgenommen. Hierzu gehörten:

- Titrationskurven von Phosphorsäure wurden mit erstellter Phosphatdatenbasis modelliert und die Auswirkungen von Hintergrundsalzen auf den Halbäquivalenzpunkt untersucht.
- Nach Veröffentlichung einer zweiten Publikation zum thermodynamischen Modell für Cäsium in hochsalinaren Lösungen wurden die Daten in der Datenbank THEREDA überarbeitet und Benchmark-Rechnungen durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Aufbau und Erprobung einer potentiometrischen Messapparatur für die Bestimmung von  $\text{HS}^-$ -Aktivitätskoeffizienten.
- Potentiometrische Bestimmung der mittleren Aktivität von K- und Na- Hydrogensulfid in Natrium- und Kaliumchloridlösungen zunächst bei  $25\text{ }^\circ\text{C}$ , anschließend bei  $15\text{ }^\circ\text{C}$  und  $40\text{ }^\circ\text{C}$ .
- Messungen des Dampfdrucks relevanter Hintergrundsalzlösungen.
- Weiterentwicklung des Werkzeugs zur Planung und Durchführung von Unsicherheitsanalysen von geochemischen Modellierungen.
- Anwendung der Phosphatdatenbasis auf publizierte Löslichkeitsdaten des Hydroxylapatits.
- Freigabe der Cäsium-Daten.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10618</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2009 bis 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 628.694,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Bernhard	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projektes ist es, Kenntnisse zur mikrobiellen Diversität im natürlichen Tongestein durch direkte molekular-biologische Methoden zu erhalten und den Einfluss identifizierter dominierender Bakterienpopulationen, nach Kultivierung entsprechender Isolate, auf das geo-chemische Verhalten der Actiniden (Uran, Plutonium, Curium) in diesem Tongestein zu untersuchen. Die Wechselwirkungsprozesse der ausgewählten Actinide mit Äspö-relevanten Biofilmen sollen aufgeklärt werden. Es werden Aussagen erstens zur Biodiversität, den dominierenden bakteriellen Populationen, und zweitens zu deren Wechselwirkungsprozessen mit den ausgewählten Actiniden erwartet. Innerhalb dieses Vorhabens soll das vorhandene biologische Know-how mit dem geo-chemischen Know-how zusammengeführt werden, um es effektiv hinsichtlich der Endlagerforschung zu nutzen.

Teilziel 1 des Vorhabens ist die direkte Untersuchung mikrobieller Diversität in Opalinus-Ton- und Porenwasserproben. Teilziel 2 ist die Kultivierung Opalinus-Ton spezifischer Bakterien. Teilziel 3 umfasst die Charakterisierung der Wechselwirkungen ausgewählter Bakterien-Tonisolat mit Actiniden.

Teilziel 4 beschäftigt sich mit der Untersuchung zu Wechselwirkungen von Biofilmen Äspö-relevanter Bakterien mit ausgewählten Actiniden.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Direkte Untersuchung mikrobieller Diversität in Opalinus-Ton- und Porenwasserproben

AP2: Kultivierung Opalinus-Ton spezifischer Bakterien

AP3: Untersuchung der Wechselwirkungen der Ton spezifischen Bakterien mit ausgewählten Actiniden

AP4: Untersuchung der Wechselwirkungen von Biofilmen Äspö-relevanter Bakterien mit Actiniden

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Isolierung von Bakterien vom Opalinuston-Porenwasser HTW3 auf 50 % R2A Medium (Isolatidentifizierung mittels Sequenzierung der 16S rRNA Gene), Isolierung der Gesamt-DNA vom Porenwasser HTW3, Amplifizierung der 16S rRNA Gene und Erstellung einer Klonbibliothek (Auswertung mit RFLP Analyse und Sequenzierung der 16S rRNA Gene); Analyse der Zellwandstrukturen mittels Aminopeptidasetest und der Substratverwertung der Isolate
- Auswertung der U(VI)/Eu(III)/Cm(III) Speziationsuntersuchungen mit *Sporomusa* sp. und *Paenibacillus* sp.
- Fortsetzung der TEM-Probenpräparation an den Ton-Isolaten und *P. fluorescens* mit Eu(III)/U(VI) sowie an *P. fluorescens* Biofilmen zum Nachweis der Immobilisierung von Eu(III) und U(VI)
- Beginn der Untersuchungen zur Wechselwirkung des Ton-Isolates *Sporomusa* sp. mit Pu
- Aktive Teilnahme am 10. Projektstatusgespräch zu BMWi- und BMBF-geförderten FuE-Projekten der Endlagerforschung und der Nuklearen Sicherheitsforschung: Vorstellung der Vorhabensergebnisse im Vortrag (Karlsruhe, 13./14.11.2012)

**Ergebnisse AP1 & AP2: Isolierung von Bakterien vom Porenwasser HTW3 auf 50 % R2A Medium:** nur Betaproteobakterien isoliert. Einige der 16S rRNA Gene waren zu 99 % identisch zum 16S rRNA Gen von *Ralstonia campinensis* Stamm WS2 und einige zu 99 % zum 16S rRNA Gen von *Acidovorax facilis* 228 (EU730927). **Auswertung der Klonbibliothek vom Porenwasser HTW3:** Alpha-, Beta-, und Gamma-Proteobakterien identifiziert. Alphaproteobakterien zu 99 % identisch zum 16S rRNA Gen von *Agrobacterium tumefaciens* NBRC 12667, Betaproteobakterien zu 99 % identisch zum 16S rRNA Gen von *Limnobacter* spp., Gammaproteobakterien zu 99 % identisch zum 16S rRNA Gen von *Pseudomonas stutzeri*. **Untersuchung der Zellwandstrukturen:** Aminopeptidasetest bestätigte bisherige Ergebnisse: bei *Paenibacillus* sp. kein Umsatz von L-Alanin-4-Nitroanilid = Gram-positiv, mit *Sporomusa* sp. erfolgte L-Alanin-Abspaltung = Gram-negativ. C-Quellen-Verstoffwechslung der Isolate mittels der API-20A-Gallerie sowie AN und GP2 Biolog-Mikrotiterplatten analysiert. *Sporomusa* sp. zeigte eine vom nächsten phylogenetischen Verwandten deutlich verschiedene Substratverwertung/Physiologie. *Paenibacillus* sp. hingegen verstoffwechselte nahezu dieselben Substrate wie *P. wynnii*. Mittels Titration die globalen pKs-Werte und Surface Site Densities von *Paenibacillus* sp.-Zellen bestimmt (Carboxyl-, Phosphoryl-, und Aminogruppen).

**Ergebnisse AP3 & AP4: U(VI) und *Sporomusa* sp.:** Mittels Titration wurden folgende U-Spezies ermittelt:  $\text{R-COO-UO}_2^+$ ,  $\text{R-O-PO}_3\text{-UO}_2^-$ ,  $\text{R-O-PO}_3\text{H-UO}_2^+$  und  $(\text{R-O-PO}_3)_2\text{-UO}_2^{2-}$ , U-Anbindung an Carboxylgruppen im Vergleich zu *P. fluorescens* stark zurückgedrängt, Emissionsmaxima der TRLFS-Spektren bestätigten steigenden Einfluss von Phosphorylgruppen an der U-Bindung. **U(VI) und *Paenibacillus* sp.:** Mittels Titration identifizierte U-Spezies:  $\text{R-COO-UO}_2^+$ ,  $\text{R-O-PO}_3\text{-UO}_2^-$ ,  $\text{R-O-PO}_3\text{H-UO}_2^+$  und  $(\text{R-O-PO}_3)_2\text{-UO}_2^{2-}$ . TRLFS-Untersuchungen bestätigten starke pH-Abhängigkeit der U-Speziation an der Zelloberfläche. TRLFS-Spektren bei pH 5 zeigten [U]-abhängig die Existenz unterschiedlicher U(VI)-Phosphoryl-Komplexe. Bestätigung der pH-abhängigen Freisetzung von anorg. Phosphat (Bildung von U(VI)-Phosphat-Spezies) durch TRLFS. **Cm(III) und *Paenibacillus* sp.:** EDTA-Extraktionen zeigten, dass bei pH 3 95 % und bei pH 8 nur 4 % Cm gebunden ist. Dies wies auf eine stark pH-abhängige Phosphataseaktivität hin. Eine reversible, biosorptive Bindung von Cm an die Zelloberfläche wurde festgestellt. TRLFS zeigte, dass der  $\text{R-O-PO}_3\text{H-Cm}^{2+}$ -Komplex dominiert. **Pu(VI)+Pu(IV)-Polymere und *Sporomusa* sp. (ohne Elektronendonator):** starke Wechselwirkungen von  $^{242}\text{Pu}$  mit den Zellen bei pH 6 ( $\sim 78 \text{ mg Pu/g}_{\text{dry}}$  weight), höhere Pu-Bindungs Kapazität der abgestorbenen Biomasse, Effizienz der Pu-Entfernung abhängig von  $[\text{Pu}]_{\text{initial}}$ , weniger Pu akkumuliert als U, Bioreduktion:  $\sim 57 \%$  des anfangs vorhanden Pu(VI) wurde infolge der Aktivität der Zellen innerhalb der ersten 24 h zu Pu(V) reduziert, gute Bindungseigenschaften von Pu(IV)-Polymeren an der Zellmembran, deutlicher Nachweis von Pu(III) und Pu(IV) an der Biomasse. **Eu(III) und *Sporomusa* sp.:** Mittels TEM/EDX konnte Eu(III) in den äußeren Schichten der Zellmembran als Eu(III)-Phosphate nachgewiesen werden, extrazelluläre Eu(III)-Phosphate nachgewiesen. **Eu(III) und *P. fluorescens* Biofilme:** Wiederholt konnte nur eine geringe bis keine Eu(III)-Wechselwirkung nachgewiesen werden (Inhibierung).

Die Dissertation „Interaction of selected actinides (U, Cm) with bacteria relevant to nuclear waste disposal“ wurde erarbeitet und wird zeitnah eingereicht.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Publikationen zusammenstellen (z. B.: Curium(III) and Europium(III) interactions with the Mont Terri clay isolate *Sporomusa* sp., Impact of the novel Mont Terri clay isolate *Paenibacillus* sp. on the U(VI) speciation, The effect of U(VI) on cultivated *Pseudomonas fluorescens* biofilms - Spectroscopic and microscopic evidence of U(VI) immobilization in cultivated *P. fluorescens* biofilms).
- Erarbeitung und Fertigstellung des Abschlussberichts des Vorhabens.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Lütke, L. et al.: Insights on the Uranium(VI) Speciation with *Pseudomonas fluorescens* on a Molecular Level. Dalton Trans. 41, 13370-13378 (2012)

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10639</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> 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)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2009 bis 31.10.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 283.149,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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**

AP3:

Eine Unsicherheit bei der Interpretation von Mess- bzw. Monitoring-Daten besteht prinzipiell darin, zu erkennen, ob ein Sensor einwandfrei arbeitet, oder ob das Signal, das er liefert, fehlerhaft ist. Dies ist im Falle einer Langzeitüberwachung, bei der Sensoren nach Verschluss des Endlagers im Grubengebäude verbleiben, von besonderer Bedeutung, da keine Zugangsmöglichkeit mehr zu den Sensoren besteht. Im Berichtszeitraum wurde der erstellte Berichts-entwurf, der die Möglichkeiten beschreibt, fehlerhafte Sensorsignale - ggf. automatisch - zu detektieren anhand der Kommentare der Projektpartner signifikant überarbeitet und zur finalen Prüfung an die Partner verschickt. Die durchgeführten Untersuchungen münden zum Beispiel in der Empfehlung, sogenannte eigensichere Sensorsysteme zu verwenden, die in der Lage sind, durch inhärente Fehlererkennungsmethoden technisch bedingte Änderungen des Messsignals zu erkennen und zu signalisieren. Solche Systeme werden derzeit in keinem der Untertagelaboratorien eingesetzt.

AP4:

Prinzipiell geht man davon aus, dass das Endlager eine prognostizierte und damit eine „erwartete“ Entwicklung durchläuft. Diese Entwicklung wird durch das sogenannte „Referenzszenarium“ charakterisiert. Abweichungen von dieser Entwicklung werden durch „alternative Szenarien“ abgebildet, die auch in ihrer Eintrittswahrscheinlichkeit bewertet werden. Basierend auf einem entwickelten modularen Monitoring-System zur Überwachung von als in der Nachverschlussphase relevant erachteten Parametern, wurde qualitativ untersucht, ob ein solches Monitoring-System in der Lage ist, Alternativszenarien, also Abweichungen von der prognostizierten Entwicklung, zu detektieren. Prinzipiell lassen sich etwa 2/3 der alternativen Szenarien detektieren.

Darüber hinaus wurde quantitativ am Beispiel eines Monitoring-Systems für einen Schachtverschluss aufgezeigt, dass unter bestimmten räumlichen und zeitlichen Bedingungen eine alternative Entwicklung des Schachtverschlussystems detektiert werden kann. Dabei wurde von einer Überwachungsperiode von 100 Jahren nach Verschluss des Endlagers ausgegangen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Inhaltliche Vorbereitung eines weiteren projektinternen Workshops, der von NDA in London ausgerichtet wird.
- Inhaltliche und organisatorische Vorbereitung der internationalen Abschlusskonferenz in Luxembourg.
- Erstellung von abschließenden Fachberichten.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10659</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2009 bis 31.03.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 84.968,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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-Dichteelementen, 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

Im Berichtszeitraum fand am 04. – 06.12.2012 in Gent (B) das FORGE-Jahrestreffen statt, wobei die bisherigen Labor-Ergebnisse als Vortrag zusammenfassend vorgestellt und diskutiert wurden. Gleichzeitig wurden die Kernaussagen und Zuarbeiten zum zusammenfassenden Abschlussbericht von WP3 diskutiert und zeitlich/inhaltlich abgestimmt.

AP3/4: Die Labortests mit definierter Aufsättigung von Bentonitformsteinen (Bentonit/Sand-Mischung) mit unterschiedlichen Injektions- und Probengeometrien in den im Rahmen des Vorhabens neu konstruierten Durchströmungszellen sind abgeschlossen.

Während in einer ersten Serie (AP3) sich die Untersuchungen auf Bentonit/Bentonit-Kontaktflächen konzentrierten, wurden als 2. Serie (AP4) die Kontaktflächen Bentonit/Granitkontur untersucht. Dabei wurden unterschiedliche Belastungskonstellationen realisiert: (1) Volumenkonstantes Quellen mit Bestimmung des maximalen Quelldrucks und (2) behindertes Quellen mit Vorgabe einer definierten mechanischen Belastung der Kontaktfläche. Die im Langzeitversuch (Versuchszeit: 300d) mit Wasser bestimmten Quelldrücke liegen bei 8 MPa, wobei auch bei Injektionsdrücken von wenigen bar mit Injektion über die Kontaktfläche das Material weiter quillt, d. h. Wasser aufnimmt.

Die Injektionstests an den Bentonit/Granit-Interfaces zeigen anfänglich eine hohe hydraulische Durchlässigkeit der Kontaktfläche, die infolge der durch Plastifizierung möglichen Setzung der Proben und durch Nachquellen innerhalb weniger Monate abgedichtet wird. Diese Kontaktflächen stellen aber nach wie vor hydraulische Schwächeflächen auch für den Gastransport dar.

AP5: Mittels direkter Schertests wurden die mechanischen Eigenschaften der Kontaktflächen zwischen Bentonit/Bentonit, Bentonit/Granit für die Zustände „dry/wetted/saturated“ bestimmt, wobei die resultierenden Kohäsionswerte und Reibungswinkel erwartungsgemäß sehr unterschiedlich sind. Als Highlight wurde für Bentonit/Bentonit-Trennflächen der in den Gasinjektionstests dokumentierte Prozess einer „Verheilung“ über den Nachweis einer Kohäsion von ca. 0,6 MPa in den ehemaligen Trennflächen mit den aktuellen Versuchsergebnissen bestätigt.

AP6: Die ursprünglich geplante Rückrechnung der Injektionstests unter Verwendung des neu am IfG entwickelten Trennflächen- und Perkolationsmodells zur Fluidausbreitung ließ sich nicht erfolgreich umsetzen, da die Aufsättigung und Plastifizierung der Bentonitmatrix nicht angemessen wieder gegeben wird. Hier werden Vorschläge für alternative Ansätze dargestellt.

AP7: Für die Abschlussveranstaltung des Forge-Vorhabens (Luxembourg, 5-7 Februar 2013) wurden zwei Beiträge eingereicht, die jeweils als Vorträge akzeptiert wurden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP7: Erstellung der Abschlussdokumentation für das Vorhaben:

- Zuarbeitung der wesentlichen Kernaussagen für den gemeinsamen Endbericht von Work package 3: Engineered barrier and seals.
- Darstellung der Ergebnisse für den eigenen Endbericht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Popp T., Röhlke, 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" (5<sup>th</sup> Int. Meeting, Montpellier, 22-25.10.2012), pp. 696/697.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10669</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2009 bis 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 263.900,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Wechselwirkung zwischen Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen sowie der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erreichen. Auf dieser Basis soll die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation bewertet werden. 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: Experimentelle Arbeiten (INE)
  - AP1.1: Laborprogramm zu Mechanismen der Kolloid-RN-Kluftmineral-Wechselwirkung
  - AP1.2: In-situ-Experimente zur kolloidgetragenen RN-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/INE)
  - AP2.1: Parametrisierung von TRAPIC (GRS)
  - AP2.2: Vorausberechnung für das CFM Experiment (GRS)
  - AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
  - AP2.4: Modellrechnungen zum Standort Äspö (GRS)
  - AP2.5: Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen (INE)
- AP3: Integration und Abschlussdokumentation (GRS/INE)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Durchführung weiterer Modellrechnungen zum Dipolexperiment 12-02 und Diskussion der wesentlichen Effekte. Eine weiterführende Auswertung erfolgt im Rahmen des Vorhabens Kolorado-e, sobald die vollständigen Datensätze vorliegen.

Durchführung erster Testrechnungen zum Dipolexperiment CFM RUN 10-01 mit dem neuentwickelten Rechenprogramm GEOTREND-FC, das den eindimensionalen, kolloidgetragenen Schadstofftransport durch offene Klüfte mit Matrixdiffusion der Schadstoffe berücksichtigt.

AP3: Erarbeitung eines Papers „Impact of bentonite colloids on radionuclide transport in fractured systems – results from field experiments and modeling“ und Vorstellung im Rahmen eines Vortrags auf der Eurosafe Conference.

Erarbeitung eines ersten Entwurfs für den gemeinsamen Bericht mit den Simulationsergebnissen der Modellierer-Gruppen aus Schweden USA und Deutschland.

Fertigstellung des Abschlussberichts.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

(Weitere Modellrechnungen zu geplanten Dipolexperimenten und einem integrierten Experiment in der Scherzone im Felslabor Grimsel werden im Nachfolgevorhaben Kolorado-e durchgeführt.)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Noseck, U.; Flügge, J.; Schäfer, Th.; Blechschmidt, I.: Impact of bentonite colloids on radionuclide transport in fractured systems – results from field experiments and modeling. Proceedings of the Eurosafe Conference, 05. - 06. November 2012 in Brussels.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10679</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2009 bis 31.12.2012		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 488.918,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Schäfer

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Der Kenntnisstand zur Kolloidproblematik, speziell zur Prognostizierbarkeit der Kolloidstabilität und Kolloid-Mineraloberflächen-Wechselwirkung hat in den letzten Jahren nicht zuletzt durch das Vorgängerprojekt KOLORADO sehr große Fortschritte gemacht und wir können z. B. die Stabilität kolloidaler Phasen mittels elektrostatischer Modellansätze beschreiben. Weiterhin wurden qualitative Daten zur Erosion der Bentonitbarriere generiert, die bisher nicht im Widerspruch zu den Kolloidstabilitäts-Arbeiten stehen. Alle Daten zum kolloidgetragenen Radionuklidtransport weisen auf eine starke Abhängigkeit der Kolloidmobilität von der Klufengeometrie hin, wobei drei- und vierwertige Actinide und ihre Homologe zu 90-99 % von der Oberfläche der Kolloide unter den bisher untersuchten Verweilzeiten dissoziieren.

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 Modelle. Die Arbeiten der GRS fokussieren sich auf die Anwendung, Weiterentwicklung und Qualifizierung von Rechenprogrammen für die Langzeitsicherheitsanalyse.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelle Arbeiten (INE)
- AP1.1: Mechanismen der Kolloid-Radionuklid-Kluftmineral Wechselwirkung
- AP1.2: Kolloidgetragene Radionuklid-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/INE)
- AP2.1: Simulationsrechnungen für die Säulenexperimente (GRS)
- AP2.2: Simulationsrechnungen für die CFM Homolog- Experimente (GRS)
- AP2.3: Simulationen für den Mock-Up Test und das integrale CFM Experiment (GRS)
- AP2.4: Bewertung des kolloidgetragenen Radionuklidtransports (GRS)
- AP2.5: Numerische Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen im Kristallin (INE)
- AP3: Integration und Abschlussdokumentation (Executive Summary) (GRS/INE)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Unter anderem auf Grund der Schwierigkeiten der Durchführung des geplanten experimentellen Programms im Felslabor Grimsel im Rahmen des *Colloid-Formation and Migration* (CFM)-Projekts wurde das Projekt kostenneutral bis zum 31.12.2012 verlängert. Folgende Arbeiten wurden im Berichtszeitraum durchgeführt:

**AP1: Status:** Die Arbeiten zum Einfluss von Oberflächenrauigkeit und Ladungs-Heterogenitäten auf die Kolloidmobilität wurden weitergeführt. Diese Arbeiten sind durch Veröffentlichung in den „peer reviewed“ Journa-

len *Langmuir*, *ES&T* und *Am. J. Sc.* dokumentiert. Spezieller Fokus der Arbeiten von Herrn Dr. Darbha lag im letzten Halbjahr auf der Messung von AFM Kraft-Abstandskurven, hier speziell mittels der Kolloid-Probe Technik, wobei für die Simulation der Tonmineralkante  $\text{Al}_2\text{O}_3$  Kolloide benutzt wurden. Die Ergebnisse werden momentan in einem Manuskript zusammengefasst.

Schwerpunkt der Arbeiten des 2. Halbjahres 2012 lag weiterhin auf der Analyse des ersten CFM Radionuklid-Experimentes im Felslabor Grimsel (a) und Laborstudien zur Machbarkeit der Radionuklidmarkierung für die Platzierung des kompaktierten Bentonits im „long term in situ Test“ (b). Die RN - Sorptionsexperimente zu synthetischem strukturell markiertem Montmorillonit (Zn, Ni) in Kollaboration mit Univ. Nancy und Univ. Mulhouse sind abgeschlossen. Diese Ergebnisse wurden auf der *International Clay Conference in Montpellier* präsentiert und ein Manuskript wird zeitnah eingereicht.

- (a) Die ersten 96 Proben des Radionuklid-Experiments (Run 11-02 gestartet im Februar 2012) mit direkter Injektion der Radionuklide  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{133}\text{Ba}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{232}\text{Th}$ ,  $^{237}\text{Np}$ ,  $^{242}\text{Pu}$  und  $^{243}\text{Am}$  wurden erfolgreich mittels HR-ICP-MS analysiert. Die Kolloiddetektion erfolgte direkt vor Ort mittels der am INE entwickelten mobiler LIBD Anlage und zeigte einen Kolloid- Wiedererhalt von ca. 66 %. Im Vergleich hierzu konnte über den zugesetzten synthetischen Ni- Montmorillonit ein Kolloidwiedererhalt von 34-37 % ermittelt werden. Die Ergebnisse zeigen neben dem Kolloiddurchbruch die Detektion von allen eingesetzten Radionukliden trotz einer um den Faktor 70 erhöhten Verweilzeit im Vergleich zum CRR Projekt. Für die im Injektionscocktail quantitativ kolloidassoziierten Actiniden  $^{242}\text{Pu}$  und  $^{243}\text{Am}$  konnte ein Wiedererhalt von 28-32 % bzw. ~16 % ermittelt werden. Die Quantifizierung der  $^{232}\text{Th}$  Mobilität gestaltete sich analytisch als äußerst schwierig, da die natürliche  $^{232}\text{Th}$  Hintergrundkonzentration eine exakte Bestimmung des Wiedererhalts stark beeinflusst, obwohl eine Durchbruchskurve gemessen werden konnte. Das im Cocktail nicht kolloidassoziierte  $^{237}\text{Np(V)}$  zeigt hingegen nur einen Wiedererhalt von 3-4 % auf Basis der bisher analysierten Proben, wobei dieser Wert auf Grund des starken Tailings der Durchbruchskurve zu höheren Werten nach Abschluss aller Analysen korrigiert werden wird. Für die eingesetzten schwach sorbierenden Tracer  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  und  $^{133}\text{Ba}$  konnten Wiedererhalte von ~64 %, ~10 % und ~0.1 % ermittelt werden.
- (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. Die momentan gewählte zylindrische Geometrie mit definierter Kluft- Apertur und direkter Messung der fluidgeschwindigkeitsabhängigen Kolloidfreisetzung mittels LIBD erlaubt weiterhin unter Berücksichtigung der Kontaktfläche den direkten Vergleich der Erosionsraten mit dem von SKB publizierten Erosionsmodell (Report TR-10-64).

**AP2.5: Status:** Sensitivitätsrechnungen zum Einfluss der Probennahme aus den zusätzlichen Monitoring- Bohr- löchern im Nahfeldbereich des Injektionsbohrlochs 06.001i2 auf das Fließfeld wurden abgeschlossen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP3: Die Integration der Arbeitspakete und die Abschlussdokumentation werden fristgerecht fertig gestellt. Neben diesem als KIT Scientific Report Bericht erscheinenden Abschlussbericht wird vor allem die Publikation in wissenschaftlichen Zeitschriften mit peer-review Verfahren angestrebt (siehe Berichte & Veröffentlichungen)  
Die geplanten Weiterarbeiten sind in dem Fortsetzungsantrag (KOLLORADO-e) ausführlich dargelegt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

- Darbha, Fischer, Michler, Lützenkirchen, Schäfer, Heberling, Schild (2012) *Langmuir*, 28, 6606-6617.
- Darbha, Fischer, Lützenkirchen, Schäfer (2012) *ES&T*, 46, 9378-9387.
- Fischer, Michler, Darbha, Kanbach, Schäfer (2012) *Am. J. Sci.*, 312, 885-906.
- Schäfer, Huber, Seher, Missana, Alonso, Kumke, Claret, Enzmann (2012) *Appl. Geochem.* 27(2), 390-403.
- Huber, Enzmann, Wenka, Bouby, Dentz, Schäfer (2012) *J. Contam. Hydrol.*, 133 40-52.
- Huber, Schild, Vitova, Rothe, Kirsch, Schäfer (2012), *Geochim. Cosmochim. Acta* 96, 154-173.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10689</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2009 bis 31.12.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.003.689,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 die Retentionskurve sowie die Permeabilität gegenüber Gas im Einbauzustand ( $2.1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2$ ) und gegenüber Wasser im gesättigten Zustand ( $1.2 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2$ ) ermittelt.
- AP2: Der Erhitzerversuch HE-E läuft seit 28.06.2011 weitgehend störungsfrei und die Messdaten werden laufend registriert.
- AP3/AP4: Die Rechenfälle und Modellvarianten für die Langzeitextrapolation wurden festgelegt. Für die Auswertung der experimentellen Daten und der Modellierungsfälle für die Langzeitsicherheitsbetrachtung wurde ein Fragenkatalog aufgestellt und die Struktur des AP4-Berichts vereinbart.

#### 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 vorbereitende Arbeiten 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.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10699</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt KIT: Thermodynamische Datenbasis für Radionuklide		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2009 bis 31.03.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 444.095,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Np(V)-Daten in NaCl-Lösungen bei 298.15K (Elemente: Np, OH, H, Na, Cl) wurden die Benchmark-Rechnungen mit dem Code EQ3/6 durchgeführt und das Benchmark-Dokument erstellt. Die Abweichungen der Rechnungen mit den Codes ChemApp, Phreeqc, GWB und EQ3/6 für dieses Release sind vernachlässigbar. Ein Vergleich der Ergebnisse mit experimentellen Daten zeigt, dass die experimentellen Unsicherheiten deutlich größer sind, als die Unterschiede mit den verschiedenen Codes. Für das geplante Cs-Benchmark wurden die Rechnungen mit EQ3/6 durchgeführt und die Ergebnisse im Benchmark-Paper dokumentiert.

Aufgrund einer neuen IUPAC-Veröffentlichung von Daten für Calcit und gelöstes Carbonat (De Visscher et al. 2012), wurden die Einträge für Carbonat in THEREDA angepasst. Die Wechselwirkungen von Actiniden mit Karbonatanionen waren bisher mit dem vorherigen Datensatz abgeleitet worden. Die Auswirkungen der leicht veränderten Daten wurden nach intensiven Testrechnungen als vernachlässigbar eingeschätzt im Vergleich zu den experimentellen Unsicherheiten.

Die thermodynamischen Daten von Th(IV), Np(IV) und Pu(IV) wurden nochmals abschließend für Chlorid- und Karbonat-Lösungen begutachtet. Die selektierten Daten – Stabilitätskonstanten und Pitzerparameter – wässriger Spezies und Festphasen von Th(IV) und Pu(IV) wurden in THEREDA eingegeben. Für das Th(IV) wurde ein vereinfachtes geochemisches Modell übernommen, basierend auf Publikationen von Rai und Kollegen. Dieses Modell berücksichtigt  $\text{Th}^{4+}$ , als einzige wässrige Hydrolysespezies  $\text{Th}(\text{OH})_4(\text{aq})$  sowie als Festphasen  $\text{ThO}_2(\text{am})$  und  $\text{ThO}_2(\text{cr})$ . Für diese Spezies wurde von Rai et al. ein in sich konsistenter thermodynamischer Datensatz für das Pitzer-Modell abgeleitet. Mit diesen Daten lässt sich die Löslichkeit von Th(IV) in bis zu 5 M NaCl-Lösungen gut beschreiben. Für die Beschreibung von Th(IV) in Karbonatlösungen wurden die Spezies  $\text{Th}(\text{CO}_3)_5^{6-}$ ,  $\text{Th}(\text{OH})_3(\text{CO}_3)^-$  mit deren Stabilitätskonstanten und Pitzer-Wechselwirkungskonstanten zur Datenbasis hinzugefügt. Weiterhin wurde das chemische Modell um den Komplex  $\text{Ca}_4[\text{Th}(\text{OH})_8]^{4+}$ , der in  $\text{Ca}^{2+}$ -haltigen Wässern mit hohen pH-Werten gebildet werden kann, erweitert. Für Pu(IV) wurden die Hydrolyse-Spezies  $\text{Pu}(\text{OH})^{3+}$ ,  $\text{Pu}(\text{OH})_2^{2+}$ ,  $\text{Pu}(\text{OH})_3^+$ ,  $\text{Pu}(\text{OH})_4(\text{aq})$  und  $\text{PuO}_2(\text{am, hyd})$  berücksichtigt. Die Stabilitätskonstanten wurden aus der NEA-TDB übernommen, mit der Erweiterung der Pitzer-Parameter von Neck et al. Weiterhin wurden die Spezies  $\text{Pu}(\text{CO}_3)_4^{4-}$ ,  $\text{Pu}(\text{CO}_3)_5^{6-}$ ,  $\text{Pu}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$  und analog zum Th(IV)  $\text{Ca}_4[\text{Pu}(\text{OH})_8]^{4+}$  selektiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Benchmark-Rechnungen für die tetravalenten Actiniden bzw. Dokumentation aller Arbeiten im Abschlussbericht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10709</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2009 bis 31.03.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 178.770,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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/Rossendorf 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 Datenbanken 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-SO<sub>4</sub>-Cl-H-OH-H<sub>2</sub>O) werden *in diesem Vorhaben auch die Carbonate der Alkali- und Erdalkalimetalle sowie die Gleichgewichte mit CO<sub>2</sub> im gleichen Temperaturbereich konsistent eingearbeitet. Dabei wird auch die Abhängigkeit der Löseseleichgewichte vom CO<sub>2</sub>-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<sup>+</sup>-K<sup>+</sup>-Mg<sup>2+</sup>-Ca<sup>2+</sup>-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>-Cl<sup>-</sup>-H<sup>+</sup>-OH- HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>-CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O 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 CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> 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 – CO<sub>2</sub> - 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 CO<sub>2</sub> und CaCO<sub>3</sub> 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-Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>-CaCO<sub>3</sub>-MgCO<sub>3</sub>-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O in einem Temperaturbereich zwischen 0 – 100 °C und CO<sub>2</sub>-Drucken bis 300 bar. Für Lösungen mit wesentlichen Gehalten an Sulfat, Kalium und Calcium (hohe CaCl<sub>2</sub>-Konzentrationen) fehlen experimentelle Daten zur Ableitung der Pitzer-Parameter.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Interne Technische Berichte - THEREDA.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10719</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2009 bis 31.08.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.293.390,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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: Die Modellierung der Grundwasserströmung im Deckgebirge über dem Salzstock Gorleben wurde exemplarisch für ein zweidimensionales Profil durchgeführt und in einem Bericht beschrieben. Für die dreidimensionale Modellierung wurde eine Vorgehensweise entwickelt, wie sehr komplexe Datensätze in d<sup>3</sup>f umgesetzt werden können. Es wurde ein erster Gesamtentwurf des Berichtes zu den geochemischen Rechnungen erstellt.
- AP4: Es wurde ein erster Entwurf des Berichts mit dem Titel „Aspects on the gas generation and migration in repositories for high level waste in salt formations“ (GRS-303) erstellt und den Projektpartnern zur Kommentierung zur Verfügung gestellt. Das Positionspapier der IGSC zum Thema „Relevance of gases in the post-closure Safety Case – An IGSC Position Paper“ wurde weiter bearbeitet.
- AP5: Die Struktur des Grubengebäudes und die im ersten Halbjahr aktualisierten Eingabedaten wurden an die im Projekt ADEMOS (FKZ 02E10367) entwickelte Benutzeroberfläche XENIA angepasst. Die in AP5 geplanten Rechnungen können nun über diese neue Oberfläche eingegeben und gestartet werden. Durch die Anpassung an XENIA können die im Projekt ADEMOS neu entwickelten Statistikwerkzeuge für die Auswertung der Rechnungen eingesetzt werden.
- AP6: Die Auswertung der Literatur und die Einbeziehung von Fachleuten zu den identifizierten Natürlichen Analoga wurden fortgeführt. Auf dem von der GRS organisierten internationalen NEA-Workshop zu Natürlichen Analoga in Salz vom 04.09. bis 06.09.2012 in Braunschweig wurden die bisherigen Ergebnisse aus AP6 vorgestellt und diskutiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Die Berichte zu den hydrogeologischen und geochemischen Rechnungen werden im Laufe des ersten Halbjahres 2013 fertiggestellt.
- AP4: Der Abschlussbericht zum AP4 wird fertig gestellt und veröffentlicht. Das Positionspapier der IGSC soll in einer Präsentation auf der Abschlusstagung des EU-Projekts FORGE vorgestellt und Ergebnisse aus FORGE in das Papier eingearbeitet werden.
- AP5: Mit dem an XENIA angepassten Grubengebäude und den entsprechenden Eingangsdaten wird 2013 eine Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums durchgeführt. Verwendet werden dafür die im Projekt ADEMOS neu entwickelten Statistikwerkzeuge.
- AP6: Die Auswertung der Literatur zu den identifizierten Natürlichen Analoga wird abgeschlossen und daraufhin der Stand dieser Analoga bewertet. Auf der Grundlage dieser Bewertung wird eine Vorgehensweise (notwendige Schwerpunkte, mögliche Projekte) zur zukünftigen Behandlung Natürlicher Analoga im Langzeitsicherheitsnachweis erstellt. Ergebnisse des Projektes werden auf dem NAWG Workshop vom 12.-16. Mai in Nagoya vorgestellt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10729</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2009 bis 31.08.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 908.996,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 die Unterpunkte „gebirgsmechanische Berechnungen“ und „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. Für die Berechnungen wurden die Programmbausteine so gekoppelt, dass eine hohe Anzahl von Realisationen durchgeführt werden konnte. Die TUC-Berichte zu den Berechnungsergebnissen sowie zu den langen Nachweiszeiträumen wurden durch DBE TEC geprüft, kommentiert und mit der Bitte um Überarbeitung an die TUC übermittelt.

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.

Es wurde damit begonnen, die durchgeführten Berechnungen und die Ergebnisse in einem Bericht zu dokumentieren.

AP7 (Abschlussbericht):

Mit den Projektpartnern BGR und GRS wurde das Konzept für die Erstellung des Abschlussberichtes diskutiert und abgestimmt. 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.

### 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. 3<sup>rd</sup> US/German Workshop on Salt Repository Research, Albuquerque, October 9, 2012.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10730</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2010 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 463.328,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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:

Zur Durchführung mikrostruktureller Untersuchungen wurden Dünnschliffe von Proben angefertigt, die auf unterschiedliche Weise kompaktiert wurden. Die Unterschiede bestanden in der Temperatur, der Belastungsdauer und der Zugabe von Feuchtluft und Salzlösung. Ein bedeutender Unterschied zeigte sich bei den Proben mit und ohne Zugabe von Salzlösung. Im letzteren Fall ist der feinkörnige Strukturbereich nicht mehr in der Weise zu erkennen, wie bei



den trocken kompaktierten Proben. Offensichtlich hat die Zugabe von 1,2 % Salzlösung während der Kompaktion dazu geführt, dass im feinkörnigen Bereich die kleinen Körner miteinander zu größeren Körnern „verbacken“, so dass der Anteil feiner Poren in dem Bereich deutlich reduziert ist. Während in den trocken kompaktierten Proben mehr oder weniger deutlich zu sehen ist, dass das zur Porenvisualisierung verwendete Harz netzwerkartig die Probe durchzieht, lässt sich ein solches Netzwerk bei der feucht kompaktierten Probe nicht erkennen. Wohl aber sind hier und da lokale „Hot Spots“ zu erkennen, die in der zweidimensionalen Dünnschliffaufnahme nicht als vernetzt zu erkennen sind. Inwieweit diese „Hot Spots“ durch ein 3-D-Porensystem eventuell verbunden sind, kann noch nicht beurteilt werden.

AP3:

Mit Hilfe des Particle-Flow-Codes (PFC) wurde damit begonnen ein dreidimensionales Strukturmodell zu erzeugen, mit deren Hilfe die Nachbildung von Kompaktionsversuchen im Korngrößenmaßstab möglich ist. Die Darstellung von eckigen Körnern (z. B. Salzgruskörnern) mittels Kugeln ist jedoch mit Problemen verbunden, da bestimmte physikalische Effekte wie z. B. Verzahnungen zwischen Körnern mit einfachen Kugeln nicht realisierbar sind. Um die Kornform von Salzgrusmaterial realitätsnäher abbilden zu können, wurden Clustermodelle entwickelt. Bei den Clustern handelt es sich um einen Zusammenschluss mehrerer Kugelelemente, die somit einen neuen, beliebig komplexen Elementarbaustein aufbauen. Da die Kugeln innerhalb eines Clusters durch Kontaktgesetze miteinander verbunden sind, ist wiederum eine Verformbarkeit der Gebilde (Körner) erreichbar. Das Materialverhalten der Cluster wurde anschließend an einem Druckversuch im Labor kalibriert. Zur Bestimmung der verbleibenden Porosität zwischen den Clustern nach der Kompaktion wurde eine entsprechende Software-Routine entwickelt.

#### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP2.8:

Durchführung weiterer mikrostruktureller Untersuchungen an kompaktierten Salzgrusproben. Durchführung von Bildanalysen zur Visualisierung und Analyse des Porenraums. Diese Analysen sollen mit verschiedenen Verfahren durchgeführt werden, um herauszufinden, mit welchem Verfahren die besten Ergebnisse bei den vorliegenden Proben erzielt werden kann. Das am besten geeignete Verfahren soll dann bei den Proben zum Einsatz kommen, die zurzeit noch im Rahmen von Kompaktionsversuchen im Labor erzeugt werden.

AP3.4:

Simulation eines Oedometersversuchs im kleinen Maßstab und Vergleich der rein elastischen Lösung mit einem Kontinuummodell.

#### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10740</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2010 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.115.960,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kröhn	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Die Langzeitkompaktionsversuche bei trockener Atmosphäre und unterschiedlicher Anfangsfeuchte verlaufen weiterhin weitgehend zufriedenstellend. Nach Erhöhung der Temperatur von 30 °C auf 60 °C stellte sich in der Zelle mit der getrockneten Probe ein Defekt ein, der eine Temperaturerhöhung über ca. 57 °C verhindert. Damit bleiben die Ergebnisse noch bis Dezember 2012 vergleichbar mit den Messungen der anlieferungsfeuchten Probe. Danach wurde die Temperatur für die anlieferungsfeuchte Probe auf 90 °C erhöht, um wenigstens in dieser Probe eine Beschleunigung des Kompaktionsvorgangs zu erreichen.

Nach einer hausinternen Diskussion mit den Mitgliedern aus der VSG wurde festgestellt, dass die ursprüngliche Idee einer THM-Modellierung eines Streckenabschnitts hinter dem Streckenverschluss immer noch von aktuellem Interesse ist. Die ursprünglichen Annahmen aus AP1 werden für die Modellierung angepasst. Eine dazu passende Temperaturverteilung und -entwicklung wurde ebenfalls definiert. Damit fehlen für eine vollständige THM-Rechnung nur noch Daten zur ungesättigten Strömung im kompaktierenden Salzgrusversatz.

Als Ersatz für den geplanten Auspressversuch wurde ein triaxialer Kompaktionsversuch mit 4 unterschiedlich feuchten Proben skizziert, der die Ergebnisse des Langzeitkompaktionsversuchs hinsichtlich der Abhängigkeit der Kompaktion von der Feuchtigkeit und vom Spannungszustand ergänzen würde.

Der Versuch zur Langzeitkompaktion in verschieden feuchter Atmosphäre wurde fortgesetzt. Nachdem die Proben in Kontakt mit Luft hoher Luftfeuchtigkeit gebracht wurden, war ein deutliches Nachgeben des Versatzes zu beobachten.

Numerische Untersuchungen zum Kompaktionsverhalten von trockenem Salzgrus im Oedometerversuch lieferten mit den an Bambus II-Experimenten kalibrierten Werten bei der Simulation einiger Laborversuche der BGR unterschiedlich zufriedenstellende Ergebnisse. Die Parameter der Stoffmodelle wurden daraufhin anhand des Langzeitkompaktionsversuchs erneut bestimmt.

Anschließend wurde die bis zum Ende der Projektlaufzeit erreichbare Porosität im Langzeitkompaktionsversuch modellhaft prognostiziert. Die Rechnungen lassen erwarten, dass die Porosität der stark angefeuchteten Probe im Projektzeitraum deutlich unter 5 % fallen wird, dass aber für die trockeneren Proben lediglich ein Wert von ca. 12 % erreichbar ist. Aus diesem Grund wurde die Temperatur für die trockenen Proben ein- bzw. zweimal erhöht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung des Langzeitkompaktionsversuchs in trockener Atmosphäre
- Fortsetzung des Feuchtekompaktionsversuchs
- Konzipierung und Inbetriebnahme des Ersatzversuchs
- Beginn orientierender THM-Rechnungen zum Laugenzutritt in der Strecke

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10750</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 31.01.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 323.370,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Wolf	

## 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 5 und 6.

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Die Ergebnisse der im ersten Halbjahr 2012 durchgeführten aktualisierten sicherheitsanalytischen Rechnungen und Modellierung der Grundwasserströmung und des Schadstofftransportes wurden auf dem Projekttreffen am 11.07. und 12.07.2012 in Peine vorgestellt und gemeinsam mit den Projektpartnern diskutiert.

Aufgrund der Diskussion wurden im September von VNIPI PT weitere hydrologische und hydrogeologische Daten zur Verfügung gestellt, die daraufhin in den vorhandenen Modellen berücksichtigt wurden. Die neuen Ergebnisse wurden auf dem Projekttreffen am 22.11. und 23.11.2012 in Moskau vorgestellt.

Es wurde beschlossen, die hydrologische Datenbasis, die auf dem Treffen in Moskau abgestimmt wurde, und die darauf aufbauenden angepassten konzeptionellen Modelle für die abschließenden sicherheitsanalytischen Rechnungen und die Modellierung der Grundwasserströmung und des Schadstofftransportes im Jahr 2013 zu Grunde zu legen.

Das für die Modellrechnungen in URSEL eingesetzte EMOS-Nahfeldmodul CLAYPOS wurde an die neue Benutzeroberfläche XENIA angepasst. Die abschließenden sicherheitsanalytischen Rechnungen können nun über diese neue Oberfläche eingegeben und gestartet werden. Durch die Anpassung an XENIA können die im Projekt ADEMOS (FKZ 02E10367) neu entwickelten Statistikwerkzeuge für die Auswertung der Rechnungen eingesetzt werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Im Jahr 2013 werden die sicherheitsanalytischen Rechnungen und die Modellierung der Grundwasserströmung und des Schadstofftransportes abgeschlossen. Um die neue hydrologische und hydrogeologische Datenbasis und die darauf aufbauenden aktualisierten Konzepte bei der Modellierung berücksichtigen zu können, ist ein neues Modell in  $d^3f/r^3t$  zu erstellen. Da für das Jahr 2013 eine Aufstockung bewilligt wurde, können diese Arbeiten im Jahr 2013 durchgeführt werden. Erste Ergebnisse der neuen Modelle sollen auf dem nächsten Projekttreffen im Mai vorgestellt werden.

Des Weiteren wird im ersten Quartal 2013 im Projekt ADEMOS das in URSEL eingesetzte EMOS-Fernfeldmodul CHETMAD in einen neuen Programmcode GeoTREND-F umgesetzt und an die Eingabeoberfläche XENIA angepasst. Die bisherigen Rechnungen in URSEL werden als Testfall für den Vergleich zwischen CHETMAD und GeoTREND-F verwendet. Nach erfolgreichem Vergleich werden die sicherheitsanalytischen Rechnungen in URSEL mit GeoTREND-F fortgesetzt. Durch die Anpassung von CLAYPOS und CHETMAD wird gewährleistet, dass diese Rechnungen mit den in der GRS neu entwickelten Statistikwerkzeugen ausgewertet werden können.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10760</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 31.01.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 506.233,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

AP4:

Seitens des russischen Projektpartners wurde erneut ein überarbeitetes Konzept 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. Die Berechnungsergebnisse zeigen, dass alle thermischen Grenzkriterien weiterhin eingehalten werden. Die Ergebnisse wurden in einem „Technical Report“ in englischer Sprache dokumentiert und dem russischen Partner übergeben.

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 und diese gegebenenfalls vergrößert. Um diese Frage zu untersuchen, wurde zunächst ein einfaches numerisches Modell entwickelt, das hinsichtlich der Streckengeometrie auf dem aktuellen Endlagerdesign der russischen Kollegen basiert. Dieses Modell wurde dann mit einer dynamischen Randbedingung belastet. Diese bestand aus einer sinusförmigen seismischen Welle, die die Geschwindigkeit der Verschiebung (Partikelgeschwindigkeit) am Modellrand beschreibt. Die Spannungen, die sich innerhalb des Modells ausbilden und gegebenenfalls zu Verformungen und damit zu Schädigungen im Bereich einer Streckenkante führen, sind abhängig von den seismischen Wellengeschwindigkeiten. Die ersten Testberechnungen zeigten ein leicht geändertes Schädigungsbild der Auflockerungszone.

AP7:

Im Rahmen der Projektkoordination erfolgte die Vorbereitung und Durchführung eines weiteren deutsch-russischen Arbeitstreffens in Moskau am 22. und 23.11.2012. Neben einem Gespräch mit dem neu gegründeten Endlagerbetreiber NO.RAO wurden mit VNIPI PT sowohl die neuerlich durchgeführten Berechnungen zur Temperaturentwicklung basierend auf dem aktualisierten Endlagerdesign vorgestellt und diskutiert als auch die bisherigen Ergebnisse der Simulation Erdbeben-induzierter Schädigungen einer Auflockerungszone. Seitens der Russischen Kollegen wurde zugesichert, sich um reale Aufzeichnungen einer Erdbeben-Beschleunigungskurve aus dem Gebiet Krasnojarsk zu bemühen, die dann als Input für die dynamischen Berechnungen eingesetzt werden kann. In diesem Zusammenhang wurde auch diskutiert, inwieweit es möglich wäre, die seismische Station in Sheleznogorsk und den geplanten Endlagerstandort zu besichtigen. Die russischen Kollegen werden versuchen, einen Besuch zu organisieren.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP4:

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.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10770</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 598.885,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Bischofer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das primäre Ziel von VESPA ist es, Konservativitäten in den Annahmen, die für die Radionuklide  $^{14}\text{C}$ ,  $^{79}\text{Se}$ ,  $^{129}\text{I}$  und  $^{99}\text{Tc}$  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,  $\text{SO}_4$  –  $\text{H}_2\text{O}$  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: Koordination des Verbundvorhabens

AP7: Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Literaturstudien:

Die ergänzende Literaturstudie zu  $^{14}\text{C}$  wurde überarbeitet.

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Zusammenstellung der vorhandenen Wasseraktivitätsdaten, um die binären Systeme zu ermitteln, die am effizientesten zusammen in einem isopiesticen Topf untersucht werden können. Durchführung und Auswertung von 14 isopiesticen Töpfen bei 40 °C. Beginn des Vorversuchs zur langsamen Lösung von  $\text{CaI}_2$  und  $\text{MgI}_2$  zur Vermeidung der Iod-Entstehung.



Entwicklung einer Apparatur mit einem Multi-Elektroden-Design zur potentiometrischen Bestimmung thermodynamischer Daten von Hydrogenseleniten.

Voranalysen für die Bestimmung der Löslichkeitskonstanten aus LDH-Mischkristallen (Fe-, Ni- und Co-LDHs) haben gezeigt, dass insbesondere die geringen Fe-Gehalte in den Lösungen des Fe-LDHs unterhalb der Nachweisgrenze der ICP-MS-Analytik liegt. Die Analyse soll nun mittels Polarographie erfolgen. Zurzeit laufen Arbeiten, um bei den Proben mit hohen  $MgCl_2$ -Hintergrundgehalten eine Ausfällung zu vermeiden.

Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis:

Zusammenstellung der von GRS im Langzeitsicherheitsnachweis verwendeten Daten zum Geochemischen Milieu, Randbedingungen, Ionenstärke, Matrixsalzen etc. in Salz und im Ton sowie Erstellung eines Exzerpts der im Bericht des Projektes „Vorgezogene Sicherheitsanalyse Gorleben“ (VSG) interessanten Daten zur Vorbereitung der Entscheidung welche Daten zur Charakterisierung des geochemischen Milieus in den Testrechnungen verwendet werden sollen. Weiterhin wurden die typischen Inventare in einer Einlagerungsstrecke und einem Einlagerungsbohrloch zusammengestellt.

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 5. Projekttreffens im Nov. 2012 zum Verbundvorhaben VESPA.

#### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Literaturstudien:

Die ergänzende Literaturstudie zu  $^{14}C$  wird abschließend fertig gestellt.

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Abschluss der Isopiestik für die binären Systeme bei 40 °C, Beginn für die binären Systeme bei 60 °C und 90 °C.

Beginn der Löslichkeitsversuche für  $CaSeO_3$  und  $CaSeO_4$  bei 25-90 °C.

Potentiometrische Messung und Modellierung der binären Systeme  $KHSeO_3$  und  $NaHSeO_3$  sowie der ternären Systeme  $KHSeO_3$ -KCl und  $NaHSeO_3$ -NaCl bei 25 °C bis 90 °C.

Analyse der LDH-Mischkristall-Lösungen und Berechnung der Löslichkeitskonstanten.

Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis:

Weitere Absprachen mit den Projektpartnern über die Vergleichsrechnungen und die Daten, die sie zu den Rechnungen beitragen.

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 6. Projekttreffens zum Verbundvorhaben VESPA in Braunschweig.

#### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Generisches Poster zu VESPA wurde erstellt.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10780</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 217.340,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Curtius	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Langlebige Spalt- und Aktivierungsprodukte  $^{14}\text{C}$ ,  $^{36}\text{Cl}$ ,  $^{79}\text{Se}$ ,  $^{129}\text{I}$ ,  $^{135}\text{Cs}$  und  $^{99}\text{Tc}$  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  $^{75}\text{Se}$ ,  $^{129}\text{I}$ ,  $^{99}\text{Tc}$  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: Batch-Adsorptionsuntersuchungen an den synthetisierten LDH-Mischkristallphasen mit Selenit in Wasser, in Tonporenwasser (Mont-Terri Typ A1) und in Salzlauge ( $\text{MgCl}_2$ -reiche Lauge) sind abgeschlossen. Eine Rückhaltung konnte in allen Lösungen beobachtet werden. Die Rückhaltekapazitäten der Mischkristall-LDH-Verbindungen sind höher als für den „reinen“ MgAl-LDH Typ.

AP4: Noch nicht begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP2: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP3: Batch-Adsorptionsuntersuchungen mit Selenit an NiAl-LDH und CoAl-LDH Verbindungen sind geplant. Diese LDH-Typen stellen entsprechende Endglieder der zuvor eingesetzten Mischkristalle dar. Von Interesse ist der Einfluss der divalenten Metallkationen Mg, Co und Ni auf die Rückhaltung.

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

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10790</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 305.803,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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  $^{14}\text{C}$ ,  $^{79}\text{Se}$ ,  $^{129}\text{I}$  und  $^{99}\text{Tc}$  in Langzeitsicherheitsnachweise, z. Z. angenommen werden, abzubauen. Ziel des Teilvorhabens des HZDR ist die Identifikation von Rückhalteprozessen für das Spaltprodukt  $^{79}\text{Se}$ . 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 RES<sup>3</sup>T 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 RES<sup>3</sup>T)
- AP5: Dokumentation  
(Projektabschlussbericht)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

- Raman-, IR- und NMR-spektroskopische Untersuchungen zur aquatischen Se-Speziation zeigen bis 60 °C keine Änderungen für Se(IV) und Se(VI).
- IR Spektroskopie und NMR-Relaxation-Studien zu Se(IV) zeigen erste Hinweise auf die Bildung von Hydrogenselenit-Dimeren.

AP3:

- Batchexperimente: Sorptionsversuche und Zeta-Potential-Messungen weisen auf die Bildung eines außersphärischen Komplexes für Se(VI) an  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und eines innersphärischen Komplexes für Se(IV) an  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> hin.
- Spektroskopie: ATR FT-IR zeigt für die Se(IV) Sorption an  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> die Bildung zweier unterschiedlicher innersphärischer Oberflächenkomplexe. Die Sorption von Se(VI) erfolgt über einen bidentaten außersphärischen Komplex.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

- Weitere Untersuchungen zur Komplexbildung von Selen mit den kationischen Liganden Calcium und Magnesium bei Temperaturen bis 60 °C mit IR-, Raman- und NMR- Spektroskopie.
- Weitere Experimente zur Validierung der Dimerisierung des wässrigen Se(IV) mittels IR- und NMR-Spektroskopie.
- Temperaturabhängige NMR-Messungen für Se(-II).

AP3:

- Aufklärung der Oberflächenkomplexe von Se(VI) und Se(IV) an  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> mittels EXAFS.
- Aufklärung der Temperatur- und Ionenstärkeeffekte auf die Se(VI) und Se(IV) Sorption an  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

AP4:

- Bestimmung thermodynamischer Parameter für die Oberflächenkomplexierung von Se(VI) und Se(IV) an  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>,  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Franzen, C.; Hering, D.; Jordan, N.: The impact of salinity on the sorption of selenate onto aged  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in the context of salt dome repositories. European Mineralogical Conference. 02.-06.09.2012. Frankfurt, Deutschland. (Vortrag)

Jordan, N.; Ritter, A.; Foerstendorf, H.; Scheinost, A.C.; Heim, K.; Weiß, S.; Brendler, V.: Sorption of Se(VI) and Se(IV) oxyanions onto maghemite: a macroscopic and spectroscopic study. SELEN 2012- Selenium in geological, hydrological and biological systems. Karlsruhe, Deutschland. (Vortrag)

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.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10800</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 615.228,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Geckeis	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Qualität von Langzeitsicherheitsnachweisen für Endlager radioaktiver Abfälle hängt stark von dem wissenschaftlichen Verständnis der stattfindenden Prozesse, der Qualität verwendeter Datenbasen sowie von deren konzeptioneller und mathematischer Umsetzung in Modellen ab. Ein weitgehend standortunabhängiger Forschungsbedarf besteht für geochemische Daten und Werkzeuge bezüglich der mobilen Spalt- und Aktivierungsprodukte und deren Rückhalteprozesse in den Endlagerbarrieren, wie z. B. Thermodynamik und Sorption bei höheren Temperaturen und zu Rückhalteprozessen durch Mineralisation, d. h. durch den Einbau in neu gebildete Mineralphasen. Diese Daten wurden für deutsche Endlagerkonzepte bisher unzureichend ermittelt. Im Falle eines Vergleichs von Tonsteinstandorten haben diese Forschungsarbeiten eine entscheidende Bedeutung: Die Ergebnisse erlauben die Ableitung der Größe des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs. Die langlebigen Spalt-nuklide  $^{79}\text{Se}$  und  $^{99}\text{Tc}$  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  $^{99}\text{Tc}$  gilt dies allerdings nur für oxidierende Bedingungen, unter denen sich  $\text{TcO}_4^-$  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  $\text{Se}^{2-}$ ,  $\text{Se}_2^{2-}$  und  $\text{SeO}_3^{2-}$ , für die ähnliches gilt wie für  $\text{TcO}_4^-$ . 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 im Rahmen ihrer Doktorarbeit die Löslichkeitsexperimente mit Tc(IV) begonnen. Die Synthese von ca. 200 mg Tc(IV)-oxyhydroxid Festphase wurde abgeschlossen. Serien von Löslichkeitsexperimenten wurden in verschieden konzentrierten NaCl Lösungen angesetzt. Der Austausch des gesamten Gasreinigungssystems an der verwendeten Ar-Box wurde erfolgreich durchgeführt.

**AP2: Status:** Die Publikation von T. Kobayashi et al. „Redox behavior of Tc(VII)/Tc(IV) under various reducing conditions in 0.1 M NaCl solutions“ wurde zur Publikation in *Radiochimica Acta* akzeptiert. Experimentserien zum Redoxverhalten von Tc(VII)/Tc(IV) in konzentrierten NaCl und MgCl<sub>2</sub> Systemen wurden von E. Yalcintas abgeschlossen. Die Arbeiten wurden von Frau E. Yalcintas bei NRC8 in Como, Italien, erfolgreich vorgestellt.

**AP3: Status:** Die Arbeiten zur Tc(VII) Reduktionskinetik an anoxischem Probenmaterial (Granodiorite aus Äspö, Schweden) wurden durchgeführt. Die sich einstellenden Eh/pH Bedingungen favorisieren dabei eine Tc(VII) Reduktion und potentielle Tc(IV) Präzipitation. Tc(IV) wurde via XPS- Analytik an der Oberfläche verifiziert, vergleichbar zu Referenzspektren einer TcO<sub>2</sub>·xH<sub>2</sub>O Phase. Ähnliche Experimente zur Tc(VII) Wechselwirkung mit kristallinen Materialien aus dem Nizhnekansk Granit Massiv (potentieller Standort zur tiefengeologischen Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen in Russland) sind weitestgehend abgeschlossen. Auch hier zeigte sich bei höheren Tc(VII) Konzentrationen (10<sup>-5</sup> mol/L) eine geringe Sorption (10-15 %), da die Reduktionskapazität des kristallinen Materials überschritten wird. Für Sorptionsuntersuchungen unterhalb der Tc(IV) Löslichkeit (< 10<sup>-9</sup> mol/L) wurde in Kooperation mit der ZAG Zyklotron AG Molybdänfolie bestrahlt und das <sup>95m</sup>Tc am INE abgetrennt, um in Tc- Spurenkonzentrationen Sorptionsexperimente durchführen zu können. Säulenversuche mit natürlichen Klüften aus dem Äspö Granodiorite wurden aufgebaut, die 3D Kluft- Geometrie mittels  $\mu$ CT aufgenommen und diese Klüfte hinsichtlich ihrer hydraulischen Eigenschaften (konservativer Tracer HTO) charakterisiert.

**AP4: Status:** Eine Veröffentlichung über die Struktur der Selenit Einbauspezies in Calcit (P-GIXAFS) und experimentell und theoretisch bestimmte thermodynamische Parameter ist weitestgehend fertiggestellt. Sie enthält die Ergebnisse von Versuchen zur Aragonit- Rekristallisation in Gegenwart von Selenit, die zeigen, dass die Gegenwart von Selenit das Calcitwachstum bei niedrigen Übersättigungen stoppen kann. Zusätzlich zur ursprünglich geplanten Veröffentlichung wurde ein thermodynamisches Modell entwickelt und mit in das Manuskript aufgenommen. Dieses Modell erklärt den strukturellen Einbau in Copräzipitationsexperimenten, die beobachteten Wachstumsraten sowie die Wachstumsverhinderung bei den Aragonitrekristallisationsexperimenten. 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:** Durchführung umfassender Löslichkeitsexperimente mit Tc(IV)-oxyhydroxid Festphase in carbonatfreien NaCl, CaCl<sub>2</sub> und MgCl<sub>2</sub> Lösungen von niedriger bis extrem hoher Ionenstärke. Ableitung belastbarer Löslichkeitskurven unter detaillierter Analyse der jeweiligen Lösungs- und Festphasenspeziation. Ableitung eines korrekten chemischen Modells als Basis einer umfassenden thermodynamischen Beschreibung.

**AP2:** Erstellung eines Manuskripts zur Publikation der Tc-Redoxstudien (Eh/pH) in konzentrierter NaCl, bzw. MgCl<sub>2</sub> Lösung von E. Yalcintas. Die Arbeiten zur Tc-Redoxchemie sollen bei Fachkonferenzen (Migration 2013, GdCH-Jahrestagung) vorgestellt werden. Entsprechende Abstracts werden eingereicht.

**AP3:** Weiterführung der Tc(VII) Sorptions- Untersuchungen an Granitproben und synth. Magnetit bei Konzentrationen unterhalb der Tc(IV) Löslichkeit mit <sup>95m</sup>Tc und synth. Eisenoxiden. Quantifizierung des isotonenaustauschbaren Fe mittels stabilem <sup>57</sup>Fe. Beginn der Tc(VII) Säulenexperimente an Äspö Diorit.

**AP4:** Calcit Rekristallisationsversuche im Gleichgewicht in Gegenwart von <sup>79</sup>Se(IV) und <sup>45</sup>Ca sowie Oberflächendiffraktionsexperimente zu Se(IV) Adsorption/Einbau in Calcit, sind aufgebaut. 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.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

##### Peer-reviewed eingereicht oder in Vorbereitung:

Manuskript von Kobayashi et al. zur Tc-Redoxchemie ist akzeptiert bei *Radiochimica Acta* (Tc-Redox Arbeiten aus AP2). Manuskript zum Se(IV) Einbau in Calcit aus AP4 (Heberling et al.) wird demnächst eingereicht.

Zu AP3: Totskiy, Y., Geckeis, H., Schäfer, T. (2012): Sorption of Tc(VII) on Äspö diorite (ÄD). 1<sup>st</sup> Workshop Proceedings, 7th EC FP CP-CROCK, KIT Scientific Reports.

Manuskript zur Se Wechselwirkung mit FeS (Mackinawit) aus AP4 ist veröffentlicht: N. Finck, K. Dardenne, D. Bosbach, H. Geckeis, Selenide Retention by Mackinawite, *Environ. Sci. Technol.*, 46 (2012) 10004-10011.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10810</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV1: Dr. Andreas Hampel)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 31.01.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 306.437,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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.

Im Berichtszeitraum schloss der Zuwendungsempfänger die im ersten Halbjahr 2012 durchgeführte Überarbeitung der CDM-Formulierungen zur Modellierung der Spannungsabhängigkeit der stationären Kriechrate bei kleinen Effektivspannungen, der Schädigungswirkung auf die Verformung im Vor- und Nachbruchbereich (Entfestigung) sowie des Kriechbruchs ab. Zur Validierung der neuen Formulierungen und zur Parameterbestimmung wurden zahlreiche weitere Kriech- und Festigkeitsversuche nachgerechnet. Nach der Implementation der Modifikationen in FLAC3D führte er eine Reihe von Testberechnungen zur freien Konvergenz eines isothermen und eines erhitzten tiefen Bohrlochs in der Schachanlage Asse II durch. Außerdem erstellte er den Vergleich der Ergebnisse der Partner aus den thermo-mechanischen Benchmark-Berechnungen des Bohrlochs mit und ohne Erhitzereinsatz.

Der Zuwendungsempfänger bereitete den 7. Projektworkshop vor und führt ihn gemeinsam mit den Partnern am 08.10.2012 bei den Sandia National Laboratories in Albuquerque/NM durch. Anschließend präsentierte er Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes auf dem 3rd US-German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation (Albuquerque, 09.-10.10.2012) sowie auf dem 10. Statusgespräch des Projektträgers (Karlsruhe, 10.11.2013). Danach erstellte er in Abstimmung mit den Partnern den gemeinsamen Antrag auf 2,5-jährige Verlängerung des Verbundprojektes. Mit der geplanten Durchführung von Laborversuchen und Benchmark-Modellberechnungen von In-situ-Strukturen in der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico (USA) soll der Stoffgesetzvergleich zum thermo-mechanischen Verformungsverhalten von Steinsalz erweitert und die deutsch-amerikanische Zusammenarbeit im Rahmen des Vorhabens vertieft werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird zunächst bis zum 15.02.2013 die gemeinsame Veröffentlichung des Verbundes zu den thermo-mechanisch gekoppelten Benchmark-Berechnungen des Bohrlochs (s. u.) erstellen und sie auf dem 47<sup>th</sup> US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium der ARMA vom 23.-26.06.2013 in San Francisco präsentieren. Außerdem wird er den 8. Projektworkshop vorbereiten und gemeinsam mit den Partnern am 19.-20.02.2013 in der Leibniz Universität Hannover durchführen. Der 9. Projektworkshop ist für Juni 2013 geplant.

Der Zuwendungsempfänger wird die thermo-mechanischen Modellberechnungen des Bohrlochs und den zugehörigen Ergebnisvergleich abschließen sowie die Benchmark-Berechnungen zur Verheilung von Steinsalz mit dem CDM-Stoffgesetz beginnen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Neueste Literatur zum CDM-Stoffgesetz und zum aktuellen Verbundprojekt:

A. Hampel (2012): The CDM constitutive model for the mechanical behavior of rock salt: Recent developments and extensions. In: P. Bérest, M. Ghoreychi, F. 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. Gährken, C. Missal & J. Stahlmann (2013): Benchmark Calculations of the Thermo-Mechanical Behavior of Rock Salt – Results from a US-German Joint Project. In: Proceedings of the 47<sup>th</sup> US Rock Mechanics/Geomechanics Symposium, San Francisco, 23.-26. Juni 2013. American Rock Mechanics Association (ARMA). (In Vorbereitung).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10820</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.09.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 327.925,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 8. Oktober 2012 in Albuquerque (New Mexico, USA; veranstaltet von Sandia National Laboratories) einen Projekt-Workshop (WS 7) durch. Als Vorbereitung zu diesem Projekt-Workshop, der auch für Teilnehmer des US-German-Workshops zugänglich war, fand eine Vorbesprechung am 20. September in Braunschweig (veranstaltet von der TU Braunschweig) statt.

Auf dem Vorbereitungstreffen sowie dem Projekt-Workshop wurden von den Partnern im Wesentlichen numerische Simulationsergebnisse dargestellt und diskutiert. Diesbezüglich präsentierte der Zuwendungsempfänger fünf Präsentationen mit folgenden Inhalten: 1. Constitutive model Lux/Wolters, 2. Back-calculation of laboratory tests, 3. IFC and HFCEP calculations, 4. Modeling of the bulkhead, 5. Additional laboratory tests. Die für den Workshop in Albuquerque vorbereiteten und gezeigten Präsentationen stellten den zu diesem Zeitpunkt gegenwärtigen Stand der Projektarbeiten dar.

Zusätzlich wurde im weiteren Verlauf des Berichtszeitraumes das Berechnungsmodell für die Untertagesituation „Dammjoch“ überarbeitet und an die zuvor zwischen den Projektpartnern abgestimmte einheitliche Geometrie angepasst. Darüber hinaus sind numerische Re-Analysen von Verheilungsversuchen zur Parameterbestimmung des Stoffmodells Lux/Wolters durchgeführt worden. Für diese Berechnungen wurden zuvor erarbeitete Modifikationen des Stoffmodells Lux/Wolter in das Berechnungsprogramm Flac 4.0 der Firma Itasca eingearbeitet und getestet.

Von den vereinbarten Laborversuchen wurden beim Zuwendungsempfänger die beiden im 1. Halbjahr 2012 aufgesetzten Versuche weiter fortgeführt. Bei dem einen Versuch (Ass-402) steht die Untersuchung der temperaturabhängigen Verheilung im Vordergrund, so dass einer kurzen Schädigungsphase eine Verheilungsphase folgt. Dieser Versuch wird bei einer konstanten Prüfkörpertemperatur von 70 °C durchgeführt. Der zweite Versuch (Ass-432) ist ein Wiederholungsversuch bei  $T = 50 \text{ °C}$ , da bei dem zuvor durchgeführten Versuch Messungenauigkeiten in der Dilatanzmessung auftraten. Parallel dazu wurden die Arbeiten zur Umrüstung der Versuchsanlagen begonnen. Diese Modifizierungen sollen eine auch bei Versuchszeiten von mehreren Monaten zuverlässige und absolut leckagefreie Dilatanzmessung ermöglichen. Neben den mechanischen und elektronischen Umbauten der Anlagen ist es auch notwendig, die komplexe Maschinensteuerung neu zu programmieren.

Bei einem zusätzlichen Treffen am 5. November an der TU Clausthal wurde mit mehreren Projektpartnern das endgültige Versuchsprogramm mit WIPP-Salz für einen Verlängerungsantrag festgelegt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird weitere numerischen Simulationen für die Re-Analyse von Laborversuchen sowie zur Situation „Dammjoch“ durchführen. Daneben wird das geplante laborative Versuchsprogramm weitergeführt und die neu modifizierten Anlagen eingesetzt.

### 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.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10830</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.09.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 316.242,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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" (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

Im Berichtszeitraum führten die Partner am 20. September in Braunschweig und am 8. Oktober in Albuquerque, New Mexico, USA jeweils einen Projekt-Workshop (veranstaltet von TUB bzw. Sandia National Laboratories) 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 2 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 Vorbereitungsworkshop zum 7. Workshop gemeinsam mit den Partnern am 20. September an der TU Braunschweig sowie den 7. Projektworkshop am 8. Oktober in Albuquerque vorbereitet und durchgeführt. Auf den Workshops wurden die Ergebnisse der bisherigen Arbeiten sowie der geplanten Zusammenarbeit mit Sandia National Laboratories, insbesondere das konzipierte Laborprogramm vorgestellt und diskutiert.

Im Berichtszeitraum hat das IfG begonnen, die triaxialen Druckversuche und Kriechversuche bei unterschiedlichen Manteldrücken und Temperaturen (30 °C, 60 °C und 90 °C) mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nachzurechnen.

Am 5. November führten die Projektpartner (Dr. Hampel, TU Clausthal, IfG Leipzig, und TU Braunschweig), die sich an den gesteinsmechanischen Laborversuchen am WIPP-Steinsalz beteiligen, ein ergänzendes Projektgespräch zur Abstimmung der Planung dieser Untersuchungen in Auswertung der Befahrung der WIPP-site am 11. Oktober 2012 durch.

Auf dem 3<sup>rd</sup> US-German Workshop on "Salt Repository Research, Design and Operations" vom 9.-10. Oktober in Albuquerque, New Mexico, USA wurde vom IfG ein Vortrag zu den am Stoffmodellvergleich beteiligten Stoffansätzen gehalten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2013 ist der Beginn der gesteinsmechanischen Laborversuche am Probenmaterial aus der WIPP-site an zwei typischen Salzgesteinsvarietäten geplant, wobei das IfG die Laboruntersuchungen am „clear salt“ übernehmen wird. Außerdem wird das IfG die gesamte Prüfkörperherstellung aus den von Sandia National Laboratories zu übergebenden Großkernmaterial übernehmen.

Weiterhin ist geplant, die Nachrechnungen der Laborversuche mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell abzuschließen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zu den IfG-Stoffgesetzen:

R.-M. Günther & K. Salzer (2012): Advanced strain-hardening approach: A powerful creep model for rock salt with dilatancy, strength and healing. In Berest, Ghoreychi, Hadj-Hassen & Tijani (eds.); Proc. of the Seventh Conf. on the Mech. Behavior of Salt. Paris 2012. CRC: Taylor & Francis (Balkema). 13 – 22.

R.-M. Günther (2012): Overview of the Advanced Constitutive Models Considered in the Joint Projects. Proc. of the 3<sup>rd</sup> US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operations. 9.-10. October, Albuquerque, New Mexico, USA.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10840</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.09.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 159.370,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

Im Berichtszeitraum wurden die numerische Simulation der ECN-Versuche IFC und HFPC weitgehend fertig gestellt. Die Auswertung und die detaillierte Darstellung von eigenen Rechenergebnissen wurden ebenfalls durchgeführt und an den Koordinator für den Vergleich mit denen von Projektpartnern weitergeleitet. Die Ergebnisvergleiche wurden auf den 6. und 7. Projektworkshops im September und Oktober 2012 in Leipzig und Albuquerque präsentiert und diskutiert. Weiterhin wurden 2D-Rechnungen zur Dammjochstruktur in der Schachanlage Asse II sowohl für die offen gebliebene Strecke als auch für die ausgebaute Strecke über einen Zeitraum von 85 Jahren durchgeführt. Diese Rechnungen werden bei dem nächsten Workshop im Februar 2013 vorgestellt und mit den Verbundprojektpartnern diskutiert. Darüber hinaus wurden die neueren IfG-Kriechversuche mit Lastwechseln, bei denen die Belastung erhöht wurde, nachgerechnet und auch die Stoffparameter bestimmt.

Gemeinsam mit den Verbundprojektpartnern wurde ein BMWi-Antragsentwurf zur Weiterführung der thermo-mechanischen Benchmarkrechnungen an einer aus der „Waste Isolation Pilot Plant (WIPP)“ in New Mexico (USA) ausgewählten Endlagerstrecke angefertigt. Diese Arbeiten dienen der Vertiefung der Kooperation der deutschen Verbundpartner mit den Sandia National Laboratories.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2013 werden zunächst die Simulationsrechnungen zum Dammjochmodell und die Ergebnisse für den Vergleich mit denen von Projektpartnern fertiggestellt. Außerdem wird die Arbeit zur Anpassung der „User-Subroutine“ im Adina-Programm zur genaueren Beschreibung der Schädigung mit anschließender Verheilung des Steinsalzes bei höheren Temperaturen fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum Steinsalzstoffgesetz und zu den vorlaufenden Verbundprojekten:

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 z. BMBF-Verbundprojekt II (FKZ 02C1577-1617), Karlsruher Institut für Technologie, Projektträger PTKA-WTE.

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

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

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

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10850</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.09.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 198.242,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Rokahr

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung eines Start-Workshops
- AP2: Planung, Durchführung und Auswertung spezifischer Laborversuche
- AP3: Nachrechnung der Laborversuche, Bestimmung salztypspezifischer Kennwerte
- AP4: 3D-FDM/FEM-Modellierung der Untertagestrukturen, Auswertung der Ergebnisse
- AP5: Durchführung weiterer Workshops und Abstimmungen der Projektpartner
- AP6: Erstellung detaillierter Einzelberichte durch die Projektpartner
- AP7: Vergleich der Ergebnisse, Ausarbeitung von Schlussfolgerungen und Empfehlungen
- AP8: Durchführung einer öffentlichen Abschlussveranstaltung
- AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Berechnungsmodell für die Nachrechnung des HFCP Versuchs wurde ein weiteres Mal überarbeitet. Abschließende Berechnungen wurden durchgeführt, diesmal mit Berücksichtigung der „Abkühlphase“. Für das Dammjoch-Modell wurden weitere, ausführlichere Simulationsrechnungen durchgeführt, welche den Projektpartnern vorgestellt und diskutiert wurden. Die bisher durchgeführten Arbeiten wurden zusammenfassend beim US/German-Workshop in Albuquerque vorgestellt. Es wurden Kriech- und Festigkeitsversuche des Projektpartners IfG nachgerechnet und vorgestellt. Um die Anforderungen der im Verbundprojekt III untersuchten Fragestellungen bestmöglich bearbeiten zu können, wurden beim Stoffgesetz Lubby-MDCF anhand der Kriech, Festigkeits- und Verheilungsversuche Optimierungen in den Formulierungen durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Beim folgenden Workshop sollen Endergebnisse zu den Bohrlochversuchen präsentiert werden. Die Randbedingungen zu den Dammjoch Simulationsrechnungen sollen endgültig festgelegt und abschließende Berechnungen durchgeführt werden. Die Optimierung vom Stoffgesetz soll weitergeführt und abgeschlossen werden. Weitere Details zur WIPP-Site sollen besprochen werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hauck, R. (2001): Tragverhalten tiefliegender Salzkavernen bei atmosphärischem Innendruck.

Hampel, A., O. Schulze, U. Heemann, F. Zetsche, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, Z. Hou, R. Wolters, U. Düsterloh, D. Zapf, R. Rokahr, A. Pudewills (2007): Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1004-1054), Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Projektträger PTKA-WTE.

Schulze, O., U. Heemann, F. Zetsche, A. Hampel, A. Pudewills, R.-M. Günther, W. Minkley, K. Salzer, Z. Hou, R. Wolters, R. Rokahr & D. Zapf (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, I. Modeling of deformation processes and benchmark calculations.

Hou, Z., R. Wolters, U. Düsterloh, R. Rokahr, D. Zapf, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, U. Heemann, O. Schulze, F. Zetsche & A. Hampel (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, II. Numerical modeling of two in situ case studies and comparison.

Leuger, B., Staudtmeister, K., Yildirim, S., Zapf, D. (2010): Modeling of creep mechanism and damage of rock salt. Proceedings of the 7th european conference on numerical methods in geotechnical engineering, T. Benz, St. Nordal, London, UK, S. 89-94.

Hampel, A., R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh (2010): Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten von realen Untertagebauwerken im Steinsalz. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1577-1617), Karlsruher Institut für Technologie, Projektträger PTKA-WTE.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10860</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.09.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 198.091,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 4.0 der Firma Itasca sowie das Finite-Elemente-Programm ANSYS in der Version 13.

Am 20. September 2012 wurde am Institut für Grundbau und Bodenmechanik ein Vorbereitungstreffen für den internen Workshop sowie den 3. US/German Workshop in Albuquerque, NM, USA ausgerichtet. Schwerpunkt dieses Treffens war die Abstimmung der im Namen des Vorhabens zu haltenden Vorträge (Vorstellung der bisherigen Vorhaben, der verschiedenen Stoffgesetze und der geplanten Versuchs-Matrix).

Vom 08. bis 11. Oktober 2012 fanden der interne Workshop sowie der 3. US/German Workshop in Albuquerque, NM, USA statt. Um den Teilnehmern einen Eindruck der amerikanischen Herangehensweise an die Endlagerung sowie des Kriechverhaltens der lokalen Salzformationen zu vermitteln, wurde im Zuge des Workshops eine Befahrung der WIPP-Site bei Carlsbad, NM, USA durchgeführt. Das Stoffgesetz IGB-TUBS (Döring) wurde formelmäßig und anhand von Versuchs-Nachrechnungen vorgestellt. Zur besseren Vergleichbarkeit mit den Formulierungen der Projektpartner erfolgte eine vergleichende Darstellung der Fließbedingungen sowohl im Oktaeder- als auch im Hauptspannungsraum. Aufgrund der Weiterentwicklungen im Stoffgesetz lagen zu den Versuchen aus dem COSA II Report (IFC und HFCP) zu diesem Zeitpunkt keine Ergebnisse vor.

Ein Schwerpunkt der Optimierungen im Berichtszeitraum lag in der Berücksichtigung der Verformungsgeschwindigkeit im tertiären Kriechen. Das Ergebnis der Entwicklung konnte an Festigkeitsversuchen mit verschiedenen Belastungsgeschwindigkeiten verifiziert werden. Weitere Änderungen wurden an der Formulierung der Viskosität für primäres Kriechen und Nachbruchverhalten sowie dem Einfluss der Temperatur vorgenommen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Am 19. und 20. Februar 2013 wird der 8. Workshop zum Stoffgesetzvergleich in Hannover stattfinden. Hier sollen die aktuellen Ergebnisse der IFC und HFCP Berechnungen vorgestellt werden. Außerdem können erste Ergebnisse zur Modellbildung des Dammjochs gezeigt werden.

Für das Programmsystem ANSYS ist die Kopplung des Stoffgesetzes mit den in ANSYS vorhandenen Routinen zur Berechnung von Temperatureinflüssen geplant. Für das Programmsystem FLAC3D erfolgt der Wechsel von Version 4.0 auf 5.0 mit allen im Zuge des Upgrades notwendigen Änderungen.

Die Weiterentwicklungen und Anpassungen des Stoffmodells werden in die numerischen Programmsysteme ANSYS und FLAC3D implementiert und anschließend anhand der Versuchsdaten überprüft. Die Versuche aus dem COSA II Report (IFC und HFCP) werden mit ANSYS nachgerechnet, wobei hier noch die Schnittstelle zwischen thermischen und mechanischen Berechnungen optimiert werden muss. Mit FLAC3D wird für die weiteren Arbeiten im Forschungsvorhaben das Dammjoch berechnet und ausgewertet.

### 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

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10880</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2010 bis 31.05.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 519.570,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Voigt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Es werden die temperaturabhängigen Phasengleichgewichte (=Bindemittelphase) im Grundsystem MgO-MgCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O 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-CaCl<sub>2</sub>/MgCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O und MgO-MgSO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O erweitert. Für letztere sollen die temperaturabhängigen Phasengleichgewichte bestimmt werden, um in Kombination mit dem Grundsystem auf mögliche Mischphasen im Bindersystem unter Einfluss von Sulfat-haltigen Lösungen schließen zu können. Aus den gewonnen temperaturabhängigen Löslichkeitsdaten der genannten Systeme können Parameter abgeleitet werden, welche thermodynamische und geochemische Modellierungen der Wechselwirkungen mit den Komponenten des hexären Systems der ozeanischen Salze für übergreifende Anwendungen ermöglichen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Phasenbildung im Grundsystem MgO-MgCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O 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:

Lösegleichgewichte im System  $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ : Prüfung und ergänzende Ansätze zu 80 °C und 100 °C-Isothermen bezüglich metastabiler/stabile Gleichgewichtszustände; es ist immer noch offen, ab welcher Temperatur (60, 80 oder 100 °C) die 3-1-8 Phase nicht mehr stabil vorliegt und die Hochtemperaturphasen 2-1-4, 2-1-2 stabil auftreten.

AP2:

Lösegleichgewichte im  $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ : Isothermen bei 25 °C, 40 °C, 80 °C und 100 °C liegen vor (generell 3-1-8 Phase metastabil, 5-1-2 Phase stabil).

AP3:

Die temperaturabhängige Phasenbestandentwicklung für die Rezeptur R3a wurde für das Temperatur-Zeitfenster 90 °C wurde/wird untersucht.

AP4:

Untersuchungen zur Entwicklung von Quelldrücken (Quellprozess 1) werden im Auftrag bzw. in Zusammenarbeit mit dem IfG (Auftrag an Dritte mit Modifizierung) an der Rezeptur R3a durchgeführt (parallel mit dem Ansatz in AP3).

Mit den Quelldruckzellen des IfBuS werden parallel Messungen durchgeführt (kleinere Zellen, kleinere Probekörper sowie abweichendem Temperaturprofil bei identischer Maximaltemperatur zu den IfG-Messungen).

Im Ergebnis zeigt sich, dass je nach Temperaturverlauf der Abbindereaktion, speziell der Abkühlphase, ein Quellprozess aufgrund von Phasenumwandlung und Verbrauch der Restporenlösung um Wochen bis Monate später einsetzt. Die Druckwerte schwanken für einzelne Meschargen dabei erheblich.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1/AP2:

Die Daten zu den Lösegleichgewichten bei 80 °C und 100 °C im System  $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$  sind bezüglich erreichter bzw. nicht erreichter Gleichgewichtszustände weiter zu prüfen und zu erweitern (Ansätze mit veränderten Ausgangsbedingungen werden durchgeführt). Beginn des Versuche zur Erstellung der 120 °C-Isothermen. Bestimmung der Löslichkeitskonstanten der 3-1-8 und 5-1-2 Phase im Sulfat-System. Beginn der Arbeiten zur thermodynamischen Modellierung (Modellbearbeitung/-erstellung).

Kalorimetrische Messungen der R3a-Rezeptur zur Ermittlung der max. Abbindewärme/-temp.

AP3:

Ermittlung mechanischer Parameter der R3a-Rezeptur am IfG (Auftrag an Dritte) – Proben u. a. aus Quelldruckzellen (AP4). Rezepturanaloga Betonproben wurden hergestellt und werden auf mechanische Eigenschaften hin geprüft.

AP4:

Ansätze und Messung der R3a-Rezeptur in den IfG-Quelldruckzellen in Temperaturprofilen mit Max.-temp. von 60 °C und 90 °C mit begleitenden Phasenanalysen.

Fertigstellung zweier Veröffentlichungen zu Lösegleichgewichten im Chlorid-System sowie der Festphasencharakteristik im Sulfat-System.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10890</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2010 bis 31.10.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.547.015,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Wieczorek

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit dem Projekt VIRTUS soll ein leistungsstarkes Instrument zur Simulation, Visualisierung und wissenschaftlichen Bewertung der komplexen, untereinander gekoppelten Prozessabläufe in einem Untertagelabor bzw. Endlager sowie zur Planung und Prüfung von Endlagerkonfigurationen in Steinsalzformationen den an Endlagerprojekten in Deutschland beteiligten Institutionen bereit gestellt werden. Mit der Erfassung und Auswertung der aus 30 Jahren Endlagerforschung vorhandenen Primärliteratur und der Ableitung einer konsolidierten und qualitätsgesicherten Datenbasis für numerische Simulationen leistet das Projekt auch einen Beitrag zum Erhalt bzw. zur Dokumentation der in vielen Jahren der Untertageforschung erzielten wissenschaftlichen und technischen Ergebnisse und Erfahrungen und trägt damit insgesamt zur zeitnahen Entwicklung eines fundierten Safety Case nach der Entscheidung für einen Standort eines HAW-Endlagers in einer salinaren Formation bei.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1:

Der Grubengebäudeeditor wurde weiterentwickelt und die Bausteinbibliothek erweitert. Auf Basis des mit seiner Hilfe definierten Grubengebäudes kann nun automatisiert ein entsprechendes 3D-Oberflächenmodell generiert werden und mit dem geologischen Modell verschnitten werden.

Zur Verbesserung der Netzqualität wurde ein Remeshing-Algorithmus implementiert, durch den die Qualität der Dreiecksflächen des Modells verbessert wird (Vermeidung von spitzwinkligen Dreiecken). Dies ist, zusammen mit den früher entwickelten Algorithmen zur Modellkorrektur, für die Weiterverarbeitung des Netzes für Simulationsrechnungen erforderlich.

Zum Import von Resultatdaten aus Simulationen wurden die entsprechenden Schnittstellen entwickelt und implementiert. Die Resultatdatenvisualisierung wurde weiterentwickelt.

#### AP2:

Die Datenbankstruktur wurde finalisiert und die Migration der Datenbank von Access zum Datenbanksystem Microsoft SQL-Server (MSSQL) durchgeführt.

Die Literaturlauswertung konzentrierte sich zunächst auf Salzgesteine. Für diese wurde der Themenbereich „Dichte“ ausgewertet und abgestimmt. „Hydraulische Parameter“ wurden ausgewertet; die Expertendiskussion mit den Projektpartnern steht noch aus.

#### AP3:

Das VIRTUS Gesamtsystem soll in Form einer service-orientierten Architektur umgesetzt werden, d. h. es wird sowohl die lokale VIRTUS Softwareplattform geben, aber auch einen entsprechenden Server der bestimmte Dienste bereitstellt. Zum aktuellen Zeitpunkt sind die Bereiche Nutzerverwaltung und Zugangskontrolle umgesetzt, weitere Punkte befinden sich in Bearbeitung. Zur Implementierung und zum Test der Serverarchitektur wurde am Fraunhofer IFF eine lokale Testumgebung aufgebaut.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Definition von Einlagerungsstrecken und -bohrlöchern für den Grubengebäudeeditor
- Implementierung des Hotspot Konzepts
- Umsetzung der THM & Literaturdatenbank sowie Auswahl und Export für Experimente
- Weitere Literaturlauswertung und Auffüllen der THM-Datenbank
- Simulation definierter 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 (Projektmanagement, Administration)
- Einrichtung eines web-basierten Systemzugangs

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10900</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2010 bis 31.10.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 190.969,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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

AP2:

Im Rahmen des Vorhabens werden die wichtigsten Ergebnisse aus 40 Jahren Untertageforschung aufgearbeitet, konsolidiert und in einer Datenbank dokumentiert. Die für numerische Simulationen benötigten thermisch-hydraulisch-mechanischen (THM) Parameterdaten sollen in Form einer qualitätsgesicherten Datenbasis für Berechnungen bereitgestellt werden. Im Berichtszeitraum wurden weitere Parameterdaten aus der Literaturrecherche erhoben und in Fachprotokollen dokumentiert. Diese wurden zur Vorbereitung weiterer Fachsitzungen an die Projektpartner zur Durchsicht verteilt.

AP3:

Darüber hinaus wurde zusammen mit dem IFF weiter daran gearbeitet, eine Software-Schnittstelle zu schaffen, die es ermöglicht, die in VIRTUS erstellten geometrischen Informationen in den von der DBE TECHNOLOGY GmbH genutzten Präprozessor ANSYS zur Vorbereitung numerischer Simulationen zu übernehmen. Zum Datentransfer von Vritus nach FLAC3D wurde das Dateiaustauschformat IGES ausgewählt.

Der erste Versuch zum Transfer der Daten scheiterte zunächst, da die geometrischen Informationen seitens VIRTUS nur in einer Punkt-, Linien- und Flächenwolke vorlag. Es gab keine Möglichkeit, mit vertretbarem Aufwand, diese Flächenwolke mit ANSYS zu einzelnen geschlossenen Volumina zusammen zu schließen. Es wurde daher zunächst ein anderer Präprozessor zwischengeschaltet, mit dem eine Volumenerzeugung mit weniger Aufwand möglich war. So war es zeitnah möglich, die zur numerischen Simulation benötigte Vernetzung dieser Volumina zu testen. Die Vernetzung funktionierte an dem verwendeten Testmodell nur begrenzt, da noch eine Tessellierung (Trianguliertes Flächennetz) der Volumenoberfläche mit zum Teil sehr spitzwinkligen Dreiecken vorlag. IFF hat daraufhin mit verschiedenen Verfahren eine deutliche Verbesserung der Tessellierung der Oberfläche durch Dreiecke entwickelt. Auf Basis dieser verbesserten Tessellierung konnte eine Vernetzung des Testmodells generiert werden, wobei allerdings momentan die Vernetzung ausschließlich mit Tetraederelementen erfolgt. Eine Hexaedervernetzung ist zurzeit noch nicht möglich.

### 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
- Export von Berechnungsdaten von FLAC3D in Richtung VIRTUS und Implementierung einer entsprechenden Schnittstelle

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10910</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2010 bis 31.10.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 372.697,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Behlau	

### 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: *Geologisches Modell*

Zur Vorbereitung des Einlesens der geologischen Modelle wurde von IFF ein Eingangsscheck auf Geschlossenheit und Durchdringungsfreiheit geologischer Körper in VIRTUS implementiert. Diese führten zu nicht robust reproduzierbaren Fehleranzeigen, so dass eine zeitangepasste Fehlerbeseitigung in openGEO nicht möglich war. Ein Einlesen des geologischen Modells in VIRTUS war aber trotzdem möglich, sofern kein konstruktiver Mangel, wie Durchdringung oder Lücke, im geologischen Modell vorhanden war. Daher wird das geologische Modell im Sinn von numerischen Ungenauigkeiten, wie Rundungsfehler bei der Datenübergabe am VIRTUS, nicht mehr überarbeitet. Diese hatten in der Vergangenheit zu massiven Problemen bei der Weiterverarbeitung der geologischen Modelle in VIRTUS geführt. Um die Durchdringungsfreiheit geologischer Körper in openGEO zu gewährleisten, führt BGR eine von VIRTUS unabhängige Prüfung nach Devillers & Guigue durch. In dem grundsätzlich stabileren Verfahren wird zusätzlich eine

Koordinatentransformation von Double zu Integer durchgeführt, um die bei Double unvermeidlichen Rundungsfehler zu vermeiden. Erst das aus der Verschneidung von geologischem Modell und Grubengebäude neu entstandene VIRTUS-Modell wird mit den von IFF entwickelten Verfahren, wie Remeshing oder Mesh-healing, den Anforderungen der PLCs entsprechend konsistent entwickelt und weitergegeben.

*Übergabeformat:*

Das bereits in 2011 von BGR entworfene XML-Übergabeformat wurde in einigen Teilen noch mal überarbeitet, um die programmtechnische Seite zu vereinfachen sowie Benennung und Aufbau der Übergabegrößen besser zu strukturieren.

Dieses Format wurde für das Programm JIFE in Auftrag gegeben und hinsichtlich der Gesamtstruktur und der Angaben zur allgemeinen Geometrie und Finite-Element-Vernetzung bereits in 2012 umgesetzt. Die verbleibenden Arbeiten sind mit beauftragt und werden in 2013 realisiert werden.

*AP2: Materialparameter:*

Die im Rahmen des Literaturscreenings erstellte Liste von über 400 BGR-Veröffentlichungen wurde auf mechanisch relevante Daten von Steinsalz und andere relevante Geo-Materialien überprüft. Das erste Schwergewicht wurde auf rein elastische Parameter gelegt. Es zeigte sich, dass die elastischen Eigenschaften nicht-dilatanten Salzes formationsunabhängig sind. Die Angaben wurden erweitert um die theoretische Berücksichtigung eingestreuter Fremdmaterialien.

*AP3:*

Die Arbeiten zur Standardisierung von Arbeitsprozessen in Virtus wurden fortgeführt. Ebenso die Implementierung von Pipelines und deren Funktionen, Workflows – also Sammlungen parametrierter Funktionen – zu definieren und diese auf unterschiedliche Daten anzuwenden.

*AP4:*

Die Überarbeitung des geologischen Basismodells ist im Hinblick auf geologische Konstruktionsfehler abgeschlossen.

#### **4. Geplante Weiterarbeiten**

*AP1: Geologisches Modell:* Die Rückschreibemöglichkeiten des in VIRTUS mit einem prototypischen Grubengebäude verschnittenen geologischen Modells sowie die Rechenergebnisse der PLCs wird vorangetrieben.

*Übergabeformat:* Die Restarbeiten zur XML-Übergabedatei werden abgeschlossen und die binären VIRTUS-Importdateien (= JIFE-Exportdateien) werden ebenfalls realisiert.

*AP3:* Die Arbeiten werden fortgeführt.

*AP2:* Es wird überprüft, wieweit thermische Parameter durch allgemeine, formationsunabhängige Formeln erfasst werden können. Die mechanischen Parameter zum Kriechen und zur Schädigung von Salz werden in die Datenbank eingepflegt.

*AP4:* Die Geologie des Basismodells wird so angepasst, dass drei typische Versuchsanordnungen in VIRTUS aufbereitet und an die PLCs zur Bearbeitung weitergegeben werden können.

*AP5:* Es werden prototypische Berechnungen zur Streckenlagerung mit thermo-mechanischer Belastung durchgeführt.

#### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10921</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA- (TV1)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2011 bis 31.01.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 123.043,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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: Redaktionelle Arbeiten zu den Teilberichten.  
Diskussion von Wissensdefiziten.

AP4: Arbeiten sind abgeschlossen.

Allg.: Redaktionelle Arbeiten am Entwurf des Abschlussberichtes.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Allg.: Fertigstellung des Abschlussberichtes.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Wilsnack, Th.; Jobmann, M.; Gruner, M.: Design and hydraulic modelling of bentonite elements for shaft sealing systems. Poster P/MT/HP/7. "Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement" 22.-25 October 2012, Montpellier (France) – abstracts – p. 915-916.

<http://www.montpellier2012.com/doc/abstracts-montpellier-2012/index.html#/914/>

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10931</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA- (TV2)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2011 bis 31.01.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 240.168,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

- AP2: Im Berichtszeitraum wurde ein Berichtsentwurf erstellt, der exemplarisch die Durchführung eines ingenieurtechnischen Sicherheitsnachweises für einzelne Funktionselemente eines Schachtverschlusses im Salinar am Beispiel des VSG-Verschlusskonzeptes beschreibt (VSG = Vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben) nach Prüfung durch den Projektpartner abschließend überarbeitet.
- AP3: Der Berichtsentwurf, der die Charakterisierung der Größe der Auflockerungszone im Bereich von Schächten im Salinar am Beispiel von Gorleben und an generischen Beispielen für Schächte im Tonstein an potenziellen Standorten in Deutschland beschreibt, wurde nach Prüfung durch den Projektpartner abschließend überarbeitet.
- AP4: Im Rahmen dieses Arbeitspaketes wird beschrieben, welche allgemeinen und speziellen Anforderungen an die Konzeption und Herstellung von Schachtverschlussbauwerken speziell an Salz- und Tonsteinstandorten derzeit bestehen. Diese Anforderungen basieren grundsätzlich auf den Sicherheitsanforderungen des BMU und implizieren die in den FuE-Vorhaben ISIBEL und ANSICHT entwickelten bzw. in der Entwicklung befindlichen Sicherheits- und Nachweiskonzepte für Endlager an Standorten im Salz und Tongestein in Deutschland. Die Arbeiten wurden in einem Berichtsentwurf dokumentiert und dem Projektpartner zur Prüfung übersandt.
- AP5: Die Partner der IGD-TP haben einen Antrag auf Förderung ihrer Teilprojekte zum Thema „Plugging and Sealing“ in einem gemeinsamen Vorhaben mit dem Akronym DOPAS bei der Europäischen Kommission gestellt. Im Berichtszeitraum wurde im Rahmen der Verhandlung mit der EU-Kommission der Arbeitsplan des Projektes soweit überarbeitet, dass eine Unterzeichnung des Vertrages erreicht werden konnte.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Abschließende Bearbeitung des AP-Berichtes  
 AP3: Abschließende Bearbeitung des AP-Berichtes  
 AP4: Abschließende Bearbeitung des AP-Berichtes  
 AP6: Erstellung des Abschlussberichtes

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10941</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2011 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 852.100,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

Die numerischen Experimente mit dem SDP-Verfahren wurden abgeschlossen und dokumentiert. Das Verfahren scheint deutliche Vorteile bezüglich numerischer Effektivität und Robustheit gegenüber einfachen varianzbasierten Methoden wie FAST oder Sobol zu bieten.

Zur Problematik von Sensitivitätsanalysen bei korrelierten Eingangsparametern wurden einige Untersuchungen angestellt. Neben der Auswertung geeigneter Literatur wurden hierzu eigene Ideen verfolgt. Es konnte gezeigt werden, dass korrelierte Parameter durch eine geeignete Transformation entkoppelt werden können. Am Beispiel des Testfalls „Endlager für schwach- und mittelaktive Abfälle in einer Salzformation“ wurde untersucht, wie sich diese Transformation auf die Ergebnisse auswirkt. Bezüglich der Interpretation solcher Ergebnisse besteht weiterer Forschungsbedarf.

Es wurden weiterhin Literaturrecherchen sowie wissenschaftlicher Austausch betrieben. Der begonnene Gedankenaustausch mit Sandia Laboratories (USA) wurde bei einem weiteren Treffen fortgesetzt und vertieft.

Im Rahmen des 3. Deutsch-Amerikanischen Workshops zu Endlagern im Salz wurde das Projekt vorgestellt.

Folgende Fachkonferenzen wurden besucht:

- UCM 2012, 2.-4. Juli, Sheffield, UK.
- Wintersim 2012, 09.-12. Dezember, Berlin.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Untersuchungen zur Handhabung von Parameterkorrelationen sollen fortgesetzt werden. Bezüglich der Auswertung des typischen Outputs von Endlagermodellen soll untersucht werden, inwieweit sich die Aussagekraft und Robustheit der verschiedenen Verfahren zur Sensitivitätsanalyse durch geeignete Transformationen verbessern lässt.

Da die bislang für die Sensitivitätsanalysen verwendete Software Simlab 3.2 nicht weiter gepflegt wird, ist es notwendig, Alternativen zu identifizieren. Hierfür bieten sich bestimmte Routinen für die kommerzielle Plattform MATLAB sowie für die freie Software R an. Ein geeignetes Werkzeug soll ausgewählt und an die Erfordernisse angepasst werden. Dafür wird voraussichtlich ein Fremdauftrag erforderlich.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

D.-A. Becker: Investigations on Sensitivity Analysis of Complex Final Repository Models. 3<sup>rd</sup> US-German Workshop on Salt Research, Design and Operations, Albuquerque, NM, USA, October 2012.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10951</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2011 bis 31.05.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 588.400,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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:

Das von der DBE bereitgestellte Salzgrus-Material aus Gorleben wurde hinsichtlich der Korngrößenverteilung untersucht. Die Korngrößenverteilung stimmt sehr gut mit dem von der Firma k+s bereitgestellten Material aus Grasleben überein.

Hinsichtlich der Salzgruskompaktion wurden die Randbedingungen festgelegt und im Folgenden bei der Herstellung der Salzgrusproben angewendet. Dickschliffe der kompaktierten Salzgrusproben wurden noch nicht hergestellt.

Der im ersten Halbjahr 2012 begonnene erste Diffusionsversuch mit Grasleben-Salzgrus der Firma k+s wurde abgeschlossen und ausgewertet. Die eingesetzte Tracerkonzentration konnte in der gesättigten Salzlauge problemlos nachgewiesen werden. Der in diesem Versuch ermittelte Diffusionskoeffizient war jedoch sehr hoch und deutete darauf hin, dass die Probe in dieser Versuchsanordnung advektiv durchströmt wurde. Messungen des Flusses auf Quell- und Senkenseite der Diffusionszelle bestätigten dies. Aus diesem Grund wurde der Versuch abgebrochen.

Der Versuchsaufbau wurde angepasst, um eine advektive Strömung durch die Salzgrusproben zu verhindern. Dies betrifft vor allem den Einsatz von Fritten in den Diffusionszellen. Der Fluss auf der Quellen- und Senkenseite der Zellen wird regelmäßig durch Messungen des aufgefangenen Laugenvolumens an den Abläufen überprüft.

Vier weitere Diffusionsversuche mit Gorleben-Salzgrus mit Porositäten von 4,4 %, 5,9 %, 3,0 % und 1,2 % und einer Probenlänge von ca. 4 cm wurden begonnen. In diesen Versuchen wurden die Tracer Cs, Zn, I, Se, Nd und U mit Anfangskonzentrationen zwischen  $10^{-3} \text{ mol l}^{-1}$  und  $10^{-8} \text{ mol l}^{-1}$  eingesetzt.

Vorbereitung von zwei Diffusionsexperimenten mit einer Länge von ca. 4 cm.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Gegebenenfalls Herstellung und Auswertung von Dickschliffen.
- Analyse der in den vier durchgeführten Diffusionsversuchen gewonnenen Proben und Versuchsauswertung.
- Ggf. Anpassung des Versuchsaufbaus und der Tracerkonzentration.
- Vorbereitung von Salzgrusproben zur Durchführung weiterer Diffusionsexperimente.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10961</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 674.049,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

Das Redox- und Sorptionsverhalten von Np wurde untersucht in einer Ton-Suspension von OPA- bzw. COx-Ton und synthetischem Porenwasser (pH=7.6, Argon/1 % CO<sub>2</sub>). Hierzu wurde das Verhältnis von Feststoff zu Flüssigkeit S/L von 10 g/L bis 200 g/L variiert. Die Reaktionszeiten betragen 6 Wochen und 2 Monate. Für die Batch-Experimente wurde mit geringen Np-Konzentrationen von 10<sup>-7</sup> M gearbeitet, für die spektroskopische Charakterisierung mittels XAFS und XPS wurden die Experimente bei 10<sup>-4</sup> M angesetzt. Die experimentellen Daten wurden mit dem geochemischen Code PHREEQC modelliert, wobei das Oberflächenkomplexierungsmodell nach Bradbury and Baeyens (2SPNE SC/CE) angewandt wurde.

Die thermodynamische Redox-Speziation von Np in den Reaktionslösungen mit dem Speziationsprogramm Geochemists Workbench zeigt, dass Np bei den gemessenen Eh-Werten im tetravalenten Oxidationszustand vorliegen soll. Die Experimente zeigen allerdings, dass nach einer Reaktionszeit von 6 Wochen Np(V) die dominierende Oxidationsstufe ist. Die Sorption von Np(V) an OPA/COx konnte mittels dem 2SPNE SC/ME-Modell zufriedenstellend modelliert werden. Sie hängt vom S/L-Verhältnis ab und variiert von 15 bis 90 % sorbiertes Np(V). Im Zeitraum von 6 Wochen bis 4 Monaten erhöht sich langsam die Sorption des Np. Eine Erhöhung des log K<sub>ds</sub> von ~ 1.5 L/kg bis ~2.7 L/kg lässt auf eine Reduktion zu vierwertigem Np(IV) schließen. Die Np-Konzentration in Lösung lag dabei im Bereich 3x10<sup>-8</sup> bis 3x10<sup>-7</sup> M. Eine Modellierung nach dem Oberflächenkomplexierungsmodell für Np(IV) würde allerdings einen log K<sub>d</sub> von ~3.7 L/kg und eine Np-Konzentration in Lösung von < 1x10<sup>-8</sup> mol/L erwarten lassen. Damit ist offensichtlich, dass die gemessenen erhöhten Np-Konzentrationen nicht von einer Np(IV)-Sorption kontrolliert werden. Berücksichtigt man nun, dass Carbonat in Lösung vorhanden ist und dass Np-Carbonat-Komplexe gebildet werden können, so lassen sich die erhöhten Np(IV)-Löslichkeiten erklären. Hierzu müssen allerdings gemischte Hydroxid-Carbonat-Komplexe des Np(IV) angenommen werden, wie z. B. den Np(OH)<sub>3</sub>(CO<sub>3</sub>)-Komplex. Aus den erhaltenen Ergebnissen kann man schließen, dass es sich bei dem am Ton gebundenen Np nicht um eine Sorption bzw. Oberflächenkomplexierung handelt, sondern um eine Ausfällung als Np-(Hydr)oxid auf der Tonoberfläche. Mittels XAFS und XPS konnte bei höheren Konzentrationen von 10<sup>-4</sup> M nach einer Reaktionszeit bis 4 Monaten keine Reduktion beobachtet werden. Dies könnte darin begründet sein, dass entweder die Menge an reaktiven Reduktionsstellen auf dem Ton limitiert ist oder die Reduktions-Kinetik bei hohen Metall-Konzentrationen sehr langsam abläuft.

Mit Eu(III) wurde ein In-Diffusionsversuche an einem Illit-Kern bestehend aus kompaktiertem CatClay-Illit (aufgereinigter Illit-de-Puy, 8.18g, Durchmesser = 2.54 cm, Dicke = 1 cm, Kompaktierungsfaktor = 1.61 g/cm<sup>3</sup>, in 0.2 M NaCl) durchgeführt. Die Eu-Konzentration betrug hierbei 1.0x10<sup>-6</sup> M, und der pH-Wert 5.3. Die Laufzeit des Experiments betrug 152 Tage.

Innerhalb der ersten 60 Tage verringerte sich stetig die Eu-Konzentration in der Lösung und nach 152 Tagen wurde das Eu(III) fast quantitativ vom Illit aufgenommen. Der pH-Wert stieg allerdings von pH 5.3 auf pH 6.4, da die Lösung nicht gepuffert wurde. Eine Sorption des Eu(III) an kolloidalen Phasen in der Lösung konnte durch den Vergleich einer Ultrafiltration der Lösung bei 90 000 U über eine Stunde /min im Vergleich zur unfiltrierten Probe ausgeschlossen werden. Für eine weitere Charakterisierung des Illit-Kerns nach dem Experiment wurde die wässrige Lösung mit verschiedenen Mischlösungen an Methanol/Wasser ausgetauscht und mit Epoxy-Harz imprägniert. Durch die methanolischen Mischlösungen wurde hierbei kein Eu(III) mobilisiert. Damit ist diese Methode für „Post-Processing“-Untersuchungen mittels ortaufgelöster TRLFS (Kooperation UPPC) bzw. für Untersuchungen der Mikrostruktur geeignet. Die Charakterisierung des Illit-Kerns und die genauere Auswertung der Ergebnisse dauern noch an.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Alle beschriebenen Experimente werden fortgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10971</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 940.707,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Komplexierungs-, 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 Komplexierung 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 ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ) 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.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- U(VI)-Diffusion in Opalinuston in Ab- und Anwesenheit von Citronensäure unter anaeroben Bedingungen bei 25 °C: der Versuch wurde nach 3 Monaten beendet; Diffusionsprofile wurden bestimmt; ein signifikanter Effekt von Citronensäure auf das Uran-Profil ist zu beobachten.
- pH-abhängige U(VI)-Sorption an Illit in Ab- und Anwesenheit von  $\text{Ca}^{2+}$ : die Gegenwart von  $\text{Ca}^{2+}$  führt in Abhängigkeit vom pH-Wert zu einer Mobilisierung bzw. Immobilisierung des Urans.
- U(VI)-Sorption an Montmorillonit in NaCl ( $I \sim 1 \dots 3$  mol/kg): Ein Einfluss der Elektrolytkonz. wurde nur im sauren Bereich ( $\text{pH} < 6$ ) festgestellt. Im Vergleich zur Sorption bei  $I = 1,11$  mol/kg (einer Elektrolytkonz., die vom Quellverhalten des Montmorillonits her eine niedrige  $I$  darstellt) wird bei höheren  $I$  eine um etwa 5 bis 10 Prozentpunkte erniedrigte U(VI)-Sorption festgestellt. Im neutralen und basischen Bereich ist kein signifikanter Unterschied der Sorption zu erkennen.
- Der Einfluss der Elektrolytbestandteile von Tonporenwässern auf die WW von Actiniden mit Fulvinsäure als Modellkomponente für mobilisierbare Tonorganika wurde mittels Ultrafiltration untersucht.  $^{160}\text{Tb}$  wurde als Analogtracer für An(III) verwendet. NaCl,  $\text{MgCl}_2$  und  $\text{CaCl}_2$  wurden in Konz.  $\leq 4$  M eingesetzt. In Gegenwart von Ca wird die Fulvatkomplexbildung von Tb im molaren Konz.-bereich weitgehend unterbunden. Mg zeigt einen geringeren Effekt. Für Na wurde kein Einfluss festgestellt. Die Gesamtwirkung hoher Salinitäten auf das Mobilisierungspotential von Tonorganika kann erst im Ergebnis von Adsorptionsstudien vollständig bewertet werden.
- Die Wechselwirkung mehrwertiger Metalle mit natürlichem organischem Material kann kinetischen Stabilisierungseffekten unterliegen, was zu Unsicherheiten im Hinblick auf die Anwendbarkeit thermodynamischer Konstanten in Transportmodellierungen führt. Die Reversibilität des Prozesses wurde deshalb in Isotopenaustausch-Studien erstmals direkt und über einen längeren Zeitraum untersucht. Hierzu wurden Bindungsisothermen für  $[^{160}\text{Tb}]\text{Tb(III)}$  an Huminstoff-Flockulaten aufgenommen, wobei  $^{160}\text{Tb}$  als Radiotracer simultan oder nachträglich (nach verschiedenen Alterungszeiten des Komplexes von 1 bis 90 Tagen) eingeführt wurde. In allen Fällen wurde im Sättigungszustand ein ungehindertes dynamisches Austausch-Gleichgewicht festgestellt. Langzeitprozesse zulasten der Reversibilität treten also offenbar nicht generell auf.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Ausw. der Diffusionsprofile mit COMSOL Multiphysics 4.2a und Best. der Diffusionsparameter.
- Charakterisierung der U(VI)-Oberflächenspezies an Illit mittels TRLFS und ATR FT-IR.
- Untersuchung des Einflusses erhöhter Salinität ( $\text{CaCl}_2$ , KCl und  $\text{MgCl}_2$ ) auf die U(VI)-Sorption an Montmorillonit.
- Verifizierung der mittels Ultrafiltration gewonnenen Daten zur Fulvatkomplexbildung von Tb durch Einsatz Lumineszenz spektroskopischer Methoden (TRLFS); Bestimmung von Wechselwirkungsparametern für die Fulvatkomplexbildung von Na, Mg und Ca.
- Radiotraceruntersuchungen zur Adsorption von Actiniden ( $^{160}\text{Tb}$  als Analogtracer) an Opalinuston in Ab- und Anwesenheit von Organik mit NaCl,  $\text{MgCl}_2$  und  $\text{CaCl}_2$  in Konz.  $\leq 4$  M.
- Säulenversuche mit kompaktiertem Opalinuston zum Einfluss von Organik auf das Transportverhalten von Actiniden bei hoher Ionenstärke (Visualisierung mittels Positronen-Emissions-Tomographie unter Verwendung von  $^{86}\text{Y}$  als Analogtracer).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kremleva, A., Zhang, Y., Shor, A.M., Krüger, S., Joseph, C., Raditzky, B., Schmeide, K., Sachs, S., Bernhard, G., Rösch, N.: U(VI) complexation by sulfonate ligands: A relativistic density functional and time-resolved laser-induced fluorescence spectroscopy study. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2012, 3636 (2012).

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 temp. and humic acid. *Geochim. Cosmochim. Acta* (accepted).

Joseph, C., Stockmann, M., Schmeide, K., Sachs, S., Brendler, V., Bernhard, G.: Sorption of U(VI) onto Opalinus Clay: Effects of pH and humic acid. *Appl. Geochem.* (under review).

Zakhnini, A., Kulenkampff, J., Sauerzapf, S., Pietrzyk, U., Lippmann-Pipke, J.: Monte Carlo simulations of GeOPET experiments: 3D images of tracer distributions ( $^{18}\text{F}$ ,  $^{124}\text{I}$  and  $^{58}\text{Co}$ ) in Opalinus Clay, anhydrite and quartz. *Computers & Geosciences* (under review).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10981</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 498.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

Es wurden Batchversuche zur Sorption von Np(V) bei umweltrelevanten Konzentration an Opalinuston (OPA) und zum Vergleich an Montmorillonit (STx-1) und Kaolinit (KGa-1b) in unterschiedlich konzentrierten NaCl-Lösungen (0,1 M – 3,0 M) unter aeroben Bedingungen durchgeführt. Bei Np(V)-Konzentrationen zw.  $10^{-13}$  und  $10^{-8}$  M und einer OPA-Menge von 15 g/L war der  $\log(K_d)$ -Wert unabhängig von der Ionenstärke und betrug 2,7 (L/Kg). Die Sorption von  $3,5 \times 10^{-12}$  M Np(V) an Montmorillonit (17 g/L, 0,1 M und 1,0 M NaCl) wurde im pH-Bereich von 5 – 9 studiert, wobei die Sorpti-



on hierbei bis pH 7,9 zunahm und danach bis pH 8,9 durch Carbonatkomplexierung wieder abnahm. Die  $\log(K_d)$ -Werte betragen 2,3 (L/kg) bei pH 7,9 und  $\leq 0,7$  (L/kg) bei pH 5,3. Wie auch bei OPA hatte die Ionenstärke von NaCl keinen signifikanten Einfluss auf das Sorptionsverhalten von Np(V) an Montmorillonit. Die Batch-Experimente mit Kaolinit (15 g/L) und  $10^{-12}$  M Np(V) zeigten eine leichte Zunahme des  $\log(K_d)$ -Werts mit steigender Ionenstärke von 2,2 (L/kg) ( $I = 0,1$  M) bis 2,6 (L/Kg) ( $I = 3$  M).

Bei ersten Untersuchungen zur Sorption von  $8 \times 10^{-6}$  M Tc(VII) an OPA in synthetischem Porenwasser (pH 7,6) unter anaeroben Bedingungen wurde nur eine geringe Sorption von  $\leq 8$  % beobachtet. Durch die Zugabe von 0,5 g/L Mackinawit ( $\text{Fe}^{\text{II}}\text{S}$ ) zur OPA-Suspension sank der  $E_h$ -Wert der Lösung von +200 mV (in Abwesenheit von FeS) auf -96 mV (SHE) ab, woraufhin eine nahezu quantitative Sorption von Tc (99 %) festgestellt wurde.

In einer Messzeit an der Swiss Light Source konnte erstmals ein Diffusionsprofil von Pu in OPA mittels  $\mu$ -XRF gemessen werden. Die Speziation von Pu mit  $\mu$ -XANES ergab, dass das eingesetzte Pu(V) entlang seines Diffusionspfades zunehmend zu Pu(IV) reduziert wird. In zusätzlich untersuchten OPA-Dünnschliffen wurde mittels  $\mu$ -XRD eine Korrelation zwischen Pu(IV) und dem Tonmineral Illit festgestellt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchungen zum des Einflusses der Ionenstärke (0,1 – 3,0 M NaCl) auf die Sorption von Np(V) an OPA und STx-1 unter anaeroben Bedingungen und an Illit unter aeroben Bedingungen.
- Diffusionsexperimente mit Tc(VII) und OPA unter aeroben Bedingungen.
- Untersuchung des Einflusses von gelöstem Fe(II) auf die Sorption von Tc(VII) an OPA unter anaeroben Bedingungen.
- Eine Synchrotronmesszeit zum Thema „ $\mu$ -XRF,  $\mu$ -XANES and  $\mu$ -XRD investigations of Tc(VII) sorption on a natural clay“ ist für Mai 2013 geplant.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- N. Stöbener, S. Amayri, A. Gehl, U. Kaplan, K. Malecha, T. Reich, *Sensitive redox speciation of neptunium by CE-ICP-MS*, Anal. Bioanal. Chem., 404 (2012), 2143–2150.
- A. Damm, *Einfluss der Salinität auf die Sorption von Np(V) an Montmorillonit*, 2012 (Diplomarbeit).
- J. Rosemann, *Einfluss der Salinität auf die Sorption von Np(V) an OPA*, 2012 (Diplomarbeit).
- A. Gehl, *Speziation von Neptunium mithilfe der CE-ICP-MS*, 2012 (Diplomarbeit).
- T. Reich, *Study of neptunium sorption on clay and clay minerals using X-ray absorption spectroscopy*, NRC-8 Int. Conf. Nucl. Radiochem., 17.–21.09.2012, Como, Italien (Vortrag)
- T. Reich, *Application of X-ray absorption spectroscopy to environmental actinide chemistry*, 4<sup>th</sup> ANKA & KNMF User Meeting, 10.-12.10.12, Ettlingen (eingeladener Vortrag).
- U. Kaplan, *Micro-XRF/-XRD/-XANES study of Pu(VI) sorption and diffusion in Opalinus Clay*, Doktoranden-Seminar des DASp und des A.M.S.El., 09.–11.07.2012, Mainz (Vortrag).
- M. Lübke, *Neptunium(V) Sorption on Mackinawite (FeS)*, Interdisziplinäres Doktoranden-Seminar des DASp und des A.M.S.El., 09.–11.07.2012, Mainz (Vortrag).
- N. Stöbener, *Resonance Ionization Mass Spectrometry (RIMS) for ultratrace detection of neptunium*, Doktoranden-Seminar des DASp und des A.M.S.El., 09.–11.07.2012, Mainz (Vortrag).
- S. Amayri, *Speciation and distribution of plutonium after uptake by Opalinus Clay using synchrotron microbeam techniques*, ATAS-Workshop, 05.–07.11.2012, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Dresden (Poster).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität des Saarlandes, Campus der Universität des Saarlandes, 66123 Saarbrücken		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10991</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 583.573,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kickelbick	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter (Metall-Konzentration, pH, Temperatur, Salinität) auf die Sorption von Eu(III), Gd(III) und U(VI) in Opalinuston mit Hilfe von Batch-Versuchen (binäres System)
- AP2: Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter (Metall-Konzentration, pH, Temperatur, Salinität) auf die Desorption von Lanthanoiden und Radionukliden (Eu, Gd und U) in natürlichen Tonformationen mit Hilfe von Batch-Versuchen (binäres System)
- AP3: Bestimmung der Einflüsse von Tonorganik (Lactat, extrahierte Tonorganik bzw. Huminsäure) und anorganischer Komplexliganden (Borat) auf die Sorption von Lanthanoiden und Radionukliden (Eu, Gd und U) an Tongestein bei Grundwasserbedingungen mit hohen Salinitäten (ternäres System bei salinaren Bedingungen)
- AP4: Untersuchungen zum Komplexierungsverhalten von Uran und Lanthanoiden (Eu, Gd) mit organischen Komplexliganden (Lactat, <sup>13</sup>C-Lactat, extrahierte Tonorganik und Aldrich-Huminsäure zum Vergleich mit vorhandenen Ergebnissen) und mit anorganischen Komplexliganden (Borat) im Übergang von wässrigen Lösungen auf salinare Systeme durch Speziation mittels <sup>11</sup>B NMR, <sup>13</sup>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 Optimierungen zum Proben Clean-up für Proben mit hoher Ionenstärke durchgeführt. Dabei erwies sich Chelex 100 (Bio-Rad Laboratories, Hercules, USA) als Ionenaustauscher für Europium als geeignet. Mit Uran konnten bisher jedoch keine befriedigenden Ergebnisse erzielt werden. Um die Wiederfindung der Proben zu bestimmen, wurde vor dem Clean-up Terbium als interner Standard hinzugefügt. Danach wurden die Proben für den Ionenaustausch auf pH 5 eingestellt. Der pH-Wert wurde gewählt, weil bei ihm noch eine hohe Sorption des Europiums am Ionenaustauscher beobachtet werden konnte, aber auch weil das Europium im Anschluss wieder gut mit 1 M Salpetersäure eluiert werden konnte.

Alternativ zum Proben Clean-up wurde eine transiente ICP-MS Messung etabliert, bei welcher die Proben ohne Clean-up-Schritt vermessen werden können, da sie nur bis zu 10 Sekunden in die ICP-MS eingeführt werden und zudem noch online verdünnt werden. Anhand von pH-edges in Natriumperchlorat-Lösung wurde diese transiente Messung mit der herkömmlichen ICP-MS Messung verglichen, wobei die Graphen sehr gute Übereinstimmungen zeigten. Zudem zeigen die Ergebnisse zwischen transients Messung und Proben Clean-up ebenso gute Übereinstimmungen. Beide Methoden liefern wahre und reproduzierbare Ergebnisse. Mit Hilfe beider Methoden konnten pH-edges für Europium in Natriumperchlorat-Lösung, in 1 M und 3 M NaCl-Lösung aufgenommen werden.

Außerdem wurde im Berichtszeitraum mit den Batch-Versuchen zur Bor-Sorption an Opalinuston (OPA) in Abhängigkeit vom eingestellten pH-Wert und Salinität (NP bzw. NaCl) begonnen. Laut Literatur ist eine Sorption von Bor am Ton zu erwarten, Ergebnisse zur Auswirkung letzterer auf eine (zeitlich nachfolgende) Sorption von Europium liegen jedoch zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht vor.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die begonnenen Batch-Versuche zum Borat-Einfluss sollen fortgesetzt und auf hohe Salzkonzentrationen erweitert werden. Zudem soll der Einfluss einer Derivatisierung des OPA durch eine mögliche Bor-Anlagerung auf die Sorption von Europium analysiert werden. Unterstützend und vergleichend zu den Batch-Versuchen zur Bor-Sorption soll mit LC-Miniatur Säulenversuchen zur Bor-Sorption an OPA begonnen werden. Die Speziationsuntersuchungen anhand von NMR sollen um Lactat als Komplexbildner für Europium erweitert werden.

Die aufgenommenen pH-edges für Europium sollen noch für ternäre Bedingungen (Ton, Eu, Huminsäure) und hohen Ionenstärken wiederholt werden. Zudem soll der Einfluss von Temperatur auf die pH-edges untersucht werden. Nach Vollendung der Untersuchungen zu den pH-edges von Europium werden als nächstes Versuche zur Desorption im binären und im ternären System durchgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Möser, C., Beck H.P. & R. Kautenburger (2012): Complexation of Europium and Uranium by Humic Acids Analysed by Capillary Electrophoresis - Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry. *Electrophoresis* 33, 1482-1487.

Kautenburger R. (2012): Neue Zeitskala für Migrationsexperimente - Miniatur-Säulenexperimente als Bindeglied zwischen Batch- und Diffusionsversuchen. Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, 03.05.2012 (Vortrag).

Kautenburger R. (2012): Metal Mobility in Clay Formations – From Batch Experiments to New Column Setup with Compacted Clay. Chemiedozententagung, Freiburg, 06.03.2012 (Vortrag).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11001</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 566.966,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Phyrophyllit 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.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11011</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 340.296,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

Lumineszenzuntersuchungen von Eu(III) bei Ionenstärken  $I < 5$  (für NaCl bzw. NaClO<sub>4</sub>) bzw.  $I < 3,5$  (MgCl<sub>2</sub> bzw. CaCl<sub>2</sub>) für  $2 < \text{pH-Wert} < 6,5$  ( $T = 293 \text{ K}$ ) in H<sub>2</sub>O bzw. D<sub>2</sub>O (NaCl und CaCl<sub>2</sub>) sind abgeschlossen. In Anwesenheit von niedermolekularen organischen Säuren (NOS) wurden ebenfalls verschiedene spektroskopische Parameter ( $\tau$ ,  $R$ ) bei hohen Ionenstärken (s. o.) und verschiedenen pH-Werten (s. o.) gemessen. Zusätzlich wurde für aromatische NOS die Photophysik des Liganden untersucht. Es wurde die Änderung der Quantenausbeute des Liganden bei Raumtemperatur und  $T = 77 \text{ K}$  (unter Berücksichtigung der Phosphoreszenz) und die Energietransfereffizienz Ligand-Lanthanid-Ion charakterisiert. Die mögliche Beeinflussung der Komplexierung von Eu(III) durch NOS bei Anwesenheit von Borsäure wurde weiter charakterisiert. Als NOS wurde Glykolsäure eingesetzt. Als spektroskopische Daten für Eu(III)-Borsäure-Komplexe liegen Lumineszenzabklingzeiten und zeitaufgelöste Lumineszenzspektren zur Bestimmung des Asymmetrieverhältnisses vor. Des Weiteren wurden die Untersuchungen in An- und Abwesenheit von CO<sub>2</sub> durchgeführt und die Bildung von (gemischten) Carbonat-Komplexen hinterfragt. Die Komplexierung von Eu(III) durch aquatische und bodenbürtige Huminstoffe (FA bzw. HA) bei Ionenstärken  $I = 0,5$  bzw.  $3$  sowie unter Einbeziehung eines möglichen Temperatureinflusses ( $T = 20 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $35 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $50 \text{ }^\circ\text{C}$ ) wurde untersucht. Dazu wurden die intrinsische Huminstofffluoreszenz sowie die sensibilisierte Eu(III)-Lumineszenz gemessen und mit Hinblick auf die Bestimmung von konditionellen Bindungskonstanten ausgewertet. Mittels SFG-Spektroskopie wurden verschiedene Mineraloberfläche sowie die Adsorption von organischen Molekülen auf diesen charakterisiert. Zunächst wurden als Modellsysteme Quarz und Glimmer in Ab- und Anwesenheit von n-Alkylsilylchloriden gewählt, wobei die Länge  $n$  der Alkylkette im Bereich zwischen  $1 < n < 16$  variiert wurde. Oberflächenspezifisch konnten zunächst die OH-Gruppen der Mineraloberflächen sowie Defekte in der Sorbatschichten der n-Alkane beobachtet werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Arbeiten zum Einfluss der Ionenstärke und Temperatur auf die Komplexierung von Eu(III) durch kleine organische Liganden.
- Die Komplexierung von Eu(III) durch niedermolekulare organische Säuren (z. B. Glykolsäure) in An- und Abwesenheit von Borsäure wird mittels Lumineszenz weiter untersucht.
- Die Komplexierung von Eu(III) durch Modellpolymere sowie durch Referenz-Huminstoffe bei hohen Ionenstärken bzw. erhöhten Temperaturen wird mittels stationärer und zeitaufgelöster Lumineszenzspektroskopie weiter charakterisiert.
- Die Sorption von Eu(III) bzw. von niedermolekularen organischen Liganden auf Mineraloberflächen wird mittels Raman- und SFG-Spektroskopie bzw. mittels Kraftfeldmikroskopie weiter charakterisiert, wobei Metallionen als weitere Einflussgröße in die Untersuchungen einbezogen werden.

### 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 (eingereicht), Potsdam 2012

Marian Süßmann „*Einfluss von Temperatur und Ionenstärke auf die Komplexierung von Europium(III) mit Huminstoffen*“, Bachelorarbeit, Potsdam 2012

Melissa-Jane Monks „*Lumineszenz-basierte Speziation von Europium(III)-Borat-Komplexen*“, Bachelorarbeit, Potsdam 2012

Julia Prinz „*Untersuchung der Sorption von organischen Substanzen an Alumosilikat-Modelloberflächen mittels Schwingungsspektroskopie*“, Masterarbeit, Potsdam 2012

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11021</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 315.249,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Datenbasen schließen. Erstmals sollen Am(III)-Boratspezies in Lösung direkt spektroskopisch und thermodynamisch charakterisiert werden.

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Einsatz der Mikrotitrationskalorimetrie:

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,  $\text{MgCl}_2$ ) 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,  $\text{MgCl}_2$ ) und Temperatur (bis 80 °C).



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### Isotherme Mikrotitrationskalorimetrie (ITC)

Mittels ITC wurden die Enthalpien der Komplexbildungsreaktion von  $\text{Nd}^{3+}$  mit Malonsäure ( $T=25\text{ °C}$ ,  $\text{pH}=6$ ,  $I = 0,1 \dots 3,0 \text{ mol/kg}$ ) bestimmt. Vorhandene Literaturwerte für  $I = 1\text{ m}$  konnten reproduziert und Werte für  $I > 1\text{ m}$  erstmalig bestimmt werden. Mit steigender Ionenstärke nehmen die Komplexbildungsenthalpien ab.

#### AP1:

Mittels Laser-induzierter Fluoreszenzspektroskopie (TRLFS) wurde die Bildung einer Eu(III)-Polyborat-Festphase bei  $\text{pH } 6$  in Anwesenheit von Polyboraten beobachtet ( $0,2 \dots 0,7 \text{ M B(OH)}_3$ ,  $\text{NaClO}_4$ -Konzentration  $0,1 \dots 3 \text{ m}$ ). Die Eu-Borat-Festphase wird ab einer  $\text{B(OH)}_3$ -Konzentration von  $0,4 \text{ M}$  für alle  $\text{NaClO}_4$ -Konzentrationen beobachtet. Je höher die  $\text{B(OH)}_3$ -Konzentration, desto schneller erfolgt die Feststoffbildung. Dies korreliert mit  $^{11}\text{B}$ -NMR-Untersuchungen, die zeigen, dass Polyborate ab  $0,4 \text{ M B(OH)}_3$  ( $\text{pH } 6$ ,  $c(\text{NaClO}_4)$  variabel) existieren (siehe Ausführungen weiter unten). Die Bildung von Eu(III)-Borat-Kolloiden kann weitestgehend ausgeschlossen werden, wie Filtrationsexperimente mit Filtern verschiedener Porengrößen ergaben.

Mittels  $^{11}\text{B}$ -NMR wurde die Polymerisierung von Borsäure bei  $\text{pH } 6$  und verschiedenen  $\text{NaClO}_4$ -Konzentrationen ( $0,1 \dots 3 \text{ m}$ ) untersucht. Ab  $0,4 \text{ M B(OH)}_3$  können Polyborate (Tri- und Pentaborat) im Verhältnis von ca. 1:1 nachgewiesen werden. Die Konzentration der jeweiligen Polyborate steigt mit steigender eingesetzter  $\text{B(OH)}_3$ -Konzentration ( $> 0,4 \text{ M}$ ). Das Verhältnis beider Polyboratspezies zueinander bleibt konstant. Der Gesamtpolyboratanteil beträgt etwa  $2\%$  ( $\sim 0,01 \text{ M}$ ) in  $0,7 \text{ M B(OH)}_3$ . Es kann keine Abhängigkeit der Polyboratspeziation von der  $\text{NaClO}_4$ -Konzentration festgestellt werden. Auch ein Elektrolytwechsel zu  $\text{NaCl}$  führt zu keinen Veränderungen in der Speziation. Die Polyboratspeziation bleibt über einen weiten Zeitraum (mindestens 6 Monate) stabil.

Mittels TRLFS wurde beobachtet, dass die Komplexbildung von Eu(III) mit Salicylat, Lactat und 3-Hydroxybutyrat durch die Bildung von Ligand-Borsäureester beeinflusst wird. Die vorläufigen Stabilitätskonstanten (mittels potentiometrischer Titration bestimmt) betragen für den  $\text{B(OH)}_3$ -Salicylat (sowie für den -Lactat und -3-Hydroxybutyrat)-Ester  $\log \beta = 1,20 \pm 0,04$  ( $1,09 \pm 0,09$  und  $0,99 \pm 0,08$ ).

#### AP2:

Die Komplexbildung von Europium(III) mit Salicylsäure wurde bei Raumtemperatur bei hohen Ionenstärken ( $I = 1 - 3\text{ m NaCl}$ ) mittels TRLFS untersucht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der ITC-Experimente zur Bestimmung thermodynamischer Daten der Wechselwirkung Nd/Eu/Am mit kleinen organischer Liganden (speziell Malonsäure, Weinsäure, Oxalat)
- weitere Untersuchungen zur Polymerisierung von Borsäure mittels  $^{11}\text{B}$ -NMR-Spektroskopie in Abhängigkeit vom  $\text{pH}$  und der Salzkonzentration
- Fortführung der Arbeiten zur Charakterisierung der beobachteten Eu(III)-Polyborat-Festphase im  $\text{NaCl}$ -Medium
- Fortführung der Arbeit zur Bestimmung der Komplexbildung von dreiwertigen Actiniden und Lanthaniden mit Borsäure/Boraten in Anwesenheit von Organika (Salicylat, Lactat, 3-Hydroxybutyrat) unter Verwendung verschiedener Analysemethoden (potentiometrische Titration,  $^{11}\text{B}$ -NMR, UV/Vis-Spektroskopie, Fluoreszenzspektroskopie ...)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Astrid Barkleit, Margret Acker, Gert Bernhard: „Europium(III) Complexation with Salicylic Acid at Elevated Temperatures“, *Inorganica Chimica Acta* 394 (2013), 535-541

Astrid Barkleit, Margret Acker, Gerhard Geipel, Gert Bernhard: „Time-resolved laser-induced fluorescence spectroscopy (TRLFS) of aqueous Am(III) complexes at ambient and elevated temperature“, Poster und Beitrag zu Proceedings zum Internationalen Workshop „Advanced Techniques in Actinide Spectroscopy (ATAS)“, 5.-7.11.2012 im HZDR

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11031</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 196.296,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

Nach Abschluss der Untersuchungen zur Wechselwirkung von Cm(III) mit Propionat in verschiedenen Hintergrundelektrolyten (NaClO<sub>4</sub>, NaCl, CaCl<sub>2</sub>) wurden erste Messungen zur Komplexbildung mit Acetat durchgeführt. Diese erfolgten mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) unter Variation von Ionenstärke, Ligandenkonzentration und Temperatur. Die zunächst auf das CaCl<sub>2</sub> Medium beschränkten Untersuchungen lieferten thermodynamische Stabilitätskonstanten für die Bildung von [CmAc]<sup>2+</sup> und [CmAc<sub>2</sub>]<sup>+</sup>. Die Komplexbildungsreaktionen zeigen einen endothermen Charakter. Sowohl die Standardreaktionsenthalpien/-entropien als auch die Komplexbildungskonstanten liegen in einem ähnlichen Bereich wie die Werte der entsprechenden Propionat-Komplexe. Zudem konnten die Ion-Ion-Interaktionskoeffizienten für die Wechselwirkung der komplexierten Spezies ([CmAc]<sup>2+</sup>, [CmAc<sub>2</sub>]<sup>+</sup>) mit Chlorid bestimmt werden.

Aufbauend auf den TRLFS Untersuchungen im Cm(III)/Laktat-System wurden erste Hochtemperatur-EXAFS Messungen zur Komplexierung von Am(III) mit Laktat durchgeführt (T = 20-90 °C). Die Ergebnisse bestätigen in Übereinstimmung mit den fluoreszenzspektroskopischen Daten den exothermen Charakter der Komplexbildungsreaktion. Zudem konnten Strukturdaten der Am(III)-Laktat-Komplexe bestimmt werden. Die experimentell bestimmten Bindungsabstände zeigen, dass das Laktat sowohl über die Carboxyl- als auch die α-Hydroxy-Gruppe an das Americium gebunden ist, wodurch sich auch der Unterschied im Komplexbildungsverhalten verglichen mit den Anionen einfacherer organischer Säuren (Acetat, Propionat) erklärt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Komplexierung von Cm(III) mit Acetat in anderen Hintergrundelektrolyten (NaClO<sub>4</sub>, NaCl) bei erhöhten Temperaturen.
- Nachweis der [Cm(Prop)<sub>3</sub>] Spezies mittels TRLFS und Bestimmung der zugehörigen thermodynamischen Konstanten.
- Komplexierung von Cm(III) mit weiteren organischen Liganden (z. B. Oxalat) bei erhöhten Temperaturen.
- Komplexierung von Np(V) mit organischen Liganden bis 200 °C.
- EXAFS-Untersuchungen zur Komplexierung von Am(III) mit Acetat in Abhängigkeit des pH-Wertes.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Skerencak, A., Höhne, S., Hofmann, S., Marquardt, Ch., Panak, P.J., *Spectroscopic studies on the thermodynamics of the complexation of trivalent curium with propionate in the temperature range from 20 to 90 °C*, J. Sol. Chem, in press.

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

Fröhlich, D.R., Skerencak, A., Morkos, M.L.K., Panak, P.J., *A spectroscopic study of Cm(III) complexation with propionate in saline solutions at variable temperatures*, in preparation.

Skerencak, A., Panak, P. J., Fanghänel, T., *Complexation and thermodynamics of trivalent actinides under near-field conditions of a nuclear waste repository*, Workshop AG Chemie und Energie Energietransformationen - Die Rolle der Chemie, 15.11.2012 (Poster).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11041</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> 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		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2011 bis 30.09.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 707.587,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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<sup>3D</sup>* 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<sup>3D</sup>*, 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

Das Arbeitsprogramm ist entsprechend der gewählten Zielsetzung in folgende Arbeitspakete gegliedert:

- AP1: Datenaufarbeitung zu *FLAC<sup>3D</sup>* (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↔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: Wissenschaftlicher Erfahrungsaustausch mit dem LBNL → Erweiterung des Kenntnisstandes zu T und dem bestehenden T-F-Kopplungsansatz.
- AP3: Teilnahme am 4. internationalen TOUGH-Symposium in Berkeley, USA; Teilnahme an der 5. internationalen ANDRA-Tonsteinkonferenz in Montpellier, Frankreich.
- AP4/5: Ausbau der bestehenden F-T-Schnittstelle und -Kopplungsfunktionen, auch insbesondere hinsichtlich Zweiphasenfluss (→ Kapillardrücke und relative Permeabilitäten), thermische und hydraulische Quellen und Senken (→ zur Simulation von Erhitzertests) sowie Sättigungsrandbedingungen.
- AP7: Durchführung von diversen Testsimulationen mit T sowie von ersten Vergleichssimulationen mit FLAC an abstrahierten Modellbeispielen aus AP6 zum Zweiphasenfluss.
- AP8: Identifizierung des für ein Referenzbeispiel aus AP6 benötigten thermohydromechanischen Stoffmodells BBM im bestehenden T-F-Kopplungsansatz.
- AP9/11: Abteufen von vier Observationsbohrlöchern im URL Mont Terri inklusive Bohrkernkonservierung für Januar 2013 organisiert. Im Anschluss: Videoobservation, Kalibermessungen und Luftfeuchtigkeitsmessungen innerhalb der Bohrlöcher.
- AP10: Beschaffung von zusätzlichem Vorschubgestänge zur Observation tieferer Bohrlöcher.
- AP13: Ausrüstung zweier Kriechstände mit Apparaturen zur Luftfeuchtigkeitsregelung.

### **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.
- AP4/5: Implementierung des Stoffmodells BBM in F-T; Erweiterung der Schnittstelle und der Kopplungsroutinen nach Bedarf.
- AP7: Durchführung weiterer Testsimulationen an Modellbeispielen aus AP6 zur Behebung von verbliebenen Unstimmigkeiten und Unklarheiten.
- AP11: Bohrkernbeschaffung erfolgt im Januar 2013 im URL Mont Terri in Abstimmung mit der GRS Braunschweig und swisstopo.
- AP12: Durchführung von Bohrlochobservationsarbeiten am Standort Mont Terri ab Januar 2013 und weitere Wiederholungsmessungen am Standort Tournemire im 3. Quartal 2013.
- AP13/14: Erstellung des Laborprogramms erfolgt im Januar 2013 nach Abschluss der Bohrkernbeschaffungskampagne. Die Durchführung des Laborprogramms beginnt im unmittelbaren Anschluss.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11051</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2011 bis 30.09.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 183.075,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Röhlig	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Es wurden Rechenläufe mit unterschiedlicher Minimalschrittweite ausgeführt, um die Ergebnisse sowie die benötigte Rechenzeit in Abhängigkeit der Minimalschrittweite zu beurteilen. Zur Darstellung des Einflusses der Parameterkonstellation auf den Durchbruchzeitpunkt, wurden die Parameterränge je nach Durchbruchzeitpunkt des Abdichtungsbauwerks farbcodiert.

Das bisherige Nahfeldmodell wurde um Geosphäre und Biosphäre zu einem vollständigen Modell erweitert.

Für die neu durchgeführten Rechenläufe wurden, neben Verläufen und statistischen Lagemaßen, Mean Ranks Plots und Cusunoro-Plots erstellt sowie auch Pearson-Linear- und Spearman-Rang-Korrelationskoeffizienten ermittelt.

Zu Auswirkungen und Behandlung von Korrelationen wurden neue Samples mit Simple-Random- und Sobol-Quasi-Monte Carlo-Verfahren, jeweils mit und ohne Korrelation von zwei bestimmten Parametern, erstellt.

Die bisherigen Excel<sup>®</sup>-Umsetzungen wurden für eine zukünftig einfachere Handhabung in Matlab<sup>®</sup> umgesetzt. Diese umfasst, neben der Verlaufsdarstellung und statistischer Lagemaße, MaxPlots, Mean Ranks Plots, Cusunoro-Plots, Pearson-Linear- und Spearman-Rang-Korrelationskoeffizienten.

Teilergebnisse wurden im Oktober auf dem „3<sup>rd</sup> annual US/German Workshop on Salt Repository Research, Design & Operation“ vorgestellt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Ende Februar soll ein Beitrag für das OECD/NEA-Symposium „The Safety Case for Deep Geological Disposal of Radioactive Waste: 2013 State-of-the-Art“ eingereicht werden.

Die Problematik von Korrelationen und ihrer Auswirkung auf die Aussage der Sensitivitätsanalyse soll tiefergehend untersucht werden, insbesondere durch Veränderung des Simulationsmodells in Hinblick auf die korrelierten Parameter.

Mittels EASI-Algorithmus sollen Sensitivitätsindices erster und zweiter Ordnung ermittelt werden.

Es soll ein Simulationsmodell für ein HLW-Endlager in Salz generiert werden. An diesem HLW-Modell sollen mindestens alle vorherigen Analysen wiederholt und im Kontext des Modells erneut bewertet werden.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11061 A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2011 bis 31.08.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 530.250,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 acht Arbeitsgespräche mit den drei am Projekt beteiligten Organisationen durchgeführt. Dabei wurden vor allem FEP-Inhalte, Themen zur Charakterisierung der Referenzregion und den Endlager- und Sicherheitskonzepten diskutiert.

- AP1: Das Endlagerkonzept wurde weiter diskutiert und verfeinert. Der mögliche Einfluss mikrobieller Prozesse im Nahfeld des Endlagers wurde von der GRS durch Herrn Meleshyn auf der Tagung „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“ in einem Vortrag mit dem Titel „Microbial processes relevant for the long-term performance of radioactive waste repositories in clays“ präsentiert und eine Veröffentlichung vorbereitet.
- AP2: Der Entwurf des Sicherheitskonzepts wurde auf Basis der durchgeführten Diskussion von der GRS weiter verfeinert.
- AP3: Von den der GRS zugeordneten FEP wurden 19 FEP für das Standortmodell Nord beschrieben und diskutiert. Die diskutierten FEP wurden überarbeitet und in die Datenbank eingetragen. Die von den anderen Organisationen vorgelegten FEP-Beschreibungen wurden kommentiert und auf den Projektsitzungen diskutiert.
- AP5: Auf der Basis des Endlagerkonzepts wurden erste Abschätzungen zur Gasproduktion im Endlager durchgeführt. Weiterhin wurden erste orientierende Rechnungen zur Radionuklidenausbreitung begonnen. Diese Rechnungen sollen das Systemverständnis verbessern und als Basis für das Nachweiskonzept dienen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Erstellung einer Datenbasis für die weiteren Betrachtungen. Diskussion und Verfeinerung des Endlagerkonzeptes insbesondere im Hinblick auf die Barrieren im Nahfeld.
- AP2: Anpassung des Sicherheitskonzepts an den Stand der Diskussion.
- AP3: Beschreibung und Diskussion der FEP-Inhalte für das Standortmodell Nord. Beginn der Bearbeitung der FEP für das Standortmodell Süd.
- AP5: Weiterführung der Rechnungen zur Radionuklidenausbreitung als Grundlage der Diskussion des Endlager- und Nachweiskonzepts. Zusammenstellung der für den Nachweis der radioologischen Sicherheit benötigten Eingangsdaten und Einschätzung der Anforderungen an die Daten auf Basis des bisherigen Erkenntnisstands.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Präsentation auf der Tagung „Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement“ (siehe auch unter Durchgeführte Arbeiten zum AP1).

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11061 B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2011 bis 31.08.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 319.866,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1:

Unter Berücksichtigung der geologischen Referenzprofile sollen ein Einlagerungskonzept sowie ein Verfüll- und Verschlusskonzept als Grundlage für die FEP- und Szenarienentwicklung sowie als Grundlage für den Integritätsnachweis der geotechnischen Barrieren entwickelt werden. Das derzeitige Einlagerungskonzept ist wirtsgesteinsspezifisch, aber nicht standortspezifisch und berücksichtigt die BMU-Sicherheitsanforderungen. Insgesamt befindet sich das Konzept aber noch in einem frühen Planungsstadium. So sind z. B. für die Dimensionierung der Barrieren noch Auslegungsrechnungen unter Berücksichtigung der geologischen Eigenschaften in den Endlagermodellgebieten Nord und Süd durchzuführen.

#### AP2:

In Vorbereitung numerischer Berechnungen zum Nachweis der Integrität der geologischen Barriere an einem 3D-Modell eines Endlagers im Tonstein werden von den Projektbeteiligten BGR und DBETEC Vergleichsberechnungen an einem vereinfachten Modell (Benchmark) durchgeführt. Ziel ist es, die eingesetzten numerischen Codes OpenGeoSys und FLAC3D hinsichtlich der Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu untersuchen, und diese nach Möglichkeit mit analytischen Lösungen zu verifizieren. Für die Vergleichsberechnungen wurde nach Abstimmung der Stoffmodelle und Parametersätze ein abgestuftes Vorgehen gewählt: Während der ersten beiden Schritte wurden die hydro-mechanische Reaktion des Gebirges auf die Hohlraumerstellung sowie die thermo-mechanische Reaktion auf den Wärmeeintrag untersucht. Die Gegenüberstellung der bis dato gewonnenen Ergebnisse, zeigt die Vergleichbarkeit der Lösungen beider Codes und damit die Einsetzbarkeit zum Nachweis der Integrität.

#### AP3:

Grundlage des Langzeitsicherheitsnachweises ist ein FEP-Katalog, der alle für die zukünftige Entwicklung des Endlagersystems relevanten Eigenschaften, Ereignisse und Prozesse beschreibt. Der FEP-Katalog berücksichtigt außerdem Anforderungen, die sich aus der Methodik der Szenarienentwicklung ergeben. So wurden Initial-FEP (wahrscheinliche FEP mit direkter Einwirkung auf die Initialbarrieren), die bedingten Eintrittswahrscheinlichkeiten der FEP und die Wechselwirkung mit anderen FEP identifiziert. Es wird sowohl für eine Referenzregion Nord (Unterkreidetone) als auch für eine Referenzregion in Süd (Opalinus-Ton) ein FEP-Katalog erstellt. Begonnen wurde mit den Arbeiten zur Erstellung des ersten FEP-Kataloges (Region Nord). Für beide FEP-Kataloge wurde eine FEP-Datenbank eingerichtet, die auf der VSG-Datenbank aufbaut. Die Zugangsdaten zu dem bei DBETEC eingerichteten Datenbank-Server wurden an die Projektpartner verteilt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der Benchmarkberechnungen unter zusätzlicher Betrachtung der Anisotropie der thermischen und hydraulischen Eigenschaften sowie der Kopplung aller betrachteter Prozessklassen (THM). Dokumentation der Ergebnisse in einem Technischen Bericht.

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Lommerzheim, A. (2012): Einlagerungskonzept sowie Verfüll- und Verschlusskonzept für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle im Tongestein, FuE-Vorhaben AN-SICHT, Technischer Bericht (Entwurfssfassung 04.10.2012), DBETEC, Peine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11061 C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2012 bis 28.02.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 386.642,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Tongesteinformationen und zugehöriges Endlagerkonzept
  - AP2: Methodik des Sicherheitsnachweises für ein HAW-Endlager im Tongestein (Deutschland)
  - AP3: FEP-Selektion und Szenarienentwicklung
  - AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
  - AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tongestein
  - AP6: Berichtswesen
- Die BGR ist federführend für die Arbeitspakete 1 und 3.

Zu bearbeitende Unteraufgaben:

- AP1.1: Kriterien zur Auswahl von Referenzregionen und generischer Endlagerstandorte
- AP1.2: Zusammenstellung der Gesteinseigenschaften; Integritätsuntersuchungen
- AP1.3: Beschreibung der geologischen Standortmodelle „Nord“ und „Süd“.
- AP3.1: Prognose der weiteren geologischen Entwicklung der Referenzregionen „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 der Unteraufgabe 1.1 mit der Erstellung eines Berichts abgeschlossen. Zur Unteraufgabe 1.2 liegt ein Berichtsentwurf vor; Entsprechendes gilt für 1.3 (Berichtsentwurf zur Beschreibung des Endlagerstandortmodells NORD).

Im Rahmen des AP3 wurde mit einem Bericht zur geologischen Langzeitprognose jeweils für die Endlagerstandortmodelle NORD und SÜD (3.1) und mit der Beschreibung der geologischen FEPs für das Modell NORD (3.2) begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fertigstellung des Berichts zur Unteraufgabe 1.2 und 1.3. Erstellung von zwei Berichten über die Ergebnisse der Arbeiten zur Unteraufgabe 3.1.

Mit der Beschreibung der geologischen FEPs für das Endlagerstandortmodell SÜD wird begonnen.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11062 A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit d <sup>3</sup> f und r <sup>3</sup> t (H-DUR)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2012 bis 31.08.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.179.070,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Schneider	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen d<sup>3</sup>f und r<sup>3</sup>t 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<sup>3</sup>f und r<sup>3</sup>t, 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<sup>3</sup>f und r<sup>3</sup>t 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 30. November fand das erste Projekt-Statusgespräch bei der GRS in Braunschweig statt. Alle Arbeitsgruppen stellten ihre ersten Arbeiten zum Projekt vor und verständigten sich über das weitere Vorgehen.

Die Vorarbeiten am graphischen Benutzerinterface wurden fortgesetzt. Das Konzept der Eingabe der physikalischen Parameter wurde diskutiert. Unter anderem wurde analysiert, inwieweit das von der AG Wittum genutzte Graphikprogramm ParaView unsere Anforderungen an einen Postprozessor erfüllt und im Rahmen der vrl-Umgebung für uns nutzbar gemacht werden kann.

Mit der systematischen Überprüfung der Funktion der Quellen und Senken in  $d^3f$  wurde begonnen.

Mit der Simulation ausgewählter Systeme (AP8) konnte aufgrund eines unerwarteten Personalengpasses noch nicht begonnen werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Mit der Erarbeitung der Konzepte für die Implementierung der Cauchy-Randbedingung und der Bilanzierungsmethoden wird begonnen.
- Die Überprüfung der Funktionsweise der in  $d^3f$  und  $r^3t$  implementierten Quellen und Senken wird überprüft.
- Die Beschreibung der Benutzeroberfläche und die Vorarbeiten werden weitergeführt.
- Testfälle werden ausgewählt.

Das zweite Statusgespräch wird im Frühjahr 2013 stattfinden.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11062 B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2012 bis 28.02.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 185.266,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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**

- Das Ziel dieses Arbeitspaketes ist die Herleitung einer Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung von gelösten Konzentrationen, um die Unsicherheiten quantifizieren zu können. Innerhalb dieses Projekts soll die gesamte Wahrscheinlichkeitsverteilung der Konzentration berechnet werden. Ein Ansatz zur Berechnung der Unsicherheiten sind Monte-Carlo-Simulationen. Allerdings sind diese durch einen sehr hohen Rechenaufwand gekennzeichnet, insbesondere dann, wenn eine große Anzahl einzelner Simulationen berechnet werden muss. Deshalb wird hier ein anderer Ansatz verfolgt. Dabei soll zunächst die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Lösungskonzentration mit dem Ansatz von Colucci et al. (1998) hergeleitet und diese anschließend berechnet werden.
- Die Projektstelle konnte mit einem ausgewiesenen Wissenschaftler besetzt werden (Dr. Jude Musuza).
- Die Einarbeitung in die Methode von Colucci ist erfolgt und die Gleichung, für die Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Konzentration konnte hergeleitet werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Herleitung der Parameter für die Bewegungsgleichung der Wahrscheinlichkeitsverteilung.
- Lösung der Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Konzentration in 2D.
- Vergleich der Ergebnisse mit Monte-Carlo-Simulationen.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11062 C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2012 bis 31.05.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 653.031,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

In einem ersten Schritt wurden Datenstrukturen und Methoden zur Realisierung strukturierter Gitter entwickelt, um einen einfachen und effizienten Speicherzugriff auf Multicore- und Systemen mit Beschleunigerhardware zu gewährleisten. Unter Beschleunigerhardware zählen wir hierbei die GPGPUs und Coprozessor-Karten wie Intels Xeon Phi. Als Modellproblem wurde die Konvektions-Diffusions-Gleichung auf einem strukturiertem Gitter gewählt. Sie wird mit einem geometrischen Mehrgitterverfahren gelöst, da dies eine optimale Komplexität aufweist. Auf vielen Systemen stellt der Speicherzugriff einen Flaschenhals dar. Daher wurde der Ansatz verfolgt, die Diskretisierungsmatrix nicht zu speichern, sondern jeweils nur die für die Berechnung nötigen Teile lokal zu diskretisieren. Für die Auswertung des Matrix-Vektor-Produktes sind dadurch nur noch ungefähr halb so viele Speicherzugriffe notwendig. Dazu wurde ein Framework entwickelt, das den gleichen Code für CUDA, OpenCL, die Ausführung auf Multicore-CPU-Systemen (OpenMP), und die Ausführung ohne Hilfsfunktionen auf der CPU verwendet. Es enthält Funktionen für die Finite-Differenzen-Diskretisierung, Matrix-Vektor-Produkte, Vektoroperationen, Funktionen für geometrische Mehrgitterverfahren, Glätter und Hilfsfunktionen, so dass das komplette Lösungsverfahren auf der Beschleuniger-Hardware laufen kann. Um bei der Berechnung der lokalen Teile der Diskretisierungsmatrix im Code flexible Koeffizienten zu verwenden (z. B. wenn der Diffusionstensor von  $x$ ,  $y$ ,  $t$  abhängt) muss man den Diskretisierungscode anpassen. Als weiteren Schritt entfernten wir die Notwendigkeit, diese Änderungen direkt im C-Code vornehmen zu müssen, um die Benutzerfreundlichkeit zu erhöhen. Wir entwickelten ein System, das den Code des Modells in der auch von UG4 verwendeten Skript-Sprache LUA einliest. In dieser einfach zu erlernenden Sprache muss der Benutzer Funktionen für die Diffusion, den Quellterm, die Geschwindigkeit und die Randwerte angeben. Diese werden vom Programm „JITSG“ (Just-In-Time Structured Grids) an die entsprechenden Stellen im C-Code gesetzt und mit dem entsprechenden Compiler (GCC für CPU-Code, NVCC für CUDA, OpenCL-API für OpenCL) in optimierten Maschinencode übersetzt und ausgeführt. Hierbei wird auch das Ändern und Steuern von Parametern von außen sehr vereinfacht. Die Matrix-Algebra in UG4 wurde umgestellt, um sie an die Beschleunigerhardware übergeben zu können. Des Weiteren wurden Vektoroperationen und Matrix-Vektoroperationen getestet.

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

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.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11072 A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K <sub>d</sub> -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2012 bis 30.11.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.189.335,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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<sub>d</sub>-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen, welches im Rahmen des Vorhabens ESTRAL entwickelt und in das Rechenprogramm r<sup>3</sup>t 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<sub>d</sub> Wert Matrizen  
(Gewinnung thermodynamischer Sorptionsdaten und K<sub>d</sub>-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.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11072 B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K <sub>d</sub> -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2012 bis 30.11.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 598.956,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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<sub>d</sub>-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen, welches im Rahmen des Vorhabens ESTRAL entwickelt und in das Rechenprogramm r<sup>3</sup>t 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<sub>d</sub> Wert Matrizen  
(Gewinnung thermodynamischer Sorptionsdaten und K<sub>d</sub>-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:

- Recherche zur Auswahl geeigneter Codes (PHAST, COMSOL, OpenGeoSys) für Vergleichsrechnungen zu r<sup>3t</sup>

AP3:

- Literaturrecherche zu geplanten Sorptionsexperimenten und spektroskopischen Untersuchungsverfahren
- Vorversuche zur Bestimmung der geeigneten fest-flüssig Verhältnisse für Orthoklas und Muskovit sowie zum Leachingverhalten von Orthoklas
- Vorversuche Auflösungs- und Sorptionskinetik im Durchfluss
- Planung der Experimente zur U(VI)-Sorption an Orthoklas und Muskovit

AP4:

- Recherche zur Implementierung zusätzlicher Prozesse in das PHREEQC-Inputfile für smart-K<sub>d</sub> Berechnung (Redoxprozesse, Ionenaustausch)

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Auswahl und Benchmark-Tests eines geeigneten Codes für Vergleichsrechnungen zu r<sup>3t</sup>

AP3:

- Sorptionsexperimente (Batch) zu U(VI) an Orthoklas und Muskovit
- Spektroskopie (TRLFS, IR) zu Oberflächenkomplexen des U(VI) an Orthoklas und Muskovit
- Planung der Experimente mit Np(IV)

AP4:

- Vertiefende Einarbeitung in PHREEQC zur Berücksichtigung weiterer relevanter Teilmoleküle (Ionenaustausch, Pitzer) und Einflussgrößen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11082</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> 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			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2012 bis 31.01.2015		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.08.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 713.390,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 rechenstechnisch 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: Hauptziel dieses Arbeitspaketes ist die Weiterentwicklung der Polyederstrukturen, um das Verformungsverhalten von Steinsalz mit allen Gesetzmäßigkeiten abzubilden. Insbesondere wurden Arbeiten für das Arbeitspaket 1.2 geleistet, welches die Implementierung leistungsfähiger Stoffmodelle als Hauptziel hat. Mit Hilfe der in VerA Phase I verwendeten Stoffmodelle konnte das makroskopische Verformungsverhalten in erster Näherung zufriedenstellend abgebildet werden. Hinsichtlich der mikromechanischen Prozesse gibt es jedoch noch weiteren Optimierungsbedarf, da insbesondere die Mikrorissentstehung und -entwicklung nicht mit Ergebnissen aus Laborversuchen korreliert. Aktuelle Forschungsergebnisse aus der Literatur belegen, dass Verformungen zwischen den Salzkörnern und innerhalb der Körner eng miteinander verknüpft sind und einen plausiblen Grund für die Mikrorissentstehung liefern. Eine derartige Verknüpfung ist jedoch bisher mittels der verwendeten Stoffmodelle nicht realisierbar. Im Rahmen des Arbeitspaketes wurden zunächst die materialkundlichen Grundlagen, die bei der Entwicklung eines passenden Stoffmodells zu berücksichtigen sind, erarbeitet.
- AP2: Ein wissenschaftliches Institut wurde mit der Durchführung von akustischen Emissionsmessungen an geeigneten Steinsalzproben beauftragt. Ziel ist den Kenntnisstand über die mikromechanischen Bruchprozesse zu verbessern, um letztendlich eine Validierung der numerischen Simulationen zu ermöglichen.
- AP4: Die nach Abschluss der In-situ-Injektionsarbeiten gewonnenen Bohrkerne (VerA Phase I) wurden geowissenschaftlich präpariert, um sie Anfang 2013 für mikrogefügekundliche Analysen bereitzustellen.
- AP5: Es wurde ein wissenschaftliches Institut beauftragt, ergänzende Langzeituntersuchungen zur Si-Löslichkeit von Silikatgel in salinaren Lösungen durchzuführen. Ziel der Untersuchungen sind detaillierte Erkenntnisse zur Abhängigkeit der Si-Löslichkeit von der  $MgCl_2$ -Konzentration. Der experimentelle Teil wird voraussichtlich im ersten Quartal 2013 abgeschlossen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.2: Im weiteren Verlauf soll mit externer Unterstützung untersucht werden, wie die erarbeiteten materialkundlichen Prozesse in einem Stoffmodell formuliert werden können.
- AP1.3: Anfertigung von Dünnschliffen geeigneter Steinsalzproben. Ziel ist die Anpassung der Polyederstrukturen an das Mikrogefüge von Steinsalz, um eine größtmögliche Übereinstimmung mit dem Mikrogefüge realer Steinsalzproben zu erreichen.
- AP4: Anhand von Dünnschliffen soll die Ausbreitung des Injektionsmittels visualisiert werden.
- AP5: Die Vorbereitungen für die Durchführung der Sorptionsversuche von endlagerrelevanten Elementen an Silikatgel bzw. MOC-Phasen sind abgeschlossen, so dass voraussichtlich mit diesen Experimenten im ersten Quartal 2013 begonnen werden kann.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Wagner, A., Konietzky, H., Otparlik, K., Müller, C., Lerch, C. (2012): Microstructure simulation based on discrete element models – theory and application in salt mechanics. In Konietzky, H. (ed.), 41. Geomechanik-Kolloquium, 16.11.2012, Freiberg.
- Müller, C. (2012): Microstructure simulation based on discrete element models. 3<sup>rd</sup> US-German Workshop, October 9-10, 2012, Albuquerque, NM, USA.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11092</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2012 bis 30.04.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.11.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 307.098,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. Mischo	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es soll eine Grundrezepturen 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  $< 10^{-14}$  m<sup>2</sup> 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: Charakterisierung von Salzgrusproben. Beschaffung des REPOPERM-Referenzmaterials

AP2: Vorbereitungen zum Beginn der Arbeiten

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: Untersuchung des Zusammenhanges zwischen Partikeleigenschaften von Salzgrus und der erforderlichen Bindemittelzugabemenge

Bestimmung der Viskosität und der Benetzungseigenschaften von MgO- und CaSO<sub>4</sub>-haltigen Suspensionen an Steinsalz

AP2: Definition der notwendigen Ansätze  $K^+ : Mg^{2+} : Ca^{2+}$  und Ableitung von Basisrezepturen für die Polyhalitbildung

Einfluss der CaSO<sub>4</sub>-Modifikation und der Abbinde temperatur auf die Kinetik der Polyhalitbildung

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11102</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2012 bis 31.12.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.08.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.296.429,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 der IGSC.
- Abstimmung des IGSC-Arbeitspapiers „Relevance of gases in the post-closure Safety Case“ mit den beteiligten Institutionen und Vorstellung auf der IGSC-Sitzung.
- Organisation und Durchführung des Workshops “Natural analogues for Safety Cases of repositories in rock salt” des Salt-Clubs der OECD/NEA. Vorstellung von Beiträgen zum Deutschen Endlagerprogramm, zu der deutschen Strategie zur Verwendung von Analoga für das aktualisierte Sicherheitsnachweiskonzept sowie zu Mikroben im Steinsalz.
- Beginn der Arbeiten zusammen mit US-DOE zu einem gemeinsamen FEP-Katalog und zum Salt Archive im Rahmen des Salt Clubs. Teilnahme an den Salt-Club-Workshops in Albuquerque und Paris.
- Organisation und Durchführung der Abschlussveranstaltung zum Natural Analogue Project „Ruprechtov“ in Karlsbad.
- Teilnahme an dem Jahrestreffen zum EU-Vorhaben „First Nuclides“ mit Präsentation der derzeitig verwendeten Mobilisierungsmodelle für abgebrannte Brennelemente.
- Teilnahme am Vorbereitungstreffen zum Vorhaben CAST und Vorstellung der geplanten Modellrechnungen zu Bildung und Ausbreitung von C-14 von Seiten der GRS.
- Teilnahme an der 75. Sitzung des Arbeitskreises HAW-Produkte.
- Teilnahme am IAEA/RAWRA/SNL Meeting in Prag mit Vorstellung von GRS-Modellrechnungen zum Radionuklidtransport in geklüfteten Medien.

TA2:

- Teilnahme am Joint Meeting der EBS und Groundwater Task Force.
- Fortsetzung des Aufsättigungsversuchs aus dem vorigen Projekt und Konzeption eines isothermen Aufsättigungsversuchs mit eingeschränkter Wasserzufuhr.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung des RWMC.
- Erstellung der Proceedings für den Natural Analogue Workshop “Natural analogues for Safety Cases of repositories in rock salt”.
- Teilnahme am internationalen Symposium „Gas generation & migration“ in Luxemburg und Vorstellung der Inhalte des IGSC Position Papers zum Thema Gase.
- Teilnahme am 13. NAWG Workshop in Nagoya mit Beiträgen über den Natural Analogue Workshop in Braunschweig und aktuelle Ergebnisse zu Analoga für das deutsche Konzept.
- Beginn der Arbeiten zur Bildung und Ausbreitung von C-14 in einem Endlager im Salz.
- Beginn der Arbeiten zur Quantifizierung der Einflüsse von Mikroben auf die relevanten Prozesse in einem Endlager im Ton.

TA2:

- Planung der Arbeiten zur Entwicklung methodischer Ansätze im Hinblick auf die Abwägung zwischen Sicherheit in der Betriebsphase und Langzeitsicherheit.
- Fortsetzung, bzw. Beginn der Aufsättigungsversuche.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11112</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Auswirkungen der Sicherheitsanforderungen Rückholbarkeit auf existierende Einlagerungskonzepte und Anforderungen an neue Konzepte (ASTERIX)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 201.913,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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:

Im Berichtszeitraum wurde eine Literaturrecherche zur Rückholung erstellt und die Ergebnisse dokumentiert. Die in den Sicherheitsanforderungen des BMU vom September 2010 enthaltenen Definitionen wurden analysiert und ins Verhältnis gesetzt zu international verwendeten und akzeptierten Definitionen (z. B. von OECD/NEA und IAEA). Darüber hinaus wurde eine rechtliche Einordnung der Sicherheitsanforderungen vorgenommen, um mögliche genehmigungsrelevante Konsequenzen erkennen zu können. Aus der rechtlichen Einordnung der BMU-Sicherheitsanforderungen in das gesetzliche Regelwerk kann schlussgefolgert werden, dass durch den bindenden Charakter der Sicherheitsanforderungen für den Antragsteller diese auch eine Genehmigungsvoraussetzung sind. Als eine Art konkretisierende Verwaltungsvorschrift geben die Sicherheitsanforderungen somit detailliertere Anforderungen zur Beurteilung/Erteilung einer Planfeststellung gemäß AtG. Dementsprechend müssen gemäß AtG die zur Rückholung geplanten technischen Maßnahmen auch dem Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen. Die Ergebnisse wurden in einem AP-Bericht dokumentiert.

AP2:

Es wurden Betrachtungen zu wirtsgesteinsspezifischen Auswirkungen der Anforderung "Rückholbarkeit" angestellt, um die Analyse einzelner Endlagerkonzepte vorzubereiten. Für die drei im Wesentlichen in Frage kommenden Wirtsgesteine, Salz, Ton und Kristallin wurden spezifische Aspekte zur Rückholung untersucht wie z. B. die Auffahrung von Hohlräumen und der Streckenausbau. Die jeweiligen geomechanischen/geotechnischen Verhältnisse des Wirtsgesteins beeinflussen die Vortriebstechnik und den nötigen Ausbaufwand maßgeblich. Während z. B. in Salz kein Ausbau erforderlich ist, muss dieser im Tonstein für länger zu nutzende Strecken vorgesehen werden.

AP3:

Die zu betrachtenden Endlagerkonzepte in den Wirtsgesteinen Salz, Tonstein und Granit wurden recherchiert und zusammengestellt und erste Überlegungen zur Umsetzung der Rückholungsanforderungen angestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Abschluss der Arbeiten zu diesem AP und Dokumentation der Ergebnisse in Form eines AP-Berichtes
- AP2: Weiterführung der Untersuchungen zu den wirtsgesteinsspezifischen Auswirkungen auf die Rückholung und Erstellung eines AP-Berichtes
- AP3: Weiterführung der Überlegungen zur endlagerkonzeptspezifischen Umsetzung der Rückholungsanforderung und Entwurf eines AP-Berichtes
- AP4: Herleitung von erforderlichen FuE-Arbeiten sowie notwendigen Demonstrationsversuchen beginnen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11122</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Systemverhalten und Systembeschreibung			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2016		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 443.525,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 gering-permeable störungsfreie Sorelbeton-Matrix ebenso beschreiben, wie die Korrosion auf Kontaktfugen an der Kontaktfläche Dichtbauwerk-Salzgebirge.

Das Vorhaben wird in enger Kooperation mit dem Vorhaben LASA (Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar) der GRS durchgeführt. Dadurch soll am Ende der beiden Vorhaben ein konsistenter Datensatz für THMC-Modellierungen zum Langzeitverhalten von Dichtbauwerken aus Sorelbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen vorliegen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Laborversuche

AP1.1: Herstellung des Sorelbetons und der Salzlösungen; AP1.2: Ermittlung von Materialkenngrößen des unkorrodierten Sorelbetons. Bestimmung der Permeabilitätskoeffizienten, Dichten und Viskositäten; AP1.3: Kaskadenversuche, Versuche zur Ermittlung des Reaktionspfades der Korrosion mit NaCl-, IP9 und IP21-Lösungen; AP1.5: Vorbereitung der Versuchsreihen; AP1.6: Durchführung der Versuchsreihen; AP1.7: Probenahme und Messungen; AP1.7.1: Matrixproben; AP1.7.2: Schnittflächenproben; AP1.7.3: Proben von realen Kontaktflächen; AP1.8: Röntgentomographische Untersuchungen; AP1.9: Auswertung der Messdaten

AP2: Modelltheoretische Arbeiten

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



- AP3: Simulationsrechnungen  
AP3.1: Geochemische Gleichgewichtsmodellierung der Ergebnisse aus den Kaskadenversuchen; AP3.2: Nachmodellierung der Versuchsergebnisse aus den Versuchsreihen  
AP4: Dokumentation der Ergebnisse und Abschlussbericht

### **3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

- AP1.1: Arbeiten weitestgehend abgeschlossen.  
AP1.2: Bruchfestigkeiten wurden ermittelt.  
AP2.1: Die existierenden thermodynamischen Daten wurden gesichtet.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Erstellung der QM-Dokumentation nach EN ISO/IEC 17020 und Fortsetzung der geplanten Arbeiten in der im Arbeitsprogramm beschriebenen Abfolge.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11132</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2016		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 491.350,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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**

Bei einem von der TUBA Freiberg in Kooperation mit der DBE Technology ausgerichteten ELSA Workshop im September 2012 wurden das Vorhaben LASA vorgestellt, ein Bezug zu dem EU-Projekt DOPAS hergestellt und über die geplante Vorgehensweise zur Integration der Ergebnisse in das ELSA Projekt diskutiert.

Im Nachgang zu diesem Workshop hat eine erste Kontaktaufnahme mit der DBE Technology stattgefunden, die die Beschaffung geeigneten Bohrkernmaterials zum Ziel hat.

Durchführung weiterer vorbereitender Arbeiten zur Vorhabensthematik.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Beschaffung geeigneten Bohrkernmaterials
- Durchführung erster orientierender laborativer Untersuchungen
- Durchführung erster orientierender modelltheoretischer Untersuchungen
- Dokumentation

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Czaikowski, O.; Rothfuchs, T.: DOPAS – Demonstration of plugs and seals. Deutsche Beiträge und ihre Verknüpfung mit dem Projekt ELSA. ELSA Workshop, 19. September 2012, Peine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11142</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 216.801,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 sind dabei 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: Beginn der gemeinsamen Beantwortung eines Fragebogens zusammen mit der DBE-Tec zum Thema „Design Bases, Reference Designs and Performance Demonstration of Plugs and Seals“. Grundlage der beschriebenen Referenzdesigns sind dabei die Arbeiten im Projekt VSG.

AP4: Teilnahme am Kick-Off Meeting für das EU-Projekt DOPAS bei Posiva in Finnland.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: Abschluss der Beantwortung des ersten Teils 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: Zusammenstellung der verschiedenen bestehenden konzeptuellen Modelle, zur Berücksichtigung der EDZ und der Betonkorrosion.

AP3: Erstellung eines Strukturmodells zur Durchführung zukünftiger integrierter Rechnungen auf Basis des Endlager- und Verschlusskonzeptes der VSG.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11152</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2016	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 297.778,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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**

Es wurde damit begonnen, die Planungsgrundlagen für verschiedene Abdichtungsbauwerke, die derzeit in den nationalen Endlagersystemen für Salz, Ton und Kristallin vorgesehen sind, zusammenzutragen bzw. zu entwickeln. Die Planungsgrundlagen basieren auf den Anforderungen in den jeweiligen gesetzlichen Vorschriften, den kurz- und langfristigen Funktionen des Endlagersystems und den spezifischen Aufgaben und Eigenschaften der Verschluss- und Abdichtungsbauwerke sowie der technischen Machbarkeit der Herstellungs- und Installationsmethoden für diese Bauwerke.

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. Ein dazu entwickelter und an die Projektpartner verteilter Fragebogen wurde für die deutsche Seite, in Zusammenarbeit mit der GRS, für das Wirtsgestein Salz bearbeitet und zur weiteren Auswertung versendet.

In dem vorliegenden Vorhaben sollen für die deutsche Seite speziell die Ausgangsbedingungen für die Planung, Entwicklung und den Test von Verschlusskomponenten eines Schachtverschlussystems verbessert werden.

Es soll aufgezeigt werden, unter welchen Bedingungen bisherigen geplante Elemente eines Verschlussbauwerkes gegebenenfalls durch andere ersetzt werden können, die in ihrer Funktion verbessert oder durch eine zusätzliche Sicherheitsfunktion im Rahmen des gesamten Verschlussbauwerkes ergänzt werden. Im Falle der in diesem Vorhaben behandelten Komponente „Stützelement“ wäre die Alternative zur Schottersäule eine Füllsäule aus hochverdichtetem Salzgrus oder Salzgrus-Bentonit Gemisch. Die Sicherheitsfunktion „Abstützung“ kann durch die Verwendung der alternativen Füllsäule um die Sicherheitsfunktion „langfristige Abdichtung“ ergänzt werden.

Die modelltheoretischen Arbeiten in diesem Vorhaben liefern dazu grundlegende Informationen zur Material- und Einbauspezifikation einer solchen Füllsäule. Es wurde damit begonnen, ein Partikelmodell zu entwickeln, mit dessen Hilfe unterschiedliche Korngrößen- bzw. Partikelverteilungen generiert und ein Verdichtungsprozess simuliert werden kann.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fertigstellung und Test des Partikelmodells zur Simulation von Verdichtungsprozessen.

### **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11162</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 30.838,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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:

Im Rahmen der Ermittlung und Zusammenstellung des Ausgangspunktes und der Randbedingungen für P&T in Deutschland wurde damit begonnen, den aktuellen Stand der Endlagerkonzeption/ -planung für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in Deutschland zu beschreiben. 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. Hierzu zählen zum einen die aktuellen Konzepte und Planungen, die im Rahmen der Vorläufigen Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (VSG) erarbeitet wurden und Demonstrationsversuche zur Direkten Endlagerung ausgedienter Brennelemente. Zum anderen gehören dazu auch F+E-Arbeiten für ein HAW-Endlager in Tonstein (z. B. FuE-Vorhaben ERATO).

AP2:

Die Definition der Szenarien und deren Ausarbeitung bilden die Grundlage für die sozialwissenschaftlichen Untersuchungen in Modul B. Es werden bis zu vier Szenarien definiert und für die Untersuchung der Szenarien werden Kriterien und Deskriptoren etabliert, die sozialwissenschaftliche Aspekte berücksichtigen. Im Rahmen eines Workshops aller Projektpartner und unter Beiziehung externer Sachverständiger und Interessenvertreter wurden vier Szenarien entworfen und diskutiert:

- 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.

Bei der Ausarbeitung der Vorschläge zur Szenariendefinition inklusive Referenzszenario und der Erarbeitung von Deskriptoren dazu wurden vor dem Hintergrund des Ausstiegsbeschlusses aus der Kernenergie Beiträge hinsichtlich der eingeschränkten Relevanz von P&T für die Endlagerung in Deutschland geliefert.

AP5:

Mit den Untersuchungen zu den Auswirkungen von P&T auf Endlagerkonzepte und Langzeitsicherheit von Endlagern wurde in Abstimmung mit GRS begonnen. Es soll untersucht und beschrieben werden, in welcher Weise sowohl die Endlagerauslegung (Art und Größe des Endlagerbergwerkes und dessen Betrieb) als auch die bestehenden Einlagerungskonzepte in Salz- und Tonsteininformationen durch P&T beeinflusst werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Abschluss der Arbeiten zu diesem AP und Dokumentation der Ergebnisse

AP2: Abschluss der Arbeiten zu diesem AP und Dokumentation der Ergebnisse

AP5: Weiterführung der Untersuchungen zu den Auswirkungen von P&T auf Endlagerkonzepte und Zuarbeit zum AP-Bericht

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11172</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Querschnittsthemen mit Bezug zur Endlagerung	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2012 bis 31.08.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2012 bis 31.12.2012
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 40.072,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 (Abtrennungsverfahren, 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: In einem Auftaktworkshop am 09.10.2012 wurden der Ausgangspunkt der Analyse und die Randbedingungen diskutiert und erste Festlegungen getroffen. Während des Workshops am 15.11.2012, an dem die Teilnehmer aus Modul A und Modul B teilnahmen, wurden diese Ergebnisse vertiefend beraten. In einem Arbeitsgespräch des Moduls A am 27.11.2012 in Karlsruhe wurden die Beiträge für den Abschlussbericht grob skizziert, diskutiert und die Bearbeiter festgelegt.
- AP2: Der Auftakt für die Entwicklung der Szenarien war der Workshop am 15.11.2012 in Berlin. Es wurden 4 Basis-Szenarien erarbeitet und für die weitere Bearbeitung festgelegt. Die Bewertung der Szenarien soll anhand von Deskriptoren erfolgen, deren erste Fassung während des Workshops diskutiert wurde. In einem Arbeitsgespräch des Moduls A am 27.11.2012 in Karlsruhe wurden die Beiträge für den Abschlussbericht grob skizziert, diskutiert und die Bearbeiter festgelegt.
- AP5: Die inhaltliche Bearbeitung begann mit der Vorbereitung für das Arbeitsgespräch des Moduls A am 27.11.2012 in Karlsruhe. Es wurden die Beiträge für den Abschlussbericht grob skizziert und die Bearbeiter festgelegt. Im Nachgang wurde begonnen, die Beiträge für den Abschlussbericht zu formulieren; ein erster Entwurf mit Beiträgen der GRS Braunschweig wurde an DBE Technology zur weiteren Bearbeitung bzw. Iteration versandt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Zur Fortsetzung der Arbeiten sind weitere Workshops und Arbeitstreffen entsprechend dem Projektantrag geplant. Der Entwurf des Abschlussberichts über alle Arbeitspakete soll Ende März 2013 fertiggestellt werden.

- AP1: Fortsetzung der Arbeiten am Abschlussbericht. Teilnahme an Arbeitstreffen, Workshops, usw.
- AP2: Fortsetzung der Arbeiten am Abschlussbericht. Telefonkonferenz zu den Deskriptoren Ende Januar 2013. Abstimmung der Ergebnisse mit Partnern aus Modul B.
- AP5: Weitere Abstimmungen der Projektpartner (Modul A) zu den Auswirkungen von P&T auf die Endlagerung radioaktiver Abfälle. Teilnahme an Telefon- und Videokonferenzen sowie Workshops zur Abstimmung der Deskriptoren, mit denen die Sicherheit bewertet wird. Fortsetzung der Arbeiten am Abschlussbericht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.



## **2.2 W-Vorhaben**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 W 6259</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Kernmaterialüberwachung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2009 bis 30.04.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 670.250,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 der Durchführung eines geophysikalischen Messprogramms; Leitung eines Projekts zur 3-D-Modellierung seismischer Ausbreitung für verschiedenen Quellen; Mitarbeit in der Safeguards-Expertengruppe der IAEO.
- Datenfernübertragung: Durchführung 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 Arbeitsgruppe „Verification Technologies and Methodologies“; Mitarbeit in den Arbeitsgruppen „Containment and Surveillance“, „Destructive Analysis“, „Training and Knowledge Management“ sowie „Implementation of Safeguards“.
- Safeguardstechniken: Projektleitung bei der Entwicklung und Implementierung von NGSS, DMCA, HM-5 Software.
- Safeguardsanalytik: Durchführung eines gemeinsamen Promotionsprojektes mit dem Safeguardslabor der IAEA zur Produktion und Charakterisierung von Referenzpartikeln; Vorbereitung der Qualifizierung Jülichs für das Netzwerk der IAEA-Analyselaboratorien (NWAL); Projektleitung bei der LIBS Machbarkeitsstudie.
- Satellitenfernerkundung: Projektleitung zweier Studien zum Einsatz von Fernerkundung und Geoprocessing in der IAEA.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von „State-level Concept“ (SLC), „Acquisition Path Analysis“ (APA) und Safeguards-by-Design“ (SBD).
- AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis: Mitarbeit in den safeguardsbezogenen Gremien und Teilnahme an den Sitzungen.
- Standing Advisory Group on Safeguards Implementation (SAGSI): Beratende Begleitung des SAGSI-Mitglieds.
- Zusatzprotokoll und Implementierung von Integrated Safeguards: Unterstützung und Beratung von Betreibern; Unterstützung des BMWi bei Anfragen von IAEA 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.
- IAEA-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Leitung eines Projekts zur Verbesserung der Kernmaterialüberwachung der IAEA unter Einbezug neuer analytischer Methoden aus den Bereichen Statistik, Operations Research und Spieltheorie.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen NPT Überprüfungskonferenzen in völkerrechtlicher Sicht und den Proliferationsgefahren im Nahen und Mittleren Osten (11.10.12).

#### 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: Fortsetzung des Feldtests zur DFÜ von Safeguards-Daten; Mitarbeit bei den Vereinbarungen für die Implementierung der DFÜ von Safeguards-Daten aus den Standort-Zwischenlagern.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Arbeitsgruppen und -Gremien.
- Safeguardstechniken: Implementierung für NGSS, DMCA, HM-5 Software. Durchführung einer Feldstudie zum Einsatz von Ortungs- und Navigationstechnologien.
- Safeguardsanalytik: Fortsetzung des gemeinsamen Promotionsprojektes zur Produktion und Charakterisierung von Referenzpartikeln; Qualifizierung Jülichs für das weltweite Netzwerk der IAEA-Analyselaboratorien; Weiterführung der LIBS Machbarkeitsstudie.
- 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 der Umsetzung des Zusatzprotokolls und der Einführung und Bewertung von Integrated Safeguards.
- IAEA-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Wissenschaftliche Beiträge, Teilnahme an Sitzungen bei der IAEA.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: DGAP-Expertensitzungen.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- I. Niemeyer, C. Listner, S. Nussbaum: Object-based Image Analysis Using Very High-resolution Satellite Data, *Journal of Nuclear Materials Management (JNMM)*, Vol. XXXX, No. 4, 2012, 100-109
- R. Avenhaus, M.J. Canty, T. Krieger: Game Theoretical Perspectives for Diversion Path Analysis, *Journal of Nuclear Materials Management (JNMM)*, Vol. XXXX, No. 4, 2012, 130-144
- Aufsätze in den Proc. Institute of Nuclear Materials Management 53<sup>rd</sup> Annual Meeting, 15.-19.07.2012, Orlando, siehe Berichtszeitraum 01.01.-30.06.2012





### **2.3 BMWi-Hausvorhaben**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>KWA 9005</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Endlagerung radioaktiver Abfälle: Endlagersystem		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2011 bis 31.12.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2012 bis 31.12.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.101.993,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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, 02E10618, 02E10669, 02E10679, KIT/INE, BGR)

### **FuE-Arbeiten zu Tonstein in den Untertagelabors Mt. Terri, Tournemire und Bure**

(Vorhaben 02E10086, 02E10377, 02E10618, KIT/INE, BGR)

Schwerpunkte der Arbeiten, die sowohl In-situ-, Labor-Untersuchungen und Modellierungsarbeiten umfassen, betreffen Untersuchungen zur Migration, zum Transport und zur Rückhaltung kolloidaler und gelöster Radionuklidspezies 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

<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover</b>		
02 E 10910	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	92
02 E 11061 C	Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)	126
<b>DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine</b>		
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)	40
02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	56
02 E 10730	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	58
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL	64
02 E 10900	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	90
02 E 10931	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA-(TV2)	96
02E11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein	124
02E11082	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	138
02E11112	Auswirkungen der Sicherheitsanforderungen Rückholbarkeit auf existierende Einlagerungskonzepte und Anforderungen an neue Konzepte (ASTERIX)	144
02E11152	Prozess-Simulation zur Konzeption von Stütz- und Dichtelementen für Schachtverschlüsse (ProSiD)	152
02E11162	Beteiligung an der Studie von KIT und Uni Stuttgart zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	154

<b>Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz</b>
--

- |            |   |      |
|------------|---|------|
| 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) | 📖 74 |
|------------|---|------|

<b>Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich</b>
---

- |            |   |       |
|------------|---|-------|
| 02 E 10780 | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA) | 📖 68  |
| 02 W 6259  | Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden  | 📖 160 |

<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena</b>
---

- |            |   |       |
|------------|---|-------|
| 02 E 10578 | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP3 - Kurztitel: A-DuR | 📖 32  |
| 02E11062B  | Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)                                    | 📖 130 |

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

- |            |   |      |
|------------|---|------|
| 02 E 9944  | Geelektrische 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 10548 | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern  | 📖 26 |
| 02 E 10558 | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP1 - Kurztitel: A-DuR | 📖 28 |
| 02 E 10608 | Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa  | 📖 36 |
| 02 E 10669 | Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2                                      | 📖 44 |
| 02 E 10689 | Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS  | 📖 48 |

02 E 10719	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	54
02 E 10740	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	60
02 E 10750	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaus-sage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL	62
02 E 10770	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungspro- dukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückho- lung (VESPA)	66
02 E 10890	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	88
02 E 10941	Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivi- tätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL	98
02 E 10951	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus – DIKOSA	100
02E11061A	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein	122
02E11062A	Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)	128
02E11072A	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd- Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	134
02E11102	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	142
02E11122	Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Sorelbeton in Salzformationen – Kurztitel: LAVA	146
02E11132	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Kurztitel: LASA	148
02E11142	Performance Assessment of Sealing Systems – Kurztitel: PASS	150
02E11172	Studie zur Partitionierung und Transmutation (P&T) hochradioaktiver Abfälle	156

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

02 E 10618	Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechsel- wirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden	38
02 E 10971	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im na- türlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf	104
02E11072B	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd- Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR	136

- |   |  |
|---|--|
| <b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig</b> |  |
| 02 E 10790  | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA) <span style="float: right;">70</span>  |
| <b>Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig</b>   |  |
| 02 E 10588  | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP4 - Kurztitel: A-DuR <span style="float: right;">34</span>  |
| <b>IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack &amp; Partner, Lessingstr. 46, 09599 Freiberg</b>                |  |
| 02 E 10447  | Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilität <span style="float: right;">24</span>   |
| <b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig</b>   |  |
| 02 E 10659  | Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge <span style="float: right;">42</span>  |
| 02 E 10830  | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG) <span style="float: right;">78</span>     |
| <b>Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz</b>   |  |
| 02 E 10981  | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz <span style="float: right;">106</span>                                  |
| <b>Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main</b>  |  |
| 02 E 10568  | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP2 - Kurztitel: A-DuR <span style="float: right;">30</span>  |
| 02E11062C   | Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR) <span style="float: right;">132</span>  |
| <b>Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover</b>   |  |
| 02 E 10850  | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB) <span style="float: right;">82</span> |
| <b>Projektträger Karlsruhe Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen</b>         |  |
| KWA 9005  | Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine <span style="float: right;">164</span>  |
| <b>Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg</b>   |  |
| 02 E 11031  | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg <span style="float: right;">116</span>                             |



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

- |            |  |       |
|------------|--|-------|
| 02 E 10679 | Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2   | 📖 46  |
| 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 | 📖 50  |
| 02 E 10800 | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  | 📖 72  |
| 02 E 10840 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)   | 📖 80  |
| 02 E 10961 | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie   | 📖 102 |

<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg</b>
---

- |            |  |       |
|------------|--|-------|
| 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 | 📖 52  |
| 02 E 10880 | Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs  | 📖 86  |
| 02 E 10921 | Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA-(TV1)  | 📖 94  |
| 02 E 11092 | Gefügestabilisierter Salzgrusversatz (GESAV) – Phase 1   | 📖 140 |


<b>Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig</b>
---

- |            |   |      |
|------------|---|------|
| 02 E 10860 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS) | 📖 84 |
|------------|---|------|


<b>Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2A, 38678 Clausthal-Zellerfeld</b>
---

- |            |  |       |
|------------|--|-------|
| 02 E 10820 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)                                       | 📖 76  |
| 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 | 📖 118 |
| 02 E 11051 | Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern  | 📖 120 |


**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  114


**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  110

**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  108

**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  112