

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

**PTE Nr. 43**

BMWf geförderte FuE zu  
„Entsorgung gefahrlicher Abfalle in tiefen geologischen Formationen“

Berichtszeitraum: 1. Januar - 30. Juni 2012

Projekttrager Karlsruhe  
Wassertechnologie und Entsorgung  
(PTKA-WTE)

**August 2012**

## **PTE-Berichte**

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

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

- Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen  
(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.

## Vorwort

Das KIT betreut 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“. Dieses umfasst die FuE-Arbeiten, die in den Förderkonzepten „Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“ und „Schwerpunkte zukünftiger FuE-Arbeiten bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle“ sowie dessen Fortschreibungen aufgeführt sind. Unter Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen wird hierbei die Endlagerung radioaktiver und die untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle verstanden.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMBF und BMWi im Rahmen des Förderkonzepts geförderten FuE-Vorhaben. Die Betreuung der FuE-Vorhaben erfolgt für folgende Referate in den beiden Ministerien:

Endlagerung radioaktiver Abfälle	BMWi Referat III B3
Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle (beendet)	BMBF Referat 724
Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete (beendet)	BMBF Referat 724
Kernmaterialüberwachung	BMWi Referat III B4

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“,
- C ⇒ „Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle“, beendet  
„Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete“, beendet
- W ⇒ „Kernmaterialüberwachung“

Die vom BMWi betreuten FuE-Vorhaben, die so genannten Hausvorhaben, sind mit der Buchstabenfolge KWA gekennzeichnet.

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>Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche *</i> .....	1
1.2	<i>Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse</i> .....	3
1.3	<i>Kernmaterialüberwachung</i> .....	9
<b>2</b>	<b>Formalisierte Zwischenberichte .....</b>	<b>11</b>
2.1	E-VORHABEN .....	11
2.2	W-VORHABEN.....	143
2.3	BMW-HAUSVORHABEN.....	147
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....</b>	<b>151</b>

\* „Endlager“ bezeichnet Endlager für radioaktive Abfälle und Untertagedeponien.



# 1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

## 1.1 Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche

<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>	📖 48
<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>	📖 50
<b>02 E 10689</b>	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 52
<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>	📖 54
<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>	📖 56
<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>	📖 58

<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>	📖 60
<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>	📖 66
<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>	📖 68
<b>02 E 10880</b>	Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 90
<b>02 E 10921</b>	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle -ELSA- (TV1)	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 98
<b>02 E 10931</b>	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle -ELSA- (TV1)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 100
<b>KWA 9005</b>	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	<b>Projektträger Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE)</b>	📖 148



## 1.2 Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse

<b>02 E 9894</b>	Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 12
<b>02 E 9944</b>	Geelektrische 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 10518</b>	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 26
<b>02 E 10528</b>	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 28
<b>02 E 10548</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 30
<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>	📖 32
<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>	📖 34
<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>	📖 36

<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>	📖 38
<b>02 E 10608</b>	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 40
<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>	📖 42
<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>	📖 44
<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>	📖 46
<b>02 E 10730</b>	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 62
<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>	📖 64
<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>	📖 70
<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>	📖 72
<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>	📖 74
<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>	📖 76
<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>	📖 78

<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>	📖 80
<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>	📖 82
<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>	📖 84
<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>	📖 86
<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>	📖 88
<b>02 E 10890</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 92
<b>02 E 10900</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 94
<b>02 E 10910</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>	📖 96
<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>	📖 102
<b>02 E 10951</b>	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 104
<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>	📖 106

<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>	📖 108
<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>	📖 110
<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>	📖 112
<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>	📖 114
<b>02 E 11011</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam	<b>Universität Potsdam</b>	📖 116
<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>	📖 118
<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>	📖 120
<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>	📖 122
<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>	📖 124
<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>	📖 126
<b>02 E11061B</b>	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein (AnSichT)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 128
<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>	📖 130

- |                   |  |  |       |
|-------------------|--|--|-------|
| <b>02 E11062A</b> | Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)         | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b> | 📖 132 |
| <b>02 E11062B</b> | Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)         | <b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>                             | 📖 134 |
| <b>02 E11062C</b> | Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)         | <b>Johann Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt am Main</b>            | 📖 136 |
| <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> | 📖 138 |
| <b>02 E11072B</b> | Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS | <b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>             | 📖 140 |



### 1.3 Kernmaterialüberwachung

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

**Forschungszentrum  
Jülich GmbH**

 144





## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 E-Vorhaben**

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9894</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor - Hauptprojekt		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2004 bis 30.06.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.721.522,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dipl.-Geophys. Rothfuchs	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im SB-Experiment soll untersucht werden, ob sich Permeabilitäten von Ton/Mineral-Gemischen so optimieren lassen, dass der sich in einem abgeschlossenen Endlagerbereich einstellende Gasdruck bei kontrollierter Abströmung der Gase über das Verschlussystem stets kleiner als die kleinste Hauptspannung bleibt, so dass im Gebirge keine unkontrollierten Risse generiert werden.

Für die Optimierung der Verschlusskörper werden das Aufsättigungsverhalten, die sich einstellenden Quelldrücke, die Gasdurchbruchdrücke sowie die Gas- und Wasserpermeabilitäten von verschiedenen Ton/Mineral-Gemischen im Labor ermittelt. Im Technikum werden die geplanten In-situ-Einbautechniken und die Messtechnik überprüft. Im Untertagelabor Mont Terri werden in einem Versuchsfeld die in situ erreichbaren Einbaudichten, Wassersättigungen in Wechselwirkung mit dem umgebenden Gebirge, die resultierenden Quelldrücke sowie die Ein- und Zweiphasenflussparameter bestimmt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Abschließende Laboruntersuchungen zur Materialauswahl, Bestimmung von Materialparametern, Ermittlung geeigneter Einbautechniken für das Dichtmaterial sowie Auslegungs- und Modellrechnungen.

AP2: Technikums- und In-situ-Untersuchungen:

Im Mt. Terri Untertagelabor werden in 4 instrumentierten Bohrlöchern an den ausgewählten Ton/Mineral-Gemischen die Einbringtechnik, die Gas- und Wasserpermeabilitäten, die Gasdurchbruchdrücke im wassergesättigten Zustand und die Zweiphasenflussparameter in Wechselwirkung mit dem umgebenden Gebirge untersucht. Zum Test der Einbring- und Verdichttechniken werden in einem Technikum in Braunschweig entsprechende Vorversuche durchgeführt.

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

AP2:

Nach dem Beginn der Probenahme an der Bohrung SB1 Ende November/Anfang Dezember 2011, wurden die abschließenden Probenahmen an den Bohrungen SB2, SB13 und SB15 im Frühjahr 2012 durchgeführt und zwar in nachfolgend angegebener Reihenfolge: SB13 und SB15 in der Zeit vom 6. bis 16. Februar 2012 und abschließend SB2 in der Zeit vom 12. bis 21. März 2012.

Die Probenahme erfolgte in der angegebenen Reihenfolge, um vor der Beprobung des erfolgreichsten Versuchs in der Bohrung SB2 genügend Erfahrungen mit den verschiedenen zum Einsatz kommenden Probenahmeverfahren gewinnen zu können.

Sämtliche Proben wurden nach ihrer Gewinnung vor Ort luftdicht verpackt und möglichst umgehend in das Labor nach Braunschweig verbracht, wo zwischen die abschließenden Wassergehaltsbestimmungen vorgenommen wurden.

Sämtliche experimentelle Arbeiten (in situ und im Labor) wurden Ende Mai 2012 abgeschlossen. Parallel zu den Laboruntersuchungen wurde mit der Erstellung des Projekt-Abschlussberichts begonnen. Zum Ende des Berichtszeitraumes lag dieser Bericht bereits weitgehend in einem ersten Entwurf vor.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Qualitätskontrolle und Veröffentlichung des Abschlussberichtes

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

Czaikowski<sup>1</sup>, O., Mieke, R., Zhang, C.-L., Rothfuchs, T.: Self-sealing barriers of clay/sand mixtures – Numerical modelling and subsequent experimental confirmation, Mt. Terri Projekt: TIMODAZ-Workshop, St. Ursanne, 7. Februar 2012

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2004 bis 31.12.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 im letzten Jahr 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: Im Mai wurden Proben aus der aufgewältigten Sektion II des Prototype Repository an BGR und GRS verschickt. GRS erhielt vereinbarungsgemäß rückgeholte Sensoren aus dem Versatz, Versatzproben sowie zwei Bohrkerne aus dem oberen Bereich des Buffers von Lagerbohrloch #5, in die jeweils die Elektrodenketten im Buffer eingeschlossen sind. Die Sendung wurde aufgenommen; zurzeit werden die Untersuchungen geplant. Weitere Versatzproben von definierten Lokationen müssen noch angefordert werden.

Beim Projekttreffen im Juni 2012 in Olkiluoto wurden die bisherigen Laborergebnisse präsentiert und diskutiert. Die inhomogene Wasseraufnahme des hochkompaktierten Bentonit-Buffers über den Umfang der Lagerbohrlöcher wurde bestätigt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung der In-situ-Messungen in Sektion I

AP2: Folgende Untersuchungen sind geplant:

- Wassergehalts- und Resistivitätsbestimmung der Versatzproben aus dem Versuchsfeld
- Inspektion der Versatz-Elektroden
- Vierpunktmessung der Resistivität der Bufferkerne mittels der eingebauten Elektrodenketten
- Wassergehaltsmessung an Proben der Bohrkerne
- Ausbau und Inspektion der Buffer-Elektroden

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 30.06.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 790.090,00 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:

Die isopiestic Messungen für die sulfatischen ternären Systeme Fe(II) – Na,K,Mg – SO<sub>4</sub> – H<sub>2</sub>O bei 40 °C wurden durchgeführt. Bei 60 °C und 90 °C wurden für die sulfatischen ternären Systeme mit Fe(II)-SO<sub>4</sub> ebenfalls zahlreiche isopiestic Versuche durchgeführt, bei denen die Äquilibrierungszeit permanent erhöht wurde. Leider sind die Gleichgewichtseinstellungen der betrachteten Systeme mit Fe(II)SO<sub>4</sub> jedoch so langsam, dass bei 60 °C und 90 °C bei dem momentanen experimentellen Design eine Äquilibrierungszeit von 11 Wochen noch immer nicht ausreicht, um einen Gleichgewichtszustand zu erreichen. Deshalb wurde eine Schaukelapparatur zur Verringerung der Äquilibrierungszeit entwickelt.

#### Löslichkeitsversuche

Weiterführung 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.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### Literaturstudie

Fortführung der Literaturlauswertung bezüglich Fe(II)-Cl-H<sub>2</sub>O im System der ozeanischen Salze.

#### Dampfdruckmessungen:

Einsatz einer Schaukelapparatur zur Verringerung der Äquilibrierungszeiten bei 60 ° und 90 °C. Fortführung und Abschluss der isopiestic Messungen für die sulfatischen ternären Systeme Fe(II) – Na,Mg,K – SO<sub>4</sub> – H<sub>2</sub>O bei 60 °C und 90 °C. Beginn der Isopiesik für die ternären Systeme mit Sulfat und Chlorid bei 40 °C, 60 °C und 90 °C.

#### Löslichkeitsversuche

Abschluss des Löslichkeitsversuches im System Fe(II)-K-Cl-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O bei 60 °C.

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2006 bis 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.795.867,00 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 Tonsteinformationen in Deutschland erreicht werden können, wenn man die Wärmeleitfähigkeit des Barriere-materials 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 wurden mit dem numerischen 3D-Modell zur rechnerischen Simulation des im französischen Untertagelabor Bure durchgeführten mehrphasigen Erhitzerversuches TED (Expérience thermique deux) weitere Temperaturrechnungen durchgeführt, um das sich ausbreitende Temperaturfeld nun über mehrere Erhitzerphasen zu simulieren.

Im Berichtszeitraum erfolgte eine Rekalibrierung des Modells unter Verwendung aller bisherigen Erhitzerphasen, um damit eine geeignete Prognose für die Abkühlphasen durchzuführen zu können. Es hatte sich gezeigt, dass eine bestmögliche Modellkalibrierung dann erreicht werden kann, wenn alle Heizphasen und damit der gesamte überdeckte Temperaturbereich, berücksichtigt werden.

Darüber hinaus wurde ein 3D-thermo-hydro-mechanisch gekoppeltes Modell mit FLAC3D entwickelt und getestet, um neben der Temperatúrausbreitung insbesondere auch das thermisch induzierte hydraulische Gesteinsverhalten zu charakterisieren. Parallel dazu wurde im Rahmen eines Unterauftrags seitens der Firma dynardo ebenfalls ein 3D-thermo-hydro-mechanisch gekoppeltes Modell erstellt, aber mit dem Computercode ANSYS/Multiplas. Mit beiden Modellen soll, unter Vergleich der Ergebnisse, eine bestmögliche Anpassung der thermisch induzierten Porenwasserdruckentwicklung im Modellgebiet erreicht werden.

Mittels eines neuen Stoffgesetzes, das sowohl die spannungsabhängige Permeabilität als auch die Permeabilitätsänderung als Folge der plastischen Dehnungen berücksichtigt, konnte mit dem ANSYS-Modell eine zufriedenstellende Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit der gemessenen Porenwasserdruckentwicklung erzielt werden. Die vergleichenden Berechnungen mit dem FLAC-Modell sind noch nicht abgeschlossen.

Am 29.06.2012 fand ein Arbeitstreffen der Modellierungsgruppen bei der ANDRA in Paris statt. Auf diesem Treffen wurden die Modellierungsergebnisse vorgestellt und diskutiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP6:

- Durchführung von THM-Prognoseberechnungen für die geplante Abkühlphase des TED-Erhitzerversuches in Bure.
- Erstellung des Abschlussberichtes.

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

Keine.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2007 bis 31.03.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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:

Im Rahmen des Projekts Kolorado-2 (FKZ 02 E 10669) wird ein Programm benötigt, das den kolloidbeeinflussten Transport von Schadstoffen durch ein geklüftet-poröses Medium abbildet. Dieses Programm, genannt *GeoTREND-FC*, wird als Fernfeldmodul von *RepoTREND* konzipiert und in zwei Phasen neu entwickelt:

- Phase 1: Entwicklung eines Basismodells, welches zunächst nur diejenigen Konzepte beinhaltet, die für das im Vorhaben Kolorado-2 simulierte Experiment relevant sind.
- Phase 2: Erweiterung des Modells um weitere bzw. alternative Konzepte, die bei zukünftigen Anwendungen benötigt werden.

Im Berichtszeitraum wurden:

- die fachlichen, mathematischen und numerischen Modelle für *GeoTREND-FC* ausgearbeitet und
- die Software-Architektur entwickelt.

AP3:

Die Entwicklung des C++-Programmcodes für *GeoTREND-FC* wurde begonnen und befindet sich bereits in einer fortgeschrittenen Phase. Die Komponenten zum Einlesen der Programm- und Übergabeparameter sowie zum Berechnen des Transports von Kolloiden und zum Ausgeben der Ergebnisse für Kolloide sind weitgehend fertig.

Die Programmkomponenten zur Behandlung des Schadstofftransports befinden sich in der Entwicklung.

Die Entwicklung des Statistik-Rahmens von *RepoTREND*, bestehend aus den unabhängig arbeitenden Modulen *ListMaker*, *JsonModifier* und *OutCollector*, wurde weitgehend abgeschlossen. *OutCollector* wurde dahingehend erweitert, dass es auch das Sammeln von Zwischenergebnissen zur Berechnung von Sicherheits- und/oder Performanceindikatoren erlaubt. Anwendungstests mit der vollen Modulkette stehen noch aus.

AP4:

Für *GeoTREND-FC* wurden die Benutzeroberflächen zur Eingabe der Modellparameter in der neuen Benutzerumgebung XENIA konzipiert und als Modul-Beschreibungen realisiert.

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:

- Kopieren von Objekten (auch rekursiv) und Parametern eines Rechenlaufs,
- Editieren von vorhandenen und in den Rechenläufen bereits verwendeten Modulbeschreibungen,
- erweiterter Export eines Rechenlaufs (zusätzliche Informationen und die verwendeten Modulbeschreibungen werden exportiert),
- Import eines Rechenlaufs und einer Modulbeschreibung,
- Speicherung der benutzerdefinierten Einstellungen und Konfigurationen der XENIA-Benutzeroberfläche.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das neue Fernfeldmodul *GeoTREND-FC* ist fertigzustellen und zu testen. Es ist die vollständige Dokumentation zu diesem Rechenmodul zu erstellen.

Die Arbeiten am Statistikrahmen sind abzuschließen und zu dokumentieren.

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2007 bis 30.06.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012
<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:*

- Die Quellversuche wurden durch Luftbefeuchtung einer Tonsteinprobe bei Begrenzung der Axialverformung und ohne Radialbeanspruchung weitergeführt.
- Fünf einaxiale und drei triaxialen Kriechversuche sind bei unterschiedlichen Spannungen bislang über 1 bis 6.5 Jahre fortgeführt worden.
- Ein triaxialer Kriechversuch bei hohen Temperaturen von 30-90 °C ist bei Spannungen von  $\sigma_1/\sigma_3 = 15/3$  MPa über ca. 1 Jahr gefahren worden. Deutliche thermische Kriechbeschleunigung wurde beobachtet.
- Die langzeitigen Messungen der Wasserpermeabilität an 5 geschädigten Tonsteinproben wurden nach 4 Jahre beendet. Anschließend sind die Gasmigrationstests bei Manteldrücken von 2 bis 4 MPa und Gasdrücken gestartet worden. Dabei werden Gasdurchbruchdrücke bzw. Gaspermeabilitäten der verheilten Tonproben bestimmt.
- Ein Aufheiztest wurde durch Aufheizung eines gelochten Großtonkerns von 30 bis 90 °C gestartet und wird für 2-3 Monate weitergeführt.
- Quelldruck-, Permeabilitäts- und Wassersättigungsmessungen an kompaktierten Mischungen aus Ausbruchtonstein und Bentonite sind fortgeführt worden.

#### *Bohrlochverformung:*

Nach Erreichen der 2. LSt. in 12/2011 Stagnation der Deformationsrate, allerdings deutliche Reaktion der MP auf Packerdruckerhöhung dokumentiert, nach 2 bzw. 3-monatiger Ruhephase Wiederaufnahme der Deformation zu beobachten, Problematik des verbleibenden geringen Messbereichs weiterhin vorhanden.

#### *Modellierung:*

(TED-Exp.): Erstellung eines 2D Modells (ebener Verzerrungszustand) im Bereich des Referenzschnittes mit expliziter Berücksichtigung sämtlicher Messintervalle bei der Vernetzung. HM-gekoppelte Simulation der zeitlich versetzten Bohrlocherstellung / Sondeneinbau zur Ermittlung des Porenwasserdruckfeldes vor der Aufheizung zum Vergleich mit Messbefunden. Präsentation der Ergebnisse beim 18. TER-TED-FG in Paris in 03/2012.

Bei einem Fachgespräch mit ANDRA im Mai wurden die aktuellen Ergebnisse der Langzeitkriech-/Verheilungsversuche am Tonstein und der Versatzuntersuchungen am Ausbruchmaterial bzw. kompaktierten Gemisch mit Bentonit präsentiert und diskutiert. Das ergänzende Programm zur Modellentwicklung für Schädigung und Verheilung von Tonstein wurde beim CODE\_BRIGTH-Workshop im Mai präsentiert. Die vorgesehenen Implementierungsarbeiten sind in der Arbeitsplanung des CODE\_BRIGTH-Konsortiums eingezogen worden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des Bohrlochttests, Durchführung begleitender Modellierungen
- Weiterführung der Laborversuche am Tonstein sowie der Versatzuntersuchungen
- Erstellung eines Zwischenberichts für den Zeitraum von 05.2007 bis 12.2011
- Vorbereitung der Modellentwicklung
- 3D-Extension des vorh. TED-Modells, Vergleich mit Messbefunden

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang C.-L.; Czaikowski, O.: GRS Research programme – development and implementation of constitutive models for damage and sealing of clay rock, 4th workshop of CODE\_BRIGTH USERS, 3rd May 2012, Barcelona, Spain

Zhang, C.-L.: Abstracts for 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.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2007 bis 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

Hardware verlorener Drucksensor:

- Anpassung der Basisstation für den Empfang der Daten der kabellosen Sensoren

Tests: In-situ-Arbeiten:

- Anwendung der Oberflächenpacker für In-situ-Permeabilitätsmessungen an zwei Standorten im Rahmen kommerzieller Projekte → die im Ergebnis der Messungen gewonnenen Erfahrungen fließen in die Weiterentwicklung der Methodik und in kleineren Teilen die Anpassung der Messtechnik ein. Die bisherigen Messungen zeigen, dass die oberflächennahe Permeabilität von Salinarkonturen abhängig ist von der geologischen und bergtechnischen Standortsituation sowie den Wetterbedingungen am Standort. Die Untersuchungen zur Klärung der Ursachen und zur Verifizierung dieser Prozesse überschreiten die Möglichkeiten in diesem Projekt.
- Die Messungen bestätigen die Eignung des Messsystems zur Ermittlung der oberflächennahen Gebirgspermeabilität.
- Vorbereitung und Realisierung einer Publikation: Wilsnack, Th.; Rössel, A.; F. Grafe, F. (2012): Kabellose Datenübertragung im Salinar. Kali und Steinsalz
- Vorbereitung patentrechtlicher Schutz für kabellose Sensoren

Fortschreiben des Berichts zum Vorhaben.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

Wiederholungsmessung zur Sendeleistung der kabellosen Sensoren für das lösungsbeauftragte Bauwerk im ERAM.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10518</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) – TV1		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 31.03.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 31.03.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 886.153,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt ESTRAL (Partner: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V.) dient der Überführung von State-of-the-Art mechanistischen Sorptionsmodellen (namentlich Oberflächenkomplexierungsmodelle) in bestehende Codes zur Langzeitsicherheitsanalyse. Ziel ist es, ein Instrumentarium zu entwickeln, mit dem der Einfluss veränderter geochemischer Bedingungen auf die Radionuklidsorption besser berücksichtigt werden kann.

Da die Rechenzeiten entsprechender Codes nicht signifikant verlängert werden dürfen, wird eine indirekte Einbindung der Sorptionsmodelle über mehrdimensionale Matrizen vorausberechneter „smart  $K_d$ “ Werte angestrebt. Diese Berechnungen erfolgen auf Basis bekannter Wechselwirkungen zwischen Kontaminanten und Wirtsgestein mit Hilfe geeigneter geochemischer Speziationscodes.

Ein Schwerpunkt liegt in der Ertüchtigung des bisher durch GRS genutzten  $r^3t$  Codes durch Integration einer Abfrage vorcompilierter  $K_d$ -Werte. Dafür notwendige Eingangsgrößen (pH, Konzentration wichtiger Komponenten) sind für jeden Raum-Zeit-Punkt der Modellierung bereitzustellen. Das entwickelte Instrumentarium soll durch Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Szenarien, die zu einer zeitlichen und räumlichen Veränderung der geochemischen Bedingungen im Modellgebiet führen, erprobt werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Beschreibung des betrachteten Systems und Entwicklung der Methodik (Auswahl Elemente, Sedimente, Minerale inklusive Datenbasis, Batch-Experiment, Auswahl Einflussgrößen, Berechnung und Überprüfung der smart  $K_d$ -Werte)
- AP2: Konzeption und Implementierung in das Rechenprogramm  $r^3t$  (Modell für zeitliche und räumliche Änderungen der Einflussgrößen, Codeanpassungen für Einflussgrößen und  $K_d$ -Abruf, eindimensionale Testrechnungen)
- AP3: Anwendungsrechnungen für ausgewählte Prozesse (Strömungs- und Transportrechnungen)
- AP4: Qualitätsmanagement / Dokumentation



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Durchführung eines abschließenden Arbeitsgesprächs mit HZDR in Braunschweig.

AP2:

Abschluss der Implementierung des Konzepts zur Berücksichtigung geochemischer Prozesse in  $r^3t$  und Einbau des  $K_d$ -Abrufs durch das Steinbeis-Institut. Berechnung von 2 Testfällen zum 1D-Transport unter transienten geochemischen Bedingungen mit. Die Ergebnisse sind plausibel und zeigen eine erfolgreiche Implementierung des Smart- $K_d$ -Konzepts.

AP3:

Abschluss und Dokumentation von Strömungs- und Transportrechnungen zum rezenten Zustand, nachfolgend konstanten Bedingungen und einer zukünftigen Meerwasserüberflutung mit  $d^3f$  und dem modifizierten Code  $r^3t$ . Detaillierte Diskussion des Transports der Einflussgrößen und der Auswirkungen auf den  $K_d$ -Wert. Vergleich der Ergebnisse von Rechnungen mit konstanten  $K_d$ -Werten und Smart  $K_d$ -Konzept.

AP4:

Fertigstellung des Abschlussberichts.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Noseck, U; Brendler, V. Flügge, J.; Stockmann, M., Lampe, M., Britz, S.; Schikora Schneider, A.: Realistic integration of sorption processes in transport codes for long-term safety assessments. FKZ: 02E10518 (BMW), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-297. Braunschweig 2012.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10528</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) – TV2		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 31.03.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 31.03.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 214.575,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brendler	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt ESTRAL (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig) dient der Überführung von State-of-the-Art mechanistischen Sorptionsmodellen (namentlich Oberflächenkomplexierungsmodelle) in bestehende Codes zur Langzeitsicherheitsanalyse. Ziel ist es, ein Instrumentarium zu entwickeln, mit dem der Einfluss veränderter geochemischer Bedingungen auf die Radionuklidsorption direkt ermittelt werden kann.

Da die Rechenzeiten entsprechender Codes nicht signifikant verlängert werden dürfen, wird eine indirekte Einbindung der Sorptionsmodelle über mehrdimensionale Matrizen vorausberechneter „smart- $K_d$ “ Werte angestrebt. Diese Berechnungen erfolgen auf Basis bekannter Wechselwirkungen zwischen Kontaminanten und Wirtsgestein mit Hilfe geeigneter geochemischer Speziationscodes.

Ein Schwerpunkt liegt in der Ertüchtigung des bisher durch GRS genutzten  $r^3t$  Codes durch Integration einer Abfrage vorcompilierter  $K_d$ -Werte. Dafür notwendige Eingangsgrößen (pH, Konzentration wichtiger Komponenten) sind für jeden Raum-Zeit-Punkt der Modellierung bereitzustellen. Das entwickelte Instrumentarium soll durch Strömungs- und Transportrechnungen für ausgewählte Szenarien, die zu einer zeitlichen und räumlichen Veränderung der geochemischen Bedingungen im Modellgebiet führen, erprobt werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Beschreibung des betrachteten Systems und Entwicklung der Methodik (Auswahl Elemente, Sedimente, Minerale inklusive Datenbasis, Batch-Experiment, Auswahl Einflussgrößen, Berechnung und Überprüfung der smart  $K_d$ -Werte)
- AP2: Konzeption und Implementierung in das Rechenprogramm  $r^3t$  (Modell für zeitliche und räumliche Änderungen der Einflussgrößen, Codeanpassungen für Einflussgrößen und  $K_d$ -Abruf, eindimensionale Testrechnungen)
- AP3: Anwendungsrechnungen für ausgewählte Prozesse (Strömungs- und Transportrechnungen)
- AP4: Qualitätsmanagement / Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

- Komplettierung der SCM-Parameter bezüglich aller relevanten Radionuklide Cs, Ra, Ni, Am, Th, Np(V), U(VI), Se(VI) sowie Matrixelemente Ca, Al,  $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$
- Fertigstellung der projektspezifischen thermodynamischen ESTRAL-Datenbank mit Überprüfung relevanter aquatischer Spezies und SCM-Daten
- Finale Berechnung der smart  $K_d$ -Wolken mittels Kopplung von SimLab, UCODE und PhreeqC für alle drei Sedimenteinheiten UAF, AT, LAF.
- Finale Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen der berechneten  $K_d$ -Werte für UAF, AT, LAF.

AP2:

- Fertigstellung und Umsetzung des konzeptionellen Modells zur Variation der Einflussgrößen pH, DIC, I, [Ca] und [RN] in r<sup>3</sup>t.
- Aktualisierung des Konzeptes zur Ablage und Abfrage mehrdimensionaler, äquidistanter Tabellen von smart  $K_d$ -Werten.

AP4:

- Überprüfung und Aktualisierung folgender Dokumente zur Erstellung Abschlussbericht:
  - 4.1 Compilation of minerals and elements
  - 4.2 Assessing data situation
  - 4.4 Environmental parameters
  - 4.5 Calculation of smart  $K_d$ -values
  - 4.6 Sensivity and Uncertainty Analysis

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine. Siehe WEIMAR-Projekt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vom 24. bis 29. Juni fand in Montréal (Kanada) die „Goldschmidt 2012“-Konferenz statt, wo M. Stockmann ESTRAL durch den Vortrag „Smart  $K_d$ -Concept based on Surface Complexation Modeling“ vorstellte.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2008 bis 31.07.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

#### TA1:

- Teilnahme am Kick-Off-Meeting des Salt-Clubs der OECD/NEA.
- Fertigstellung des NEA-Statusberichts „Indicators for the Safety Case“.
- Abschluss der Modellrechnungen zur Überprüfung der Anwendbarkeit der von GRS Köln vorgeschlagenen Indikatoren und Dokumentation der Arbeiten.
- Fertigstellung der Berichte zu Radionuklidinventaren für verglaste HAW-Abfälle aus La Hague und zu mikrobiellen Prozessen und deren Auswirkungen auf die Langzeitsicherheit von Endlagern in Tonformationen.

#### TA2:

- Abschluss und Dokumentation der Modellrechnungen des HMGU zur Berücksichtigung von Klimaübergängen in Biosphärenmodellen.
- Abschluss transienter Strömungs- und Transportrechnungen für Klimazyklen über Zeiträume von einigen 100.000 Jahren für ein Deckgebirge eines Endlagers im Salinar.
- Abschluss und Dokumentation der Arbeiten zum Standort Ruprechtov.
- Weiterführung der Aufsättigungsexperimente und begleitender Modellrechnungen und Dokumentation der Arbeiten. Teilnahme an der Task Force on EBS Phase 2 in Berlin.
- Weiterführung und Abschluss der Nachuntersuchungen zum selbstheilenden Versatz (SVV) am Standort Teutschenthal.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung der Abschlussberichte zum Standort Ruprechtov, zur Berücksichtigung von Klimaübergängen in Biosphärenmodellen und des zusammenfassenden Abschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Meleshyn, A.: Microbial Processes Relevant for the Long-Term Performance of Radioactive Waste Repositories in Clays. FKZ: 02E10548 (BMW), Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. GRS-291, Braunschweig 2011.

Meleshyn, A.; Noseck, U.: Radionuclide inventory of vitrified waste from nuclear fuel reprocessing: Basic issues and current status in Germany. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. GRS-294. Braunschweig 2012.

Miller, B.; Noseck, U.; Becker, D.; Grupa, J.; Marivout, J.; Wolf, J.: Indicators in the Safety Case. An NEA Status Report. OECD/NEA, Paris, 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 31.03.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

Am 20. April 2012 fand in Braunschweig das 6. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten. Der Zeitplan für die Erstellung des Abschlussberichtes wurde vereinbart.

Mehrere Testfälle für die inverse Modellierung wurden der AG Wittum zur Verfügung gestellt.

Für die aktuell laufende Task 8c der Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes (TF GWFTS) von SKB war ein Modell erstellt worden, das nur die wenigen explizit bekannten „deterministischen“ Klüfte enthält. Das Modell enthält außerdem zwei Strecken, 2 Großbohrungen für frühere Experimente und 5 kleinere Sondierungsbohrlöcher für das BRIE-Experiment (Buffer-Rock Interface Experiment). Die Hintergrundklüfte, die SKB in Form statistischer Verteilungsparameter zur Verfügung stellt, werden derzeit noch durch ein homogenes Ersatzmedium repräsentiert. Um den Einstrom in die 5 Probebohrlöcher nachzubilden, wurden diese in einen Quader mit niedrigerer Permeabilität eingebettet, wobei zwei Bohrlöcher durch zwei synthetische Klüfte hydraulisch mit dem homogenen Ersatzmedium verbunden wurden. In 2012 wurde zusätzlich ein Messwert für eines der Bohrlöcher mit deutlich geringerer Schüttung bekannt gemacht.

Im Berichtszeitraum wurde versucht, das Grundwassermodell anhand der gemessenen Fließraten zu kalibrieren. Dies ist mit Blick auf die relativ hohen Einstromraten in die Sondierungsbohrlöcher gelungen. Auch der generelle Trend abnehmenden Drucks in Richtung auf die Hauptstrecke wird reproduziert. Der neue Wert aus 2012 wird nun allerdings noch nicht ganz befriedigend getroffen. Problematisch ist auch nach wie vor der hohe Zufluss aus den diskreten Klüften. Dies scheint die Folge einer schlechten Beschreibung der Klüfte oder der Druckrandbedingungen zu sein.

Die bisherigen Arbeiten an Task 8c sowie erste Schlussfolgerungen wurden in einem informellen Interimsreport an den von SKB bestellten Reviewer (Stefan Finsterle, LBL) im Detail zusammengestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Mit den Rechnungen der ersten Version des Testfalls Task 6c wird begonnen, sobald die Methoden zur Bestimmung eines äquivalenten Ersatzkontinuums bereitgestellt sind. Hierbei sind sowohl die Modellierung der Grundwasserströmung als auch eine Modellierung des Tracertests „C2“ geplant.
- Beschreibung der Matrix einschließlich der Hintergrundklüfte durch ein äquivalent poröses Medium statt der Homogenbereiche und der synthetischen Klüfte im Modell für Task 8c.
- Mit der Modellierung eines 2d-Testfalls wird begonnen.
- 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Folgevorbahn 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  $r^3t$

Sowohl die z. T. großen Geschwindigkeiten in den Klüften, als auch das Auftreten von Verwirbelungen, was im Rahmen dieses Projektes beobachtet wurde, werfen die Frage nach der Gültigkeit des Darcy-Gesetzes auf. Um dies näher zu untersuchen, wurde von uns eine Forchheimer-Korrektur eingeführt, die eine bessere Approximation der Reibungskräfte ermöglicht. Diese wurde sowohl für das  $d$ - als auch für das  $(d-1)$ -dimensionale Modell in  $d^3f$  integriert. Untersuchungen wurden für verschiedene Forchheimer-Koeffizienten durchgeführt und es wurde beobachtet, dass durch die Korrektur die Geschwindigkeit im Vergleich zur Darcy-Geschwindigkeit verlangsamt und dadurch der Einfluss der Kluft verringert wird. Des Weiteren wurde auch an der dimensionsadaptiven Handhabung der Klüfte gearbeitet. Es wurde ein Gittertransfer (zunächst in 2D) eingeführt, mit dessen Hilfe es möglich ist, während der Laufzeit der Simulation zwischen einem Gitter mit  $d$ -dimensionaler Kluft und einem mit  $(d-1)$ -dimensionaler Kluft zu wechseln. Dieser Gittertransfer soll nun abhängig von einem Kriterium, für das zunächst die Reynolds-Zahl gewählt wurde, zwischen den Gittern und damit auch zwischen den Modellen wechseln und so die Kluft nur dann auflösen, wenn die aktuellen Strömungsverhältnisse es auch tatsächlich erfordern. Zudem wurden die Verfeinerungsroutinen auf hybriden Gittern im Hinblick auf massiv parallele Systeme weiter entwickelt.

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 zunächst zwei verschiedene Testprobleme mit jeweils konstanter Permeabilität aufgesetzt und diese anschließend sehr detailliert (hohe Auflösung und kleine Zeitschritte) gerechnet, wobei die Konzentration an wenigen ausgewählten Stellen gespeichert wurde. Schließlich sollte durch inverse Modellierung mit Hilfe der bekannten Konzentrationen versucht werden, die in der detaillierten Rechnung verwendete Permeabilität zu bestimmen. Dazu wurde ein Optimierungsverfahren, basierend auf dem Newton-Verfahren, entwickelt. Die durchgeführten Untersuchungen haben gezeigt, dass das eingesetzte 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

- A. Grillo, M. Lampe, D. Logashenko, S. Stichel, G. Wittum: Simulation of salinity- and thermohaline-driven flow in fractured porous media. *J. Porous Media* 15(5):439-458, 2012.  
 S. Stichel, D. Logashenko, A. Grillo, S. Reiter, M. Lampe, G. Wittum: Numerical methods for flow in fractured porous media. In: J. Delgado, editor, *Heat and Mass Transfer in Porous Media*, volume 13 of *Advanced Structured Materials*, pages 83–113. Springer Berlin Heidelberg, 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Szenarien-untersuchungen
- Geostatistische Methoden
- stochastische und fraktale Modellierung von Channeling

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Die hergeleiteten theoretischen Ausdrücke der longitudinalen und transversalen Dispersionskoeffizienten in Medien ohne Skalenseparation wurden abschließend mit experimentellen Daten verglichen, die von Gelhar et al. (1992) aufgelistet wurden und von 59 verschiedenen Untersuchungsgebieten stammten. Für die longitudinale Komponente konnte aufgrund des bekannten Powerlaws eine Regressionsfunktion bestimmt werden. In der Literatur wurden bisher schon theoretische Ergebnisse mit den experimentellen Daten verglichen, z. B. von Neuman (1995), aber ein Vergleich mit den transversalen experimentellen Daten war bislang noch nicht möglich.

Das Ergebnis zeigte, dass die theoretischen Ausdrücke die experimentellen Daten sowohl für die longitudinale als auch die transversale Komponente gut beschreiben. Zu diesen Ergebnissen wurde eine Veröffentlichung vorbereitet.

AP4 & AP6:

Der Zufallsfeldgenerator für 2D- und 3D-Felder wurde in C++ implementiert. Derzeit ist die Truncated-Gauss-Autokorrelationsfunktion implementiert.

Bei der Untersuchung zur Erzeugung von Zufallsfeldern mit spezieller Korrelationsfunktion wurde zusätzlich zur Randomisierungs- und Fourier-Wavelet-Methode eine dritte so genannte Hybrid-Methode implementiert und untersucht. Dabei zeigte sich, dass diese die Stärken der beiden anderen Methoden verbinden konnte.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

Die Veröffentlichung über die theoretischen Ausdrücke der Dispersionskoeffizienten soll abgeschlossen werden und eine weitere Veröffentlichung über die Ergebnisse zur Filtermethode Coarse Graining ist in Arbeit und wird bis September abgeschlossen.

AP4 & AP6:

Geplant ist die Integration des C++-Codes in  $d^3f$ . Außerdem sollen willkürliche Rotationen der Hauptachsen ebenso implementiert werden wie exponentielle Autokorrelationsfunktionen. Eine eventuelle Überarbeitung des eingereichten Manuskriptes wird erwartet gemäß der Urteile, welche von den Gutachtern abgegeben werden. Darüber hinaus ist eine weitere Veröffentlichung in Arbeit, in welcher die Untersuchungen zur Erzeugung von mehrskaligen Zufallsfeldern beschrieben werden sollen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vortrag: EGU Generalversammlung am 24. April 2012

Veröffentlichung: Hesse, F. and S. Attinger (2012): 'Assessing the validity of a lower-dimensional representation of fractures for numerical and analytical investigations', eingereicht bei Advances in Water Resources am 14. Mai 2012.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Kluffgesteine entwickelt, um Genauigkeit und Stabilität der numerischen Modelle zu prüfen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Jede Prozesssimulation in Kluffgesteinen 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 (Kluffsysteme, Heterogenitäten) aufgrund geringer Erkundungsdaten, Parametrisierungs- und Skalenprobleme. Für die Unsicherheitsanalyse sollen Methoden für Kluffgesteine 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.

- Kluff-Matrix Systeme: Kluff-Matrix Interaktion, Kluffsysteme (z. B. Grimsel-Scherzone), Porenraummodelle,
- Kopplung von Prozessen (systematisch zunehmende Komplexität): Hydraulik, insbesondere für Kluffrauigkeiten (stark heterogene Klufföffnungs- 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

Die Schwerpunkte in dieser Berichtsphase lagen einerseits in der Erweiterung des Random-Walk-Particle-Tracking (RWPT) Verfahrens für reale 3D poröse Medien und andererseits in der Weiterentwicklung des XFEM Verfahrens für Kluftnetzwerke. Weiterhin wurde an der Verbesserung der Recheneffizienz des RWPT Verfahrens gearbeitet (Parallelisierung).

RWPT: Eine wichtige Voraussetzung für die Simulation realer 3D poröser Medien ist eine geeignete Finite-Elemente-Vernetzung. Hierfür wurde der Mesh-Generator von OpenFOAM verwendet (weitere OGS Schnittstelle verfügbar, Naumov, personal communication). Damit konnten erstmals RWPT generische Simulationen von Sorptions- und Zerfallsreaktionen sowie Intrapartikeldiffusion auf der Porenkala für realistische poröse Medien simuliert werden (Sun 2012).

XFEM: Die erweiterte finite Elemente Methode wurde für Kluftnetzwerke erweitert und durch analytische Lösungen verifiziert (Watanabe et al. 2012).

#### AP9: Benchmarkmarking

Die in AP8 erfolgten Modellerweiterungen wurden durch weitere Benchmarks verifiziert.

ADuR14 ist 3D Testbeispiel für Strömungs-, Transport- und einfache Reaktionsprozesse auf der Porenkala mit der RWPT Methode (Sun 2012).

ADuR15 ist ein 2D Testbeispiel für gekoppelte Prozesse in einfachen Kluftnetzwerken mit der XFEM Methode (Watanabe et al. 2012).

Damit stehen nunmehr 15 Testbeispiele zur Verfügung, die Strömungs-, Deformations- und Transport-(HMC) Prozesse in porösen und klüftigen Medien abbilden (Sun et al. 2012). 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). Alle ADuR Testbeispiele sind auf dem Projektserver abgelegt, weitere Benchmarks sind über das Internet verfügbar.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

In der abschließenden Projektphase sind folgende Arbeiten geplant:

- Simulation nichtlinearer Strömungs- und Transportprozesse in porösen und klüftigen Medien nach der Darcy-Forchheimer-Gleichung (AP8) und Entwicklung entsprechender Benchmarks zur Methodenverifizierung (AP9),
- Erstellung des Abschlussberichts und Vorbereitung gemeinsamer Publikationen für das A-DuR Vorhaben.

### 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 (2012): Random-Walk-Particle-Tracking (RWPT) methods for non-linear flows in porous and fractured media, PhD thesis, in preparation, TU Dresden, in preparation.

Taron J, Watanabe N, Sun YY, Park C-H, Radu F, Kolditz O (2012): Abbildung von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung. 5th A-DuR Progress Report. Helmholtz Centre for Environmental Research UFZ.

Watanabe N, Wang W, Taron J, Gorke U-J, Kolditz O (2012): Lower-dimensional interface elements using local enrichments and application for a coupled hydromechanical problem in fractured rock. International Journal for Numerical Methods in Engineering, DOI: 10.1002/nme.3353.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2008 bis 30.06.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Hintergrundsalsen (Nitrate und Perchlorate von Kalium, Natrium und Lithium) und ihrer Wechselwirkungen mit anorganischen Komplexbildnern Hydroxid, Chlorid und Carbonat bei 25 - 90 °C. Ergänzende Wasserdampfdruckmessungen sowie Löslichkeitsmessungen.
- Entwicklung von Werkzeugen zur Durchführung geochemischer Modellrechnungen und Unsicherheitsanalysen in einem Schritt durchzuführen. Hierzu werden drei Programm-Module entwickelt, die die Planung, Durchführung und Auswertung von statistisch begleiteten Rechnungen ermöglichen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Bestimmung der Löslichkeit von  $\text{H}_2\text{S}(\text{g})$  in salinaren Lösungen wurde abgeschlossen. Die bereits durchgeführten Messungen der letzten Monate wurden dahingehend ergänzt, dass nunmehr für die binären Salzlösungen des ozeanischen Systems Löslichkeitsdaten für alle drei angestrebten Temperaturen (15 °C, 25 °C und 40 °C) vorliegen. Erste Testrechnungen unter Berücksichtigung der neu berechneten Pitzer-Koeffizienten erfolgten mit dem Programm PHREEQC Interactiv, zunächst für 25 °C. Für die Bestimmung der  $\text{HS}^-$ -Aktivitäten in Salzlösungen wurden neben der bisher angewendeten Druckdifferenzmessungsmethode die direkte Messung der Sulfidkonzentration in Lösung in Erwägung gezogen. Messungengenauigkeiten des Sensors kombiniert mit der Schwierigkeit definierte pH-Werte für die jeweilige Konzentration zu erhalten, haben diese Methode als nicht praktikabel erscheinen lassen. Aus diesem Grund wird derzeit ein potentiometrisches Verfahren erprobt, indem mit Hilfe von ionenselektiven Elektroden (ISE) direkt die Gleichgewichtsspannung zwischen  $\text{HS}^-$  und dem jeweiligen Kation (Na & K) messbar ist. Die Literaturlauswertung zum Thema thermodynamische Stabilität ausgewählter Schwermetallsulfide und –sulfidokomplexe wurde weitergeführt. Besondere Beachtung fanden dabei die Elemente Fe, Ni, Cd, Zn und Hg.

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

- die Implementierung neuer Funktionen in die Datenbank (interne Berechnungen; Umsetzung von Datenbank-Änderungen gemäß Beschlüssen des Verbunds)
- Die Weiterentwicklung von Schnittstellen (Benutzeroberfläche, Integration interner Berechnungen in diese und Systemtabellen für das Modul DB-Control)
- Fortsetzung der Datenbewertung und Datenerfassung für Phosphat
- Erstellung neuer oder weiterentwickelter Dokumentationen (Richtlinie für Nutzer, Dokumentation der Datenbasis, Prozeduren für Datenbasis-Freigaben).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Aufbau und Erprobung einer potentiometrischen Messapparatur für die Bestimmung von  $\text{HS}^-$ - Aktivitätskoeffizienten.
- Durchführung von Gleichgewichtsspannungsmessungen von  $\text{HS}^-$  /Kation ( $\text{Na}^+$  und  $\text{K}^+$ ) in binären Systemen ( $\text{NaCl-H}_2\text{O}$ ;  $\text{KCl-H}_2\text{O}$ ) zunächst bei 25 °C, anschließend bei 15 ° und 40 °C.
- Messungen des Dampfdrucks über relevante Hintergrundsallösungen.
- Weiterentwicklung des Werkzeugs zur Planung und Durchführung von Unsicherheitsanalysen von geochemischen Modellierungen.
- Durchführung von Titrationsexperimenten zur Absicherung der Phosphat-Datenbasis.
- Implementierung weiterer Berechnungsfunktionen in DB-Control.
- Implementierung von Realgasdaten beim Export von Daten aus THEREDA.

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2009 bis 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

- Experimente zur direkten Isolierung von Gesamt-DNA aus Opalinus-Ton-Porenwasser und erste RISA Experimente; 16S-rRNA der Ton-Isolate *Sporomusa* sp. und *Paenibacillus* sp. sequenziert; mikrobiolog. Charakterisierung der Isolate: Gram-Färbung, KOH-Test, Leifson-Geißelfärbung, Lichtmikroskopie; Charakterisierung der Zelloberfläche von *Sporomusa* sp. mittels potentiometrischer Titration
- Wechselwirkung des Ton-Isolates *Sporomusa* sp. mit U(VI)/Eu(III): Sorption in Abhängigkeit der [U(VI)]<sub>initial</sub> + Kinetik; erster U(VI)-TRLFS-Versuch erfolgt; potentiometrische Titration (Eu(III))
- Wechselwirkung des Äspö-Isolates *P. fluorescens* mit U(VI): Agardiffusionstest, Live-Dead-Färbung nach U(VI)-Kontakt, Effekt von U(VI)-Perchlorat vs. -Nitrat auf Zellvitalität
- Wechselwirkung des Ton-Isolates *Paenibacillus* sp. mit U(VI)/ Eu(III)/ Cm(III): Sorption in Abhängigkeit der [U(VI)]<sub>initial</sub> und pH, Phosphatfreisetzung in Abhängigkeit von [U(VI)]<sub>initial</sub> und pH; Titration mit Eu(III); Cm(III)-TRLFS
- TEM-Probenpräparation zu den Ton-Isolaten und *P. fluorescens* mit Eu(III) und U(VI)



- Untersuchungen zur Eu(III) Wechselwirkung mit *P. fluorescens*-Biofilmen: Mikrosensormessungen + ICP/MS
- Beginn der Untersuchungen zur Wechselwirkung des Äspö-Isolates *P. fluorescens* mit Pu
- Teilnahme am Mont Terri Technical Meeting TM-30 in St Ursanne, 08./09.02.2012 (Schweiz), Beitrag: Curium(III) and europium(III) speciation studies with Mont Terri Opalinus clay isolates
- Erarbeitung des Vortrags (The impact of the Äspö ground water bacterium *P. fluorescens* on the speciation of plutonium) zur Plutonium Futures 2012 (Cambridge, UK, 15.-20.7.12)
- Erarbeitung des Vortrags (Insights on the U(VI) Speciation with Bacterial Isolates from Äspö and Mont Terri) zur ISMEC 2012 und Teilnahme an der Tagung (18.06. – 22.06.2012 – Lissabon, Portugal)

**Ergebnisse AP1 & AP2:** RISA-Ergebnisse der Porenwasserprobe zeigten signifikante bakterielle Diversität. Zellwandcharakterisierung der Ton-Isolate: Färbung von *Sporomusa* sp. ergab Gram-negativ, KOH-Test zeigte jedoch, dass stabilere Zellwand vorliegt als für Gram-negativ üblich. *Paenibacillus* sp.: KOH-Test negativ → Gram-positiv. Ergebnisse werden durch Amino-peptidasetest ergänzt. Morphologische Besonderheit beider Isolate: Ausbildung elongierter Zellen/ Zellverbände unter anaeroben Bedingungen. **Ergebnisse AP3 & AP4:** U(VI) und *Sporomusa* sp.: U(VI)-Sorption bei pH 7 bereits nach 15 min abgeschlossen. Bei  $[U(VI)]_{\text{initial}} = 0.1 \text{ mM}$  sind 97 % des U(VI) gebunden. Zellen akkumulieren bei pH 7 deutlich mehr U(VI) als bei pH 4. Bestimmung der Oberflächen-funktionellen Gruppen mittels Titration ist erfolgt. Bindungskapazität: 203 mg U/g bei 0.1 mM U(VI), BTM = 0,05 g/L, pH 7. U(VI) und *Paenibacillus* sp.: Sorptionsmaximum bei pH 7. Stamm kann größere U(VI)-Mengen akkumulieren: bei pH 7 bei einer  $[U(VI)]_{\text{initial}}$  von 0.1 mM sind 119 mg U/g gebunden. *Paenibacillus* sp. setzt weitaus mehr Phosphat frei als *P. fluorescens* (Faktor 4 bei pH 6). Phosphatase-Aktivität wie bei *P. fluorescens* maximal bei pH 6. Phosphatfreisetzung wird mit steigender  $[U(VI)]$  inhibiert. U(VI) und *P. fluorescens*: Agardiffusionstests zeigten, dass *P. fluorescens* in Anwesenheit von U(VI)-Perchlorat (im Gegensatz zu U(VI)-Nitrat) U(VI)-Resistenz entwickeln kann. Bis 5  $\mu\text{M}$  U(VI) keine Beeinträchtigung der Zellvitalität. Pu(VI)+Pu(IV)-Polymere und *P. fluorescens*: starke Wechselwirkung bei pH 6 120 mgPu/g gebunden, weniger Pu akkumuliert als U (Radiotoxizität),

Bioreduktion von  $85 \pm 17$  % des angebotenen Pu(VI) innerhalb der ersten 24 h, starke Beeinflussung der Pu-Speziation. Bisher keine Wechselwirkung des Eu(III) mit *P. fluorescens*-Biofilmen festgestellt (Gegensatz zu U).

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der Diversitätsuntersuchungen; 16S rDNA Sequenzierung der Porenwasser-Bakterien
- Fortsetzung der mikrobiolog. Charakterisierung der Ton-Isolate (Amino-peptidase-Test, Substratspezifisierung, pH- und T-Optimum des Wachstums, Sporenbildung) für Publikationsreife
- Fortsetzung der Untersuchung der Wechselwirkung des Ton-Isolates *Paenibacillus* sp. mit Cm(III) (TRLFS)
- Anfertigen einer Dissertation zu den Ergebnissen der Wechselwirkung von *P. fluorescens* und *Paenibacillus* sp. (*Paenibacillus wynnii*) mit U(VI), Cm(III) und Eu(III)
- Pu Wechselwirkungsuntersuchungen mit den Ton-Isolaten
- TEM-Untersuchungen an *P. fluorescens* Biofilm nach Wechselwirkung mit U(VI); TRLFS-Messungen nach Wechselwirkung von *P. fluorescens* Biofilm mit Eu(III). Bearbeitung des Manuskriptes „The effect of U(VI) on cultivated *Pseudomonas fluorescens* biofilms“ zur Einreichung in Water Research
- Teilnahme an der internationalen Konferenz Plutonium Futures 2012, 15.-20.07.2012, University of Cambridge (UK)
- Beginn der Arbeiten zum Abschlussbericht des Vorhabens

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Lütke, L. et al.: A new uranyl benzoate species characterized by different spectroscopic techniques. Radiochim. Acta 100, 297-303 (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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2009 bis 31.10.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

AP1:

Am 19.01.2012 fand ein Arbeitstreffen in Brüssel statt, das vom Projektpartner Euridice ausgerichtet wurde. Im Zuge dieses Treffens wurde diskutiert, welche Möglichkeiten bestehen, fehlerhaft arbeitende Sensoren zu identifizieren, auch wenn keine Zugangsmöglichkeit mehr zu diesen Sensoren besteht (z. B. nach Verschluss eines Endlagers).

Vom 29.05. bis 31.05.2012 fand der siebte interne Workshop im Rahmen dieses Vorhabens in Turku, Finnland statt. Der Workshop wurde vom Projektpartner Posiva ausgerichtet. Im Rahmen dieses Workshops wurden die Arbeiten zu den Fallstudien vorgestellt und diskutiert und die weiteren Arbeiten abgestimmt. Darüber hinaus wurde die Struktur der abschließenden Berichte diskutiert, mit dem Ziel, wesentliche Projektergebnisse in Fachberichten noch vor der für März 2013 geplanten internationalen Abschlusskonferenz als Informationsmaterial fertigzustellen.

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. Fehlerhafte Messergebnisse können, falls die Fehler nicht erkannt werden, zu Fehlinterpretationen der Endlagerentwicklung führen. Im Berichtszeitraum wurde ein erster Berichtsentwurf erstellt, der die Möglichkeiten beschreibt, fehlerhafte Sensorsignale - ggf. automatisch - zu detektieren. Der Berichtsentwurf wurde an die beteiligten Projektpartner zur Prüfung übersandt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Inhaltliche Vorbereitung eines weiteren projektinternen Workshops, der von Nagra in Mt. Terri, Schweiz ausgerichtet wird.

Fortführung der Fallstudien zur langzeitlichen Überwachung eines Endlagers.

Erstellung von Fachberichten in Vorbereitung der internationalen Abschlusskonferenz.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Jobmann, T.J. Schröder, M. White (2012): Development of a theoretical monitoring system design for a HLW repository based on the „MoDeRn Monitoring Workflow“ (A Case Study), Waste Management Conference, Phoenix, Arizona, USA.

S Mayer, A Bergmans, JL Garcia-Sineriz, BJ Breen, M Jobmann (2012): Monitoring Developments for Safe Repository Operation and staged Closure (MoDeRn) Project, Waste Management Conference, Phoenix, Arizona, USA.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2009 bis 31.03.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 vom 27.03. bis 28.03.2011 das WP 3 - Arbeitstreffen in Madrid (E) bei CIEMAT statt, wobei die bisherigen Labor-Ergebnisse zusammenfassend vorgestellt und diskutiert wurden.

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

Während sich im ersten Vorhabenzeitraum die Untersuchungen auf Bentonit/Bentonit-Kontaktflächen konzentrierten, werden jetzt aktuell die Kontaktflächen Bentonit/Granitkontur untersucht. Dabei wurden unterschiedliche Belastungskonstellationen realisiert: (1) Volumenkonstantes Quellen mit Bestimmung des maximalen Quelldrucks; (2) behindertes Quellen mit Vorgabe einer definierten mechanischen Belastung der Kontaktfläche. Die neuen Versuche haben mittlerweile Versuchszeiten von bis zu 160 Tagen erreicht, wobei noch keine vollständige Aufsättigung des Bentonits erreicht wurde.

Der maximale Quelldruck der Bentonitformsteine mit Süßwasser liegt 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 reduzierten Festigkeit durch Setzung der Proben mit Nachquellen innerhalb weniger Monate abgedichtet wird. Diese Kontaktflächen stellen aber nach wie vor hydraulische Schwächeflächen dar.

Die an teilaufgesättigten Proben mit Bentonit/Bentonitkontaktflächen durchgeführten Fluidinjektionstests dokumentieren, dass durch das Quellen die vorher bestehenden Wegsamkeiten hydromechanisch verheilt sind, d. h. die Gasinjektionsdrücke über die ehemaligen Kontaktflächen entsprechenden Matrixeigenschaften.

AP5: Mittels direkter Schertests konnte der in den Gasinjektionstests dokumentierte Prozess einer „Verheilung“ über den Nachweis einer Kohäsion von ca. 0,6 MPa in den ehemaligen Trennflächen quantitativ belegt werden.

AP7: Für die Erstellung des FORGE-Abschlussberichtes wurden die wesentlichen Ergebnisse als Teil der WP3-Zuarbeit zusammengefasst.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP3: Fortsetzung der experimentellen Untersuchungen mit Aufsättigung der Bentonitkörper unter sukzessiver Messung der Gas-Permeabilität bzw. des kapillaren Sperrdrucks.

AP5: Fortführung der Untersuchung der Scherfestigkeit von Bentonit-Formsteinen zu strukturierten Tonstein- bzw. Kristallinoberflächen.

AP6: Umsetzung der Versuchsergebnisse in hydro-mechanische Modellrechnungen unter Verwendung des neu am IfG entwickelten Trennflächenmodells zur Fluidausbreitung.

AP7: Zusammenfassung der Arbeitsergebnisse für Endbericht sowie Vorbereitung der Beiträge für das FORGE Final Symposium (Luxembourg, 5-7 Februar 2013)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Ein Beitrag wurde für die Internationale Tagung "Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement" (Montpellier, 22-25.10.2012) eingereicht und akzeptiert: Popp T., Röhlke, C., Salzer, K. & M. Gruner. Hydro-mechanical and gas transport properties of Bentonite Blocks – Role of Interfaces.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2009 bis 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 der Rechnungen zum Homolog-Experiment 10-03 und Dokumentation. Vergleich und Auswertung der Ergebnisse zu den bisher unter verschiedenen Fluidgeschwindigkeiten durchgeführten Dipolexperimenten mit Homologen und Kolloiden, Run 08-02, 10-01 und 10-03. Die Durchbruchskurven für die idealen Tracer (bzw. Kolloide in Run10-03) lassen sich gut mit einem Datensatz für die Materialeigenschaften der Kluft beschreiben. Die Kolloide können für alle Läufe gut mit den gleichen Wechselwirkungsparametern am Kluftfüllmaterial beschrieben werden. Für die Beschreibung der Homologe in Lauf 10-03 mit der längsten Transportzeit müssen deutlich geringere Desorptionsraten von den Kolloiden gewählt werden als in 10-01. Gründe hierfür könnte beispielsweise eine erhöhte Kolloidkonzentration in Run 10-03 sein.
- Durchführung von Simulationsrechnungen zum Kolloid- und Radionuklidtransport im Dipolexperiment 12-02 („Predictive Modelling“). Auf Basis der Ergebnisse an den drei Homolog-Experimenten wurden Voraussagerechnungen für das Radionuklid-Dipolexperiment gemacht. Ein erster Vergleich zeigt, dass die Wiedererhaltungsraten für die dreiwertigen Actiniden relativ gut vorhergesagt wurden. Eine exakte Überprüfung erfolgt, sobald der vollständige Datensatz vorliegt (voraussichtlich Ende August).
- AP3: Teilnahme an dem Treffen der CFM Modeller Group im Juni in der Schweiz und Präsentation der Ergebnisse der neuen Modellrechnungen mit Schwerpunkt auf dem Versuch 12-02 zum kolloidgetragenen Transport von Radionuklidtracern.
- Strukturierung des gemeinsamen Berichts der Modellierer und Abstimmung mit KTH Stockholm und LANL.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Durchführung abschließender Modellrechnungen zum Dipolexperiment 12-02 und Diskussion der wesentlichen Effekte.
- Simulation weiterer für das 2. Halbjahr 2012 geplanter Dipolexperimente an Dipolen des CRR-Versuchs mit verringerten Fließgeschwindigkeiten. Überprüfung, ob dort beobachtete, höhere Kolloidfiltrationsraten auch unter den veränderten Fließbedingungen auftreten und mit dem vorhandenen Modell beschrieben werden können.
- AP3: Anfertigung des Berichts der Modellierer zum CFM Projekt.
- Durchführung eines Treffens zur Abstimmung des Abschlussberichts der Modellierer mit KTH Stockholm und LANL und Diskussion der Ergebnisse mit den Experimentatoren.
- Fertigstellung des Abschlussberichts

### 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 10679</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2009 bis 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 KOLLORADO 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 Kluffgeometrie 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 Ladungsheterogenitäten auf die Kolloidmobilität wurden weitergeführt. Für die Arbeiten zur Vertical Scanning- Interferometrie (VSI) an Granitpro-



ben aus Grimsel wurde Herr Dr. Darbha an die Universität Göttingen delegiert, um dort VSI- Messungen durchzuführen. Diese Arbeiten sind durch AFM Untersuchungen am INE, hier speziell mittels Kraft-Abstandskurven verglichen worden. Eine Veröffentlichung ist in *Langmuir* publiziert, eine in *Am. J. Sc.* akzeptiert und ein drittes Manuskript in *ES&T* im review.

Schwerpunkt der Arbeiten des 1. Halbjahres 2012 lag (a) auf der Durchführung und Analyse des ersten CFM Radionuklid-Experimentes im Felslabor Grimsel, (b) Sorptionseigenschaften von synthetisch strukturell markiertem Montmorillonit und (c) Laborstudien zur Machbarkeit der Radionuklidmarkierung für die Platzierung des kompaktierten Bentonits im „long term In-situ-Test“.

- (a) Nach den Präparationsarbeiten der CFM-Site mit zusätzlichen Monitoring- Bohrlöchern im Nahfeldbereich des Injektionsbohrlochs 06.001i2 wurden mehrere konservative Tracerversuche unter Verwendung von Amino-G als Substitution von Uranine durchgeführt. Durch Modifikation des Run 11-02 mit direkter Injektion des konservativen Tracers in das Bohrloch 06.001i2 (0.3 mL/min) konnte der Tracer aus der quasi stagnanten Zone um das Injektionsbohrloch zum „Pinkel“-Oberflächenpacker gerichteten Fließpfad gedrückt werden. Unter diesen hydraulischen Bedingungen wurde im Februar 2012 das erste CFM Radionuklid- Tracereperiment (Run 12-02) mit den Radionukliden  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{133}\text{Ba}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{232}\text{Th}$ ,  $^{237}\text{Np}$ ,  $^{242}\text{Pu}$  und  $^{243}\text{Am}$  erfolgreich durchgeführt. Die Kolloiddetektion erfolgte direkt vor Ort mittels der am INE entwickelten mobiler LIBD Anlage. Die Proben werden im Moment noch auf Grund der niedrigen Konzentrationen mittels HR-ICP-MS analysiert, zeigen jedoch neben dem Kolloiddurchbruch die Detektion von  $^{242}\text{Pu}$  und  $^{243}\text{Am}$  und somit eine Mobilität dieser kolloidassoziierten Actiniden trotz um einen Faktor 70 erhöhter Verweilzeiten im Vergleich zum CRR Projekt.
- (b) Die Studien zum Verhalten von synthetischem Montmorillonite (strukturell Zn- bzw. Ni markiert) im Vergleich zu natürlichen Febex- Bentonitkolloiden in Kollaboration mit Univ. Nancy und Univ. Mulhouse zeigen vergleichbares Kolloidstabilitäts-, Sorptions- und RN-Reversibilitätsverhalten, weisen aber deutliche Vorteile bezüglich der Quantifizierung des Kolloidwiedererhalts auf und wurden in Run 12-02 eingesetzt. Diese Ergebnisse werden auf der International Clay Conference in Montpellier präsentiert und ein Manuskript für das Proceedings-Volume in Applied Clay Science oder Physics and Chemistry of the Earth wird eingereicht.
- (c) Schwerpunkt weiterer Arbeiten fokussierten auf das Einbringen einer Radionuklid- gespikten Bentonitpaste in einen kompaktierten Bentonitring. Das Einbringen der Paste in Glasampullen mit Sollbruchstellen scheint momentan die gangbarste Methode für das In-situ-Experiment zu sein. Momentane Tests prüfen, ob der Bentonit-Quelldruck ausreichend ist um diese Ampullen alle frühzeitig zu zerstören und die RN freizusetzen.

AP2.5: Status:

Sensitivitätsrechnungen zum Einfluss der Probennahme aus den zusätzlichen Monitoring- Bohrlöchern im Nahfeldbereich des Injektionsbohrlochs 06.001i2 auf das Fließfeld wurden durchgeführt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.1: Zusammenfassung und Publikation der Batch- Experimente an synthetischen Ni/Zn- Montmorillonit mit Pu, Np, Am sowie Desorptionsstudien zur genauen Bestimmung der Kolloidanlagerungswahrscheinlichkeit  $\alpha$ .
- AP1.2: Zusammenfassung der Daten des ersten CFM- Radionuklidmigrationsexperiments in Form eines Manuskripts. Für Ende 2012 ist ein weiterer Migrationstest mit Radionukliden in der Dipolgeometrie des CRR-Experiments angedacht um einen direkten Vergleich der Kolloidmobilität unter hohen Verweilzeiten zu erhalten. Die Analyse der Proben dieses neuen Tests mittels ICP-MS, LIBD und S-Kurven LIBD (Kolloidkonzentration und -größenverteilung) obliegt dem INE.
- AP2.5: Abschluss der Modellrechnungen der In-situ-Experimente sowie zu den neu gebohrten Monitoring-Bohrlöchern.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

Darbha, Fischer, Michler, Lützenkirchen, Schäfer, Heberling, Schild (2012) *Langmuir*, 28, 6606-6617.

Darbha, Fischer, Schäfer (2012, in review) Quantitative Impact of Mineral Aggregate Surface Topography on Colloid Retention. *ES&T*.

Fischer, Michler, Darbha, Kanbach, Schäfer (2012, accepted) Deposition of mineral colloids on rough rock surfaces. *Am. J. Sc.*

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.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2009 bis 31.12.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 863.089,00 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 bei der EU zur Kofinanzierung angebotene 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 wärmetechnischen Parameter in Abhängigkeit vom Wassergehalt bestimmt. Die Ergebnisse zeigen eine deutliche Zunahme der Wärmeleitfähigkeit mit dem Wassergehalt (von ca. 0.31 Wm-1K-1 bei 1 Gew. % Wassergehalt auf 0.43 Wm-1K-1 bei 9 Gew. %). Darüber hinaus wurde die für die Modellierung wichtige Kapillardruckkurve bestimmt.
- AP2: Der Erhitzerversuchs HE-E läuft seit 28.06.2011 störungsfrei und die Messdaten werden laufend registriert.
- AP3: Beim Projekttreffen am 7. und 8. Mai in Madrid wurden die bisherigen Modellierungsergebnisse präsentiert. Für die in WP4 festgelegten Rechenfälle zum Langzeitverhalten (s. u.) wurden die relevanten Informationsquellen (Ergebnisse aus den übrigen PEBS Tasks sowie weitere Quellen) zusammengestellt.  
Zur Strategie der Modellierungsteams bei der Extrapolation der Rechnungen auf lange Zeiten wurde eine Matrix entworfen, in der die jeweiligen Modellrechnungen und ihre Bedeutung für die Langzeitsicherheitsbetrachtung definiert werden.
- AP4: Es wurden die Rechenfälle zur Langzeitextrapolation definiert, die im Rahmen von WP4 hinsichtlich ihrer Auswirkung auf Sicherheitsfunktionen und den Abbau von Ungewissheiten untersucht werden sollen.
- Sonstiges: Am 25. April 2012 wurde das PEBS-Projekt in einem Workshop den Genehmigungsbehörden vorgestellt. Dabei waren Vertreter von BMU (D), ENSI (CH), FANC (B), IRSN (F), SSM (S) und STUC (SF) anwesend.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Laboruntersuchungen zu den wärmetechnischen Parametern von Puffermaterialien in Abhängigkeit von der Feuchte bei Raumtemperatur.
- Durchführung 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

Czaikowski, O., B. Garitte, I. Gaus, A. Gens, U. Kuhlmann, K. Wiczorek: Desing and predictive modelling of the HE-E test, Deliverable D3.2-1 of the PEBS Project. European Commission, 2012.

Gaus, I., K. Wiczorek, J.-C. Mayor, T. Trick, J.-L. García Siñeriz, K. Schuster, B. Garitte, U. Kuhlmann: EBS Behaviour Immediately After Repository Closure in a Clay Host Rock: The HE-E Experiment (Mont Terri URL), Proceedings of the 14th Int Conference on Environmental Remediation and Radioactive Waste Management (ICEM'11), September 25-29, 2011, Reims, France. ASME.

Teodori, S.-P., I. Gaus, S. Köhler, J.-C. Mayor, C. Nussbaum, U. Rösli, K. Schuster, J.-L. García Siñeriz, P. Steiner, T. Trick, H. Weber, K. Wiczorek: Report on the construction of the HE-E experiment, Deliverable D2.2-3 of the PEBS Project. European Commission, 2012.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2009 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

Datenerfassung: Von Jahresanfang bis Ende Februar wurde die durch LINEAS programmierte Eingabeoberfläche DBControl inkl. Audit, Sets und Gültigkeitsgrenzen getestet und etwaige Probleme zur Überarbeitung an LINEAS gemeldet. Die fertige Eingabeoberfläche konnte dann Anfang März freigegeben werden. Die ersten umfangreichen Audits der freigegebenen Daten des ersten Releases (Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Cl<sup>-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, H<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>O(l)) wurden eingeleitet. Hierzu wurde zum einen die Eingabeoberfläche DBControl, als auch das Audit-Verfahren selbst getestet und gegebenenfalls angepasst.

Zum Tc-System wurden im Rahmen des Pitzer-Modells abgeleitete Daten gesichtet und bewertet. Während für das heptavalente Pertechnetat auf Basis früherer Arbeiten von INE eine befriedigende Datenlage existiert, ist diese für das unter stark reduzierenden Bedingungen relevante vierwertige Tc(IV) kritisch. Die beiden für Tc(IV) relevanten Modelle sind von Neck et al. (1999), bzw. von Hess et al. (2004) erstellt. Während Neck et al. ein Modell für den gesamten pH- und Ionenstärkebereich für NaCl KCl, CaCl<sub>2</sub> und MgCl<sub>2</sub> näherungsweise abschätzt, ist das über Löslichkeitsexperimente und spektroskopische Untersuchungen gut gestützte Modell von Hess et al. nur für NaCl Systeme bei pH < 7 definiert. Die beiden Modelle zeigen für saure NaCl Systeme drastische Unterschiede in der Tc-Speziation und Tc-Gesamtlöslichkeit. Eine abschließende Bewertung dieser Systeme ist, auch angesichts aktueller experimenteller Arbeiten von E. Yalcintas (KIT-INE) im Rahmen des BMWi- Verbundprojektes VESPA, noch nicht erfolgt. Es wurde weiterhin begonnen, Pitzer-Daten zu Th(IV) zusammenzustellen und zu bewerten.

Für die Datenfreigabe Am(III), Cm(III), Nd(III) in NaCl, CaCl<sub>2</sub> und MgCl<sub>2</sub>-Lösungen bei 298.15K (Elemente: Am, Cm, Nd, OH, H, Mg, Ca, Cl) wurden die Benchmark-Rechnungen mit dem Code EQ3/6 nachgeholt und das Benchmark-Dokument entsprechend ergänzt. Auch für den ersten Datenrelease (Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Cl<sup>-</sup>, SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>, H<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>O(l)) der ozeanischen Salze wurden die Benchmark-Rechnungen mit EQ3/6 nachgeholt und das Benchmark-Dokument entsprechend aktualisiert. Die Abweichungen der Rechnungen mit EQ3/6 für beide Releases waren nicht größer als die der anderen Codes. Damit sind die Parameterdateien für diese beiden Datenreleases bei 298.15 K nun für alle derzeit unterstützten Codes verfügbar, d. h. für Phreeqc, ChemApp, EQ3/6 und Geochemist's Workbench.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten hinsichtlich Tc gehen weiter und werden auf die tetravalenten Actiniden ausgedehnt.

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2009 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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/Rosendorf ist die Entwicklung einer einheitlichen, umfassenden und konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozessen für die derzeit in Deutschland diskutierten oder bereits realisierten Wirtsformationen untertägiger Entsorgungseinrichtungen. Hierzu bilden die beteiligten Projektpartner einen Kreis von Experten, der vorhandene thermodynamische Stoffgrößen sammelt, nach einheitlich vorher festgesetzten Kriterien bewertet und in einer Datenbank zusammenfasst. Besonderer Wert wird auf eine lückenlose Dokumentation und Rückverfolgbarkeit von Datenbankeinträgen gelegt. Es ist vorgesehen, den bereits in anderen Datenbasen vorhandenen Datenbestand zu integrieren. Die Datenbank hilft bei der Identifikation von Wissenslücken und beim Entwurf von Strategien zu deren Schließung.

Aufbauend auf dem bisher in Phase-I des Projektes THEREDA erstellten temperaturabhängigen (0 – 110 °C) Pitzer-Modell des 7-Komponenten-Systems bestehend aus dem hexären System der ozeanischen Salze einschließlich der sauren und basischen Lösungen (Na-K-Mg-Ca-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 Lösegleichgewichte 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>3-</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 und Drucken.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung von AP 5.2. Systemkomplex 3 und 4 mit Einarbeitung der leichtlöslichen Carbonate wie Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> und deren Hydrate und Doppelsalze.

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2009 bis 31.08.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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
- 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: Für das Deckgebirge wurden basierend auf den Daten der BGR verschiedene zweidimensionale Profile erstellt und die Strömung des Grundwassers über dem Salzstock Gorleben für diese Profile abgebildet. Zudem wurde ein dreidimensionales geologisches Modell für das Deckgebirge aus den Daten abgeleitet. Für den Bericht zu den geochemischen Rechnungen wurden erste Berichtsteile erstellt.
- AP4: Es wurde an der Erstellung eines Positionspapiers der IGSC mitgearbeitet zum Thema „Relevance of gases in the post-closure Safety Case – AN IGSC Position Paper“. In dieses Positionspapier sind die in ISIBEL-2 erarbeiteten Ergebnisse eingeflossen.
- AP5: Die für das erste Halbjahr 2012 geplante Durchführung der probabilistischen Rechnungen wurde auf das zweite Halbjahr verschoben. Geplanter Start ist Oktober 2012. Die den Rechnungen zu Grunde liegenden Eingangsdaten (Inventar, Grubengebäude) wurden den aktuellen Daten aus der vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) angepasst.
- AP6: Es wurden acht Themen identifiziert, die im AP6 einer vertieften Bearbeitung unterzogen werden. Für diese Themen wurde mit der Zusammenstellung und Auswertung der Literatur begonnen und verschiedene Gesprächen mit Fachleuten (insbesondere BGR, K+S, IfG, Asse GmbH) zu den identifizierten Natürlichen Analoga begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Die Modellierung der Grundwasserströmung über dem Salzstock Gorleben soll 2012 abgeschlossen und mit der Erstellung des Berichtes begonnen werden. Der Bericht zu den geochemischen Rechnungen wird im Laufe des Jahres 2012 um neue Berichtsteile erweitert.
- AP4: Das Positionspapier der IGSC soll fertiggestellt werden. Weiterhin soll mit der Erstellung des Abschlussberichts zum AP4 auf Basis des internen Berichts GRS-A-2592 begonnen werden.
- AP5: Mit dem erstellten Grubengebäudemodell wird im zweiten Halbjahr 2012 eine Überprüfung des für die Konsequenzenanalyse zur Verfügung stehenden probabilistischen Instrumentariums durchgeführt. Dabei sollen auch bei der Ableitung der Szenarien im Rahmen der VSG aufgekommene Fragestellungen berücksichtigt werden, z. B. die Umsetzung von Alternativszenarien in probabilistische Rechenläufe.
- AP6: Die Auswertung der Literatur und die Einbeziehung von Fachleuten zu den identifizierten Natürlichen Analoga wird weiter fortgeführt und zum Ende des zweiten Halbjahres 2012 abgeschlossen. Auf dem internationalen Workshop zu Natürlichen Analoga in Salz vom 04.09. bis 06.09.2012 in Braunschweig werden die Themen auch internationalen Kontext vorgestellt und diskutiert.

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2009 bis 31.08.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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. Es erfolgte die Überprüfung dieser Versagenswahrscheinlichkeiten, weiterhin wurden Ansätze recherchiert und überprüft, die Abhängigkeit von präferierten Pfaden zu überprüfen. Als praktisches Beispiel für die Überprüfung wurde der Asse-Vordamm gewählt, für den eine vergleichsweise umfangreiche, weitestgehend veröffentlichte Datenlage zu Verfügung steht.

Die Versagenswahrscheinlichkeiten einzelner Grenzzustandsfunktionen wurden auf dem Niveau einer Vorbemessung mittels statistischer Variationsfunktionale behandelt (variografische Verfahren), um eine Aussage über den Einfluss der Länge auf die Versagenswahrscheinlichkeit zu erzielen. Einzelne Programmbausteine sind von der TU Clausthal dabei so zu koppeln, das die Prozesse soweit automatisiert ablaufen, dass eine hohe Anzahl von Realisationen durchgeführt werden kann. Der Bericht zu den Berechnungsergebnissen wurde geprüft, kommentiert und mit der bitte um Überarbeitung an die TU Clausthal übermittelt. Auch Arbeitsergebnisse, die den Bezug zu langen Nachweiszeiträumen herstellen, wurden schriftlich dokumentiert und durch die DBE TECHNOLOGY GmbH geprüft.

AP2A:

Die Erfassung des Abfallmengengerüsts von nicht-wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen, bei denen noch nicht abschließend geklärt werden kann, ob sie die Annahmebedingungen für das Endlager Konrad erfüllen, ist abgeschlossen.

AP3 (Thermomechanische Berechnungen):

Keine neuen Untersuchungen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Die Arbeiten zum Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlussbauwerke werden fortgeführt.

AP3: Die Stoffmodellparameter des transienten Materialverhaltens des Steinsalzes sollen bestimmt werden, um verbesserte Aussagen zur Gebrauchstauglichkeit eines offenen Bohrlochs vornehmen zu können.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2010 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 weiterer mikrostruktureller Untersuchungen wurden seitens BGR erneut Proben aus einem früheren Kompaktionsversuch zur Verfügung gestellt. Die Proben haben einen anderen Kompaktionsgrad als die bisher untersuchte Proben und damit auch unterschiedlichen Porositäten und wurden während der Kompaktierung mehrmals mit gesättigter

Salzlösung durchströmt, um die Permeabilität zu messen. Die einzelnen Proben wurden in einem Exsikator evakuiert und mit einem sehr gering viskosen blauen Harz getränkt. Nach angemessener Verweildauer mit Aushärtung des Harzes wurden von jeder Probe Dünnschliffe angefertigt. Die Dünnschliffe wurden anschließend unter dem Mikroskop fotografiert. Die fotografische Erfassung erfolgt in zwei Schritten. Nachdem zunächst der gesamte Dünnschliff erfasst wurde, wird er anschließend in einer deutlich höheren Auflösung rasterförmig abgeleitet um Detailanalysen durchführen zu können.

Die Ergebnisse dieser ergänzenden Mikroskopanalyse bestätigten die bereits in vorhergehenden Untersuchungen gefundenen Unterschiede in der Struktur des Porenraums beim Vergleich von trocken und feucht kompaktierten Salzgrusproben.

AP3:

Die Diskrete-Element-Methode unter Anwendung des Partikel-Flow-Codes (PFC) eignet sich dazu, Materialien auf mikroskopischer Ebene zu simulieren. Da PFC kugelförmige Elemente einsetzt, Salzgruspartikel jedoch eine kantige Form aufweisen, wurden im Rahmen der aktuellen Arbeiten sogenannte Cluster implementiert und eingesetzt. Cluster setzen sich aus kleineren Kugeln zusammen, die durch Kontakte verbunden sind. Auf diese Weise lassen sich von der Kugelform abweichende Elemente bilden und somit die Salzgruspartikel sinnvoll abbilden. Aktuell werden ellipsoide Cluster eingesetzt, deren Größe und Form (Verhältnis von Lang- zur Kurzachse) sich nach vorgegebenen Funktionen steuern lässt. Des Weiteren müssen die einzelnen Cluster hinsichtlich ihres visko-elastoplastischen Verformungsverhaltens kalibriert werden. Zu diesem Zweck wurden Standard-Laborversuche nachgefahren und wichtige elastische und plastische Parameter erhoben. Aktuell findet eine Anpassung der Clustergeometrie an die Salzgruskörner statt. Ferner soll in einem weiteren Schritt ein Vergleich zwischen Diskontinuum- und Kontinuummodell hinsichtlich der elastischen Lösung im Oedometerversuch stattfinden.

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

AP2: Durchführung mikrostruktureller Untersuchungen an kompaktierten Salzgrusproben aus früheren Kompaktionsversuchen. Durchführung von Bildanalysen zur Visualisierung und Analyse des Porenraums.

AP3: Anpassung der Clustergeometrien an die Kornform der Salzgruspartikel. Simulation eines Oedometerversuchs im kleinen Maßstab und Vergleich der rein elastischen Lösung mit einem Kontinuummodell.

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

K.P. Kröhn, C.L. Zhang, J. Wolf, D. Stührenberg, M. Jobmann, L. von Borstel, C. Lerch (2012): The compaction behaviour of salt backfill at low porosities, SaltMech7, mechanical behaviour of salt, 16-19 Apr 2012, MINES ParisTech, Paris.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2010 bis 30.04.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

Insgesamt fanden im Berichtszeitraum 2 Treffen der Projektpartner zur Steuerung des Gesamtprojekts und zu einzelnen APen statt.

Die Langzeitkompaktionsversuche bei trockener Atmosphäre und unterschiedlicher Anfangsfeuchte verlaufen weiterhin zufriedenstellend. Orientierende Modellrechnungen deuten allerdings darauf hin, dass die Proben mit geringer Anfangsfeuchtigkeit im Projektzeitraum unter isothermen Bedingungen nur eine Porosität von ca. 10 % erreichen werden. Aus diesem Grund soll - in Abstimmung mit den Projektpartnern - die Temperatur nach Abschluss der laufenden Laststufe zunächst auf 60 °C, später dann auf 90 °C angehoben werden, um den Kompaktionsvorgang zu beschleunigen (eine Temperaturerhöhung war ursprünglich erst gegen Ende des Versuchs vorgesehen). Auf der Grundlage von begleitenden Prognoserechnungen sollen (analog zur Vorgehensweise bei den vorangegangenen Laststufen) auch für die einzelnen Temperaturstufen Aussagen zur Zuverlässigkeit der modifizierten Materialparameter getroffen werden.

Parallel sind Modellrechnungen zur Simulation eines laufenden mehrstufigen Kriechkompaktionsversuchs der BGR mit den modifizierten Materialparametern durchgeführt und mit den Messbefunden verglichen worden. Erste Ergebnisse haben gezeigt, dass für eine hinreichend zuverlässige Modellprognose unbedingt auch die dem Versuch vorlaufende Vorkompaktionsphase des Materials numerisch abgebildet werden sollte.

Der Versuch zur Langzeitkompaktion in verschiedenen feuchter Atmosphäre wurde neu eingerichtet und ist angelaufen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschlussarbeiten an einem Ergebnisrapport zu AP1 und Definition eines THM-Modells zu einem Zutrittsszenarien unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus dem Projekt VSG.
- Fortsetzung des Langzeitkompaktionsversuchs in trockener Atmosphäre.
- Fortsetzung des Feuchtekompaktionsversuchs.
- Fortsetzung der Modellrechnungen zum Langzeitkompaktionsversuch.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kröhn, K.-P., Zhang, C.L., Wolf, J., Stührenberg, D., Jobmann, M., von Borstel, L., Lerch, C.: The compaction behaviour of salt backfill at low porosities. FKZ 02 E 10740 (BMW), in: Bérest, P., Ghoreychi, M., Hadj-Hassen, F., Tijani, M. (eds.): Mechanical Behaviour of Salt VII – Proceedings of the 7th Conference on the Mechanical Behaviour of Salt, Paris, 2012.

Czaikowski, O., Wieczorek, K., Kröhn, K.-P.: Compaction of salt backfill – new experiments and numerical modeling. FKZ 02 E 10740 (BMW), in: Bérest, P., Ghoreychi, M., Hadj-Hassen, F., Tijani, M. (eds.): Mechanical Behaviour of Salt VII – Proceedings of the 7th Conference on the Mechanical Behaviour of Salt, Paris, 2012.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 31.01.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 270.970,00 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**

Auf der Grundlage der bisherigen Ergebnisse und Diskussionen sowie der im Dezember 2011 von VNIPI Promtehnologii in Moskau vorgestellten Neubewertung hydrogeologischer Parameter im Untersuchungsgebiet wurden die sicherheitsanalytischen Rechnungen aktualisiert. Dies gilt vor allem hinsichtlich der Randbedingungen und der hydrogeologischen Parameter der Migrationspfade für Radionuklide. Zur Bewertung der Ergebnisse der aktualisierten Rechnungen wurden umfangreiche Parameterstudien durchgeführt.

Die Modellierung der Grundwasserströmung und des Schadstofftransportes wurde ebenfalls auf der Grundlage der neuen Daten zu den Randbedingungen und hydrogeologischen Parameter aktualisiert.

Im ersten Halbjahr 2012 startete der Informationsaustausch über die von VNIPI Promtehnologii zum Thema „Kritikalität“ für die Sicherheitsanalyse zur Endlagerung von radioaktiven Abfällen durchgeführten Arbeiten sowie die Optimierung der technologischen und technischen Lösungen für diese Abfälle in Bezug auf die nukleare Sicherheit. Erste Ergebnisse werden auf dem nächsten Projekttreffen am 11.07. und 12.07.2012 in Peine diskutiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Ergebnisse der durchgeführten sicherheitsanalytischen Rechnungen und der Modellierung der Grundwasserströmung und des Schadstofftransportes werden auf dem nächsten Projekttreffen am 11.07. und 12.07.2012 in Peine vorgestellt und gemeinsam mit den Projektpartnern diskutiert.

Im Nachgang dieses Treffens werden die Ergebnisse der mit den neuen Randbedingungen und Parametern durchgeführten sicherheitsanalytischen Rechnungen den anderen Projektpartnern als vorläufiger Bericht zur Verfügung gestellt. Die Modellierung der Grundwasserströmung und des Schadstofftransportes wird ebenfalls auf der Grundlage der neuen Daten aktualisiert und die Ergebnisse den anderen Projektpartnern zur Verfügung gestellt.

Zusammen mit BGR und DBE TECHNOLOGY wird eine Vorgehensweise erarbeitet, wie auf der Grundlage der Ergebnisse aus den Modellrechnungen Aussagen über die Robustheit der Sicherheitsfunktionen gewonnen und damit Konsequenzen für die Langzeitsicherheit abgeschätzt werden können.

Im Falle der Bewilligung der beantragten Aufstockung des Projektes (siehe 8.) soll zudem die Zusammenarbeit im Bereich der Kritikalitätssicherheit intensiviert werden. Des Weiteren ist geplant, die in URSEL eingesetzten EMOS-Module CLAYPOS und CHETMAD so zu erweitern, dass sie gemeinsam mit den in der GRS neu entwickelten Statistikwerkzeugen eingesetzt werden können (Beginn Ende 2012, Schwerpunkt 2013).

### **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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 31.01.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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**

AP1 und AP4:

Seitens des russischen Projektpartners wurde nochmals 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. Von russischer Seite wurden dazu auch Bewertungskriterien geliefert, insbesondere Grenztemperaturen, die im Bergwerk an den Hohlraumkonturen nicht überschritten werden sollen. Die Berechnungsergebnisse zeigen, dass alle thermischen Grenzkriterien eingehalten werden. Die Ergebnisse wurden in einem „Technical Report“ in englischer Sprache dokumentiert und dem russischen Partner übergeben.

AP7:

Im Rahmen der Projektkoordination erfolgte die Vorbereitung und Durchführung eines weiteren deutsch-russischen Arbeitstreffens in St. Petersburg zur Entsorgung schwach- und mittelaktiver Abfälle und zur Endlagerung in einer Tonsteinformation in der Leningrader Region. Seitens der russischen Kollegen erfolgte eine detaillierte Darstellung der durchgeführten Laboruntersuchungen an vorhandenem Kernmaterial.

Auf dem Treffen wurde fest gestellt, dass die Durchführung gemeinsamer Arbeit zu den diskutierten Themen relevant ist, für die Begründung technischer Lösungen in der Vorprojektphase und für Fragen der Sicherheit im Hinblick auf die Notwendigkeit der Entwicklung von Design-Dokumenten zur Endlagerung radioaktiver Abfälle in den Tonformationen auf dem Territorium der Leningrader Zweigstelle des "SZTO FSUE" RosRAO " sowie für das Studium der Endlagerung radioaktiver Abfälle in Tonformationen in Deutschland. Darüber hinaus können die gemeinsamen Arbeiten und Empfehlungen Grundlage sein für die Entwicklung von Regelungen für Sicherheitsnachweise und für methodische Ansätze für andere Endlager sowie für Vorschriften und Sicherheitsbestimmungen in der Russischen Föderation. Neben der Entwicklung eines gemeinsamen Arbeitsprogramms sollen vor allem Vorschlägen zum Sicherheits- und Nachweiskonzept der Endlagerung radioaktiver Abfälle in Tonformationen speziell für die Leningrader Region im Rahmen des geplanten Projektes ausgearbeitet werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP4:

Thermische Berechnungen zur weiteren Optimierung des Einlagerungskonzeptes.  
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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Die isopiestic Messungen zur Schließung der Datenlücke bei 25 °C für die Systeme Cs-Ca-Cl- $\text{H}_2\text{O}$ , Cs-Mg-Cl- $\text{H}_2\text{O}$ , Cs-Mg- $\text{SO}_4$ - $\text{H}_2\text{O}$  wurden erfolgreich durchgeführt.

Isopiestic Messungen bei höheren Temperaturen (40 °, 60 ° und 90 °C) für die binären Systeme CsCl- $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CsSO}_4$ - $\text{H}_2\text{O}$ , NaI- $\text{H}_2\text{O}$ , KI- $\text{H}_2\text{O}$  wurden begonnen. Die Dauer der Experimente bis zur Gleichgewichtseinstellung ist jedoch bei 60 ° und 90 °C deutlich länger als zunächst angenommen, deshalb wurde eine Schaukelapparatur entwickelt.

Eine erste Charge der benötigten Chemikalien  $MgSeO_4$  und  $CaSeO_4$  wurden synthetisiert. Erste Messungen zur potentiometrischen Bestimmung thermodynamischer Daten mit Hydrogenseleniten wurden mit  $NaHSeO_3$  durchgeführt. Da die Einstellung des Gleichgewichts recht lange dauert (nur 1 Messpunkt pro Tag) wird gerade an einem bei höheren Temperaturen einsetzbaren Multi-Elektroden-Design gearbeitet.

Gleichgewichtseinstellung bei den Versuchen zur Bestimmung der Löslichkeitskonstanten aus LDH-Mischkristallen (Fe-, Ni- und Co-LDHs) wurde erreicht.

Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis:

Erstellung einer Zusammenschau über die Daten, die von den einzelnen Projektpartnern in VESPA erhoben und für die Vergleichsrechnungen zur Verfügung gestellt werden können. Vorstellung der von GRS für die Rechnungen im Ton und Salz vorgeschlagenen Codes bei den Projektpartnern.

Koordination des Verbundvorhabens:

Erstellung einer Formatvorlage für den Abschlussbericht.

Vor- und Nachbereitung des 4. Projekttreffens im Mai 2012 zum Verbundvorhaben VESPA.

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

Literaturstudien:

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

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Fortführung der Isopiestik für die binären Systeme  $CsCl-H_2O$ ,  $CsSO_4-H_2O$ ,  $NaI-H_2O$ ,  $KI-H_2O$  unter Einsatz einer Schaukelapparatur zur Beschleunigung der Gleichgewichtseinstellungen sowie Beginn der Isopiestik von Na,K,Mg- $SeO_4$  bei 40 °, 60 ° und 90 °C.

Durchführung weiterer Messungen zur potentiometrischen Bestimmung thermodynamischer Daten mit Hydrogenseleniten.

Abschluss der Versuche zur Bestimmung der Löslichkeitskonstanten aus LDH-Mischkristallen sowie Berechnung der Löslichkeitskonstanten.

Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis:

Absprache mit den Projektpartnern über die Vergleichsrechnungen (Festlegung von geochem. Milieu, Randbedingungen, Ionenstärke, Matrixsalzen, Abfallinventar etc.)

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 5. Projekttreffens zum Verbundvorhaben VESPA.

#### **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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2013		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012
<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: Die Synthesen, strukturelle Charakterisierungen und Bestimmung der Bildungsenthalpien von LDH-Mischkristallverbindungen, in denen partiell das divalente Magnesium gegen divalentes Eisen, Cobalt und Nickel ausgetauscht wurde sind abgeschlossen. Eine Publikation ist in Vorbereitung.

AP2: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP3: Batch-Adsorptionsuntersuchungen an den synthetisierten LDH-Mischkristallphasen mit Iodid und Pertechnat in Wasser, in Tonporenwasser (Mont-Terri Typ A1) und in Salzlauge ( $\text{MgCl}_2$ -reiche Lauge) sind abgeschlossen. Eine Rückhaltung konnte in Wasser und in Tonporenwasser, nicht aber in einer  $\text{MgCl}_2$ -reichen Salzlauge beobachtet werden. Aufgrund der Pufferwirkung der LDHs konnte für die Sorption keine pH-Abhängigkeit festgestellt 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 an den synthetisierten LDH-Mischkristallphasen mit Selenit als Funktion der Zeit, des pH-Wertes und der Radionuklidkonzentration sind geplant.

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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 wurden bei 25 °C durchgeführt.
- <sup>77</sup>Se-NMR-Spektren von Se(IV) und Se(VI) zeigen bis 60 °C unveränderte Speziation für verschiedene, definierte pH-Werte.

AP3:

- Batchexperimente
  - Sorption von Se(VI) an  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> wird signifikant verringert bei Zunahme der Ionenstärke (Hintergrundelektrolyt NaCl bzw. MgCl<sub>2</sub>)
  - Erste Versuche zur Sorption von Se(VI) und Se(IV) an  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> erfolgten.
- Spektroskopie
  - Sorptionsversuche von Se(VI) an  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> mittels ATR FT-IR zeigen die Bildung eines außersphärischen Komplexes mit einer Symmetriebildung von T<sub>d</sub> zu C<sub>2v</sub>.

AP4:

- Bestimmung von  $\Delta_R G_f^0$ ,  $\Delta_R H_f^0$ ,  $\Delta_R S_f^0$  für die Se(VI) Sorption an TiO<sub>2</sub> ergab Endothermie und Entropieabnahme.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Untersuchungen zur Komplexbildung von Selen mit den kationischen Liganden Calcium und Magnesium bei Temperaturen bis 60 °C und Ionenstärken bis 6 M mit Raman und NMR Spektroskopie.

AP3: Untersuchungen zur Oberflächenkomplexbildung von Selen 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> bei 40 und 60 °C und von Selen an  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> bei Ionenstärken bis 5 M.

AP4: Bestimmung thermodynamischer Parameter für die Sorption von Selen 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.; Jordan, N.; Müller, K.: Influence of Temperature on the Sorption of Selenate onto Anatase. Experimental Mineralogy, Petrology and Geochemistry. 04.-07.03.2012. Kiel, Deutschland. (Vortrag)

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2010 bis 30.06.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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:* Die Löslichkeitsexperimente von Tc(IV) wurden von Frau Ezgi Yalcintas durchgeführt.

Vorversuche in verschiedenen konzentrierten NaCl Systemen bei  $5 < \text{pH} < 14$  aus Unter- und Übersättigung sind abgeschlossen und liefern erste Hinweise auf das Löslichkeitsverhalten von Tc(IV). Arbeiten zur Synthese von ca. 200 mg Tc(IV)-oxyhydroxid Festphase, welches als Ausgangsmaterial für nachfolgend geplante umfangreiche Löslichkeitsstudien mit expliziter Festphasencharakterisierung dient, wurden durchgeführt.

**AP2: Status:** Es wurde eine Publikation zu den von T. Kobayashi untersuchten Tc-Redoxprozessen im 0.1 M NaCl System bei *Radiochimica Acta* eingereicht. Das Manuskript ist derzeit in Review. Ähnlich ausgelegte Experimentserien zum Redoxverhalten von Tc(VII) in höher konzentrierten NaCl und  $\text{MgCl}_2$  Systemen sind weitgehend abgeschlossen und liefern Hinweise auf eine teils deutliche Abhängigkeit des Redoxverhaltens von der Ionenstärke bzw. der Chloridkonzentration. Die Arbeiten sollen von Frau E. Yalcintas bei der kommenden NRC8 Konferenz in Como, Italien, vorgestellt werden, es wurde hierzu ein Abstract eingereicht.

**AP3: Status:** Die kinetischen Arbeiten zur Tc(VII) Reduktionskinetik an im Rahmen des EURATOM CP CROCK Projekts zur Verfügung stehenden anoxischen Probenmaterial (Granodiorite aus Äspö, Schweden) wurden durchgeführt und ein Manuskript im Rahmen der Workshop-Proceedings von CP-CROCK eingereicht. Die sich einstellenden Eh/pH Bedingungen favorisieren dabei eine Tc(VII) Reduktion und potentielle Tc(IV) Präzipitation in Form einer  $\text{TcO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$  Phase. Bei diesen Batchexperimenten zeigte sich, dass höhere Tc(VII) Konzentrationen ( $10^{-5}$  mol/L), wie sie üblicherweise für spektroskopische Untersuchungen zum Einsatz kommen, in diesen Batchexperimenten bereits die Reduktionskapazität des Granodiorit- Materials überschreiten, korrelierend mit der gemessenen ionenaustauschbaren Fe(II) Konzentration. Ähnliche Experimente sind zurzeit an granitischen Materialien aus dem Nizhnekansk Granit Massiv (potentieller Standort zur tiefengeologischen Endlagerung von hochradioaktiven Abfällen in Russland), die über die Lomonosov Moscow State University aus der Arbeitsgruppe von Prof. St. Kalmykov zur Verfügung gestellt wurden, im Gange.

**AP4: Status:** Eine Veröffentlichung über die Struktur der Selenit Einbauspezies in Calcit (P-GIXAFS) und experimentell und theoretisch bestimmte thermodynamische Parameter ist in Vorbereitung und wird voraussichtlich noch diesen Sommer eingereicht. Versuche zur Aragonit-Rekristallisation in Gegenwart von Selenit laufen. Vorläufige Ergebnisse deuten in Übereinstimmung mit vorhergehenden Durchflussreaktor Experimenten an, dass die Gegenwart von Selenit das Calcitwachstum sehr stark behindert. Bei hoher Übersättigung (SI(Calcit): 1.2 – 3.6) entsprechen die Verteilungskoeffizienten den im Durchflussreaktor gemessenen. Die Studien zur Wechselwirkung von Selenid mit Mackinawit sind abgeschlossen und ein Manuskript zu den spektroskopischen Daten (EXAFS/XANES) ist verfasst und in einem „peer review“ Journal eingereicht worden. Die experimentellen Arbeiten zur Wechselwirkung mit Pyrit sind auf Grund technischer Probleme verzögert.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Abschluss der Tc(IV)-oxyhydroxid Festphasensynthese. Umfassende Löslichkeitsexperimente mit dieser Tc(IV)-Phase in carbonatfreier NaCl und  $\text{MgCl}_2$  Lösung mit genauer Charakterisierung löslichkeitsbestimmender Tc-Festphasen. Vergleich der experimentellen Daten mit geochemischen Modellrechnungen. Zusammenstellung thermodynamischer Daten zu Tc in endlagerrelevanten Systemen.

**AP2:** Abschluss der Tc-Redoxexperimente (Eh/pH) in konzentrierter NaCl bzw.  $\text{MgCl}_2$  Lösung. Diskussion von neuen Möglichkeiten, das in den betreffenden wässrigen Systemen gemessene Redoxpotential systematisch einzuschätzen. Präsentation der Arbeiten zur Tc-Redoxchemie im Rahmen von Fachkonferenzen.

**AP3:** Weiterführung der vergleichende Tc(VII) Sorptions- Untersuchungen an Granitproben aus dem Nizhnekansk Massiv und synth. Eisenoxiden unter Verwendung von Fe-59 zur Quantifizierung des isotopenaustauschbaren Fe. Untersuchung der Batchexperimentproben mit Oberflächenanalytik (e.g. XPS) zur Identifizierung des Wechselwirkungsmechanismus. Beginn der Tc(VII) Säulenexperimente an Äspö Diorit.

**AP4:** Calcit Rekristallisationsversuche im Gleichgewicht in Gegenwart von  $^{79}\text{Se(IV)}$  und  $^{45}\text{Ca}$ , sowie Oberflächendiffraktionsexperimente zu Se(IV) Adsorption/Einbau in Calcit, sind geplant. Die Umwandlung von Mackinawit in Pyrit soll mit reinem FeS und mit Selenid-dotiertem Mackinawit untersucht werden. XRD und REM Messungen sollen zeigen, ob Se die Synthese beeinflusst, und ob sich eine separate Se-Phase bildet.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Manuskript von Kobayashi et al. ist derzeit in Review bei „*Radiochimica Acta*“ (Tc-Redox Arbeiten aus AP 2). Manuskript zum Se(IV) Einbau in Calcit aus AP 4 (Heberling et al.) ist in Vorbereitung.

Manuskript zur Se Wechselwirkung mit FeS (Mackinawit) aus AP 4 in Review.

Zu AP 3: Totskiy, Y., Geckeis, H., Schäfer, T. (2012): Sorption of Tc(VII) on Äspö diorite (ÄD). 1<sup>st</sup> Workshop Proceedings, 7<sup>th</sup> EC FP CP-CROCK, KIT Scientific Reports.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 31.01.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 in Kooperation mit der BGR Hannover entwickelten Composite-Dilatanz-Modell (CDM) und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Fa. Itasca).

Im Berichtszeitraum nahm der Zuwendungsempfänger einige Modifikationen der CDM-Formulierung vor, die durch Ergebnisse bisheriger Benchmark-Berechnungen im Verbundprojekt nahe gelegt worden waren. Dies betrifft z. B. die Modellierung der Spannungsabhängigkeit der stationären Kriechrate bei kleinen, in situ relevanten Effektivspannungen, die Modellierung der Schädigungswirkung auf die Verformung (Entfestigung) sowie die Modellierung des Kriechbruchs. Zur Validierung der neuen Formulierungen und zur Parameterbestimmung wurden zahlreiche Kriech- und Festigkeitsversuche nachgerechnet.

Die Partner führten am 23.-24.01. in Braunschweig den fünften und am 12.-13.06. in Leipzig den sechsten Projekt-Workshop durch, auf dem sie aktuelle Arbeiten und Ergebnisse vorstellten und besprachen. Vom 16.-19.04. präsentierte der Zuwendungsempfänger auf der 7th Conference on the Mechanical Behavior of Salt (Saltmech7) in Paris Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes sowie den aktuellen Stand seines CDM-Stoffgesetzes.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird die Ergebnisse der Projektpartner aus den thermomechanischen Modellberechnungen der Bohrlochkonvergenz in der Schachtanlage Asse II vergleichen. Außerdem wird er weitere Laborversuche zum thermomechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz mit dem überarbeiteten CDM-Stoffgesetz nachrechnen sowie die Modellierung der Untertagestruktur „Dammjoch“ beginnen. Er wird den 7. Projektworkshop vorbereiten und am 08.10.2012 bei den Sandia National Laboratories in Albuquerque/NM mit den Partnern durchführen. Am 09.-11.10.2012 wird er auf dem 3rd US-German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation in Albuquerque Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes präsentieren. Schließlich wird er den Antrag auf Vorhabensverlängerung zur Durchführung von Benchmark-Modellberechnungen von In-situ-Strukturen in der Waste Isolation Pilot Plant (WIPP) in New Mexico (USA) fertig stellen. Diese Arbeiten dienen auch der Vertiefung der Kooperation der deutschen Verbundpartner mit den Sandia National Laboratories.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hampel (2012): The CDM constitutive model for the mechanical behavior of rock salt: Recent developments and extensions. In: Proceedings of the 7th Conference on Mechanical Behavior of Salt (s. u.), S. 45-55.

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 (2012): Joint projects on the comparison of constitutive models – I. Overview of the projects, reference mine for 3-D benchmark calculations, in-situ measurements and laboratory tests. In: Proceedings of the 7th Conference on Mechanical Behavior of Salt (s. u.), S. 221-230.

Hampel, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters & U. Düsterloh (2012): Joint Projects on the Comparison of Constitutive Models for the Mechanical Behavior of Rock Salt - II. Overview of the models and results of 3-D benchmark calculations. In: Proceedings of the 7th Conference on Mechanical Behavior of Salt (s. u.), S. 231-240.

Alle in: P. Bérest, M. Ghoreychi, F. Hadj-Hassen & M. Tijani (Hrsg.): Proc. 7th Conf. on the Mechanical Behavior of Salt, Paris, 16.-19. April 2012. CRC Press/Balkema, Leiden NL.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.09.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 zwei Projekt-Workshops durch: am 23.-24. Januar in Braunschweig (veranstaltet von der TU Braunschweig) sowie am 12.-13. Juni 2012 in Leipzig (veranstaltet vom IfG Leipzig).

Auf diesen Workshops wurden von den Partnern numerische Simulationsergebnisse präsentiert und diskutiert. Diesbezüglich präsentierte der Zuwendungsempfänger auf dem ersten Workshop seine Ergebnisse der durchgeführten numerischen Simulationen für die Re-Analyse der Untertagesituation „Dammjoch“. Wesentlicher Bestandteil der Präsentation war in diesem Zusammenhang die Vorstellung der Modellgeometrie sowie die Simulation der Dilatanzenwicklung und Schädigungsrückbildung nach  $t = 85$  Jahren. Mit dem Begriff „Dammjoch“ wird eine ausgebaute Strecke in der Schachanlage Asse II bezeichnet, bei der es aufgrund der Konvergenzwirkung über einen Zeitraum von ca. 85 Jahren zu einem Aufkriechen des Steinsalzgebirges auf den Ausbau kam. Die damit einhergegangene Schädigungsrückbildung im Salzgebirge soll von jedem Projektpartner mit seinem jeweiligen Stoffmodell numerisch simuliert und mit durchgeführten Permeabilitätsmessungen verglichen werden.

Zusätzlich wurden im Berichtszeitraum numerische Re-Analysen von Verheilungsversuchen sowie eine Stoffmodellparameterbestimmung auf Grundlage von bereits vom IfG Leipzig dargestellten Festigkeitsversuchen durchgeführt. Bei der Re-Analyse der Verheilungsversuche lag der Fokus auf dem Einfluss der behinderten Querdehnung durch die Stahldruckplatten an den Stirnseiten des Salzprüfkörpers während der Versuche. Daher wurden Verheilungsversuche einmal mit und einmal ohne Druckplatten simuliert und hinsichtlich der lokalen Dilatanzenwicklung im Prüfkörper ausgewertet. Darüber hinaus wurden ausgewählte Kriechversuche an WIPP Salz, die bei Sandia National Laboratories durchgeführt wurden, nachgerechnet und dazu Stoffmodellparameter bestimmt. Die Ergebnisse der Re-Analysen von diesen Versuchen wurden auf dem zweiten Workshop in Leipzig vorgestellt.

Von den vereinbarten Laborversuchen wurden beim Zuwendungsempfänger im Berichtszeitraum zwei Laborversuche beendet sowie zwei weitere Versuche neu aufgesetzt. Bei einem der neu gestarteten Versuche steht wiederum die Untersuchung der temperaturabhängigen Verheilung im Vordergrund, so dass einer kurzen Schädigungsphase eine Verheilungsphase folgt. Dieser Versuch wird bei einer konstanten Prüfkörpertemperatur von  $70\text{ °C}$  durchgeführt. Der andere Versuch ist ein Wiederholungsversuch bei  $T = 50\text{ °C}$ , da bei dem zuvor durchgeführten Versuch Messungenauigkeiten in der Dilatanzmessung auftraten.

#### **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 das US-German Meeting Anfang Oktober 2012 vorbereitet.

#### **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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b>  01.10.2010 bis 30.09.2013		<b>Berichtszeitraum:</b>  01.01.2012 bis 30.06.2012
<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 23./24. Januar in Braunschweig und am 12./13. Juni in Leipzig jeweils einen Projekt-Workshop (veranstaltet von TUB bzw. dem IfG) 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. Am 24. Januar führten die Projektpartner eine Befahrung der Schachanlage Asse II durch, um die Randbedingungen für die Modellierung der Untertagestrukturen unmittelbar in situ kennen zu lernen.

Das vorliegende Teilvorhaben 2 beteiligt sich mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley und dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach Günther/Salzer am Stoffgesetzvergleich und verwendet das Programm FLAC3D (Fa. Itasca). Außerdem ist es maßgeblich an der Durchführung der Laborversuche zur Ableitung der Stoffmodellparameter beteiligt.

Im Berichtszeitraum hat das IfG die geplanten, triaxialen Druckversuche bei unterschiedlichen Manteldrücken und Temperaturen (30 °C, 60 °C und 90 °C) abgeschlossen und die Ergebnisse den Partnern am 23. Januar auf dem 5. Projektworkshop übergeben und diskutiert. Auf diesem Workshop wurde auch eine Modifikation des Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatzes vorgestellt, die eine verbesserte Anpassung der Versuche bei unterschiedlichen Temperaturen gestattet. Der IFC- und HFCEP-Versuch wurde mit diesem Parametersatz wiederholt und mit gutem Ergebnis nachgerechnet.

Auf dem 6. Projektworkshop am 12. Juni wurde die Nachrechnung sowohl der triaxialen Kriechversuche als auch der triaxialen Druckversuche bei verschiedenen Temperaturen mit dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz gezeigt. Mit diesen Berechnungen, die mit einem einheitlichen Parametersatz realisiert werden konnten, wurde eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Werten erzielt. Weiterhin wurden dort erste Modellrechnungen mit dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz zum Spannungs-Verformungsverhalten des Dammjoches vorgestellt und beispielhaft der Einfluss der Ausbauparameter diskutiert.

Das IfG beteiligte sich an der Aufstellung der Versuchsmatrix zur Ableitung der Stoffmodellparameter am Steinsalz der WIPP-site.

Auf der Saltmec7 vom 16.-19. April in Paris wurden Vorträge zum Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz und zum visko-elasto-plastischen Stoffmodell sowie zu den vorangegangenen Projektphasen gehalten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das IfG wird den 7. Projektworkshop gemeinsam mit den Partnern am 20. September an der TU Braunschweig sowie den 8. Projektworkshop am 8. Oktober in Albuquerque vorbereiten und durchführen und dort vor allem die Ergebnisse der bisherigen Arbeiten sowie der geplanten Zusammenarbeit mit Sandia National Laboratories, insbesondere das konzipierte Laborprogramm vorstellen und diskutieren. Weiterhin sind Nachrechnungen der Laborversuche mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell geplant

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.09.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Stoffgesetzmöglichkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden folgende Modellrechnungen durchgeführt:

- Die Nachrechnung der neueren Laborversuchsergebnisse des IfG und der TUC bei höheren Temperaturen wurde weitergeführt. Ziel dieser Arbeit ist es, die bereits verwendeten Stoffmodellkennwerte an die Kriechmessdaten von Asse Steinsalz anzupassen.
- Die Auswertung der Simulationsergebnisse des HFCEP- Erhitzerexperiments zeigt, dass das Rechenergebnis mit dem ADINA Programm zufriedenstellend mit dem der In-situ-Messungen übereinstimmt. Zugleich erkennt man, dass die Güte des Ergebnisses einer dreidimensionalen Rechnung entscheidend von der gewählten Diskretisierung abhängt und schließlich wurde der Einfluss der Modelldiskretisierung auf Simulationsergebnisse untersucht.
- Die Dammjochstrecke auf der 700-m-Sohle in der Schachanlage Asse wurde als vertikales zweidimensionales ebenes Dehnungs-Modell simuliert. Die Geometrie der Struktur sowie das Materialverhalten der Gussstahl Verrohrung und der Betonhinterfüllung wurden einheitlich von der TU Braunschweig bereitgestellt. Für die Materialeigenschaften des Steinsalzes wurde das KIT Stoffmodell verwendet. Es wurde sowohl die offene Strecke als auch die ausgebaute Strecke über einen Zeitraum von 85 Jahren berechnet. Die ersten Rechenergebnisse wurden bei dem 6. Workshop in Leipzig präsentiert und mit den Projektpartnern diskutiert. Es folgten einige Änderungen an der Modellgeometrie und eine weitere Stoffmodell Anpassungen. Die neuen Berechnungen werden zurzeit durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird die Rechenergebnisse aus den thermomechanischen Modellberechnungen der Bohrlochkonvergenz in der Schachanlage Asse II für den Vergleich mit denen von Projektpartnern bereitstellen. Außerdem wird er bei der Vorbereitung des deutsch-amerikanischen Workshops in Albuquerque und bei der Definition des neuen Benchmark- Problems beitragen. Weiterhin werden die vorliegenden Laborversuche zum thermomechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz-Stoffgesetzen nachgerechnet und auch die Modellierung der Untertagestruktur „Dammjoch“ fertiggestellt.

### 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 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.

Salzer K., 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 (2012): 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 A., K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, U. Düsterloh (2012): 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.09.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Erhitzerversuchs wurde verfeinert. Neue Berechnungen wurden durchgeführt und vorgestellt. Randbedingungen für die Dammjoch-Berechnung wurden unter den Projektpartner besprochen und festgelegt. Erste Berechnungen wurden durchgeführt und im Projektworkshop vorgestellt und diskutiert. Verheilungsversuche der TUC wurden analytisch und numerisch analysiert und im Projektworkshop vorgestellt und mit den Projektpartnern besprochen. Außerdem wurden weitere Arbeiten bezüglich der WIPP-Site besprochen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Kriechversuche des IfG und die Versuche aus der WIPP-Site sollen nachgerechnet und vorgestellt werden. Alle durchgeführten Arbeiten sollen zusammengefasst und im nächsten US/German-Workshop präsentiert 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.09.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 23. Januar 2012 wurde am Institut für Grundbau und Bodenmechanik der 5. Workshop zum Stoffgesetzvergleich ausgerichtet. Zusätzlich fand am 24. Januar 2012 mit den Teilnehmern des Workshops eine Befahrung der Asse statt, um eine bessere Vorstellung für die In-situ-Versuche IFC, HFCP und Dammjoch zu bekommen.

Das IGB führte im Berichtszeitraum eine erste Auswertung der SANDIA-Versuchsdaten durch und stellte die Ergebnisse auf dem 6. Workshop am 12. und 13. Juni 2012 in Leipzig vor. Die Versuchsdaten wurden von Mitte der 70er bis Mitte der 90er Jahre gewonnen. Aufgrund der technischen Möglichkeiten umfasst die Qualität der Rohdaten eine große Bandbreite. Bei SANDIA wurden vor allem Kriechversuche durchgeführt. Die vorliegenden Festigkeits- und Verheilungsversuche sind zur Bestimmung der Stoffgesetzparameter unzureichend. Daher wurde für die geplante Verlängerung des Forschungsvorhabens zur Berechnung von In-situ-Versuchen in der WIPP-Site, ein neues Versuchsprogramm zur Parameterbestimmung vorgeschlagen. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf Festigkeitsversuchen.

Ebenfalls wurden auf dem Workshop in Leipzig Anpassungen an den Formulierungen der Temperaturabhängigkeit des Stoffmodells IGB-TUBS (Döring) vorgestellt und diskutiert. Ein Schwerpunkt lag auf der neuen Beschreibung des Spannungsexponenten für das sekundäre Kriechen "n". Der Einfluss der Änderung wurde anhand eines Kriechraten-Effektivspannungs-Diagramms für unterschiedliche Temperaturen gezeigt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Am 20. September 2012 findet in Braunschweig ein Vorbereitungstreffen für den internen Workshop und den 3. US/German Workshop in Albuquerque (USA) statt. Um aus den SANDIA-Versuchsdaten Referenzversuche abzuleiten, an den die Versuche des neuen Laborprogramms verifiziert werden können, werden die Laufzeiten, Temperaturbedingungen, Manteldrücke und Kriechraten weitergehend ausgewertet. Ein Augenmerk wird hier auf höhere Manteldrücke und längere Laufzeiten gelegt, um die stationäre Kriechrate ermitteln zu können.

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. Mit FLAC3D wird für die weiteren Arbeiten im Forschungsvorhaben das Dammjoch modelliert.

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2010 bis 31.05.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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  $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ : Die Datensituation bei 80 °C wurden erweitert. Ansätze zur Bestimmung der 100 °C-Daten wurden ausgewertet und laufen weiter (zur Überprüfung des möglichen, erreichten Gleichgewichtszustandes – gleiches gilt für alle Isothermen im System).

AP2:

Lösegleichgewichte im  $\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ : Daten bei 25 °C und 40 °C wurden erweitert. Untersuchungen für die 80 °C- und 100 °C-Isotherme laufen und erste Daten liegen vor. Bis 100 °C zeigt sich die 5-1-2 Phase als stabile Phase im System.

AP3:

Das MgO der Fa. Styromag wurde durch MgO der Fa. Lehmann & Voss (L&V) ausgetauscht. Es hat sich gezeigt, dass L&V MgO mit konstanter Qualität und Reaktivität kontinuierlich liefern kann. Die MgO-Reaktivität wurde so gewählt, dass bei hohen Abbinde Temperaturen (> 100 °C) noch mit einer nachträglichen Quelldruckentwicklung zu rechnen ist. Externe Messungen bei der MPA Braunschweig weisen darauf hin (im Auftrag des BfS). Diese Rezeptur R3a wurde bezüglich des Quarzmehlanteils (M300, Euroquarz) für eine technologische Verarbeitbarkeit eingestellt.

Für die Rezepturen R2a und R3a wurden mechanische Kennwerte bestimmt.

Für R3a wurde die temperaturabhängige Phasenbestandsentwicklung (mit  $T_{\text{max}}$  bei 80 °C) röntgenographisch bestimmt. Im Ergebnis liegt über die Bildung der metastabilen 5-1-8 und 9-1-4 Phase nach Abkühlung des Baustoffs die thermodynamisch stabile 3-1-8 Phase als alleinige Bindemittelphase im Baustoff vor.

Für die Untersuchungen nach entsprechenden Abbinde Temperaturen/-zeiten werden die Probekörper in gasdichten Stahlzellen getempert und gelagert.

AP4:

Die Rezeptur R3a wurde zur Bestimmung des Quelldruckverhaltens (Quellen 1) in 3 analoge Zellen nach dem Abbinden bei 80 °C, 3 Wochen, in Form von entsprechenden Probekörpern eingebracht. Die bisher registrierten Daten zeigen für die 3 Zellen abweichende Daten und wurden abgebrochen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Lösegleichgewichte bei allen Temperaturen werden bezüglich der Datenentwicklung weiter verfolgt, da sich die Gleichgewichtseinstellungen als sehr langwierig erweisen (AP1, AP2). Wiederholung der R3a-Quelldruckversuche in 3 analogen Zellen nach Abbinden bei 80 °C (3 Wochen) sowie in weiteren analogen 3 Zellen, in welche die Probekörper nach einem Tag < nach Abbinden eingebracht werden, für weiter 3 Wochen bei 80 °C gehalten werden und anschließend abgekühlt werden, um eine mögliche Quelldruckentwicklung zu registrieren. Mit dem Vergleich der Daten aus allen 6 Zellen soll die Funktionsfähigkeit der Quelldruckapparaturen geprüft werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

R. E. Dinnebier, M. Oestreich, S. Bette, D. Freyer: „ $2\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-2H}_2\text{O}$  and  $2\text{Mg}(\text{OH})_2\text{-MgCl}_2\text{-4H}_2\text{O}$ , two high temperature phases of the Magnesia Cement System.“ Z. Anorg. Allg. Ch. (2012) 638, (3-4), 628-633

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2010 bis 31.10.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.547.015,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Rothfuchs	

## 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:

Nach Abschluss der Anforderungsanalyse war das erste Halbjahr 2012 im Wesentlichen durch Arbeiten zur Erstellung eines bereinigten, prototypischen, geologischen Modells gekennzeichnet. Hierbei traten insbesondere Probleme bzgl. Geschlossenheit, Netzqualität und Topologie auf, die aber bis zum Ende des Berichtszeitraumes weitgehend gelöst werden konnten.

Als Teil der Vorverarbeitung wurden Algorithmen zur Validierung, Fehlerkorrektur und Vereinfachung der Geometrie importierter geologischer Modelle implementiert. Die Vereinfachung ermöglicht eine durch eine Fehlermetrik gesteuerte Reduktion der vorliegenden Netzstruktur bei gleichzeitiger Aufrechterhaltung der Netzqualität und Detaillierung.

Grubengebäude können nun - neben der openGeo Schnittstelle - auch aus CAD-Datenaustauschformaten importiert oder direkt in Virtus modelliert und konfiguriert werden. Der Grubengebäudeeditor bietet dazu die Möglichkeit, Netze von Strecken und Schächten anzulegen sowie Querschnitte zu definieren und erzeugt daraus entsprechende Volumen-Geometrien.

Die bereits definierte Schnittstelle zwischen Virtus und den Process-Level-Codes (PLCs) wurde implementiert und an verschiedenen Modellausschnitten getestet. Eine erfolgreiche Netzgenerierung in den PLCs ist aufgrund der mangelhaften Dreiecksqualität der Ausgangsdaten allerdings erst nach der Fertigstellung der Remeshing, Smoothing und Healing Algorithmen möglich.

Zur Standardisierung von Arbeitsprozessen in Virtus wurden Pipelines und entsprechende Pipeline-Funktionen implementiert, die Nutzern die Möglichkeit geben, Workflows – also Sammlungen parametrierter Funktionen – zu definieren und diese auf unterschiedliche Daten anzuwenden.

#### AP2:

Die Datenbankstruktur wurde weiterentwickelt, insbesondere hinsichtlich der Verknüpfung von Materialdaten mit Stratigrafie und Materialgruppen. Weitere Anforderungen an die Oberfläche wurden definiert.

Die systematische Auswertung von ca. 850 Literaturstellen ist in Bearbeitung. Erste qualitätsgesicherte Datenblätter für die Dichte, Permeabilität und thermische Leitfähigkeit von Salzgesteinen stehen zur Übernahme in die Datenbank als Best-Estimate-Werte (BEW) zur Verfügung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Implementation der Healing-Algorithmen und probeweise Vernetzung eines exportierten Geologie-Ausschnittes mit finiten Elementen in den Präprozessoren der PLCs
- Verschneiden der unterschiedlichen Datenlayer (Grubengebäude, Geologie, Einbauten)
- Import und Aufbereitung und Visualisierung von Resultatdaten
- Implementierung der Services des Virtus-Servers
- Implementation der GRS-seitig entwickelten THM-Datenbank (MS Access) durch IFF
- Weiterführung der Literatursauswertung und Beratung von BEW-Protokollen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Rothfuchs, T., Masik, S., Behlau, J., Jobmann, M.: Projekt VIRTUS - Virtuelles Untertagelabor im Salz, Proceedings der 9. Fachtagung "Digitales Engineering zum Planen, Testen und Betreiben Technischer Systeme", S. 287 - 291, Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung IFF, Magdeburg, Juni 2012

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2010 bis 31.10.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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. Nach Abschluss des Literaturscreenings wurde im Berichtszeitraum mit der detaillierten Literaturauswertung begonnen, um die notwendigen Parameterdaten zu erheben. Die Arbeiten zur Literaturauswertung wurden unter den Projektpartnern aufgeteilt.

Nach Erhebung der Parameterdaten soll im Rahmen von speziellen Fachsitzungen der Projektpartner einvernehmlich entschieden werden, welche Daten geeignet sind, in die Datenbank aufgenommen zu werden.

In einer ersten Fachsitzung wurde diskutiert, wie entsprechende Empfehlungsprotokolle zur Datenbankaufnahme auszusehen haben und wie eine standortspezifische Auswertung erfolgen soll. In einem weiteren Schritt wurden entsprechende BEW-Empfehlungsprotokolle (BEW = Best Estimate Wert) seitens der DBETEC zunächst exemplarisch für die Parameter Wärmeleitfähigkeit erstellt. Obwohl allein für die Wärmeleitfähigkeit von Steinsalz insgesamt 64 Literaturstellen gesichtet und ausgewertet wurden, zeigt sich, dass nur weniger als eine handvoll Quellenangaben als zuverlässig eingestuft werden können. Zuverlässig meint hier Kennwerte, die im Labor oder unter in-situ Bedingungen erhoben wurden. Die Vorgehensweise bei der Auswertung und eine zusammenfassende Darstellung aller ausgewerteten Kennwerte zur Wärmeleitfähigkeit findet sich im BEW-Empfehlungsprotokoll wieder. Zusätzlich beinhaltet das Protokoll eine Begründung, warum gewisse Literaturstellen als wesentlich erachtet werden und in die Datenbank aufgenommen werden sollen. In einem weiteren Schritt sollen diese BEW-Empfehlungsprotokolle dann dem Entscheidungsgremium vorgelegt werden.

### 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, Revisionen von Datenbankstruktur und Eingabeoberfläche
- Export von Experimentdaten in Richtung Prozess Level Code (in unserem Fall FLAC3D) und Implementierung einer entsprechenden PLC Schnittstelle.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Rothfuchs, T., Masik, S., Behlau, J., Jobmann, M.: Projekt VIRTUS - Virtuelles Untertagelabor im Salz, Proceedings der 9. Fachtagung "Digitales Engineering zum Planen, Testen und Betreiben Technischer Systeme", S. 287 - 291, Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung IFF, Magdeburg, Juni 2012

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2010 bis 31.10.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Bohrlochlage- rung bzw. entsprechender HAW-Endlagerkonfigurationen (GRS, BGR, DBETEC)
- AP6: Abschlussbericht und VIRTUS-Präsentation in einer Fachveranstaltung (GRS (IFF), BGR, DBE-TEC)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Nach Abschluss der Anforderungsanalyse war das erste Halbjahr 2012 im Wesentlichen durch Arbeiten zur Feststellung der Anforderungen an ein konsistentes, prototypisches, geologisches Modell gekennzeichnet. Die Kriterien ergeben sich aus der Weiterbearbeitung des Modells in VIRTUS+ bzw. aus den Anforderungen der PLC-Codes. Die wesentlichen Konsistenzfragen betrafen die Geschlossenheit, Nulldreiecke und Durchdringungen, die zum Teil auf numerische Effekte im mm-Bereich beruhten. Hierfür konnten aber bis zum Ende des Berichtszeitraumes weitgehend Lösungen erarbeitet werden.

Als Teil der Vorverarbeitung wurden Algorithmen zur Validierung, Fehlerkorrektur und Vereinfachung der Geometrie importierter geologischer Modelle implementiert. Die Vereinfachung ermöglicht eine durch ei-

ne Fehlermetrik gesteuerte Reduktion der vorliegenden Dreiecksanzahl bei gleichzeitiger Aufrechterhaltung der Topologie und weitgehender Formerhaltung.

Grubengebäude können nun - neben der openGEO Schnittstelle - auch aus CAD-Datenaustauschformaten importiert oder direkt in Virtus modelliert und konfiguriert werden. Der Grubengebäudeeditor bietet dazu die Möglichkeit, Netze von Strecken und Schächten anzulegen sowie Querschnitte zu definieren und erzeugt daraus entsprechende Volumen-Geometrien.

Die bereits definierte Schnittstelle zwischen Virtus und den Process-Level-Codes (PLCs) wurde implementiert und an verschiedenen Modellausschnitten getestet.

Die von der BGR bereits in 2011 erstellte Schnittstellendefinition wurde in 2012 noch einmal an einigen Stellen überarbeitet und zur Verfügung gestellt. Die entsprechenden Arbeiten am einlesenden und ausgehenden PLC-Programm JIFE wurden fortgeführt und werden 2013 abgeschlossen. Eine erfolgreiche Netzgenerierung in den PLCs ist aufgrund der mangelhaften Dreiecksqualität der Ausgangsdaten allerdings erst nach der Fertigstellung der Remeshing, Smoothing und Healing Algorithmen möglich.

Zur Standardisierung von Arbeitsprozessen in Virtus wurden Pipelines und entsprechende Pipeline-Funktionen implementiert, die Nutzern die Möglichkeit geben, Workflows – also Sammlungen parametrierter Funktionen – zu definieren und diese auf unterschiedliche Daten anzuwenden.

AP2:

Die Datenbankstruktur wurde weiterentwickelt, insbesondere hinsichtlich der Verknüpfung von Materialdaten mit Stratigrafie und Materialgruppen. Weitere Anforderungen an die Oberfläche wurden definiert.

Die systematische Auswertung von ca. 850 Literaturstellen ist in Bearbeitung. Erste qualitätsgesicherte Datenblätter für die Dichte, Permeabilität und thermische Leitfähigkeit von Salzgesteinen stehen zur Übernahme in die Datenbank als Best-Estimate-Werte (BEW) zur Verfügung. Die BGR-Literaturliste wurde mit Blick auf die mechanischen Parameter zu den Salzgesteinen durchgearbeitet. Die entsprechenden Arbeiten sind aufgrund des erheblichen Umfangs noch nicht abgeschlossen, werden fortgeführt und dem Projekt in der gewünschten Form zur Verfügung gestellt.

AP4:

Das geologische Modell ist im Hinblick auf geologische Konstruktionsfehler in der Überarbeitung. Eine Überarbeitung im Sinn von numerischen Ungenauigkeiten findet nur dann statt, wenn sich herausstellt, dass die numerische Genauigkeit des geologischen Modells für die Volumenbildung und Vermaschung durch die PLC-Präprozessoren nicht ausreicht.

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

- Implementation der Healing-Algorithmen und probeweise Vernetzung eines exportierten Geologie-Ausschnittes mit finiten Elementen in den Präprozessoren der PLCs
- Verschneiden der unterschiedlichen Datenlayer (Grubengebäude, Geologie, Einbauten)
- Import und Aufbereitung und Visualisierung von Resultatdaten
- Implementierung der Services des Virtus-Servers
- Implementation der GRS-seitig entwickelten THM-Datenbank (MS Access) durch IFF
- Weiterführung der Literaturlauswertung und Beratung von BEW-Protokollen

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

Rothfuchs, T., Masik, S., Behlau, J., Jobmann, M.: Projekt VIRTUS - Virtuelles Untertagelabor im Salz, Proceedings der 9. Fachtagung "Digitales Engineering zum Planen, Testen und Betreiben Technischer Systeme", S. 287 - 291, Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und -automatisierung IFF, Magdeburg, Juni 2012

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2011 bis 31.01.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 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 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.

Zur Charakterisierung des Wirtsgesteins Ton fehlt die Verifizierung möglicher Stoffgesetze, die kein konkreter Standort vorliegt. Die zutreffenden Materialparameter können nur sehr grob angenommen werden. Zum Steinsalz ist der Kenntnisstand abgesichert.

AP4: Diskussion der Anforderungen an zukünftige Schachtverschlüsse für HAW-Endlager.

Allg.: Erarbeitung und Redaktion der Vorhabensbeschreibung des Nachfolgethemas ELSA II.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP3: Fertigstellung des Berichtes zu AP3.

AP5: Workshop "Rahmenbedingungen für die Konzeption von Schachtverschlüssen für Endlager für hochradioaktive Abfälle" am 19. September in Peine.

Allg.: Erstellung des Abschlussberichtes. Finanzplanung des Vorhabens ELSA II.

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

Keine.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2011 bis 31.01.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 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 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). Dieser Berichtsentwurf wird derzeit projektintern geprüft.

AP3:

Die Arbeiten zur 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 wurden abgeschlossen und werden derzeit in Berichtsform dokumentiert.

AP5:

Im Projektzeitraum wurde ein abgestimmtes Konzept zur Einbringung eines Internationalen Verbundprojekts Schachtverschluss unter deutscher Federführung (BMW) in die „Implementing Geological Disposal Technology Platform (IGD-TP)“ entwickelt. Ein vorläufiges Versuchskonzept für die folgenden Projektphasen wurde entwickelt und den Beteiligten der IGD-TP in englischer Sprache auf dem Web-server der IGD-TP zur Verfügung gestellt.

Die Partner der IGD-TP haben einen gemeinsamen Antrag auf Förderung ihrer IGD-TP Projekte bei der Europäischen Kommission gestellt. Eine erste Rückmeldung seitens der Europäischen Kommission besagt, dass der Antrag gute Aussichten auf eine Förderung hat.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP4: Abschluss der Arbeiten zur Formulierung von Anforderung und Auswahlkriterien für Schachtverschlüsse.

AP5: Workshop " Rahmenbedingungen für die Konzeption von Schachtverschlüssen für Endlager für hochradioaktive Abfälle" am 19. September in Peine.

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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2011 bis 30.04.2014		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

Im praktischen Bereich wurden die Untersuchungen zu verschiedenen Ziehungsverfahren fortgeführt und vertieft. Das Sobol-Lp-Tau-Verfahren lieferte dabei in Verbindung mit verschiedenen Auswerteverfahren die stabilsten Ergebnisse. Weiterhin wurden die numerischen Experimente mit dem SDP-Verfahren fortgeführt. Die erforderlichen Programmierarbeiten wurden abgeschlossen.

Ansonsten konzentrierte sich die Projektarbeit im Berichtszeitraum auf Literaturrecherchen und wissenschaftlichen Austausch. Zahlreiche Veröffentlichungen zu den Themen

- Sensitivitätsanalyse,
- Stichprobenziehung,
- Metamodellierung,
- Parameterkorrelation und
- Transformation von Ausgabegrößen

wurden identifiziert und orientierend gesichtet; einige Papiere wurden durchgearbeitet und im Hinblick auf die Projektziele ausgewertet. Es fand ein erster Gedankenaustausch mit Experten von Sandia (USA) statt, die langjährige Erfahrung und wissenschaftliche Reputation auf dem Gebiet der Sensitivitätsanalyse für Endlagermodelle besitzen. Weiterhin wurden Beiträge für die folgenden Fachkonferenzen erarbeitet:

- SIAM UQ, 2.-5. April, Raleigh, USA,
- PSAM11/ESREL 2012, 25.-29. Juni, Helsinki, Finnland,
- UCM 2012, 2.-4. Juli, Sheffield, UK.

Die beiden Beiträge zur PSAM/ESREL-Konferenz wurden textlich ausgearbeitet und als wissenschaftlich rezensierte Artikel im Tagungsband veröffentlicht. Eine weitere Veröffentlichung, die noch auf Ergebnissen aus dem Projekt WESAM (02E10276) beruht, wurde wegen der engen inhaltlichen Verknüpfung im Projekt MOSEL zu Ende gebracht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Anhand der identifizierten Literatur sowie eigener Überlegungen sollen Ansätze zur Handhabung von Parameterkorrelationen bei Sensitivitätsanalysen von Endlagermodellen erarbeitet 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.

Die Thematik wird in den Deutsch-Amerikanischen Workshop zur Forschung über Endlager im Salz eingebracht. Eine Fortsetzung der Zusammenarbeit mit Sandia wird in Form eines weiteren bilateralen Gedankenaustauschs stattfinden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

S.M. Spiessl, D.-A. Becker, A. Rübel: EFAST Analysis Applied to a PA model for a Generic HLW repository in clay. In: Reliability Engineering and System Safety, Elsevier, 2012

D.-A.Becker, S. M. Spiessl: Particularities in Sensitivity Analysis of Numerical Models for Long-Term Safety of Final Repositories. PSAM11/ESREL2012 proceedings, 03-Mo2-4, 2012

S. M. Spiessl, D.-A. Becker: A Metamodel Approach to Sensitivity Analysis of a PA Model for a Generic HLW Repository in Clay. PSAM11/ESREL2012 proceedings, 03-Mo2-3, 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2011 bis 31.05.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012
<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:

Zusätzlich zu dem von der Firma k+s bereitgestellten Salzgrus wurde Material aus dem Salzstock Gorleben zur Verfügung gestellt, so dass nun vergleichende Experimente zur Erhebung standortunabhängiger Versuchsergebnisse möglich sind. Zu verwendende Salzlaugen werden jeweils aus dem im Versuch eingesetzten Material hergestellt.

Eine Literaturrecherche zur Kompaktionsdauer, Kompaktionskraft, Feuchtigkeit der Probe während der Kompaktion und den möglichen Auswirkungen auf die Korngrößenverteilung und Porosität der Proben wurde durchgeführt. Weitere Versuche sollen zeigen, wie die Porosität und Korngrößenverteilung innerhalb der Proben von der Kompaktionskraft und der Probenlänge abhängt. Für diese Untersuchungen wurde die Möglichkeit zur Fertigung und Auswertung von Dickschliffen sondiert.

Eine weiterführende Literaturrecherche zur Tracerauswahl und Tracerkonzentrationen wurde durchgeführt. In Abhängigkeit von der Löslichkeit der Tracer in gesättigter Salzlauge und den zu erwartenden Diffusionskoeffizienten wurden Durchbruchkurven und Konzentrationen in der Senkenlösung abgeschätzt. Einzusetzende Tracer sind Cs als einwertiges Kation, Zn als zweiwertiges Kation, I als einwertiges Anion, Selenat als zweiwertiges Anion, Nd als Vertreter der Lanthaniden und U als Vertreter der Actiniden. Alle einzusetzenden Tracer wurden beschafft.

Vorversuche zum Versuchsaufbau und Versuchsrandbedingungen sowie weitere abschätzende Rechnungen wurden durchgeführt und ggf. Anpassungen vorgenommen. Dies betraf den Einsatz von Fritten, die Hydraulik der Zellen, die Länge der Salzgrusproben, die Porosität der Salzgrusproben und die angestrebte Pumprate.

Ein erster Diffusionsversuch mit Grasleben-Salzgrus und dem Tracer CsCl mit einer Anfangskonzentration von  $10^{-3} \text{ mol l}^{-1}$  wurde bei einer Porosität von 13 % und einer Probenlänge von ca. 92 mm durchgeführt. Auf der Basis der gewonnenen Ergebnisse wird die einzusetzende Tracerkonzentration ggf. noch angepasst.

Vorbereitung von einem Diffusionsexperiment mit einer Salzgrusporosität von 5,9 % zur Durchführung unter den in den Vorversuchen festgelegten Randbedingungen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Gegebenenfalls Herstellung und Auswertung von Dickschliffen.
- Analyse der im ersten Diffusionsversuch gewonnenen Proben und Versuchsauswertung.
- Beginn des Diffusionsexperimentes bei einer Salzgrusporosität von 5,9 %.
- Herstellung und Charakterisierung weiterer Salzgrusproben mit Porositäten bis zu 15 %, Beginn der Diffusionsexperimente mit diesen Proben

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

Die Experimente zur Sorption von dreiwertigen Lanthaniden/Actiniden an den Tonphasen Illit und Montmorillonit wurden fortgeführt. Es wurden Versuche in NaCl-Lösungen (0.1, 1 und 4 mol/L) und CaCl<sub>2</sub>-Lösungen (0.2 und 2 mol/L) durchgeführt. Die Ton-Chargen wurden über Säure-Base-Titrationskurven bei den jeweiligen Ionenstärken charakterisiert. Die Titrationskurven liegen im pH-Bereich 5 bis 8 alle übereinander und zeigen damit keine Ionenstärke-Effekte. Zur Abschätzung der kolloidalen Stabilität von Tonsuspensionen bei höheren Ionenstärken wurde die Koagulationsgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Ionenstärke in NaCl-Lösungen exemplarisch für das Tonmineral Montmorillonit gemessen. Die in der Literatur teilweise mit steigender Ionenstärke beschriebene Destabilisierung gefolgt von erneuter Restabilisierung bei hohen Ionenstärken konnte auch bei längeren Messzeiten (1000 min) nicht beobachtet werden. Wie erwartet wird die Sorptionskante mit steigender Ionenstärke zu höheren pH-Werten verschoben. CaCl<sub>2</sub> zeigt dabei eine stärkere Verschiebung als NaCl. Bei niedrigen pH-Werten wird der vorherrschende Kationenaustausch mit der Erhöhung der Ionenstärke deutlich unterdrückt. Die experimentellen Sorptionskurven lassen sich mit dem 2SPNE SC/CE-Modell sowie Anwendung des Pitzer-Formalismus zur Berechnung der Aktivitätskoeffizienten in Lösung bei höheren Ionenstärken relativ gut beschreiben, wobei signifikante Abweichungen bei höheren pH-Werten auftreten. Hier wird die Sorption durch eine Modellierung unterschätzt. Mit Hilfe der TRLFS wurde zu den bisher bekannten Cm(III)-Sorptionsspezies erstmals eine weitere Spezies beobachtet, die bei hohen pH-Werten dominant ist und für die Abweichungen der Modellrechnungen mitverantwortlich sein könnte.

Für die Diffusionsversuche mit Illit wurden neue PEEK-Diffusionszellen in Inertgasboxen aufgebaut und kompaktierte Illit-Kerne hergestellt. Zur Stabilisierung des Porenwasser pH-Wertes sind verschiedene Verfahren getestet worden, da die üblicherweise eingesetzten pH-Puffer in diesem kompaktierten Illit nicht mobil sind ( $\rho = 1.65 \text{ g/cm}^3$ ); hier wird nun eine pH-Titration der Suspension mit anschließender Gefriertrocknung favorisiert. Nach erfolgreichem Test der Komponenten mit inaktiven Elektrolytlösungen wurden die eigentlichen Experimente mit Eu(III), <sup>36</sup>Cl und <sup>3</sup>H begonnen. In ersten Experimenten mit Partner UPPC konnte die räumliche Verteilung von Eu in kompaktiertem Ton nach Aushärtung mit niedrig viskosem Harz gemessen werden und weitere Messungen sind geplant.

Die ersten Untersuchungen zur Np(V)-Komplexierung mit Propionat wurden mittels UV-Vis/NIR-Spektroskopie angefangen. Die Np(V)-Konzentration wurde von  $2.5 \times 10^{-5}$  bis  $7.7 \times 10^{-4}$  mol/L, die Propionat-Konzentration von 0.004 bis 0.15 M und die Ionenstärke mit NaCl von 0.5 bis 4 mol/L variiert, bei einem konstantem pH-Wert von 5. Mit zunehmender Propionat-Komplexierung nimmt die Np(V)-Absorptionsbande mit einem Maximum bei 980 nm ab, wobei eine neue Bande mit einem Absorptionsmaximum bei etwa 983 nm gebildet wird. Ein isobestischer Punkt kann nicht erkannt werden, was auf die Existenz von mehr als einem Komplex hindeutet. Eine Steigungsanalyse der Datenpunkte bestätigt diese Annahme: bei niedrigen Propionat-Konzentrationen erhält man eine Steigung  $\sim 1$ , die bei höheren Konzentrationen (ab ca. 0.08 M) in eine Steigung  $\sim 2$  übergeht. Für einen 1:1-Komplex wurde eine vorläufige Komplexbildungskonstante  $\log K_{1(0.5M)}$  von  $1.15 \pm 0.30$  bei  $I = 0.5$  M NaCl aus den spektroskopischen Daten abgeleitet. Die Modellierung der Daten mit Phreeqc bestätigt die spektroskopische Beobachtung, dass mit zunehmender Ionenstärke die Stabilität des 1:1 Propionat-Komplex zunimmt. So wurde eine vorläufige Komplexbildungskonstante  $\log K_{1(4.0M)}$  von  $1.53 \pm 0.21$  bei  $I = 4$  M abgeleitet. XAFS-Untersuchungen von NpO<sub>2</sub><sup>+</sup>-Propionatlösungen wurden ebenfalls als Funktion der Ionenstärke durchgeführt. Erste Ergebnisse geben keinen Hinweis darauf, dass sich die Struktur des Komplexes nennenswert mit der Zunahme der Ionenstärke ändert.

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente der Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Komplexbildungs-, Redox-, Sorptions- und Diffusionsverhalten der Radionuklide im System Radionuklid/Tonorganika/Tongestein/Aquifer erhalten werden. Diese Arbeiten zielen auf ein besseres Verständnis der ablaufenden Prozesse sowie auf eine Erweiterung der thermodynamischen Datenbasis und sollen zeigen, inwieweit die bisher in Gegenwart von Porenwässern geringerer Ionenstärke erhaltenen Erkenntnisse zum Migrationsverhalten von Radionukliden im natürlichen Tongestein auf potentielle Tonstandorte in Norddeutschland, deren Grund- und Porenwässer höhere Salinitäten aufweisen, übertragbar sind. Die Ergebnisse liefern somit einen Beitrag zur kontinuierlichen Verbesserung der Kenntnisse und des Instrumentariums zur Prognose der langfristigen Entwicklung untertägiger Entsorgungseinrichtungen. Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten der Universitäten Mainz, Dresden, Saarbrücken, München, Heidelberg, Potsdam und des Karlsruher Instituts für Technologie.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Untersuchung der Komplexbildung von Np, U und Pu in ausgewählten Oxidationsstufen mit endlagerrelevanten organischen Liganden in salinaren Lösungen.
- Untersuchung der Stabilität von Huminstoff-Kolloiden in Abhängigkeit von der Ionenstärke ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ) 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 Barriergestein und der Auflockerungszone.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- U(VI)-Diffusionsversuche mit Opalinuston bei 60 °C wiesen auf eine Änderung der Uran-Speziation unter diesen Bedingungen hin. Deshalb wurde die Uran-Speziation in Opalinustonporenwasser bei 60 °C mittels TRLFS, PCS und SEM-EDX untersucht. Bei der beobachteten aquatischen Uran-Spezies handelt es sich um  $\text{Ca}_2\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3(\text{aq})$ ; die kolloidale Uran-Spezies konnte nicht näher identifiziert werden, möglicherweise sorbiert Uran an ausfallendem  $\text{CaCO}_3$ .
- Start der Versuche zur U(VI)-Diffusion in Opalinuston ( $\rho \sim 2,35 \text{ g/cm}^3$ ) in Ab- und Anwesenheit von Citronensäure bei 25 °C unter anaeroben Bedingungen. Derzeit finden Vorversuche mit HTO zur Porositätsbestimmung statt.
- Vor deren Anwendung in Sorptionsexperimenten wurden Illit und Montmorillonit aufgearbeitet.
- Für pH-Wert-Messungen bei hohen Ionenstärken (I) wurden Kalibrationsmessungen mit NaCl und  $\text{MgCl}_2$  durchgeführt.
- Der Einfluss hoher Salinität auf die Dispersionsstabilität von Fulvinsäuren als Referenzsubstanz für höhermolekulare Tonorganika wurde bei verschiedenen pH-Werten untersucht. Dabei wurden die porenwassertypischen Metalle Na, Mg und Ca ( $\leq 5 \text{ M}$ ) eingesetzt. Für beide verwendeten Fulvinsäuren (Moorwasser-Isolat, Suwannee River FS) wurde nach einmonatiger Beobachtungszeit in keinem der Systeme ein Flockungsprozess festgestellt. Die Möglichkeit einer Mobilisierung von Actiniden durch Fulvatkomplexierung ist somit auch bei hohen I grundsätzlich gegeben.
- Eine Methode zur räumlich-zeitlich aufgelösten Parametrisierung der PET-Messungen durch automatische Parameteranpassung des Finite-Element-Modells wurde entwickelt. Quantitative Bildverbesserungen anhand der Monte-Carlo-Simulationen wurden entwickelt und getestet (Streukorrektur und Energiefilterung). Räumlich aufgelöste Diffusionsmessungen in Tonen unter Einfluss von Konzentrationsgradienten wurden konzipiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung des Einflusses erhöhter Salinität auf die U(VI)-Sorption an Montmorillonit, Illit und Opalinuston in Abhängigkeit vom pH-Wert. Beginn mit NaCl ( $I = 1\text{-}3 \text{ M}$ ), anschließend  $\text{MgCl}_2$  und  $\text{CaCl}_2$ .
- Untersuchung der  $^{233}\text{U(VI)}$ -Diffusion in Opalinuston in An- und Abwesenheit von  $^{14}\text{C}$ -markierter Citronensäure bei 25 °C unter anaeroben Bedingungen.
- Untersuchung der Fulvatkomplexierung von  $^{160}\text{Tb}$ ]Tb(III) als Analogtracer dreiwertiger Actinide in Gegenwart von NaCl,  $\text{MgCl}_2$  und  $\text{CaCl}_2$  in Konzentrationen von bis zu 4 M (Ultrafiltration).
- Isotopenaustauschexperimente zur Reversibilität der Metall-Huminstoff-Wechselwirkung: Aufnahme von Bindungsisothermen für  $^{160}\text{Tb}$ ]Tb(III) an Huminstoff-Flockulaten bei simultaner und bei nachträglicher Einführung des Tracers.
- Beschaffung, Präparation und Charakterisierung geeigneter Proben; Probenauswahl anhand von PET-Untersuchungen mit  $^{124}\text{I}$ ].
- Vergütungsversuche an mechanisch belastetem Salzgestein (Wasserglasinjektion).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Lippold, H., Eidner, S., Kumke, M.U., Lippmann-Pipke, J.: Diffusion, degradation or on-site stabilisation – identifying causes of kinetic processes involved in metal-humate complexation. *Appl. Geochem.* 27, 250-256 (2012).

Schmeide, K., Sachs, S., Bernhard, G.: Np(V) reduction by humic acid: Contribution of reduced sulfur functionalities to the redox behavior of humic acid. *Sci. Total Environ.* 419, 116-123 (2012).

Lippold, H., Lippmann-Pipke, J.: Radiotracer studies on the kinetics and equilibrium characteristics of adsorption of humic matter. Vortrag, Goldschmidt 2012, 24.-29.06.2012, Montréal, Kanada.

Zakhnini, A., Kulenkampff, J., Lippmann-Pipke, J., Pietrzyk, U.: GATE-Based Simulation in GeoSciences. Vortrag, OpenGATE collaboration meeting, 03.-04.05.2012, Athen, Griechenland.

Schikora, J., Kulenkampff, J., Gründig, M., Lippmann-Pipke, J.: Modelling and Simulation of 4D GeoPET Measurements with COMSOL Multiphysics 4.2a. Poster, EGU General Assembly 2012, 22.-27.04.2012, Wien, Österreich.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente der Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

Der empirische Korrekturparameter  $A$  wurde für die pH-Elektroden von Schott (Blue Line pH 16) und Ross (Halbmikroelektrode, 8103SC) für den sauren pH-Bereich (1-3) bei verschiedenen Elektrolytkonzentrationen (mol/kg) zwischen 0,1-5 m NaCl bestimmt. Die Experimente lieferten folgende Mittelwerte für  $A$  (Schott/Ross): 0,1 m: -0,07/-0,20; 0,5 m: -0,04/-0,14; 1 m: 0,04/-0,04; 2 m: 0,22/0,15; 3 m: 0,41/ 0,33; 4 m: 0,60/0,53; 5 m: 0,78/0,71. Unter Berücksichtigung des Natriumfehlers und des

$pK_w$ -Wertes wurden zudem die  $A$ -Werte für NaCl im basischen pH-Bereich (11–13) unter Argonatmosphäre mit der Schottelektrode bestimmt: 1 m: -0,03; 2 m: 0,15; 3 m: 0,39; 4 m: 0,56; 5 m: 0,80. Im Vergleich zur Rosselektrode lieferte die Schottelektrode eine bessere Übereinstimmung mit den am INE/KIT bestimmten  $A$ -Werten. Ebenso wurden auch für CaCl<sub>2</sub> (0,1-3,1 m) und MgCl<sub>2</sub> (0,1-2,5 m)  $A$ -Werte für pH 1-3 bestimmt.

Es wurden Versuche zur Sorption von 8  $\mu$ M Np(V) an Montmorillonit (STx-1) bei pH 5 und 8 sowie an Opalinuston (OPA) und zum Vergleich an Kaolinit (KGa-1b) bei pH 7,6 in unterschiedlich konzentrierten NaCl-Lösungen (0,1-3,2 m) unter aeroben Bedingungen durchgeführt. Die Batchexperimente mit unterschiedlichen Tonmengen von 2-20 g/L zeigten im Fall von STx-1 eine Abnahme der Sorption mit zunehmender Ionenstärke von  $\log K_d = 2,0$  (0,1 m) auf  $\log K_d = 0,4$  (3,2 m) (L/kg). Bei Kaolinit nahm die Sorption von Np(V) mit der Ionenstärke zu; d. h. von  $\log K_d = 1,0$  (0,1 m) auf  $\log K_d = 2,0$  (3,0 m) (L/kg). Bei OPA war die Sorption mit  $\log K_d = 2$  (L/kg) unabhängig von der Ionenstärke. Zusätzlich wurden für OPA-Suspensionen mit 15 g/L Sorptionsisothermen in einem Konzentrationsbereich von  $10^{-13}$  bis  $10^{-5}$  M Np(V) in 0,1 m und 1,0 m NaCl-Lösung an Luft bei pH 7,6 gemessen. Für den Bereich von  $10^{-6}$  bis  $10^{-13}$  M ergaben sich für beide Salinitäten Freundlich-Isothermen mit  $\log K_d = 2,5$  (L/kg).

In ersten Untersuchungen zur Sorption von 8  $\mu$ M <sup>99g</sup>Tc(VII) an OPA (15 und 20 g/L) bei einer Kontaktzeit von drei Tagen konnte im pH Bereich von 3-9 kaum eine Aufnahme von Tc durch den Ton festgestellt werden. Nach Erhöhung der Tonmenge auf 100 g/L und der Kontaktzeit auf 2,5 Wochen wurde bei pH < 4 eine Sorption von Tc von bis zu 26 % festgestellt.

Die Bildungskonstanten für Np(V)-Acetatkomplexe wurden bei pH 5,1 und  $I = 0,39$  M sowie einer Np(V)-Konzentration von  $8 \times 10^{-8}$  M mittels CE-ICP-MS mit folgenden Ergebnissen bestimmt:  $\log K = 1,90$ ,  $\log \beta_2 = 3,08$  und  $\log \beta_3 = 3,57$ . Diese Werte stimmen gut mit den von K. Takao *et al.* (2009) für  $2,78 \times 10^{-3}$  M und  $I = 0,30$  M mittels UV-vis-NIR Spektroskopie ermittelten Komplexbildungskonstanten überein.

Die Versuche zur Redoxstabilität von Pu(III-VI) in OPA-Porenwasser bei pH 7,6 mittels CE-ICP-MS zeigten eine zeitabhängige Oxidation der niedrigeren Oxidationsstufen zu ausschließlich Pu(VI). Zur Klärung dieses Verhaltens sind weitere Optimierungen der CE-ICP-MS bezüglich Probenvorbereitung und Hintergrundelektrolyt erforderlich.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung des Einflusses der Ionenstärke (0,1-3,2 m NaCl) auf die Sorption von Np(V) an STx-1 (pH 5 und 8), OPA (pH 7,6) und KGa-1b (pH 7,6) bei umweltrelevanten Np-Konzentration von  $8 \times 10^{-12}$  M unter aeroben Bedingungen.
- Untersuchung der pH-Abhängigkeit der Sorption von  $8 \times 10^{-12}$  M und  $8 \times 10^{-6}$  M Np(V) an STx-1 (15 g/L) in 1 m NaCl-Lösung unter aeroben Bedingung.
- Messung von Isothermen in 1,0 m NaCl für die Sorption von Np(V) in einem Bereich von  $10^{-13}$  bis  $10^{-5}$  M Np an STx-1 bei pH 8,0 sowie an Kaolinit bei pH 7,6.
- Weitere Untersuchungen zur Redoxstabilität von Pu(III-VI) in OPA-Porenwasser mittels CE-ICP-MS.
- Sorptions- und Diffusionsversuche mit Tc(VII) und OPA unter anaeroben bzw. aeroben Bedingungen.
- Eine Messzeit an der Swiss Light Source zum Thema „ $\mu$ -XRF,  $\mu$ -XRD, and  $\mu$ -XAFS Studies on the Influence of Dissolved Fe(II) on the Sorption and Diffusion of Pu in Natural Clay“ wurde bewilligt und soll voraussichtlich im November 2012 stattfinden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente der Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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,  $^{13}\text{C}$ -Lactat, extrahierte Tonorganik und Aldrich-Huminsäure zum Vergleich mit vorhandenen Ergebnissen) und mit anorganischen Komplexliganden (Borat) im Übergang von wässrigen Lösungen auf salinare Systeme durch Speziation mittels  $^{11}\text{B}$  NMR,  $^{13}\text{C}$  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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente der Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 566.966,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. 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 2:1 Schichtsilikaten, die sich bisher auf die (010)-Oberfläche konzentrierten, wurden um die Oberflächen (100) und (110) erweitert (AP1.1). Für Pyrophyllit konnte gezeigt werden, dass unterschiedliche Oberflächenorientierungen mit ihren verschiedenen Oberflächengruppen zu



unterschiedlichen bevorzugten Adsorptionsplätzen führen. Optimierungen ergaben für adsorbiertes Uranyl die Koordinationszahlen (CN) 4 oder 5. CN = 4 ist bevorzugt bei Plätzen mit Sauerstoffatomen die an verschiedene Al- oder Si-Zentren gebunden sind und damit relativ großem Abstand zeigen. Als Modell der schichtgeladenen Minerale Beidellit und Montmorillonit (AP1.2) wird ein Modellsmeckt mit der Schichtladung  $-0.5 e$  verwendet, der pro  $2 \times 1$ -Einheitszelle eine beidellitische ( $\text{Si}^{4+} \rightarrow \text{Al}^{3+}$ ) oder montmorillonitische Substitution ( $\text{Al}^{3+} \rightarrow \text{Mg}^{2+}$ ) aufweist, die durch ein solvatisiertes  $\text{Na}^+$ -Ion in der Zwischenschicht kompensiert wird. Als Beispiel für einen weiteren Vergleich wurde die (100)-Oberfläche gewählt, mit Substitutionen an der Oberfläche oder in der nächsttieferen (Al,Si)-Lage. Die Substitution unter der Oberfläche erwies sich als bevorzugt ( $10\text{--}20 \text{ kJ/mol}$ ). Überraschenderweise beeinflussen Substitutionen die Adsorption von Uranyl(VI) nur wenig. Wie bei Pyrophyllit sind auf Modellsmeckiten Aluminol-Plätze stabiler als Silanolplätze, auch nach Modifikation durch Substitution. Auch die Koordinationszahl der Komplexe blieb erhalten. Wesentliche geometrische Unterschiede ergaben sich nur bei direkten Bindungen an Substituenten. Wir verfolgen damit die weiter zu prüfende Arbeitshypothese, dass die Struktur von Adsorptionskomplexen wesentlich von den chemischen Gruppen an Oberflächen bestimmt wird und relativ unabhängig vom betrachteten Tonmineral ist. Bindungsenergien variieren allerdings mit Art und Position der Substitution. Weitere Untersuchungen zur Koordinationszahl sind notwendig, da in den Rechnungen CN = 4 bzw. 5 bevorzugt ist, während EXAFS-Experimente vor allem CN = 5–6 liefern. Eine quantenmechanische dynamische Simulation der Adsorbatkomplexe von Uranyl(VI) (AP1.2) auf AlOOH- und SiO-AlO-Plätzen der (010)-Kantenfläche von Pyrophyllit über 12 ps ergab CN = 4 für den SiO-AlO-Platz, zeigte jedoch nach 2.4 ps einen Wechsel von CN = 5 nach 4 für den AlOOH-Platz. Exemplarische Optimierungen von Strukturen aus der Simulation bestätigten dieses Ergebnis mit einem Energieunterschied von 38 kJ/mol. Rechnungen zu Actinid-Borat-Komplexen (AP2.2) wurden vorbereitet mit der erfolgreichen Prüfung eines Bor-Basissatzes anhand von  $\text{BH}_2$  und  $\text{BH}_3$ . Ein Vergleich unserer Dichtefunktionalrechnungen für die Spezies  $\text{B}(\text{OH})_3$ ,  $\text{B}(\text{OH})_2\text{O}^-$  und  $\text{B}(\text{OH})_4^-$  mit genauen „quadratic CI“-Rechnungen in der Gasphase ergaben gute Übereinstimmung in der Struktur. Optimierungen mit einem Solvationsmodell lieferten nur geringfügige Lösungsmittelleffekte. Erste Ergebnisse zu Monoboratkomplexen von  $\text{UO}_2^{2+}$  und  $\text{Am}^{3+}$  in der Gasphase deuten darauf hin, dass das Boratanion eine OH-Gruppe abspalten kann, wodurch die Bildung von ternären Borsäure-Hydroxid-Komplexe möglich erscheint.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- A. Kremleva, B. Martorell, S. Krüger, N. Rösch, Uranyl Adsorption on Solvated Edge Surfaces of Pyrophyllite: A DFT Model Study, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14 (2012) 5815.
- A. Kremleva, Y. Zhang, A. M. Shor, S. Krüger, C. Joseph, B. Raditzky, K. Schmeide, S. Sachs, G. Bernhard, N. Rösch, Uranyl(VI) Complexation by Sulfonate Ligands: A Relativistic Density Functional and Time-Resolved Laser-Induced Fluorescence Spectroscopy Study, *Eur. J. Inorg. Chem.* DOI: 10.1002/ejic.201200207.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente der Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 340.296,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. 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

Die Lumineszenz 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>) wurde bei  $2 < \text{pH-Wert} < 6,5$  untersucht ( $T = 293 \text{ K}$ , in H<sub>2</sub>O, Arbeiten in D<sub>2</sub>O laufen). Der Vergleich der Lumineszenzdaten für einwertige und zweiwertige Kationen als Hintergrundelektrolyt zeigte zunächst keinen Einfluss der Ionenwertigkeit auf die spektroskopischen Parameter des Eu(III), Unterschiede wurden erwartungsgemäß lediglich zwischen den verschiedenen pH-Werten gefunden.

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, wobei ein deutlicher Einfluss des Hintergrundelektrolyten auf die Komplexierung durch die verschiedenen Liganden beobachtet wurde und zwar sowohl der Ionenstärke an sich als auch der Wertigkeit des Kations.

Die Komplexierung von niedermolekularen organischen Säuren mit Gd(III) wurde mittels Raman-Spektroskopie untersucht. Durch die Anwesenheit von Gd(III) wurde die Intensität bestimmter Schwingungsbanden verändert. In einem weiteren Schritt wurde das System um Kaolinit als Modellmineralphase erweitert, wobei zunächst die Schwingungsspektren der reinen Mineralphase und dann die des Mehrphasensystems gemessen wurden.

Die mögliche Beeinflussung der Komplexierung von Eu(III) durch NOS bei Anwesenheit von Borsäure wird charakterisiert. Die ersten spektroskopischen Daten für Eu(III)-Borsäure-Komplexe liegen vor und die Untersuchungen zu Konkurrenz- bzw. Synergieeffekten durch NOS haben begonnen.

Die Komplexierung von Eu(III) durch Huminstoffe bei hohen  $I$  bzw. bei erhöhten  $T$  wird anhand der intrinsischen Huminstofffluoreszenz und der Emissionsspektren von Eu(III) unter indirekter Anregung untersucht (u. a. konditionelle Bindungskonstanten).

Die Charakterisierung der Sorption von Metallionen auf Mineraloberflächen wird mittels Raman-Mikroskopie, Kraftfeldmikroskopie sowie SFG-Spektroskopie charakterisiert. Zunächst werden Modellsystem (z. B. Kristalloberflächen belegt mit organischen Molekülen) untersucht und die Methoden für die Fragestellung angepasst.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Der Einfluss der Ionenstärke auf die Komplexierung von Eu(III) durch kleine organische Liganden wird in D<sub>2</sub>O als Lösungsmittel untersucht. Für H<sub>2</sub>O und D<sub>2</sub>O wird zusätzlich der pH-Wert bzw. die Temperatur variiert.
- 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 Fulvin- und Huminsäuren 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. Die verschiedenen Verfahren werden dabei auf die Leistungsstärken und -einschränkungen untersucht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

H. Lippold, S. Eidner, M.U. Kumke, J. Lippmann-Pipke: Diffusion, degradation or on-site stabilisation – identifying causes of kinetic processes involved in metal-humate complexation. Appl. Geochem. 27 (2012) 250-256.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente der Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Komplexierung 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 Mikrotitrationskalorimetrie in Abhängigkeit verschiedener Untersuchungsparameter (pH, I, T und Medium)

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

Spektroskopische Charakterisierung von Am(III)-Boratspezies in Lösung u. a. mittels TRLFS, UV-Vis, FT-IR und Ramanspektroskopie sowie Bestimmung der thermodynamischen Daten zur Komplexbildung von Am(III) mit Borat unter Standardbedingungen ( $T=25\text{ °C}$ ,  $I<0.1\text{ M NaClO}_4$ ) und in salinaren Medien unter Variation von Ionenstärke (bis 3 M), Salzmedium (NaCl, MgCl<sub>2</sub>) und Temperatur (bis 80 °C) bei  $\text{pH} > 7$

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### Isotherme Mikrotitrationskalorimetrie (ITC)

Mittels ITC wurde die Protolyse der Pyromellitsäure, der Weinsäure und Malonsäure in NaCl bei verschiedenen Ionenstärken (bis 1 M) untersucht. Vorhandene Literaturwerte zu den Protolysekonstanten ( $\log K_n$ ) und Protolyseenthalpien ( $\Delta H$ ) der Liganden konnten reproduziert bzw. erstmalig bestimmt werden.

#### AP1:

Untersuchungen mit laserinduzierter Fluoreszenzspektroskopie zeigen, dass die Komplexierung von Eu(III) durch Salicylat und Lactat bei pH 5 durch Borsäure beeinflusst wird.  $^{11}\text{B}$ -NMR-Untersuchungen unterstützen die Vermutung einer Konkurrenzreaktion durch die Bildung eines Esters zwischen Borsäure und Salicylat/Lactat, der komplexierende Eigenschaften gegenüber Eu(III) zeigt.

Mittels TRLFS, dynamischer Lichtstreuung (PCS) und Filtration kann im System Eu(III)-Borsäure bei pH 6 eine Eu(III)-Festphase mit einer vorgelagerten Eu(III)-Komplexierung durch Polyborate nachgewiesen werden. Die Existenz von Eu(III)-Borat-Kolloiden (in Homologie zu Actinid(III)-Silicat-Kolloiden) wird vermutet.

Es wurde mit Ionenaustauschexperimenten bei pH 6 und 7,5 in NaCl-Medium (verschiedene Ionenstärken) begonnen, um eine mögliche Wechselwirkung von Eu(III) mit Monoborat unter Eu(III)-Tracerbedingungen ( $c_{\text{Eu}} < 10^{-8}$  mol/l) zu charakterisieren. Bisher konnte noch keine Komplexierung nachgewiesen werden.

#### AP2:

Die Komplexierung von Europium(III) mit Salicylsäure wurde bei Raumtemperatur in Abhängigkeit der Ionenstärke im für potentielle Salzstöcke als Endlager relevanten NaCl-Medium von  $I = 0.01$  bis 1 molal mittels TRLFS untersucht (pH ca. 5.5). Die Komplexbildungskonstanten sinken erwartungsgemäß von 0.01 über 0.05, 0.1 bis 0.5 molal ab, um dann wieder leicht anzusteigen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der IT- Experimente im System Nd/Eu-NOM (NOM = Weinsäure, Pyromellitsäure, Malonsäure) bei verschiedenen Ionenstärken an NaCl
- Untersuchung der Polymerisierung von Borsäure mittels  $^{11}\text{B}$ -NMR-Spektroskopie in Abhängigkeit der Ionenstärke
- Fortgang der Arbeit zur Charakterisierung der beobachteten Eu(III)-Borat-Festphase in Abhängigkeit der Ionenstärke
- Nachweis von Eu(III)-Borat-Kolloiden in Homologie zu Actinid(III)-Silicat-Kolloiden
- Fortgang der Arbeit zur Bestimmung der Komplexierung von dreiwertigen Actiniden und Lanthaniden mit Borsäure/Boraten in An- und Abwesenheit von Organika (Salicylat, Lactat) unter Verwendung verschiedener Analysemethoden (Fluoreszenzspektroskopie,  $^{11}\text{B}$ -NMR)
- Fortführung der Ionenaustauschexperimente zum Eu-Borat-System
- Die Untersuchungen zur Komplexierung von Eu(III) mit Salicylsäure in
- Abhängigkeit von der Ionenstärke werden bei Raumtemperatur bis  $I = 3$  molal (NaCl) fortgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

„Europium(III) Complexation with Salicylic Acid at Elevated Temperatures“, Astrid Barkleit, Margret Acker, Gert Bernhard: *Inorganica Chimica Acta*, Manuskript eingereicht im März 2012; momentan im Revisionsprozess.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente der Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2011 bis 30.06.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

Aufbauend auf den Untersuchungen im  $\text{NaClO}_4$ -System wurde die Komplexbildung zwischen Cm(III) und Propionat in  $\text{NaCl}$  und  $\text{CaCl}_2$  Lösung mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) unter Variation von Ionenstärke, Ligandenkonzentration und Temperatur untersucht. Unter den gewählten experimentellen Bedingungen wurde weder die Bildung ternärer Ca-Spezies, noch ein Einfluss der Chlorid-Ionen bei erhöhten Temperaturen beobachtet. Wie auch in  $\text{NaClO}_4$  verschiebt sich die Speziation mit steigender Temperatur zunehmend in Richtung der komplexierten Spezies.

Im Cm(III)/Lactat-System wurde mittels TRLFS die Bildung des  $[\text{Cm}(\text{Lac})]^{2+}$ - und  $[\text{Cm}(\text{Lac})_2]^+$ -Komplexes nachgewiesen. Des Weiteren zeigten die Emissionsspektren eine weitere Spezies, welche sich zu geringen Anteilen bildet. Aufgrund ihrer geringen Molfraktion war eine eindeutige Identifikation dieser Spezies nicht möglich. Die Lage der Emissionsbande lässt jedoch vermuten, dass es sich hierbei um den  $[\text{Cm}(\text{Lac})_3]$ -Komplex handelt. Entgegen den anderen bisher untersuchten Systemen erfolgt im Fall des Lactat-Systems eine Rückbildung zum Cm(III) Aqua-Ion mit steigender Temperatur.

Für alle untersuchten Systeme konnten die zugehörigen thermodynamischen Stabilitätskonstanten für die Bildung der komplexierten Spezies und die Standardreaktionsenthalpie und -entropie erstmals bestimmt werden. Die Ergebnisse zeigen, dass die Bildung der  $[\text{Cm}(\text{Prop})_n]^{3-n}$ -Komplexe endotherm ist, während die Bildung der  $[\text{Cm}(\text{Lac})_n]^{3-n}$ -Komplexe exotherm abläuft, was die Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung erklärt. Des Weiteren wurden die Ion-Ion-Wechselwirkungsparameter der einzelnen Cm(III) Spezies mit dem jeweiligen Hintergrundelektrolyten ermittelt, welche von großer Bedeutung für eine geochemische Modellierung sind.

Erste Hochtemperatur-EXAFS Messungen zur Komplexbildung von Am(III) mit Lactat bei  $T = 90^\circ\text{C}$  wurden erfolgreich durchgeführt. Die Daten befinden sich noch im Auswerteprozess.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Komplexierung von Cm(III) mit Lactat in weiteren Hintergrundelektrolyten ( $\text{NaCl}$ ,  $\text{CaCl}_2$ ) bei erhöhten Temperaturen.
- Komplexierung von Cm(III) mit weiteren, organischen Liganden (z. B. Acetat) bei erhöhten Temperaturen
- Komplexierung von Np(V) mit organischen Liganden bis  $200^\circ\text{C}$
- Einsatz von Hochtemperatur-EXAFS zur Strukturaufklärung weiterer Ligand-Systeme bei  $T > 25^\circ\text{C}$ .

### 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  $T = 20 - 100^\circ\text{C}$ : 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.

A. Skerencak, D.R. Fröhlich, P.J. Panak, *Application of TRLFS to study the thermodynamics of Cm(III) in aqueous solution*, Invited Talk, University of Padua, Italy.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2011 bis 30.09.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Endlagereinwirkungen 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 $\leftrightarrow$ M-Einflüsse,
- AP6: Erarbeitung von Referenzbeispielen,
- AP7: Durchführung von ersten Testsimulationen,
- AP8: Identifizierung und Charakterisierung implementierter Stoffmodelle,
- AP9: Organisation des In-situ-Untersuchungsprogramms,
- AP10: Ergänzung des In-situ-Equipments,
- AP11: Abstimmung und Durchführung einer Bohrkernbeschaffungskampagne,
- AP12: Durchführung der In-situ-Untersuchungen Mont Terri & Tournemire,
- AP13: Erstellung eines Laborprogramms / Anpassung bestehender laborativer Ausrüstung,



- AP14: Durchführung eigener laborativer Untersuchungen,
- AP15: Ableitung von standortbezogenen repräsentativen Materialdaten,
- AP16: Durchführung von numerischen Simulationen / Qualitäts- und Effizienzüberprüfung,
- AP17: Validierung von physikalischer Modellierung und numerischer Simulation,
- AP18: Vorstellung und Diskussion der Arbeiten,
- AP19: Dokumentation der Arbeiten, Generalisierung der Befunde, Abschlussbericht.

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

- AP1: Erweiterung des Kenntnisstandes zu T und dem bestehenden T-F-Kopplungsansatz durch Literaturrecherche und Kontakt zum LBNL (Entwicklungsstätte von T).
- AP2: Aufarbeitung von laborativen Untersuchungen insbes. zu Quelldruckmessungen.
- AP3: Erarbeitung eines grundlegenden THM-Prozessverständnisses durch Literaturrecherche sowie durch einen Vortrag eines externen Fachkundigen (umfassende Erfahrung).
- AP4/5: Ausbau der bestehenden F-T-Schnittstelle und -Kopplungsfunktionen, auch insbesondere hinsichtlich thermischer Randbedingungen/Prozesse sowie Zweiphasenfluss.
- AP6: Erarbeitung weiterer grundlegender Modellbeispiele sowie erste Zusammenstellung weiterführender komplexerer Modellbeispiele (realitätsnah).
- AP7: Durchführung von ersten Testsimulationen an abstrahierten Modellbeispielen aus AP6, Einarbeitung in ein weiteres Programm zur Simulation von Zweiphasenfluss (FLAC).
- AP8: Identifizierung von Funktionen in T für Kapillardruck und relative Permeabilität.
- AP9: Abstimmung der weiteren Vorgehensweise mit GRS und Swisstopo ist erfolgt.
- AP11: Kontakt zu Swisstopo (Mt. Terri) bezüglich Kernkonservierung wurde aufgenommen.
- AP12: Durchführung weiterer Wiederholungsmessungen am Standort Tournemire (05/2012).
- AP13: Erste Testserie an altem Probenmaterial erfolgt z. Zt. in modifizierter Anlage.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP1: Wissenschaftlicher Erfahrungsaustausch mit dem LBNL, Vertiefung der Kenntnisse.
- AP2: Beschaffung von Literatur zu laborativen Untersuchungen zum THM-Materialverhalten, Aufarbeitung eigener laborativer Befunde sowie Dokumentation.
- AP3: Weitere Einarbeitung in vorliegende Literatur, weitere Recherche und Identifizierung offener Fragestellungen.
- AP4: Erweiterung der Schnittstelle bezüglich Sättigungsrandbedingungen.
- AP5: Erweiterung der Kopplungsroutinen hinsichtlich mechanisch beeinflusster Porositäten.
- AP7: Durchführung weiterer Testsimulationen an Modellbeispielen aus AP6.
- AP9: Bohrlöcher zur PW-Messung (GRS) vorauss. 9/2012; Observationsbohrlöcher vorauss. 11/2012.
- AP10: Beschaffung weiteren Bohrgestänges erfolgt, wenn die realisierbaren Bohrlochteufen definitiv feststehen.
- AP11: Durchführung der Bohrkernbeschaffungskampagne erfolgt vorauss. 11/2012.
- AP12: Durchführungen der nächsten In-situ-Untersuchungen erfolgen voraussichtlich: 11/2012 (Standort Mont Terri), Mitte /Ende 2013 (Standort Tournemire).
- AP13: Erfolgt, wenn im November 2012 die Anzahl der konservierten Proben feststeht.
- AP14: Erfolgt nach Durchführung der Bohrkernbeschaffungskampagne ab 12/2012.

### **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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2011 bis 30.09.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2011 bis 31.12.2011	
<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 Sensitivanalyse. Die numerische Effizienz soll anhand von Testfällen mit Praxisbezug überprüft und bewertet werden. Weiterhin ist geplant, methodische Grundlagen zur Sensitivanalyse bei zeitabhängigen Simulationsergebnissen zu erarbeiten sowie die Wirkungsweise von Metamodellen und deren Potential hinsichtlich einer Verbesserung der numerischen Effizienz zu untersuchen.

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

- Grafische Darstellung der Radionuklidströme aus dem Nahfeld
- Erstellung von Cobweb-Plots mit und ohne Berücksichtigung des Durchbruchzeitpunkts
- Plotten des Parameterrangs gegen den  $\text{Peak}_{\text{MAX}}$  für jedes Radionuklid unter Berücksichtigung des Durchbruchzeitpunkts
- Betrachtung der benötigten Rechenzeit und Rechenschritte in Abhängigkeit der Eingangsparameter
- Ermittlung der Durchbruchzeitpunkte im Zeitraum von  $10^6$  bis  $10^8$  Jahren
- Zeitabhängige Charakterisierung der Radionuklidströme mittels statistischer Lagemaße

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Vergleich einzelner Rechenläufe in Bezug auf die Rechendauer und der Abhängigkeit der Ergebnisse von unterschiedlichen Minimalschrittweiten
- Farbkodierung der Parameterkonstellation in Bezug auf den Durchbruchzeitpunkt des Abdichtungsbauwerks bis zu  $10^8$  Jahren
- Erweiterung des bisherigen Berechnungsmodells um Geosphäre und Biosphäre
- Ermittlung von Sensitivitätsindices erster und zweiter Ordnung mittel EASI-Algorithmus
- Erstellung von CUSONORO-Plots für bisherige Rechenläufe
- Erstellung eines Berechnungsmodells für ein generisches HLW-Endlager in Salz

### **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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2011 bis 31.08.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 Szenarienentwicklung
- AP4: Möglichkeit des Nachweises der Sicherheit in der Betriebs- und kontrollierten Nachbetriebsphase
- AP5: Nachweiskonzept und Konsequenzenanalyse für die Langzeitsicherheit von Standorten im Tonstein
- AP6: Berichtswesen

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wurden im Berichtszeitraum fünf Arbeitsgespräche mit den drei am Projekt beteiligten Organisationen durchgeführt. Dabei wurden vor allem die Themen zur Charakterisierung der Referenzregion, das Endlager- und das Sicherheitskonzept sowie Grundlagen zum FEP-Katalog diskutiert.

- AP1: Es wurde die Auswahl der Referenzregionen für Nord- und Süddeutschland diskutiert. Weiterhin wurde das Endlagerkonzept diskutiert und verfeinert. Mögliche mikrobielle Prozesse im Nahfeld des Endlagers und deren Einflüsse wurden von der GRS vorgestellt und im Rahmen der Projektgruppe diskutiert. Optionen zur Anpassung des Endlagerkonzepts zur Vermeidung mikrobieller Prozesse im Nahfeld wurden diskutiert und die Anpassungen vorgenommen. Es wurde von der GRS ein Diskussionspapier über mögliche Auswirkungen der Temperaturerhöhung auf das Wirtsgestein Ton und tonmineralhaltige Versatzstoffe erstellt. Die Diskussion der Effekte und eine eventuelle Berücksichtigung im Endlagerkonzept erfolgen im folgenden Berichtszeitraum.
- AP2: Es wurde von der GRS ein erster Entwurf für die Grundzüge des Sicherheitskonzepts erstellt und in der Projektgruppe diskutiert. Der Entwurf wurde und wird entsprechend dem Diskussionsstand und dem verfeinerten Endlagerkonzept fortlaufend angepasst.
- AP3: Eine erste Liste von FEPs, die im FEP-Katalog betrachtet werden sollen, wurde zusammengestellt und die FEPs zur Bearbeitung auf die einzelnen Organisationen verteilt. Die ersten 14 FEPs wurden von der GRS bearbeitet und werden auf dem ersten Treffen des folgenden Berichtszeitraums diskutiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Diskussion des Standortmodells und 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 die Änderungen des Endlagerkonzepts. Festlegung der Vorgehensweise in der Szenarienentwicklung.
- AP3: Abstimmung der Struktur der FEP-Datenbank. Bearbeitung und Diskussion der FEPs.
- AP5: Durchführung erster orientierender Rechnungen zur Radionuklidenausbreitung als Grundlage der Diskussion des Endlager- und Nachweiskonzepts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2011 bis 31.08.2014	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 entwickelt, wobei die Methodik zum Nachweis der Integrität der technischen, geotechnischen und geologischen Barrieren im Vordergrund steht. Voraussetzung für einen Sicherheitsnachweis ist ein umfassender FEP-Katalog, in dem alle relevanten Prozesse beschrieben sind. Es ist daher ein Teilziel, ausgehend von dem OECD-NEA-Katalog, die Prozesse zu selektieren bzw. zu ergänzen, die für eine Endlagerung in deutschen Tonsteinformationen relevant sind. Darüber hinaus soll herausgearbeitet werden, wo die größten Unsicherheiten im Rahmen einer Nachweisführung zu erwarten sind. Dabei soll sowohl die Option ohne eine geplante Rückholung der Abfallgebinde als auch mit einer geplanten Rückholung untersucht werden, um sicherheitstechnische Unterschiede aufzuzeigen und zu bewerten. Empfehlungen für weitere FuE-Arbeiten, die noch bestehende Kenntnislücken schließen sollen, bilden den Abschluss.

## 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:

Die Projektpartner verständigten sich darauf, die aus dem ERATO-Projekt hervorgegangene Vorzugsvariante der vertikalen Bohrlochlagerung als Referenzkonzept für die Arbeiten in diesem Vorhaben als Grundlage zu nehmen und die Methodik des Sicherheits- und Nachweiskonzeptes an diesem Beispiel zu demonstrieren. Da die Mächtigkeit der Wirtsgesteinschichten in den Referenzregionen Nord und Süd unterschiedlich sind, wurde die Länge der vertikalen Bohrlöcher gegenüber dem ERATO-Konzept verkürzt, um das gleiche Einlagerungskonzept in beiden Referenzregionen zu Grunde legen zu können.

AP3:

Grundlage des Langzeitsicherheitsnachweises ist ein FEP-Katalog, der alle für die zukünftige Entwicklung des Endlagersystems relevanten Eigenschaften, Ereignisse und Prozesse beschreibt. Es wird sowohl für eine Referenzregion in Norddeutschland als auch für eine Referenzregion in Süddeutschland ein FEP-Katalog erstellt. In der Region Nord handelt es sich bei dem Wirtsgestein um Unterkreidetone und in der Region Süd um den Opalinuston. Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten zur Erstellung des ersten FEP-Kataloges (Region Nord) weiter geführt. Die Vorgehensweise lehnt sich dabei an die Methodik des abgeschlossenen FuE-Vorhabens ISIBEL bzw. der Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) an.

AP4:

Gemäß den neuen Sicherheitsanforderungen des BMU besteht die Notwendigkeit einer Berücksichtigung der Rückholung von Abfällen während der Betriebsphase sowie der Bergbarkeit der Behälter für einen Zeitraum von 500 Jahren. Im Berichtszeitraum wurde das vorliegende ERATO-Einlagerungskonzept analysiert, um herauszufinden, ob eine Rückholung unter den gegebenen Bedingungen praktikabel ist bzw. was am Konzept geändert werden müsste, um eine Rückholung praktikabel zu machen. Im Ergebnis bleibt festzuhalten, dass eine Rückholung zwar prinzipiell in allen Fällen möglich ist, der Aufwand aber durchaus unterschiedlich ist für die verschiedenen Einlagerungsvarianten und das hier und da Anpassungen am Konzept notwendig sind, um eine einwandfreie Rückholung zu gewährleisten. Ein Berichtsentwurf dazu wurde erstellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Entwicklung eines prinzipiellen Verfüll und Verschlusskonzeptes als Grundlage für die FEP- und Szenarienentwicklung sowie als Grundlage für den ingenieurtechnischen Nachweis bzgl. der geotechnischen Barrieren. Benchmark-Berechnungen zur Vorbereitung der Arbeiten zum Integrationsnachweis der geologischen Barriere.

AP3: Fortführung der Arbeiten zur Erstellung des FEP-Kataloges für die Referenzregion Nord.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2012 bis 28.02.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.03.2012 bis 30.06.2012	
<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 Tongesteininformationen 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 wurde mit der Bearbeitung der Unteraufgaben 1.1 und 1.2 des Arbeitspaketes 1 begonnen. Die Arbeitsergebnisse zur Unteraufgabe 1.1 sind in einem Berichtsentwurf dokumentiert.

Arbeiten im Rahmen des AP3 beschränkten sich im Berichtszeitraum auf die Erstellung der geologischen Langzeitprognose für die Referenzregion „Nord“ (Unteraufgabe 3.1).

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fertigstellung des Berichtes zur Unteraufgabe 1.1 und Erstellung eines Berichtes über die Ergebnisse der Arbeiten zu Unteraufgabe 1.2.

Mit der Beschreibung der geologischen FEPs für die Referenzregionen „Nord“ und „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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2012 bis 31.08.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.03.2012 bis 30.06.2012	
<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). Mehrskalenansätze 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**

Ein Kooperationsvertrag zwischen der Universität Frankfurt, der Universität Jena und der GRS wurde abgeschlossen.

Mit der Planung des graphischen Benutzerinterfaces auf der Basis der Virtual Reflection Library (VRL) wurde begonnen. Um entsprechende Anwendungen mit der geforderten Funktionalität realisieren zu können, wurde VRL um die notwendigen technischen Aspekte erweitert, die eine plattformübergreifende Integration verschiedener Bibliotheken in eine einheitliche Programmoberfläche ermöglichen.

### **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 Funktionsweise der in d<sup>3f</sup> und r<sup>3t</sup> implementierten Quellen und Senken wird überprüft.
- Die Beschreibung der Benutzeroberfläche und die Vorarbeiten werden weitergeführt.
- Testfälle werden ausgewählt

Das erste Statusgespräch wird im Herbst 2012 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2012 bis 28.02.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.06.2012 bis 30.06.2012	
<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**

Bisher konnte mit der Arbeit noch nicht begonnen werden, da der zuständige Mitarbeiter erst im Juli 2012 eingestellt werden konnte.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden – wie im Projektantrag festgelegt – begonnen und durchgeführt.

### **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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2012 bis 31.05.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.03.2012 bis 30.06.2012	
<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 sollen Datenstrukturen und Methoden zur Realisierung strukturierter Gitter entwickelt werden, um einen einfachen und effizienten Speicherzugriff auf Multicore- und GPU-Systemen zu gewährleisten. Hierzu wurden mehrere Ansätze gegeneinander abgewogen. Eine Entscheidung darüber, welcher Ansatz implementiert wird, soll in Kürze erfolgen.

AP3: Umsetzung eines hochskalierbaren gekoppelten DD-Mehrgitterlösers

Im Berichtszeitraum wurden Skalierbarkeitsstudien für unser auf dem FETI-DP-Ansatz ("Dual-Primal Finite Element Tearing and Interconnecting") basierendes Domain-Decomposition-Verfahren (DD-Verfahren) auf massiv-parallelen Systemen mit verteiltem Speicher durchgeführt. Das Rechengebiet (die Domain), auf der die zu lösenden Differentialgleichungen definiert sind, wird dabei zunächst in Teilgebiete ((FETI-)Subdomains) zerlegt ("Tearing"), auf denen das Lösen der hier definierten Teilprobleme parallel erfolgen kann ("äußere" Parallelität). Das Zusammenfügen der Teillösungen ("Interconnecting") erfolgt beim FETI-Ansatz durch eine globale Iteration. Anders als bei Standard-FETI-DP kann bei unserer Implementierung jede Subdomain für sich wieder auf (theoretisch) beliebig viele MPI-Prozesse verteilt werden, so dass die Teilprobleme mit einem parallelen Löser gelöst werden können ("innere" Parallelität). Zur Beschreibung der Kommunikation der MPI-Prozesse innerhalb einer FETI-Subdomain werden diese zu Prozess-Gruppen zusammengefasst und durch MPI-Kommunikatoren beschrieben.

Für die hier vorgestellten Studien wurde FAMG (Filtering Algebraic Multigrid) als ein solcher innerer, auf einer FETI-Subdomain arbeitender Subproblem-Löser eingesetzt. Untersucht wurde dabei eine Spanne von 4 bis 16 Ki PE (16.384 PE; "PE" - "Processing Entities") in mehreren Serien mit jeweils konstanter Anzahl PE pro FETI-Subdomain, angewendet auf eine Laplace-Gleichung als Testproblem in zwei Dimensionen.

Das Verfahren skaliert für 1 und 4 PE pro FETI-Subdomain gut, für 16 PE pro FETI Subdomain bereits deutlich schlechter. Für die Serien mit 64 und 256 PE pro FETI-Subdomain (sowie allen weiteren, hier nicht untersuchten PE-Anzahlen) skaliert das Verfahren noch sehr schlecht, so dass sich hier weiterer Optimierungsbedarf zeigt.

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

AP6: Löser für hochdimensionale Probleme

Für AP5 und AP6 wurden Vorarbeiten durchgeführt.

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2012 bis 30.11.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.06.2012 bis 30.06.2012	
<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>3t</sup> 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

AP3:

- Planung und erste Vorbereitungen zu den Promotionsarbeiten von Frau Susan Britz und Frau Sandra Kalanke.
- Entwicklung eines geeigneten und optimierten Versuchsaufbaus der geplanten Säulenversuche.
- Durchführung und Auswertung erster Oberflächensorptionsversuche zum Ausschluss ungewollter Sorption an Oberflächen verwendeter Materialien im Säulenversuch.
- Literaturrecherche zum Einfluss von Konkurrenz-Kationen und Liganden auf das Sorptionsverhalten von Nickel und Europium an Mineralphasen.
- Erstellen eines Versuchsplans und Festlegung der Randbedingungen für Batchversuche.

AP7:

- Planung des ersten Arbeitstreffens in Leipzig.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Vorbereitung und Beschreibung 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:

- Einwöchiger Austausch der Doktoranden vom HZDR und der GRS. Durchführung eines Workshops zur Abstimmung der Arbeiten.
- Abschluss Vorversuche der Säulenexperimente bis Anfang Dezember 2012 und anschließende Datenaufnahme sowie –auswertung geplanter Hauptversuche.
- Abschluss der Vorversuche für Batch-Experimente und Beginn der Durchführung erster Hauptversuche.
- Erstellung von Titrationskurven der Minerale Quarz, Kaolinit sowie Ermittlung geeigneter Oberflächenkomplexparameter mittels PhreeqC.
- 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.

### 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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2012 bis 30.11.2015	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.06.2012 bis 30.06.2012	
<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>3t</sup> 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**

AP3:

- Planung und erste Vorbereitungen zur Promotionsarbeit von Frau Constanze Richter (Arbeitsaufnahme am 01.07.2012)

AP4:

- Einarbeitung in redoxchemische Fragestellungen in geochemischen Speziationscode PHREEQC für smart-Kd Berechnung

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP3:

- Literaturrecherche zu geplanten Sorptionsexperimenten und spektroskopischen Untersuchungsverfahren
- Konkrete Planung der Experimente

AP4:

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

### **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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Kernmaterialüberwachung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2009 bis 30.04.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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

- Safeguards-Web-Portal: Realisierung des Konzeptvorschlags.
- Geologische Endlagerung: Durchführung eines geophysikalischen Messprogramms; Mitarbeit in der Safeguards-Expertengruppe der IAEO.
- Datenfernübertragung: Vorbereitung eines Feldtests zur Datenfernübertragung von State-of-Health-Daten in Abstimmung mit Euratom, den Betreibern, dem BMWi und den BSI.

- ESARDA: Mitarbeit in den Arbeitsgruppen „Containment and Surveillance“, „Verification Technologies and Methodologies“, „Training and Knowledge Management“, „Implementation of Safeguards“ und der „Reflection Group“, Mitarbeit im Steering und Editorial Committee.
- Safeguardstechniken: Projektleitung bei der Entwicklung von NGSS, DMCA, HM-5 Software.
- Safeguardsanalytik: Vorbereitung eines gemeinsamen Promotionsprojektes mit dem Safeguardslabor der IAEO zur Produktion und Charakterisierung von Referenzmaterialien. Projektleitung bei der LIBS Machbarkeitsstudie.
- Satellitenfernerkundung: Projektleitung zweier Studien zum Einsatz der Fernerkundung in der IAEO.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von „State-level Safeguards“ und „Acquisition Path Analysis“.
- 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 neuen SAGSI-Mitglieds.
- Zusatzprotokoll und Implementierung von Integrated Safeguards: Unterstützung und Beratung von Betreibern; Unterstützung des BMWi bei Anfragen von IAEO und Euratom; Erstellung der Deklaration für Deutschland nach dem Zusatzprotokoll; Erstellung von Vorlagen zur Einführung von Integrated Safeguards für spezielle Anlagen; Teilnahme an Besprechungen; Kommentierung von Entwürfen/Vorlagen Dritter.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Ausarbeitung von wissenschaftlichen Beiträgen für die Jahrestagungen von INMM und ESARDA sowie für das JNMM, Teilnahme an der Sitzungen bei der IAEO in Wien.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen iranisches Nuklearprogramm und Raketenabwehrprojekt der NATO (26.04.12).
- Training: Durchführung eines Trainings von IAEO- und Euratom-Inspektoren im FZJ.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Safeguards-Web-Portal: Realisierung des Konzeptvorschlags.
- Geologische Endlagerung: Fortsetzung des Messprogramms im Erkundungsbergwerk Gorleben. Geomodellierung von möglichen Signalen und deren Ausbreitung.
- Datenfernübertragung: Durchführung des Feldtest für die Datenfernübertragung von State-of-Health-Daten.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Arbeitsgruppen und -Gremien.
- Safeguardstechniken: Projektabschluss für NGSS, DMCA, HM-5 Software.
- Safeguardsanalytik: Durchführung des Promotionsprojektes mit dem IAEO-Safeguardslabor zur Produktion und Charakterisierung von Referenzmaterialien. Weiterführung der LIBS-Machbarkeitsstudie.
- Satellitenfernerkundung: Projektleitung zweier Studien zum Einsatz der Fernerkundung bei der IAEO.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von „State-level Safeguards“ und „Acquisition Path Analysis“.
- 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.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Wissenschaftliche Beiträge, Teilnahme an Sitzungen bei der IAEO.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: DGAP-Expertensitzungen.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- 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,
- C. Fricke-Begemann, R. Noll, A. Monteith, A. Maddison, M. Dürr: Assessment of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy as a Method to Pre-Screen Environmental Swipe Samples, *Proc. Institute of Nuclear Materials Management 53rd Annual Meeting*, 15.-19.07.2012, Orlando
- C. Listner, M.J. Canty, A. Reznicek, I. Niemeyer, G. Stein: A Concept for Handling Acquisition Path Analysis in the Framework of IAEA's State-level Approach, *Proc. Institute of Nuclear Materials Management 53rd Annual Meeting*, 15.-19.07.2012, Orlando
- I. Niemeyer, P. Button, O. Okko, J.-P. Paquette, G. Parsons, T. Tadono: Safeguarding Geological Repositories, *Proc. 13. Geokinematischer Tag*, 10.-11.05.2012, Freiberg
- S. Nussbaum, I. Niemeyer: Geographic Information Systems (GIS) – from Visualization to Analysis, *Proc. Institute of Nuclear Materials Management 53rd Annual Meeting*, 15.-19.07.2012, Orlando





### **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> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2011 bis 31.12.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2012 bis 30.06.2012	
<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 02E9894, 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	📖 96
02 E 11061 C	Methodenentwicklung und Anwendung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für einen generischen HAW-Endlagerstandort im Tonstein (AnSichT)	📖 130
<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)	📖 44
02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	📖 60
02 E 10730	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	📖 62
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL	📖 68
02 E 10900	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	📖 94
02 E 10931	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA-(TV2)	📖 100
02E11061B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein	📖 128
<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)	📖 78
<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)	📖 72
02 W 6259	Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden	📖 144

<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 | 📖 36  |
| 02E11062B  | Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden Rechnern mit $d^3f$ und $r^3t$ (H-DUR)                                    | 📖 134 |

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

- |            |   |      |
|------------|---|------|
| 02 E 9894  | Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt         | 📖 12 |
| 02 E 9944  | Goelektrische 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 10518 | Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1     | 📖 26 |
| 02 E 10548 | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern  | 📖 30 |
| 02 E 10558 | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP1 - Kurztitel: A-DuR | 📖 32 |
| 02 E 10608 | Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa  | 📖 40 |
| 02 E 10669 | Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2                                      | 📖 48 |
| 02 E 10689 | Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS  | 📖 52 |
| 02 E 10719 | Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA) | 📖 58 |
| 02 E 10740 | Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager   | 📖 64 |

- 02 E 10750 Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaus-  
sage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein -  
Kurztitel: URSEL 66
- 02 E 10770 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungspro-  
dukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückho-  
lung (VESPA) 70
- 02 E 10890 Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS 92
- 02 E 10941 Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivi-  
tätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges  
Endlager - MOSEL 102
- 02 E 10951 Diffusion in kompaktiertem Salzgrus – DIKOSA 104
- 02E11061A Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes  
für ein HAW-Endlager im Tonstein 126
- 02E11062A Verbundprojekt: Modellierung von Datenungleichheiten auf hybriden  
Rechnern mit  $d^3f$  und  $r^3t$  (H-DUR) 132
- 02E11072A Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd-  
Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS 138

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

- 02 E 10528 Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in  
Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) -  
TV2 28
- 02 E 10618 Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechsel-  
wirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden 42
- 02 E 10971 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im na-  
türlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2:  
Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf 108
- 02E11072B Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-Kd-  
Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt HZDR 140

**Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Inter-  
disziplinäre Isotopenforschung, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig**

- 02 E 10790 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungspro-  
dukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückho-  
lung (VESPA) 74

**Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Permoserstr. 15,  
04318 Leipzig**

- 02 E 10588 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strö-  
mungs- und Transportmodellierung mit  $d^3f$  und  $r^3t$  - TP4 - Kurztitel:  
A-DuR 38

**IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wils-  
nack & Partner, Lessingstr. 46, 09599 Freiberg**

- 02 E 10447 Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilität 24

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

- 02 E 10659 Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge 📖 46
- 02 E 10830 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG) 📖 82

**Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz**

- 02 E 10981 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz 📖 110

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

- 02 E 10568 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit  $d^3f$  und  $r^3t$  - TP2 - Kurztitel: A-DuR 📖 34
- 02E11062C Verbundprojekt: Modellierung von Datenungewissheiten auf hybriden Rechnern mit  $d^3f$  und  $r^3t$  (H-DUR) 📖 136

**Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover**

- 02 E 10850 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB) 📖 86

**Projektträger Karlsruhe Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen**

- KWA 9005 Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine 📖 148


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


- 02 E 11031 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg 📖 120

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


- 02 E 10679 Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2 📖 50
- 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 📖 54
- 02 E 10800 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA) 📖 76





02 E 10840 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)  84

02 E 10961 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie  106


**Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg**

02 E 10709 Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate  56


02 E 10880 Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs  90


02 E 10921 Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA-(TV1)  98


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

02 E 10860 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)  88


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

02 E 10820 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)  80


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  122

02 E 11051 Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern  124


**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  118


**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  114

**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  112

**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  116