

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

**PTE Nr. 42**

BMBF und BMWi geförderte FuE zu  
„Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“

Berichtszeitraum: 1. Juli - 31. Dezember 2011

Projektträger Karlsruhe  
Wassertechnologie und Entsorgung  
(PTKA-WTE)

**Februar 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	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“ und  
(„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	C-VORHABEN .....	139
2.3	W-VORHABEN.....	145
2.4	BMW-HAUSVORHABEN .....	149
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....</b>	<b>153</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>	📖 54
<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>	📖 56
<b>02 E 10689</b>	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 58
<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>	📖 60
<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>	📖 62
<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>	📖 64












<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>	📖 66
<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>	📖 72
<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>	📖 74
<b>02 E 10870</b>	Instrumente, Bedarf und Potentiale für Wissensmanagement in der Endlagerforschung	<b>Öko-Institut e. V., Institut für angewandte Ökologie, Freiburg</b>	📖 96
<b>02 E 10880</b>	Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 98
<b>02 E 10921</b>	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle -ELSA- (TV1)	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 106
<b>02 E 10931</b>	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle -ELSA- (TV1)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 108
<b>KWA 9005</b>	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	<b>Projektträger Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE)</b>	📖 150





## 1.2 Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse

<b>02 C 1628</b>	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung - Phase 2, Kurztitel: WeDa-II	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 140
<b>02 C 1638</b>	Bentonit als Barrierematerial für den Abschluss von Untertagedeponien - Abschließende Versuche und eine Zusammenstellung von Wissenschaft und Technik (Kurztitel: Bentonit-Barrieren)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 142
<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>	Goelektrische 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 10306</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse	<b>Albert-Ludwigs-Universität Freiburg</b>	📖 20
<b>02 E 10336</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 22
<b>02 E 10367</b>	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 24
<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>	📖 26
<b>02 E 10447</b>	Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung	<b>IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack &amp; Partner, Freiberg</b>	📖 28
<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>	📖 30
<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>	📖 32

<b>02 E 10548</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 34
<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>	📖 36
<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>	📖 38
<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>	📖 40
<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>	📖 42
<b>02 E 10608</b>	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 44
<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>	📖 46
<b>02 E 10639</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>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 48
<b>02 E 10649</b>	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 50
<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>	📖 52
<b>02 E 10730</b>	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 68
<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>	📖 70
<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>	📖 76
<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>	📖 78

<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>	 80
<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>	 82
<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>	 84
<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>	 86
<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>	 88
<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>	 90
<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>	 92
<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 Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig</b>	 94
<b>02 E 10890</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	 100
<b>02 E 10900</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	 102
<b>02 E 10910</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>	 104

<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>	📖 110
<b>02 E 10951</b>	Diffusion in kompaktiertem Salzgrus - DIKOSA	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 112
<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>	📖 114
<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>	📖 116
<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>	📖 118
<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>	📖 120
<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>	📖 122
<b>02 E 11011</b>	Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam	<b>Universität Potsdam</b>	📖 124
<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>	📖 126
<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>	📖 128
<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>	📖 130
<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>	📖 132

- 02 E 11061 A** Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein **Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln**  134
- 02 E 11061 B** Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein **DBE Technology GmbH, Peine**  136



### 1.3 Kernmaterialüberwachung

**02 W 6259** Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden **Forschungszentrum Jülich GmbH**  146





## **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 31.12.2011		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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:

Eine aktualisierte Prognoserechnung zur Abschätzung der Aufsättigungsdauer in BSB-2 mit Berücksichtigung des im Versuchsverlauf erfassten Gebirgsverhaltens ergab, dass das sich im Verbund Dichtung - Gebirge einstellende Fluiddruckgleichgewicht möglicherweise nicht zu einem eindeutig messbaren Porendruck und damit zu dem gewünschten Wasseraustrag an der Oberseite der Dichtung führen wird. Erst für den Fall der Erhöhung des Injektionsdrucks auf das im Technikumsversuch angewandte Druckniveau von  $p_{\text{Fluid}} = 1.085 \text{ MPa}$  an der Dichtungsunterseite ergaben die Ergebnisse der numerischen Simulation eine eindeutige Druckerhöhung an der Fluidaustrittsseite.

Unter Berücksichtigung dieser Ergebnisse wurde der Wasser-Injektionsdruck auf zunächst 1 MPa erhöht, wobei ein vorübergehend geringfügiger, dann aber stagnierender Wasseraustrag festzustellen war. Daraufhin wurde der Druck erneut um 0.1 MPa heraufgesetzt. Ab diesem Zeitpunkt war ein etappenweiser Wasseraustrag, wie er auch beim Technikumsversuch 2 registriert wurde, zu beobachten. Mit einer Fließrate von  $1.19 \text{ cm}^3/\text{h}$  ergab sich eine Wasserpermeabilität von  $4.2\text{E-}18 \text{ m}^2$ . Dieser Wert stimmt sehr gut mit der im Technikumsversuch 2 bestimmten Wasserpermeabilität von  $1.5\text{E-}18 \text{ m}^2$  überein.

Zur anschließenden Bestimmung des Gaseintrittsdrucks wurde ein Abbau des Wasserinjektionsdrucks im System vorgenommen. Die unterhalb des Packers im oberen Bereich der Dichtung gemessenen Quelldrücke folgten dabei dem Verlauf des Injektionsdrucks. Nach dem Druckabbau stellte sich für die Quelldrücke ein Wert von 0.33 MPa bzw. 0.43 MPa ein. Die Bestimmung des Gaseintrittsdrucks zeigte, dass der Gaseintrittsdruck im Bereich der Quelldrücke lag, was auch mit den Ergebnissen des im Technikumsversuchs 2 ermittelten Gaseintrittsdrucks vergleichbar ist. Nach dem Absenken des Injektionsdrucks war ein Rückfluss des Wassers in den oberen Teil der Dichtung zu beobachten. Diese Beobachtung geht wieder konform mit den Ergebnissen der numerischen Simulation, die ein Fluiddruckgleichgewicht zwischen Injektionsdruck und Porenwasserdruck im Gebirge ergab. Die Simulationsrechnungen und die nachfolgend tatsächlich beobachteten Messergebnisse belegen, dass am Ende des Experiments ein gutes Prozessverständnis erzielt wurde.

Zur Vorbereitung der Beprobung wurde ein Druckabbau auch bei den anderen Bohrungen BSB1, BSB13 und BSB15, bei denen der Injektionsdruck nicht erhöht worden war, ebenfalls herbeigeführt.

Bei den Bohrungen BSB1 und BSB15 war ein sehr schneller Druckabbau in der Druckkammer festzustellen, was - wie bereits früher berichtet - auf Randläufigkeiten und ein gestörtes Gebirge zurückzuführen ist. Bei den Bohrungen BSB2 und BSB13 hingegen verläuft der Druckabbau langsamer. Dieses Verhalten bestätigt die gute Dichtwirkung des Dichtelements im Verbund mit dem Gebirge.

Die Beprobung zur Bestimmung der Wassergehaltsverteilung in den vier Dichtelementen und im angrenzenden Gebirge wurde mit der Bohrung BSB1 begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Nachuntersuchung der erreichten Sättigung bei den In-situ-Versuchen BSB1, BSB2 und BSB3.
- Dokumentation.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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. Dabei sind von der Resistivitätserhöhung nur die obersten Elektroden direkt unter der Firste betroffen. Ein möglicher Grund für die Resistivitätserhöhung im obersten Streckenbereich ist die Tatsache, dass in der Sektion I permanent zutretendes Wasser abgepumpt wird, um den Wasserdruck in der versetzten Strecke gering zu halten. Vermutlich ist es unter der Firste zu einer leichten Entsättigung oder möglicherweise auch zu einer Setzung gekommen, die die Ankopplung der Elektroden verschlechtert.

AP2: Beim Projekttreffen im November 2011 wurden unter anderem die Ergebnisse einer Auswahl an bisher ausgewerteten Laborversuche von Clay Technology im Auftrag von SKB an Buffer-Proben präsentiert. Sie zeigen, dass die Wasseraufnahme des hochkompaktierten Bentonits ausgesprochen inhomogen über den Umfang der Lagerbohrlöcher verteilt ist. Daher wurde entschieden, dass Clay Technology diese Untersuchungen zunächst vollständig dokumentiert und die Ergebnisse den Projektpartnern zur Verfügung stellt, damit auf dieser Basis die Auswahl der Proben für die weiteren Untersuchungen erfolgen kann.

Ein weiteres bereits verfügbares Ergebnis ist, dass auf Grund der geringen Steifigkeit des Streckenversatzes die Quellung der Bufferblöcke im oberen Bereich der Lagerbohrlöcher zu einer Hebung im Dezimeterbereich geführt hat. Dies ist vermutlich der Grund für die Elektrodenausfälle im Buffer, entweder durch Kabelbruch oder fehlende Ankopplung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

AP2: Wassergehaltsbestimmungen an Proben aus dem Versuchsfeld und Inspektion von aus dem Versuchsfeld geborgenen 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 31.03.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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

Dampfdruckmessungen:

Beginn der isopiestic Messungen für die sulfatischen ternären Systeme Fe(II) – Na,K,Mg – SO<sub>4</sub> – H<sub>2</sub>O bei 40 °C, 60 °C und 90 °C.

Literaturstudie: -

Löslichkeitsversuche:

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

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Dampfdruckmessungen:

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 40 °C, 60 °C und 90 °C. Evtl. Beginn der ternären Systeme mit Sulfat und Chlorid 40 °C, 60 °C und 90 °C.

Literaturstudie:

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

Löslichkeitsversuche:

Fortsetzung der Löslichkeitsversuche im System Fe(II)-K-Cl-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O bei 60 °C und 40 °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 30.06.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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. Die Kalibrierung der thermischen Gesteinsparameter erfolgte anhand der in der ersten Erhitzerphase gewonnenen Daten und ergab seinerzeit ein sehr gutes Fitting. Dieser Datensatz wurde dann genommen, um die nachfolgenden Erhitzerphasen zu prognostizieren. Ein Vergleich mit den aktuellen Messwerten ergab, dass insbesondere in der letzten Erhitzerphase mit der höchsten thermischen Leistung eine deutliche Abweichung zwischen Messung und Prognoseberechnung festzustellen ist. Offensichtlich ist eine Kalibrierung des Modells und damit eine inverse Bestimmung der thermischen Gesteinsparameter aus in-situ Temperaturmessungen nur erfolgreich, wenn die Kalibrierung den gesamten Temperaturbereich abdeckt. Eine Extrapolation in Bereiche höherer Temperatur, also mit einem höheren Wärmeeintrag, ist nur begrenzt mit ausreichender Genauigkeit möglich. Derzeit wird eine Rekalibrierung des Modells unter Verwendung aller bisherigen Erhitzerphasen angestrebt um damit dann ein Prognose für die Abkühlphasen durchzuführen.

Anschließend wurde ein 3D-thermo-hydro-mechanisch gekoppeltes Modell mit FLAC3D entwickelt, um neben der Temperaturausbreitung 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 eine bestmögliche Anpassung der thermisch induzierten Porenwasserdruckentwicklung im Modellgebiet erreicht werden.

Die korrekte Simulation der Porenwasserdruckentwicklung stellt in beiden Simulationsfällen insofern eine Herausforderung dar, da die Porendruckentwicklung nicht nur vom Verlauf der Erhitzung abhängt, sondern auch stark von den vielen Messbohrungen beeinflusst wird, die als Potenzialsenken wirken. Zudem ist das gesamte Porendrucksystem bedingt durch die Auffahrtätigkeiten in Bure sehr heterogen. Es wurde damit begonnen zu untersuchen, inwieweit man mittels eines neuen Stoffgesetzes zur spannungsabhängigen Permeabilität die realen Verhältnisse besser im Modell abbilden kann.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP6:

- Durchführung von Prognoseberechnung für die weiteren Phasen des TED-Erhitzerversuchs in Bure.
- Durchführung thermo-hydro-mechanischer Berechnungen zur Analyse der thermisch induzierten Porenwasserdruckentwicklung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fahnenbergplatz, 79098 Freiburg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10306</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 30.09.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 94.760,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kröner	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit der Entwicklung der Programmpakete  $d^3f$  und  $r^3t$  stehen Werkzeuge zur Modellierung der salzgetriebenen Dichteströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien zur Verfügung. Im Rahmen dieser Vorgänge haben die Arbeitsgruppen in Bonn und Freiburg Visualisierungswerkzeuge für die großen und komplexen Datensätze in 2D und vor allem in 3D entwickelt. Diese Werkzeuge sollen nun weiterentwickelt werden und den neuen Fragestellungen im Zusammenhang mit Kluftgeometrien und freien Oberflächen angepasst werden.

Diese Visualisierung soll hierarchisch konzipiert werden. D. h. in der interaktiven Exploration werden grobe Repräsentationen der Daten bereitgestellt, die effektiv in Echtzeit zeitlich animiert oder räumlich skaliert und gedreht werden können. Finale graphische Ergebnisse und Animationen sollen hingegen den vollen Detailreichtum der Simulationen widerspiegeln.

Die Datenanalyse dreidimensionaler zeitabhängiger Daten erfordert lokalisierte Techniken der Visualisierung. D. h. es soll möglich sein, an Raumpunkten über die Zeit oder auf Kurven in Raumzeit oder auch auf Domänengrenzen über die Zeit die Entwicklung skalarer oder vektorieller sowie akkumulierter Größen auszulesen und graphisch aufzubereiten.

Schon im Projekt  $r^3t$  wurden Multiskalen-Bildverarbeitungstechniken entwickelt, um die Strömungsfelder und den Transport von Schadstoffen visuell angemessen darzustellen und damit ein Verständnis der simulierten Prozesse zu ermöglichen. Diese Methoden sollen nun vor allem in Hinblick auf dreidimensionale Strömungen mit Schadstofftransport weiterentwickelt werden.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der GRS (Anke Schneider), der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Bonn (Prof. Rumpf) und der Uni Heidelberg (Prof. Wittum) durchgeführt. Zusätzlich ist auch das Steinbeis-Forschungszentrum (Dr. Heisig) über einen Unterauftrag eingebunden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP9: Visualisierung und Datenanalyse (Arbeitsgruppe Kröner)

## AP10: Visualisierung und Datenanalyse (Arbeitsgruppe Rumpf)

Schwerpunkt der Arbeitsgruppe Kröner ist hierbei die Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die hier zu entwickelnden numerischen Methoden zur Datenanalyse. Schwerpunkt der Arbeitsgruppe Rumpf ist die Entwicklung von hierarchischen Datenanalysemethoden und Postprocessing-Methoden basierend auf dreidimensionaler morphologischer Bildverarbeitung.

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

Die Visualisierungsplattform GRAPE wurde im Kontext von neuen Datenformaten weiterentwickelt. Bearbeitet wurde das Projekt von Herrn Mirko Kränkel (AG Kröner).

*Im Zusammenhang mit den Visualisierungswerkzeugen wurden folgende Arbeiten durchgeführt:*

In diesem letzten Abschnitt, wurden die entwickelten Visualisierungswerkzeuge an realistischen Modellrechnungen getestet und gegebenenfalls angepasst. Hauptaspekt hierbei waren die Darstellungsroutinen für Kluftdaten, insbesondere die Geschwindigkeitsdaten in 3d.

Des Weiteren wurden die Probe-Methoden zur Datenanalyse auch für die niederdimensionalen Klüfte angepasst.

Es wurde begonnen Einlese- und Darstellungsroutinen für elementbasierte Geschwindigkeitsfelder zu entwickeln und zu implementieren.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Abschlussbericht in Vorbereitung.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10336</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d <sup>3</sup> f und r <sup>3</sup> t		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 30.09.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.340.848,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Schneider	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit der Entwicklung der Programmpakete d<sup>3</sup>f und r<sup>3</sup>t stehen Werkzeuge zur Modellierung der salzgetriebenen Dichteströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien zur Verfügung. Um die Anwendbarkeit der beiden Programmpakete auch auf die Wirtsfformationen Ton und Kristallin auszudehnen, ist eine Weiterentwicklung zur expliziten Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen Voraussetzung. Bei der Modellierung von Einflüssen durch Klimaveränderungen kann der Wärmetransport nicht mehr vernachlässigt werden. Deshalb wird die Modellierung der Dichteströmung auf den Einfluss des Wärmetransportes ausgedehnt. Hierzu wird das Skalenverhalten von thermohalinen Strömungen in heterogenen Medien untersucht. Um Modellierungen im oberflächennahen Bereich zu ermöglichen, wird auch die Berücksichtigung von phreatischen und Potentialströmungen ermöglicht. Selbstverständlich werden auch Prä- und Postprozessoren zur Dateneingabe und zur Ergebnisdarstellung den erweiterten Anforderungen angepasst.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Freiburg (Prof. Kröner), der Uni Bonn (Prof. Rumpf) und der Uni Frankfurt (Prof. Wittum) durchgeführt. Zusätzlich ist auch das Steinbeis-Forschungszentrum (Dr. Heisig) über einen Unterauftrag eingebunden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP1: Leitung des Vorhabens

AP2: Detailplanung und Entwicklung der Benutzeroberfläche

AP3: Testrechnungen

AP4: Erstellung eines gemeinsamen Abschlussberichtes, Fortschreibung der Anwenderhandbücher und der Testfallsammlungen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Von der GRS wurden weitere Testrechnungen mit Klüften, Wärmetransport und freier Grundwasseroberfläche mit  $d^3f$  und  $r^3t$  durchgeführt. Gerechnet wurden:

- Ein 1d-Testfall von Ogata, Vergleich mit analytischer Lösung (erst reine Wärmeleitung, dann Konvektion, Wärmeleitung und thermale Dispersion)
- Ein 2d-Testfall von Yang, Vergleich mit anderen Modellergebnissen (Yang & Edwards 2000 und Graf 2005), Wärmeleitung in anisotropen Medien, Kopplung von Wärmetransport und Grundwasserströmung über wärmeabhängige Fließparameter.
- Ein 2d-Testfall mit Klüften zum Standort „Majak“, Vergleich mit FEFLOW-Modellrechnungen bzw. Vergleich  $d^3f/r^3t$ : Wärme- bzw. Stofftransport durch Klüfte
- Einfache 2d-Testfälle zur Modellierung der freien Grundwasseroberfläche (Durchströmung eines Dammes, Modell mit Brunnen)

Die neuen Tools zum Pre- und Postprocessing wurden getestet. An den Benutzerhandbüchern wurde weiter gearbeitet.

Abschließende Wiederholungsrechnungen zum Testbeispiel nach Tang et al. für Matrixdiffusion zeigten nunmehr eine zufriedenstellende Übereinstimmung. Abweichungen zwischen Modell und analytischer Lösung sind gering und durch unterschiedliche Annahmen erklärbar. Die Auswertung des 3D-Modells mit Klüften, Strecken und Bohrungen zum Testfall 8b der Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes (TF GWFTS) wurde ergänzt um einige Ergebnisplots zum Geschwindigkeitsfeld in der Matrix und in den Klüften. Außerdem wurden die berechneten Zulaufmengen mit Messdaten zum deutschen Zweiphasenflusseperiment in Äspö verglichen. Danach ergaben sich im Modell plausible Werte. Am diesbezüglichen Teil eines Berichts, der im Rahmen der Task Force Groundwater Flow and Solute Transport erstellt wird, wurde mitgearbeitet.

Der gemeinsame Abschlussbericht „Advancing the codes  $d^3f$  and  $r^3t$ “ (GRS 292) wurde erstellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

### 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011
<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

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

AP3:

Folgende Module wurden für die neue Benutzerumgebung XENIA konzipiert und als Modul-Beschreibungen (in xml) realisiert:

- Biosphärenmodul *BioTREND* zur Spezifikation des Biosphärenmodells,
- Hilfsmodul *dosefactors* zur Spezifikation und Speicherung von Dosiskonversionsfaktoren, Organdosis-konversionsfaktoren und Dosiskoeffizienten,
- Hilfsmodul *job-configuration* zur Erfassung von Daten, die für den gesamten Rechenlauf relevant sind.

Das Biosphärenmodul *BioTREND* (Nachfolger von EXCON und EXMAS) des Programmpakets *RepoTREND* (Nachfolger von EMOS) zur Berechnung der jährlichen Effektivdosen wurde in der ersten Version fertig gestellt. Die jährlichen Effektivdosen können je nach Benutzereinstellung entweder aus den Radionuklidkonzentrationen im Biosphärenwasser oder aus den Strömen der Radionuklide aus der Geo- in die Biosphäre berechnet werden. Folgende neue Funktionalitäten wurden im neuen Rechenmodul *BioTREND* realisiert:

- zwei zusätzliche Sicherheitsindikatoren – Radiotoxizitätskonzentrationen im Biosphärenwasser und Radiotoxizitätsströme aus der Geosphäre – können berechnet werden;
- mehrere Schnittstellen mit der Biosphäre können berücksichtigt werden;
- es werden zusätzlich Summendosen über jede Zerfallsreihe standardmäßig berechnet.

Beim Fernfeldmodul *GeoTREND-SP* (Nachfolger von CHET1 und CHET2) des Programms *RepoTREND* wurde das Konzept für die automatische Zeitschrittsteuerung um die Abhängigkeit der Zeitschrittlänge von der Halbwertszeit der Radionuklide verfeinert.

Eine verbesserte Version des Moduls *OutCollector* des statistischen Rahmens *Statist-Control* von *RepoTREND* wurde fertig gestellt. Die Aufgabe von *OutCollector* ist, die für die statistische Analyse erforderlichen Daten aus den Gesamtergebnissen zu extrahieren.

Die Entwicklung des Programms *emos2json* zur Konvertierung der Spezifikation eines Rechenlaufs aus dem alten ASCII-Format (mehrere Dateien) in das neue json-Format befindet sich in einer fortgeschrittenen Phase. Folgende Daten können mit der aktuellen Programmversion konvertiert werden:

- Spezifikation des Rechenmoduls CHET1 und ein Teil der Spezifikation des Nahfeldmoduls LOPOS,
- Spezifikation der Nuklide und Elemente.

AP4:

Es wurden die Anforderungen bezüglich der neuen Funktionalitäten in der grafischen Benutzerumgebung XENIA ausgearbeitet und in einem Lastenheft festgehalten.

Im Rahmen des Projekts soll weiterhin eine interaktive grafische Oberfläche zur Modellierung der Topologie eines Grubengebäudes sowie zur Darstellung der Rechenergebnisse entwickelt werden. Im Kontext dieses Arbeitspakets wurden die Bestandsaufnahme und die erste Anforderungsanalyse durchgeführt.

AP5:

Es wurden umfangreiche Tests zur Verifikation von *BioTREND* und von *Statist-Control* durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Weitere Fernfeldmodule – CHETMAD, TRAPIC, ein neues Modul für kolloid-getragenen Schadstofftransport durch ein geklüftet-poröses Medium – sollen an *RepoTREND* angebunden werden.

Des Weiteren soll die Analyse für das Nahfeldmodul *NaTREND* unter der Berücksichtigung des Zwei-Phasen-Flusses durchgeführt und das Konzept dafür entwickelt 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011
<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. Dabei wurden maximale Axialquelldrücke von 8 bis 10,5 MPa und maximale Radialverformungen von 0,5 % bis 6,5 % unter 100 % Luftfeuchtigkeit gemessen.
- Fünf einaxiale und drei triaxialen Kriechversuche sind bei unterschiedlichen Spannungen bislang über 1 bis 6 Jahre fortgeführt worden. Deutliche Kriechverformungen wurden beobachtet.
- Drei triaxialen Kriechversuche bei hohen Temperaturen von 28-110 °C sind bei Spannungen von  $\sigma_1/\sigma_3 = 15/1-3$  MPa über 2 bis 8 Monate fortgeführt worden. Deutliche thermische Kriechbeschleunigung wurde beobachtet.
- Die langzeitigen Messungen der Wasserpermeabilität an 5 geschädigten Tonsteinproben sind bei unterschiedlichen THM-Beanspruchungen über 3,5 Jahre fortgeführt worden. Dabei lässt sich eine deutliche Verheilung zur sehr niedrigen Permeabilitäten von  $10^{-19}$  -  $10^{-21}$  m<sup>2</sup> erkennen.
- An Tonsteinversatz bzw. Tonmischungen mit Sand, Kies, Splitt und Bentonite sind Kompaktionsversuche in Oedometer- und Triaxialzellen fortgeführt worden, wobei die Änderungen der Porosität bzw. Permeabilität gemessen wurden. Der Quellvermögen der kompaktierten Versatzmaterialien wurde durch Messung der Quelldruckaufbau während der Wassersättigung bestimmt.

#### *Bohrlochverformung:*

Dokumentation bestätigt generellen Trend (konstante Deformationsrate seit 05/2011 in beiden Messrichtungen), MP-Einbau 08/2011 realisiert, 2. Laststufe seit 12/2011, da sonst min. Messbereich im 01/2012 erreicht, Reaktion der MP dokumentiert.

Projektverlängerung mit der erweiterten Zielsetzung zur Entwicklung von Stoffmodellansätzen zur Beschreibung der Schädigung und Verheilung von Tongestein für weitere 4 Jahre bewilligt. Die Beteiligung der GRS am neuen ANDRA-Forschungsprogramm (2011 bis 2015) ist fest vereinbart worden (Teilnahme an TER/TED Experimenten im Bure-URL, laborative Untersuchungen, begleitende Simulation). Bereitstellung von Kernproben von ANDRA zugesagt. Fachliche und finanzielle Beteiligung der GRS an CODE\_BRIGHT-Konsortium vertraglich festgehalten. Fachliche Beratung zur Modellentwicklung zunächst ohne vertragliche Bindung von UPC zugesagt, Umsetzung von umfangreicheren Implementierungsarbeiten können allerdings nur entgeltlich von Konsortium durchgeführt werden. Auftragsvergabe erfolgt erst bei Bedarf.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des Bohrlochttests, Durchführung begleitender Modellierungen
- Weiterführung der Laborversuche am Tonstein
- Weiterführung der Kompaktions-/ Permeabilitätsversuche am Tonversatzmaterial
- Zwischenbericht für den Zeitraum von 05.2007 bis 12.2011
- Vorbereitung der Modellentwicklung
- Durchführung begleitender Modellierungen zu TER/TED Experimenten

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang C.-L.: Self-sealing of fractures in clay host rock for disposal of radioactive waste, the International Workshop on Radioactive Waste Disposal in Beijing, 16.10.2011

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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:

- Bau und Weiterentwicklung der Basisstation für den Empfang der Daten der kabellosen Sensoren
- Auswahl und Beschaffung Netzwerkanalysator
- Auswahl, Anschaffung und Installation der erforderlichen Antenne für Netzwerkgenerator

Tests: In-situ-Arbeiten:

- In-situ-Leistungsmessungen zur Beurteilung der Sendeleistung der kabellosen Sensoren mit neuem Netzwerkanalysator,
- Auswertung der In-situ-Leistungsmessungen und vergleichende Gegenüberstellung der Messungen vom 15.07.2011 und 24.11.2011,
- 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 Messungen bestätigen die Eignung des Messsystems zur Ermittlung der oberflächennahen Gebirgspermeabilität. Die standortabhängig ermittelten Besonderheiten erfordern eine separate Untersuchung,
- Vorbereitung und Realisierung einer Publikation: Voigt, H.-D; Grafe, F.; Wilsnack, Th. (2011): Entwicklung eines Oberflächenpackers zur Bestimmung der Permeabilität von Salz- und Festgestein. In: Kali- und Steinsalz (3) S. 40-46.

Fortschreiben des Berichts zum Vorhaben.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Voigt, H.-D; Grafe, F.; Wilsnack, Th. (2011): Entwicklung eines Oberflächenpackers zur Bestimmung der Permeabilität von Salz- und Festgestein. In: Kali- und Steinsalz (3) S. 40-46.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 von zwei weiteren Arbeitsgesprächen mit FZD in Leipzig und Braunschweig.
- Ableitung für die Oberflächenkomplexmodellierung für die Sorption von von Cäsium und Strontium an Muskovit und Orthoklas mit dem Programm UCODE gekoppelt mit PhreeqC. Weitergabe der Daten an HZDR zur Berechnung der  $K_d$ -Wolke.
- Überprüfung der verwendeten Oberflächenkomplexmodelle und des Bottom-Up Ansatzes anhand von Modellrechnungen für aus der Literatur verfügbare Batch-Experimente zur Sorption von Uran an Feinsanden.

AP2:

- Fertigstellung des konzeptionellen Modells für die Variation der Einflussgrößen, deren Interaktion und Transport in  $r^3t$ .
- Überprüfung der in  $d^3f$  und  $r^3t$  neu implementierten Optionen zur Beschreibung der Klimaübergänge und Durchführung erster Testrechnungen zur Grundwasserströmung während Klimaübergängen.

AP3:

- Vorbereitung und teilweise Durchführung von vergleichenden Strömungs- und Transportrechnungen für Klimaübergänge für das Deckgebirge Gorleben.

AP4:

- Erstellung eines Papers und Präsentation der Ergebnisse für die GWC-Konferenz vom 19. bis 21.9.2011 in Pretoria, Südafrika.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Abschluss der Implementierung des Konzepts zur Berücksichtigung geochemischer Prozesse in  $r^3t$  und Einbau des  $K_d$ -Abrufs durch das Steinbeis-Institut.

AP3:

- Abschluss von Strömungs- und Transportrechnungen mit  $d^3f$  und dem modifizierten Code  $r^3t$ . Vergleich der Rechnungen mit konstanten  $K_d$ -Werten und Smart  $K_d$ -Konzept.

AP4:

- Fertigstellung des Abschlussberichtes.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J.; Noseck., U; Schneider A.; Stockmann, M., The Impact of Climate Transitions on the Radionuclide Transport through a Sedimentary Aquifer, International Conference on Groundwater Our Source of Security in an Uncertain Future, Biennial Conference of GWD-GSSA and IAH, September 19th to 21st 2011, Pretoria, Südafrika, ISBN 978-0-620-50725-7

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 der Radionuklide  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Am}^{3+}$ ,  $\text{Th}^{4+}$ ,  $\text{NpO}_2^+$ ,  $\text{UO}_2^{2+}$ ,  $\text{SeO}_4^{2-}$  sowie  $\text{Ca}^{2+}$  an Quarz, Feldspäte, Glimmer, Goethit, Gibbsite, 2- und 3-Schicht-Tonminerale einschließlich deren Bandbreiten sowie Normierung auf unendliche Verdünnung und Bindungsstellendichte von  $2,31 \text{ nm}^{-2}$ .
- Aktualisierung der projektspezif. thermodyn. ESTRAL-Datenbank mit Komplexbildungskonstanten und deren Reaktionsgleichungen für o.g. Mineral/Sorbent-Paare.
- Fertigstellung des PhreeqC-Inputfiles zur Berechnung der Verteilungskoeffizienten ( $K_d$ s) für o.g. Radionuklide für den oberen Grundwasserleiter (oGWL).
- Erweiterung der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen (UA/SA):  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Am}^{3+}$ ,  $\text{NpO}_2^+$ ,  $\text{UO}_2^{2+}$ ,  $\text{SeO}_4^{2-}$  - Sorption an Mineralphasen des oGWL.
- Erzeugung von  $K_d$ -Matrizen mittels Kopplung von SimLab, UCODE und PhreeqC für o.g. erweitertes Testbeispiel bei erweiterter Parametervariation (8 Größenschritte pro Dimension  $E_i$ ). Erzeugte  $K_d$ -Wolke enthält jetzt 262.144 Parameterkombinationen.

#### AP2:

- Aktualisierung des konzeptionellen Modells zur Variation der Einflussgrößen pH, DIC,  $\text{pCO}_2$ , I, [Al], [Ca] in r<sup>3</sup>t.
- Erarbeitung eines Konzeptes zur Ablage und Abfrage mehrdimensionaler, äquidistanter Tabellen von smart  $K_d$ -Werten.

#### AP4:

- Überprüfung und Aktualisierung folgender Dokumente:
  - 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. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1:

- Einbeziehung von  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$  und  $\text{SiO}_3^{2-}$  in  $K_d$ -Berechnung
- Erweiterung der UA/SA und Komplettierung der Erzeugung der  $K_d$ -Matrizen
- Berechnung der Verteilungskoeffizienten ( $K_d$ s) für den unteren Grundwasserleiter (uGWL) und Grundwassergeringleiter (GWGL)

#### AP2:

- Überprüfung des Modells zur Variation der chemischen Stoffgrößen im r<sup>3</sup>t-Code

#### AP4:

- Aktualisierung aller Arbeitsdokumente, Erstellung Abschlussbericht

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011
<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:

- IGSC: Erstellung eines Entwurfs zum NEA-Statusbericht über Indikatoren. Teilnahme an der jährlichen IGSC-Sitzung mit Leitung der Topical Session „Relevance of gases for the post-closure safety case of DGR for HLW and spent fuel“.



- Teilnahme am US-DOE Workshop mit Beiträgen zum Safety Case und zu Analoga für Endlager im Salinar.
- Erstellung eines Berichtsentwurfs zu mikrobiellen Prozessen und deren Auswirkungen auf die Langzeitsicherheit von Endlagern in Tonformationen.
- Ermittlung von Radionuklidinventaren für verglaste HAW-Abfälle aus La Hague.

TA2:

- Grundwasserprobenahme am Standort Ruprechtov und weitere Analyse der durch den Kaolinabbau freigelegten, Uran-führenden Horizonte.
- Modellrechnungen zu Biosphärensystemen für veränderte klimatische Bedingungen: Erarbeitung eines Modells zur Verlandung von Seen.
- Weiterführung der Aufsättigungsexperimente. Datenanalyse zur Prognose der erforderlichen Dauer der Aufsättigungsexperimente. Teilnahme an der Task Force on EBS Phase 2 in Toronto.
- Erstellung eines Beitrags für die SaltMech7 mit den aktuellen Ergebnissen zu den Untersuchungen zum selbstheilenden Versatz (SVV) am Standort Teutschenthal.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung des RWMC.
- 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 und Erstellung des Abschlussberichts.
- 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.

Erstellung des zusammenfassenden Abschlussberichts des Vorhabens.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Noseck, U.; Tullborg, E.; Suksi, J.; Laaksoharju, M.; Havlová, V.; Denecke, M.A.; Buckau, G.: Real system analysis / natural analogues. Applied Geochemistry 27 (2012) 490–500.

Herbert, H.-J.; Meyer, L.; Hertel, U.: SVV a self-sealing material for technical barriers in salt mines – experimental results. Proceedings SaltMech7, 16.-19.April 2012, Paris, 8p.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 21. November 2011 fand in Jena das 5. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten.

Für die aktuell laufende Task 8c der Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes (TF GWFTS) von SKB wurde ein Modell erstellt, das nur die wenigen explizit bekannten „deterministischen“ Klüfte enthält. In das Modell sind weiterhin technische Bauwerke, wie zwei Tunnel, 2 Bohrungen und 5 kleinere Sondierungsbohrlöcher, in das Modell integriert. Die Hintergrundklüfte, die SKB in Form statistischer Verteilungsparameter zur Verfügung stellt, werden derzeit noch durch ein homogenes Ersatzmedium repräsentiert.

Die Grundwasserströmung im Modell wurde simuliert. Aus Messungen ist bekannt, dass die Wasserschüttungen in die fünf Sondierungsbohrlöcher räumlich stark variieren. Dem Vorschlag in der Task-Beschreibung folgend wurde versucht, die Unterschiede in den Wasserzutritten in diese Bohrungen mit Hilfe von zwei willkürlich gewählten, zusätzlichen Klüften, die die Bohrungen schneiden, nachzubilden.

Das Modell liefert bisher insgesamt zu hohe Ausflüsse in Strecken und Bohrungen, was aber eher auf unzutreffende Randbedingungen und/oder Permeabilitätswerte bei den Klüften zurückzuführen scheint als auf die noch ausstehende Behandlung der Hintergrundklüfte. Hier sind weitere Parametervariationen notwendig. Durch die zusätzlich in das Modell aufgenommenen Klüfte konnten die in den Sondierungsbohrungen gemessenen unterschiedlichen Zuflussraten bisher nicht befriedigend reproduziert werden.

Die Beschreibung des Testfalls Task 6c der TF GWFTS und die Aufbereitung der Geometrie- und Hydraulikdaten wurde fortgesetzt. Die Zusammenstellung der Modelldaten für die Strömung in den deterministischen Klüften ist abgeschlossen. Außerdem wurde ein Tracertest in diesem Kluftsystem mit unterschiedlich stark sorbierenden Tracern beschrieben.

### 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.
- Das Modell zu Task 8c soll anhand der gemessenen Zuflussraten kalibriert werden.
- Mit der Modellierung eines 2d-Testfalls wird begonnen.

Das nächste Statusgespräch wird am 20. April 2012 stattfinden.

### 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 548.396,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Wittum	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Das Simulationssystem UG ist weltweit über 350-mal lizenziert. Diese Nutzergemeinde ist eine ausgezeichnete Plattform zur Verbreitung und Verwertung der Projektergebnisse.

Es erfolgt eine Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS), Braunschweig, dem Department für Umweltinformatik des Helmholtz-Zentrums für Umweltforschung (UFZ), Leipzig und dem Institut für Geowissenschaften der Universität Jena.

Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der beiden BMBF-Projekte vom 01.10.1994 – 31.08.1998 (FKZ 02 C 0254 6 und 02 C 0465 0) und vom 01.10.1998 – 31.12.2003 (FKZ 02 E 9148 2).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP3: Entwicklung eines numerischen Lösers für das mesoskalige Referenzmodell
- AP5: Adaptiver numerischer Mehrskalnlöser 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 Lösers für das mesoskalige Referenzmodell
- AP5: Adaptiver numerischer Mehrskalnlöser für das Gesamtsystem und Implementierung in  $d^3f$  und  $r^3t$

Die dimensionsadaptive Behandlung der Klüfte steht nun auch für den 3-dimensionalen Fall in  $d^3f$  zur Verfügung und es wurden damit erste Testrechnungen durchgeführt. Um auch auf einem 3-dimensionalen Gebiet Vergleiche zwischen niederdimensionalen und volldimensionalen Simulationen durchführen zu können, wurde das Vergleichsmodul, das im volldimensionalen Fall die Lösung über die Kluftbreite integriert um einen vergleichbaren Wert zum Ergebnis der niederdimensionalen Rechnung zu liefern, für den 3-dimensionalen Fall erweitert. Erste Vergleiche zeigten für dünne Klüfte gute Übereinstimmungen, jedoch für dickere Klüfte wesentliche Abweichungen, die viel größer als im 2-dimensionalen Fall sind.

Zusätzlich wurden Überlegungen zum Modell angestellt: So ist es bei den großen Geschwindigkeiten, die in den Klüften auftreten können, stets eine Frage, ob die Gültigkeit des Darcy-Gesetzes angenommen werden darf. Um dies näher zu untersuchen und auch die Fälle abzudecken, in denen das Darcy-Gesetz nicht mehr gültig ist, wurde damit begonnen eine Forchheimer-Korrektur für die Geschwindigkeit in  $d^3f$  einzubauen. Betrachtungen der Forchheimer-Gleichung zeigten, dass die Korrektur eine im Gegensatz zur Darcy-Geschwindigkeit kleinere Geschwindigkeit liefert.

## 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." Accepted for publication in Journal of Porous Media, 2011.

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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Frankfurt (Prof. Wittum), dem UFZ Leipzig (Prof. Kolditz) und der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit durchgeführt.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

AP4: Konzepte und Kriterien für die Mehrskaladaptivität

AP6: Niederdimensionale Modellierung von Heterogenitäten und Klüften

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

*Erzeugung der subskaligen Heterogenitäten (Bearbeiter: Dr. Falk Heße):*

Die Arbeiten im Berichtszeitraum beschäftigten sich mit der stochastischen Generierung subskaliger Heterogenitäten geklüfteter Gesteine. Wir haben dabei zwei Methoden zur Erzeugung von Zufallsfeldern mit spezieller Korrelationsfunktion untersucht und verglichen: (i) die so genannte Randomization Methode[1] sowie (ii) die Fourier-Wavelet Methode[2]. Die Ergebnisse zeigen, dass für ca. 6-9 Größenordnungen beide Methoden die vorgegebene Korrelationsfunktion gut reproduzieren können. Aufgrund ihrer einfacheren Implementierung ist die Randomization Methode

hier zu bevorzugen. Soll die Korrelationsfunktion über mehrere Größenordnungen (9-12) exakt reproduziert werden, muss die Fourier-Wavelet Methode verwendet werden. Des Weiteren zeigten die Untersuchungen, dass die Gaussianität der erzeugten Zufallsfelder im Fall der Fourier-Wavelet Methode stets besser war als die Randomization Methode.

Damit steht nun der Generator in 2D zur Erzeugung subskaliger Heterogenitäten zur Verfügung. Zusatz: Aufgrund der Geburt seines Kindes befand sich Falk Heße in der zweiten Hälfte des Berichtszeitraumes in Elternzeit. Während dieses Zeitraumes wurden keine Arbeiten an dem A-DuR-Projekt durchgeführt.

*Skalierung (Filtermethode; Bearbeiterin: Katharina Ross):*

Im Berichtszeitraum wurden die bislang hergeleiteten Ausdrücke für die Dispersionskoeffizienten für Medien ohne Skalenseparation (unendliche Korrelationslänge der Heterogenitäten) durch die Anwendung einer speziellen Filtermethode deutlich verbessert, da sich bei den bisherigen Koeffizienten zeigte, dass in der longitudinalen Komponente die Makrodispersion (*D ensemble*) und die effektive Dispersion (*D effektiv*) zwar für alle Zeitskalen unterschiedlich sind, aber in beiden Komponenten wird die reale Dispersion auf Grund der angewandten Skalierungsmethode noch überschätzt.

Da die longitudinale Komponente bei der Beschreibung der Dispersion dominierend ist, sollten diese Koeffizienten verbessert werden. Deswegen benutzten wir die Filtermethode Coarse Graining (CG), die flexibler ist bei der Anwendung auf eine beliebige Skala:

- In Medien mit einer *endlichen* Korrelationslänge der Heterogenitäten zeigte sich schon bei einer sehr geringen Filtergröße ein sichtbarer cutoff-Effekt, der aber für große Zeiten verschwindet. Hier war es sogar so, dass für unendliche Zeiten die Makrodispersion, die effektive Dispersion und die mittels Coarse Graining erzielte Dispersion denselben asymptotischen Wert annehmen.
- Dies war in Medien mit einer *unendlichen* Korrelationslänge jedoch nicht der Fall. Hier zeigte sich, dass der cutoff-Effekt bewirkt, dass die bisher stark überschätzte Makrodispersion nun identisch mit der effektiven Dispersion (ohne CG) ist. Wird das CG auf die effektive Dispersion angewandt, so zeigt sich ein sichtbarer cutoff-Effekt für alle Zeiten und man erhält auf diese Weise einen sehr genauen Wert für die reale Dispersion. Damit sind die Arbeiten zu AP2 - Skalierung (Filtermethode) abgeschlossen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Erweiterung der Generatoren auf 3-dimensionale Felder (AP2 – subskalige Heterogenitäten)
- Untersuchung der Konnektivität der erzeugten Zufallsfelder und Ableitung hydrologischer Transporteigenschaften (AP2 – subskalige Heterogenitäten)
- einfache Strömungs- und Simulationsberechnungen in 2-D (AP2 –Modellierung von Strömung und Transport auf der feinen Skala)

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vortrag bei der ModelCARE2011 in Leipzig.

[1] Sabelfeld, K. (1991): Monte Carlo Methods, Springer-Verlag.

[2] Elliot, FW/Hornthrop, DJ/Majda AJ. (1997): A Fourier-Wavelet Monte Carlo method for fractal random fields, Journal of Computational Physics, 132 : S. 384 - 408.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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

Entsprechend der Planung im letzten Bericht stand in dieser Projektphase die Modellierung realer Kluftnetzwerkmodelle im Vordergrund. Hierfür wurden zwei neue Testbeispiele ADur10 (Kluftnetzwerk) und ADur11 (Kluftnetzwerk mit Matrixdiffusion) entwickelt, die auf dem Grimsel-10-Kluftnetzwerk basieren (Kosakowski 2007). In beiden Benchmarks wurde der Einfluss der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung auf die numerische Genauigkeit untersucht. Der zweite Fokus entsprechend der Planung lag in der Weiterentwicklung der Partikel-Methode (RWPT), die Vorteile für die Transportsimulation in extrem heterogenen Medien (wie Kluftgesteine) aufweist. Dabei konnten zunächst Fortschritte in der 3D Partikel-Simulation in homogenen porösen Medien erreicht und auf einer internationalen Konferenz (PARTICLE-2011) vorgestellt werden (Sun et al. 2011).

#### AP9: Benchmarkmarking

Neben den o. g. für die Unsicherheitsanalyse (ADur10/11) wurden weitere Benchmarks für die Prozessanalyse entwickelt. ADur12 ist ein 2D-Testbeispiel für Transportprozesse auf der Porenskala mit der RWPT Methode. ADur13 ist ein 2D-Testbeispiel für Strömungsprozesse in einem Kluft-Matrixsystem, das mit einer analytischen Lösung verifiziert wurde (Watanabe 2012). Damit stehen nunmehr 13 Testbeispiele zur Verfügung, die Strömungs-, Deformations- und Transport-(HMC) Prozesse in Einzelklüften und Kluftsystemen abbilden (Taron et al. 2012). Das A-DuR Benchmarking-Konzept wurde weiter konsequent systematisiert und hat Eingang in eine Buchpublikation für thermo-hydro-mechanisch-chemische Prozesssimulationen gefunden (Kolditz et al. 2012). Die ADuR Testbeispiele sind auf dem Projektserver abgelegt, weitere Benchmarks sind über das Internet verfügbar.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Projektphase sind folgende Arbeiten geplant:

- Erweiterung des RWPT-Verfahrens für Prozesssimulationen auf der Porenskala (AP8),
- Simulation nichtlinearer Strömungsprozesse nach der Darcy-Forchheimer-Gleichung (AP9),
- Parallelisierung des RWPT-Verfahrens zur Effizienzsteigerung und Vorbereitung von Partikelsimulationen in Kluftnetzwerken (AP8),
- Entwicklung weiterer Testbeispiele für den Vergleich mit r3t Simulationen (AP9).

### 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.

Kosakowski G. Transport in fractured media: Concepts, Models, and Applications. Habilitation: Geo-Hydrology and HydroInformatics, Center for Applied Geosciences, Tübingen University, 2007.

Sun YY, Park C-H, Wang W, Kolditz O (2011): Simulation of solute transport in a 3D porous medium using random-walk particle tracking method. II International Conference on Particle-based Methods - Fundamentals and Applications PARTICLES 2011 E. Onate and D.R.J. Owen (Eds)

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

Watanabe N (2012): Finite element method for coupled thermo-hydro-mechanical processes in discretely fractured and non-fractured porous media. Dissertationsschrift, eingereicht an der Fakultät für Forst-, Geo- und Hydrowissenschaften an der Technischen Universität Dresden.

<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 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 Hintergrundsätze
- Entwicklung einer Programmgruppe zur Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse für geochemische Modellierungen

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Untersuchung der Löslichkeit und Bestimmung der Aktivitätskoeffizienten von  $H_2S$  und Hydrogensulfid in salinaren Lösungen bei 15 - 40 °C. Untersuchung der thermodynamischen Stabilität ausgewählter Schwermetallsulfide und –sulfidokomplexe.
- Kritische Literaturlauswertung zu kolligativen Eigenschaften von Hintergrundsätzen (Nitraten und Perchloraten 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  $H_2S$  in salinaren Lösungen wurde weitergeführt. Neben der bisherigen Messmethode wurde zusätzlich ein weiteres, leicht modifiziertes Messverfahren angewendet. Hierbei wurden vorab hergestellte Salzlösungen bekannter Konzentration in die Versuchsgefäße gegeben und anschließend diese nacheinander bei unterschiedlichen Temperaturen (40 °C, 25 °C, 15 °C) äquilibriert, ohne dass dieses System einer erneuten Störung (Zugabe von Wasser) ausgesetzt war. Die mit dem modifizierten Messverfahren gewonnenen Messergebnisse sind mit den Ergebnissen der bisherigen Messmethode vergleichbar und ergänzen die bestehenden Datensätze. Das leicht modifizierte Messverfahren wurde

sowohl auf Sulfatlösungen ( $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{MgSO}_4$ ), als auch auf Chloridsalzlösungen ( $\text{NaCl}$ ,  $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{MgCl}_2$ ) angewendet. Insgesamt ergeben sich daraus für die drei genannten Temperaturen für alle Salze nahezu vollständige Datenreihen, deren Auswertungen eine Aussage über die Löslichkeit von  $\text{H}_2\text{S}$  in dem jeweiligen System zulassen.

Die Untersuchung des Dampfdrucks von Hintergrundsallösungen mit Hilfe der neuen Dampfdruckapparat konnten nicht wie geplant fortgesetzt werden, da es zu Schäden an Temperatur- und Drucksensoren kam.

Auf Basis des GRS-Programms EQBlitz wurde eine Anbindung an den geochemischen Rechencode Geochemist's Workbench (GWB) erstellt. Diese erlaubt es GWB-Datenbasen einzulesen, und ein für die Datenbasis kompatibles Rechenproblem zu definieren. Ein Starter-Modul übergibt das Rechenproblem an Geochemist's Workbench und triggert dort eine Auswertung. Falls für eine der Eingabegrößen (Konzentrationen, Feststoffmengen) Unsicherheiten definiert sind, erfolgt ein Auswürfeln und Sätze variiertes Eingabefaktoren werden als separate Rechnungen nacheinander von GWB durchgeführt.

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

- Abschluss der Messungen der Löslichkeit von  $\text{H}_2\text{S}$  in einfachen Mischsystemen bei 15 °C, 25 °C und 40 °C ( $\text{NaCl-MgCl}_2\text{-H}_2\text{O}$  und  $\text{MgCl}_2\text{-MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ )
- Aufbau und Test einer Messapparatur, die die Bestimmung von Hydrogensulfid-Aktivitäten in ozeanischen Salzlösungen ermöglicht - ggf. Erprobung einer alternativen Messmethode
- Messungen des Dampfdrucks über relevante Hintergrundsallösungen
- Weiterentwicklung des Werkzeugs zur Planung und Durchführung von Unsicherheitsanalysen von geochemischen Modellierungen auf der Basis von Geochemist's Workbench. Entwicklung eines automatischen Werkzeugs zur Auswertung von Mehrfachrechnungen

#### **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 31.08.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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

- Literaturrecherche (Actinide + Ton-relevante Mikroorganismen; Biodiversität)
- Anreicherungsexperimente (R2A- und Nitrite-Reduzierer-Medium) zur Isolierung Opalinus-Ton spezifischer Bakterien aus Porenwasser; 16S rRNA Genanalyse der Isolate; Fortsetzung der Kultivierungsversuche der Ton-Isolate (*Sporomusa* spp. und *Paenibacillus* spp.); Kultivierung von *Paenibacillus wynnii* (Referenzstamm)
- Start Untersuchungen zur Wechselwirkung von *Paenibacillus* sp. mit U(VI) (Titration, TRLFS); U(VI) Untersuchungen mit *Paenibacillus wynnii* (TRLFS)
- Fortsetzung der U(VI) Untersuchungen mit *P. fluorescens*-Biofilmen: Anfärbung der atmungsaktiven Zellen, thermodynamische Berechnung der möglichen U-Spezies im U-kontaminierten Nährmedium
- Untersuchungen zur Wechselwirkung des Ton-Isolates *Sporomusa* sp. mit Eu(III) (TRLFS)
- Präparation der Pu-Stammlösung
- Erste Auswertungen der XAS-Messungen zur Strukturcharakterisierung des mikrobiell gebunden U(VI)

(*P. fluorescens*, *Sporomusa* sp., *Paenibacillus* sp. und *P. fluorescens*-Biofilm) (ROBL: 22.06.-28.06.2011)

- Teilnahme an der internationalen Konferenz Migration'11 in Peking (18.-23.09.2011)

**Ergebnisse AP1 & AP2:** Auswertung von Anreicherungsexperimenten (R2A- und Nitrite-Reduzierer-Medium) zur Isolierung Opalinus-Ton spezifischer Bakterien aus Porenwasser. Dabei wurden auf 50 % R2A Medium Vertreter von Betaproteobakterien (*Acidovorax* sp. und *Cupriavidus campinensis* strain WS2 jeweils 99 % Ähnlichkeit der 16S rRNA Gene) isoliert. Auf dem Nitrite-Reduzierer Medium konnten nur Vertreter von Gammaproteobakterien insbesondere *Pseudomonas* sp. angereichert werden.

**Ergebnisse AP3 & AP4: U(VI) und *Paenibacillus* sp. (Tonisolat):** Durch Titration Surface Site Densities (in mmol/g) und entsprechende pKs-Werte sowie U(VI)-Spezies auf Zelloberfläche ermittelt. TRLFS: zellgebundenes U(VI) weist Maximum von 519 nm bei pH 7 auf → wie bei *P. fluorescens*. Bei pH 4 Maxima bei 481, 494, 515, 539, 564 nm → Anbindung über Carboxyl-/ Phosphoryl-Gruppen. **U(VI) und *P. wynnii* (Referenzstamm):** TRLFS: Lumineszenzmaxima und -lebensdauern bei pH 7 wie bei Tonisolat → ähnliche Anbindung des U(VI) an Zelle wie bei Tonisolat u. *P. fluorescens*. Bei pH 4 Unterschiede: sämtliche Banden 1-2 nm rotverschoben. **Eu(III) und *Sporomusa* sp.:** intensive WW zwischen pH 2 und 8; ~50 % des Eu(III) werden mit 0.01 M EDTA wieder abgelöst (Biosorption); irreversibel gebundenes Eu(III); Bestätigung der Ergebnisse im System Cm(III)– *Sporomusa*.

**Erste ROBL-Messungen:** U(VI) + *P. fluorescens*: In Abhängigkeit von verfügbarer  $[\text{PO}_4^{3-}]$  u. metabolischer Aktivität Bldg. einer hoch-kristallinen meta-Autunit-artigen Struktur. Ohne zusätzliches  $\text{PO}_4^{3-}$  dominiert Biosorption (somit TRLFS-Ergebnisse bestätigt). U(VI) + *Paenibacillus* sp.: Polynuklearer U(VI)-Komplex auf Zelloberfläche bei pH 7; bei pH 4 reine Biosorption via Carboxyl-/ Phosphoryl-Gruppen vermutet. U(VI) + *Sporomusa* sp.: Nachweis von U(IV) bei pH 7; bei pH 4 Biosorption an organischen Phosphat bzw. Carboxyl-Gruppen. Nachweis erhöhter Atmungsaktivität der Zellen im *P. fluorescens* Biofilm durch CTC/DAPI-Färbung nach U Zugabe; Bestätigung der erhöhten O<sub>2</sub>-Zehrung nach Mikrosensormessungen; durch thermodynamische Berechnung der Analysendaten des U-kontaminierten Nährmediums Nachweis der Bildung einer wässrigen  $\text{UO}_2(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$  Spezies, während erste Auswertungen der EXAFS-Spektren auf die Bildung von meta-Autunit ( $\text{Ca}[\text{UO}_2]_2[\text{PO}_4]_2 \cdot 10\text{-}12\text{H}_2\text{O}$ ) im Biofilm hinweisen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der Diversitätsuntersuchungen; DNA Isolierung vom Opalinus-Ton Porenwasser; Erstellung und Auswertung einer 16S rRNA Klonbibliothek; Fortsetzung der Kultivierung der Ton-Isolate
- Detaillierte Untersuchungen zur Wechselwirkung von *Sporomusa* sp. mit U(VI); Vertiefung der Untersuchungen von *Paenibacillus* sp. mit U(VI) und Beginn der Untersuchungen mit Cm(III); Fortsetzung der potentiometrischen Titrations mit *Sporomusa* sp.; Untersuchungen zur Wechselwirkung von Eu(III) mit *P. fluorescens*
- Start Untersuchungen von Pu mit *P. fluorescens* und Beginn der Pu *Sporomusa* sp. Experimente
- Fortsetzung der Auswertungen der ROBL-Messproben 2011
- Beginn Untersuchungen zur Eu(III)-Wechselwirkung mit *P. fluorescens* Biofilmen; Mikrosensormessungen (O<sub>2</sub>, pH, E<sub>h</sub>); TEM-Untersuchungen an Biofilmen nach Zugabe von U(VI) und Eu(III)
- Vervollständigung der Datenbank Wechselwirkung von Mikroorganismen mit Actiniden
- Teilnahme am Mont Terri Technical Meeting TM-30 in St Ursanne, 08./09.02.2012 mit Beitrag (Schweiz)
- Geplante Teilnahme mit Beitrag an der internationalen Konferenz Plutonium Futures 2012, 15.-20.07.2012, University of Cambridge (UK)

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zwei Posterbeiträge auf der 13th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere 2011, 18.-23.09.2011, Beijing, PR China

<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 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 10.10.2011 fand ein Arbeitstreffen in Antwerpen statt, das vom Projektpartner UA, der Universität Antwerpen, ausgerichtet wurde. Im Zuge dieses Treffens wurde diskutiert und festgelegt, wie die verschiedenen Arbeiten des Projektes so zusammengeführt werden können, dass am Ende ein internationales „Reference Framework“ (Rahmenrichtlinie) für eine Endlagerüberwachung abgeleitet und präsentiert werden kann. Am 15.11.2011 fand der sechste interne Workshop im Rahmen dieses Vorhabens in Amsterdam-Zaandam statt. Der Workshop wurde vom Projektpartner NRG ausgerichtet. Im Rahmen dieses Workshops wurden die Arbeiten zu den Fallstudien vorgestellt und diskutiert und die weiteren Arbeiten abgestimmt.

AP2:

Ausgangspunkt für die Identifizierung überwachungsrelevanter Prozesse in der Fallstudie Salz war das aktuelle Sicherheitsnachweiskonzept, das im Rahmen des FuE-Vorhabens ISIBEL entwickelt worden ist. Es wurden die als relevant identifizierten Prozesse und Messgrößen den Komponenten des Sicherheitsnachweiskonzeptes zugeordnet, in denen sie eine signifikante Rolle spielen.

AP3:

Für die betrachtete Beispielvariante der vertikalen Bohrlochlagerung wurden Überwachungsmöglichkeiten auf Basis von Monitoring-Modulen aufgezeigt. Empfehlungen für einen möglichen Einsatz wurden gegeben, die berücksichtigen, dass die geotechnischen Barrieren zusammen mit dem einschlusswirksamen Gebirgsbereich das Kernstück des Sicherheitsnachweises darstellen und in keinsten Weise durch technische Installationen in ihrer Wirkung beeinträchtigt werden dürfen. Neben der Aufgabe, die eigentlichen Messinformation zu gewinnen, ist es entscheidend, inwieweit man in der Lage ist, die aufgezeichneten Informationen aus dem Endlager zur Tagesoberfläche zu übertragen. Es wurde eruiert und aufgezeigt, dass einige wenige erfolgreich getestete Systeme zur Datenübertragung durch festes Gestein weltweit existieren. Inwieweit Überwachungsinformationen erfolgreich in Steinsalzformationen kabellos übermittelt werden können, kann nur durch in-situ Versuche ermittelt werden. Bezüglich der langfristig zu sichernden autarken Stromversorgung von Messsystemen gibt es aus jetziger Sicht zwei Möglichkeiten. Die erste besteht darin, thermoelektrische Isotopengeneratoren zu verwenden, die ihre dauerhaften Leistungsfähigkeiten in NASA-Weltraumsonden bereits unter Beweis gestellt haben. Die zweite Möglichkeit besteht in der Anwendung der Betavoltaik-Technologie.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Inhaltliche Vorbereitung eines weiteren projektinternen Workshops, der von Posiva in Turku, Finnland ausgerichtet wird.

AP2: Fortführung der Fallstudien zur langzeitlichen Überwachung eines Endlagers.

AP4: Beginn der Arbeiten in diesem AP.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10649</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2009 bis 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 975.614,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Bollingerfehr

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die hydraulischen Eigenschaften der Verschlussbauwerke in einem HAW-Endlager sind wesentlich für die zuverlässig dauerhafte Isolation der eingelagerten Schadstoffe von der Biosphäre. Erfahrungen aus bestehenden Untertagedeponien im Salinar belegen, dass die integrale Permeabilität eines Verschlussbauwerks bei sachgemäßer Ausführung durch die Auflockerungszone (ALZ) im konturnahen Streckenbereich bestimmt wird. Verheilungsprozesse sind in der ALZ zwar zu erwarten, jedoch lassen sich diese gegenwärtig weder hinsichtlich ihrer Geschwindigkeit noch in ihrer Auswirkung auf die Permeabilität belastbar quantifizieren. Die Reversibilität der Riss-schließung lässt sich ferner unter ungünstigen Bedingungen, insbesondere bei hydraulischen Beanspruchungen nicht ausschließen, so dass die Abnahme der Permeabilität aufgrund des Verheilungsprozesses letztlich nicht hinreichend prognostizierbar ist. Eine Schließung dieser Erkenntnislücke stößt auf erhebliche praktische Probleme. Da die Verheilungsprozesse relativ zur Dauer der Betriebsphase über äußerst lange Zeiträume ablaufen, wird der Verifizierung einschlägiger Prozesse eine belastbare Grundlage entzogen. Daher ist eine qualitätsgesicherte Vergütung der ALZ durch Injektionen von Vorteil, um den Anforderungen an die Abdichtung nachweislich zu genügen.

Ziel des Vorhabens ist es, ein Nachweisverfahren für die Abdichtung der an ein Verschlussbauwerk anliegenden Auflockerungszone in einem HAW-Endlager zu entwickeln. Das Vorhaben beinhaltet technische und konzeptionelle Aspekte zur Injektion von Wasserglas in die ALZ im Salinar. Durch In-situ-Injektionen und Untersuchungen zur mechanischen und chemischen Stabilität von Salz-Wasserglas-Systemen soll die technische Eignung des Verfahrens für den Einsatz im Endlagerbau nachgewiesen werden. Die Modellierung der injektionsbedingten Änderung von Permeabilitätseigenschaften, insbesondere Konnektivitäten, und ihr Einfluss auf die Permeationsprozesse durch die ALZ soll die Grundlage für den bautechnischen Nachweis an die Anforderungen der Vergütungsmaßnahme liefern.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Implementierung einer Simulationsumgebung für Injektionen in die ALZ
- AP2: Versuchsprogramm zur Untersuchung von Wasserglas als Injektionsmittel im Steinsalz
- AP3: Durchführung von Injektionen und Datengewinnung
- AP4: Simulation der Injektion von Wasserglas in ein reales Kluftsystem
- AP5: Aufbereitung der Ergebnisse zu bautechnischen Empfehlungen
- AP6: Abschlussbericht



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

AP1:

Die Ergebnisse zur Nachrechnungen von Laborversuchen zur Kalibrierung relevanter mechanischer Mikroparameter wurden im Abschlussbericht dokumentiert ebenso wie die Berechnungsergebnisse zur Kalibrierung der hydraulischen Mikroparameter (Rissöffnungsweiten). Abgeschlossen wurden auch die Arbeiten im AP1 mit hydraulisch-mechanisch gekoppelten Modellierungen der in der ALZ herrschenden Schädigungsprozesse.

AP2:

Die Untersuchungsergebnisse zur Langzeitbeständigkeit von Silikagel in salinaren Lösungen wurden ausgewertet und im Abschlussbericht dokumentiert. Die Literaturrecherche zur Übertragbarkeit auf natürliche geochemische Prozesse wurde ebenso abgeschlossen und die Ergebnisse dokumentiert.

AP3:

Das Untersuchungsprogramm für die in-situ-Injektionsarbeiten sowie von gezielten Laboruntersuchungen an Kernen wurde abgeschlossen und ausgewertet. Die Messdaten und Ergebnisse sind in Berichtsform zusammengefasst.

AP6:

Der Abschlussbericht zum Vorhaben wurde fertiggestellt, dem Auftraggeber übergeben und nach Freigabe verteilt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine.

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

Abschlussbericht des Vorhabens.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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-Dichtelementen, die universell in verschiedenen Endlagerkonzepten vorgesehen sind, nicht ausreichend. Die generelle Zielsetzung dieses Vorhabens besteht in der Untersuchung der Gastransporteigenschaften (z. B. kapillarer Sperrdruck, relative Gas-Permeabilitäten) und der gekoppelten hydraulisch/mechanischen Eigenschaften von Trennfugen zwischen Bentonit-Formsteinen. Schwerpunktmäßig soll dabei die Entwicklung der Gaspermeabilität nach erfolgter (Teil-) Aufsättigung des Bentonits sowie deren Änderung in Abhängigkeit von der sich mit einer Quellung entwickelten Normalspannung bzw. unter Wirkung einer Scherspannung untersucht werden. Hierfür ist die Nutzung neuer Untersuchungsverfahren notwendig.

Das Vorhaben wird im Rahmen des von der Europäischen Gemeinschaft über das 7te Euratom als „Collaborative Project“ geförderten Forschungsvorhabens „Fate of Repository Gases“ (FORGE) durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum fand das FORGE-Jahrestreffen vom 29. November – 1. Dezember 2011 in Solothurn (CH), statt, wobei die bisherigen Ergebnissen zusammenfassend vorgestellt und diskutiert wurden. Als IfG-Beitrag wurde ein Poster („Hydro-Mechanical Properties and Gas Transport of Interfaces among Blocks of Sealing Materials“ by T. Popp, T. Fabig & K. Salzer) präsentiert.

- AP3: Die Labortests mit definierter Aufsättigung von Bentonitformsteinen (Bentonit/Sand-Mischung) mittels den im Rahmen des Vorhabens hergestellten Durchströmungszellen wurden fortgesetzt. Allerdings wurde trotz einer Injektionsdauer von mehr als einem Jahr, keine vollständige Aufsättigung der bis zu 100mm dicken Formsteinaggregate erreicht. Die vorliegenden Ergebnisse dokumentieren, dass engständige Trennfugen zwischen den Formsteinen für den Wasserzutritt nicht kanalisierend wirken, sondern dass bevorzugtes Quellen entlang dieser Kontaktflächen zu einem Verschluss der Wegsamkeiten führt. Mittels der anschließend durchgeführten Gasinjektionstests wurde nachgewiesen, dass sich das Gaseindringverhalten der während der Aufsättigung geschlossenen Trennfugen nicht signifikant von den Matriceigenschaften unterscheidet. Für die ausgehend von den Trennfugen bewässerten Proben zeigten sich Gaseintrittsdrücke die abhängig von der vorliegenden Normalspannung bzw. dem simulierten Quelldruck bis zu mehreren MPa über der Summe aus dem mittleren Fluiddruck und der Einspannung lagen. Dies wird auf hohe Gaseintrittsdrücke zurückgeführt, die aus einer homogenen Bentonit/Sandmatrix resultieren. Mittels der in AP5 durchgeführten Versuche konnte der Effekt einer Verheilung von engständigen Trennflächen über den Nachweis von Kohäsion belegt werden.
- AP5: Ausgehend von den aufgesättigten Proben wurden Scherversuche zur Bestimmung der Kontaktflächenscherfestigkeit der ehemaligen Trennflächen durchgeführt. Über die Auswertung von zwei Scherversuchen wurde eine Kohäsion von 0,6 MPa bestimmt, was den in den Gasinjektionstests angedeutete Prozess einer „Verheilung“ quantitativ belegt. Allerdings ist diese Beobachtung noch zu verifizieren.

Die bisher vorliegenden Ergebnisse wurden in einem ausführlichen Zwischenbericht (IfG, 2011) 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 (Simulation der entsprechenden Oberflächenrauigkeit) – Durchführung von Fluidinjektionstests während der Scherung.
- AP6: Umsetzung der Versuchsergebnisse in hydro-mechanische Modellrechnungen unter Verwendung des neu am IfG entwickelten Trennflächenmodells zur Fluidausbreitung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

IfG (2011). Results from Interface Laboratory Experiments. - Interims report - FORGE Report D3.09 – draft version (31. August 2011), 33 pp.

<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 30.04.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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: Abschließende Parameterfestlegung für die Transportmodellierung am Beispiel des Homolog-Experimentes 10-01 und Durchführung der entsprechenden Rechnungen. Vorbereitung der Rechnungen zum Homolog-Experiment 10-03 und für das unter reduzierten Ausstrombedingungen von 25 ml/min durchgeführte Feldexperiment mit Uranin und LiBr als sorbierenden Tracer. Durchführung von Rechnungen zum Einfluss der für das integrierte Experiment neu gebohrten Beobachtungsbohrlöcher auf Strömungsfeld und Transport des Dipols CFM06-002 – Pinkel. Die Ergebnisse deuten auf einen vernachlässigbaren Einfluss der geplanten Pumprate auf Strömung und Transport hin.
- AP3: Entwurf eines gemeinsamen Papers zusammen mit den anderen Modellierer-Gruppen zur Simulation des kolloidgetragenen Transports schwerpunktmäßig für das Homolog-Experiment 10-01.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Durchführung und Dokumentation d3f- und r3t-Rechnungen für die oben genannten Feld-Experimente. Simulation des Kolloid- und Radionuklidtransports zum für Januar 2012 vorgesehenen Dipol-Experiment mit ausgewählten Radionuklidtracern. Nach detaillierter Kenntnis von Aufbau und Randbedingungen des integrierten Experiments, das im Frühjahr 2012 gestartet werden soll, Durchführung von Prognoserechnungen mit den Programmen d3f und r3t zur Mobilisierung von Kolloiden und Radionukliden aus dem Bentonitkörper (mit einem geeigneten Quellterm) und Ausbreitung in der Scherzone.
- AP3: Durchführung eines weiteren Arbeitsgesprächs mit dem FZK-INE zur Diskussion der Ergebnisse und Abstimmung der Arbeiten. Teilnahme an dem nächsten Treffen der CFM Modeller Group im Juni in der Schweiz mit Präsentation der Ergebnisse der neuen Modellrechnungen.

### 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 30.04.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 haben die Verbundpartner GRS und KIT-INE eine kostenneutrale Verlängerung der Laufzeit bis 31.12.2012 beantragt (siehe Anschreiben vom 25.11.11). Folgende Arbeiten wurden im Berichtszeitraum durchgeführt:

AP1: *Status*: Ein Schwerpunkt der Arbeiten lag speziell auf dem Einfluss von Oberflächenrauigkeit und Ladungsheterogenitäten auf die Kolloidmobilität. Diese Arbeiten wurden zum Teil an der Universität Göttingen in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Herrn Dr. Fischer und dem dort zu Verfügung stehenden Vertical Scanning- Interferometer (VSI) an Granitproben aus Grimsel durchgeführt und mit Daten zur Rasterkraftmikroskopie (AFM), hier speziell Kraft-Abstandskurven verglichen. Zwei Veröffentlichungen zu diesem Themenkomplex sind bei *ES&T* und *Langmuir* eingereicht, ein drittes Manuskript ist in Vorbereitung.

Schwerpunkt der Arbeiten des 2. Halbjahres 2011 lag (a) auf der Durchführung von weiteren Migrationsversuchen nach Installierung der Beobachtungsbohrlöcher, (b) weiteren Analyse der Proben aus dem geochemischen Hintergrund- Monitoringprogramms und (c) Laborstudien zur Machbarkeit der Platzierung des kompaktierten Bentonits.

- (a) Nach den Präparationsarbeiten der CFM-Site mit zusätzlichen 56mm Durchmesser Monitoring- Bohrlöchern im Nahfeldbereich des Injektionsbohrlochs 06.001i2 wurde im September 2011 ein weiterer „Homolog“-Test (Run CFM11-01) mit den Elementen Eu, Tb, Th, Hf, unter Anwesenheit von natürlichen Bentonitkolloiden und synthetischem Ni-/Zn-Montmorillonit durchgeführt. Dieser Versuch zeigte zum einen druckbedingte Leckagen während der Injektion, die für das geplante Radionuklid- Tracerexperiment optimiert werden mussten und zum anderen einen signifikant reduzierten bzw. nicht quantifizierbaren Wiedererhalt der Kolloide bzw. Homologe. Ein weiterer konservativer Tracertest (Run 11-02) im November 2011 mit einem neuen Injektionsgefäß in Form eines PEEK ausgekleidetem Edelstahl-Druckbehälters konnte ohne Leckagen durchgeführt werden, bestätigte jedoch die sehr niedrigen Fluss durch das Intervall (max.: 0.046 mL/min) in die MI-Scherzone. Durch Modifikation des Run 11-02 mit direkter Injektion des konservativen Tracers in das Bohrloch 06.001i2 zeigte effektiv eine Mobilisierung des Tracers aus diesen quasi stagnanten Zonen zum „Pinkel“-Oberflächenpacker gerichteten Fließpfad. Mit diesem Set-up unter geringem Injektionsfluss sind nun die hydraulischen Bedingungen für das Radionuklidexperiment eingestellt.
- (b) Die wöchentlich mittels Autosamplers genommenen Proben des „Pinkel“- Oberflächenpackers zur Quantifizierung der natürlichen Schwankungsbreite der Kolloidkonzentration wurden weiterhin fortgesetzt.
- (c) Studien zum Verhalten von synthetischem Montmorillonite (Zn- bzw. Ni markiert) im Vergleich zu natürlichen Febex- Bentonitkolloiden in Kollaboration mit Univ. Nancy und Univ. Mulhouse zeigen vergleichbares Sorptions- und RN-Reversibilitätsverhalten, weisen aber deutliche Vorteile bezüglich der Quantifizierung der Kolloidanlagerungswahrscheinlichkeit auf. Diese Ergebnisse wurden auf der Goldschmidt 2011 Konferenz in Prag vorgestellt. Weitere Arbeiten fokussieren auf das Einbringen einer Radionuklid- gespikten Bentonitpaste in einen kompaktierten Bentonitblock. Erste Versuche bei direktem Kontakt zeigten Rissbildung und Desintegration der kompaktierten Bentonitringe, hier wurden und werden weitere Modifikationen getestet.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.1: Batch-Experimente an synthetischen neutronenaktiviertem Ni/Zn-Montmorillonit mit Pu, Np, Am zur genauen Bestimmung der Kolloidanlagerungswahrscheinlichkeit  $\alpha$  werden fortgeführt.
- AP1.2: Für Mitte Februar 2012 ist als letzter Test vor der Einbringung des kompaktierten Bentonits ein Radionuklidtracertest geplant, um unter möglichst identen hydraulischen Bedingungen die Mobilität von Bentonit-Kolloiden und assoziierten Radionukliden zu verifizieren. Die Analyse der Proben dieses neuen Tests (Run12-03) mittels ICP-MS, LIBD und S-Kurven LIBD (Kolloidkonzentration und –größenverteilung) obliegt dem INE.
- AP2.5: Modellrechnungen zu den *In-situ*-Experimenten sowie zu den neu gebohrten Monitoring-Bohrlöchern werden weitergeführt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Bouby, Geckeis, Lützenkirchen, Mihai, Schäfer (2011) Interaction of bentonite colloids with Cs, Eu, Th and U in presence of humic acid: A flow field-flow fractionation study. *GCA* 75(13), 3866-3880.
- Darbha, Fischer, Schäfer (2012, submitted) Quantitative Impact of Mineral Aggregate Surface Topography on Colloid Retention. *ES&T*.
- Schäfer, Huber, Seher, Missana, Alonso, Kumke, Claret, Enzmann (2012) *Appl. Geochem.* 27(2), 390-403.
- Huber, Kunze, Geckeis, Schäfer (2011) *Appl. Geochem.* 26(12), 2226-2237.
- Huber, Enzmann, Wenka, Bouby, Dentz, Schäfer (2011, submitted) Natural micro-scale heterogeneity induced solute and nanoparticle retardation in fractured crystalline rock. *J. Contam. Hydrol.*

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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: An den im In-situ-Versuch eingebauten Puffermaterialien (hochkompaktierte Bentonit-Blöcke, Sand-Bentonit-Granulat, Bentonit-Pellets) wurden die wärmetechnischen Parameter im naturfeuchten und getrockneten Zustand in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmt. Diese Messungen wurden im Deliverable D2.2.5 des Projekts dokumentiert. Die Ergebnisse zeigen, dass die Wärmeleitfähigkeit der untersuchten Materialien nicht wesentlich von der Temperatur abhängt; Änderungen bei erhöhter Temperatur sind im Wesentlichen auf Wassergehaltsänderungen zurück zu führen. Wärmeleitfähigkeit und spezifische Wärmekapazität sind bei den Bentonitblöcken wegen der höheren Dichte und des höheren Anfangswassergehalts deutlich höher als bei den granularen Materialien. Im nächsten Schritt werden die wärmetechnischen Parameter in Abhängigkeit vom Wassergehalt bestimmt. Für Sand-Bentonit-Granulat liegen hierzu erste Ergebnisse vor, die erwartungsgemäß eine deutliche Zunahme der Wärmeleitfähigkeit mit dem Wassergehalt belegen.
- AP2: Nach Aufbau des Erhitzerversuchs HE-E und Aufheizbeginn am 28.06.2011 laufen seither die Temperatur- und Porenwasserdruck-Messungen.
- AP3: 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: Die derzeitige Behandlung der frühen Entwicklung des Puffers in einem Ton- oder Kristallin-Endlager und die im jeweiligen Endlagerkonzept damit verknüpften offenen Fragen wurden im Deliverable D1-1/D1-2 des PEBS-Projekts dokumentiert. Für die deutsche Seite wurden die Konzepte des Projekts ERATO eingebracht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Laboruntersuchungen zu den wärmetechnischen Parametern von Tonstein und 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

Wieczorek, K., R. Mische: Measurement of Thermal Parameters of the HE-E Buffer Materials, Deliverable D2.2-5 of the PEBS Project. European Commission, 2011.

The Early Evolution of the EBS in Safety Assessments, Deliverable D1-1 and D1-2 of the PEBS Project. European Commission, 2011.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 sinnvollen Schätzwerten für unbekannte Komplexbil- 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:

Es wurden keine weiteren Daten evaluiert, da in diesem Halbjahr die Eingabe-Oberfläche für die Datenbank, die von der Firma Lineas entwickelt wurde, ausgiebig getestet wurde. Hierzu wurden schrittweise die einzelnen Module, wie sie von der Firma Lineas fertig gestellt wurden online getestet. Die Module waren: Eingangsseite, Eingabe der Phasen, der Phasenkonstituenten, der thermodynamischen Daten, der Wechselwirkungsparameter. Durch zeitnahe Rückkopplung über Internet und Videokonferenzen, wurden Fehler behoben und Verbesserungen diskutiert. Die Daten für den ersten Release (Na<+>, K<+>, Mg<2+>, Cl<->, SO<sub>4</sub><2->, H<+>, H<sub>2</sub>O(l)) und zweiten Release (Na, Mg, Ca, Cl - Am(III), Nd(III), Cm(III) - H<sub>2</sub>O) wurden aktualisiert.

#### Dokumentation:

Das Kapitel 3 des Handbuchs wurde in englischer Sprache übersetzt und befindet sich gerade in der Endredaktion. Zum ersten und zweiten Release wurden zwei Benchmark-Dokumente zu den Benchmark-Rechnungen herausgegeben: THEREDA-Benchmark-02-AmCmNdNaCl\_Rev\_2-0.doc und THEREDA-Benchmark-02-AmCmNdCaMgCl<sub>2</sub>\_Rev\_2-0.doc.

Für die öffentliche Daten-Freigabe wurden nochmals eingehende Benchmark-Rechnungen durchgeführt. Die Ausgabe-Files der Exporter wurden mit PhreeqC und EQ3/6 getestet. Das Testsystem waren Am(III), Cm(III), Nd(III) in NaCl-Lösungen bei 298.15K (Elemente: Am, Cm, Nd, OH, H, Na, Cl) und Am(III), Cm(III), Nd(III) in MgCl<sub>2</sub> and CaCl<sub>2</sub>-Lösungen bei 298.15K (Elemente: Am, Cm, Nd, OH, H, Mg, Ca, Cl). Die Ergebnisse wurden mit Benchmark-Rechnungen der Codes CHEMAPP und Geochemist's Workbench, die von GRS und FZD durchgeführt wurden, verglichen. Die Ergebnisse waren innerhalb der numerischen Ungenauigkeiten gleich, d. h. die Parameterdateien waren soweit fehlerlos. Die Rechnungen wurden auch mit experimentellen Daten von [NEC/ALT2009] verglichen. Die Daten konnten gut beschrieben werden, innerhalb der experimentellen Fehler. Kleinere Abweichungen in MgCl<sub>2</sub> und CaCl<sub>2</sub> müssen zukünftig noch diskutiert werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die thermodynamischen Daten für fünfwertiges Neptunium in carbonat-, und phosphathaltigen Wässern werden zusammengestellt und begutachtet. Das nächste Release wird hierbei vorbereitet. Die Eingabeoberfläche der Firma Lineas wird weiter getestet. Hierbei stehen die Module „Audit“, „Sets“ und „Validity“ im Fokus.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Benchmark-Dokument: THEREDA-Benchmark-02-AmCmNdNaCl\_Rev\_2-0.doc

Benchmark-Dokument: THEREDA-Benchmark-02-AmCmNdCaMgCl<sub>2</sub>\_Rev\_2-0.doc

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 Löseseleichgewichte vom CO<sub>2</sub>-Partialdruck berücksichtigt.*

Im Ergebnis des Vorhabens wird eine einheitliche, konsistente thermodynamische Datenbasis für geochemische Modellierungen zur Verfügung stehen, mit der das geochemische Milieu in Salinargesteinen einschließlich angrenzender oder eingelagerter Carbonatgesteine im relevanten Temperatur- und Druckbereich behandelt werden kann. Darüber hinaus bildet die in diesem Teilvorhaben zu entwickelnde Datenbasis mit den Bestandteilen Na<sup>+</sup>-K<sup>+</sup>-Mg<sup>2+</sup>-Ca<sup>2+</sup>-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>-Cl<sup>-</sup>-H<sup>+</sup>-OH<sup>-</sup>-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:

- Erfassung und Systematisierung der Literatur zu thermodynamischen Daten zu den Chlorid-Carbonat und Sulfat-Carbonat Systemen
- Nachrechnen 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
- Extrapolation der Pitzer-Wechselwirkungsparameter von He & Morse in den erforderlichen T-p-Bereich.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung von AP5.2 Systemkomplex 3 und 4 und Bestimmung fehlender Temperaturfunktionen für Wechselwirkungsparameter im nächsten halben Jahr.

### 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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: Die Planungen für die hydrogeologischen Rechnungen wurden in der zweiten Jahreshälfte abgeschlossen. Für die hydrogeologischen Rechnungen wurde in Zusammenarbeit mit der BGR das hydrogeologische Konzeptmodell für die Rechnungen mit d3f vorbereitet. Zudem wurden die Inhalte zum Bericht zu geochemischen Rechnungen abgestimmt.
- AP4: Es wurden Rechnungen mit dem Programm TOUGH2 zum Zweiphasenfluss in einem stark vereinfachten generischen Endlager im Salz durchgeführt. Die Rechnungen betrachten zum einen den Lösungszutritt über den Schacht und zum anderen die Durchströmung einer Barriere. Die Ergebnisse zeigen Zutrittsraten und Strömungsmuster, die nicht durch die Betrachtung eines einphasigen Lösungsstroms vereinfacht abgebildet werden können.
- AP5: Das für die Arbeiten in AP5 benötigte Grubengebäudemodell wurde im zweiten Halbjahr 2011 fertiggestellt. Das erstellte Grubengebäude beinhaltet alle wesentlichen Merkmale des Endlagerkonzeptes, das von der DBE TECHNOLOGY im Rahmen der VSG erstellt wurde.
- AP6: Die ursprünglich beantragten Arbeiten wurden im ersten Halbjahr 2011 fertiggestellt. Im zweiten Halbjahr 2011 wurde eine Erweiterung der Arbeiten im Rahmen von AP6 beantragt und genehmigt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Basierend auf den im Jahr 2011 erstellten Konzepten wird im ersten Halbjahr 2012 mit den entsprechenden hydrogeologischen Modellrechnungen begonnen. Der Bericht zu geochemischen Rechnungen wird im Laufe des Jahres 2012 fertiggestellt.
- AP4: Im ersten Halbjahr 2012 erfolgt eine Erarbeitung eines konzeptuellen Modells, wie der Zweiphasenfluss in einem neuen langzeitsicherheitsanalytischen Rechenprogramm für das Nahfeld im Salz integriert werden kann.
- AP5: Mit dem erstellten Grubengebäudemodell wird im ersten 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: Nach erfolgter Planung der Arbeiten wird im ersten Halbjahr 2012 mit der Auswertung der Literatur und Gesprächen mit Fachleuten zu den identifizierten natürlichen Analoga begonnen.

### 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 31.05.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 in einem nächsten Schritt 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, dass die Prozesse soweit automatisiert ablaufen, dass eine hohe Anzahl von Realisationen durchgeführt werden kann.

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, wurde abgeschlossen. Weiterhin wurden das Abfallmengengerüst und die Kenngrößen für ausgediente Leistungsreaktorbrennelemente und für Forschungsreaktorbrennelemente aktualisiert. Die Ergebnisse wurden in einem Berichtsentwurf zusammengefasst und sollen mit den beim zuständigen Fachreferat S2.2 des BfS hierzu vorliegenden Daten abgeglichen werden.

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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 erster mikrostruktureller Untersuchungen wurden seitens BGR Proben aus früheren Kompaktionsversuchen zur Verfügung gestellt. Die Proben haben einen unterschiedlichen Kompaktionsgrad und damit auch unterschiedlichen Porositäten und wurden sowohl trocken als auch angefeuchtet kompaktiert. 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 abgelichtet um Detailanalysen durchführen zu können. Es wurde damit begonnen, die erhaltenen abgerasterten Bilder zunächst zu beschreiben. Anschließend werden die Rasterbilder einer Bildanalyse dergestalt unterzogen, dass die effektive Porosität aus dem Volumenanteil des blauen Harzes abgeschätzt werden kann.

AP3:

Die Simulation des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus mit dem Partikel-Flow-Code (PFC) ermöglicht es, Zusammenhänge zwischen mikrostrukturellen Eigenschaften eines Materials und seinen makroskopischen Eigenschaften zu erkennen. Es wurde damit begonnen, die Analyse solcher Partikelmodelle um spezielle Verteilungsfunktionen der statistischen Geometrie zu erweitern. Die dazu nötige Softwareentwicklung wird von der TU Bergakademie Freiberg durchgeführt. Implementiert wurden die Lineare Kontaktverteilungsfunktion, die Sphärische Kontaktverteilungsfunktion, die Paarkorrelationsfunktion und die Ripley's K-Funktion. Mit Hilfe dieser Funktionen lässt sich der Porenraum quantitativ beschreiben. Die Funktionen wurden zunächst für Kugelpackungen in quaderförmigen Containern implementiert. Ausgegeben werden können derzeit die minimalen und maximalen Porenradien inklusive Mittelwert und Standardabweichung sowie der berechnete Porositätswert. Zusätzlich wurde die Möglichkeit geschaffen, Packungen aus zylinderförmigen Containern einzulesen. Damit ist es möglich, Probenkörperformen z. B. aus Oedomertests zu übernehmen.

Im Berichtszeitraum wurde damit begonnen mit dem Partikel-Flow-Code ein 3D-Modell zu entwickeln, um Kompaktionsversuche in zylindrischen Containern simulieren zu können. Bezüglich der Partikelgröße wurde die DEBORA-Sieblinie als Grundlage genommen.

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

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

AP3: Fortsetzung der Softwareentwicklung zur Analyse des Porenraums innerhalb von Partikelmodellen, insbesondere eine Routine zur Berechnung der Probendichte.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10740</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 Berichtserstellung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Aufgrund der dynamischen Entwicklung im Projekt VSG wurde der Abgleich des in AP1 definierten Einlagerungshorizonts mit den aktuelleren Annahmen aus VSG zurückgestellt.

Die Laborversuche zu AP2 verliefen mit unterschiedlichem Erfolg. Die Langzeitkompaktionsversuche bei trockener Atmosphäre und unterschiedlicher Anfangsfeuchte verlaufen zufriedenstel-

lend. Dabei erreichen die trockenen Proben eine geringe Konvergenzgeschwindigkeit ( $<10^{-9}$  1/s) deutlich schneller als die feuchten Proben. Der Versuch zur Langzeitkompaktion in verschiedenen feuchter Atmosphäre musste wegen erheblicher Probleme mit der Feuchtigkeitsregelung abgebrochen werden. Ein neuer Versuchsaufbau wurde erarbeitet und wird zurzeit umgesetzt. Der alte Versuchsaufbau wird in der Zwischenzeit genutzt, um die Kompaktion bei vollständiger Flutung mit Lösung zu beobachten. Nach Überprüfung des Exsikkator-Versuchs zur Adsorption von Wasser an der Salzoberfläche als Funktion der Luftfeuchtigkeit musste festgestellt werden, dass die Änderungen des Wassergehalts etwa in der Größenordnung der Messgenauigkeit liegen. Genauere Ergebnisse ließen sich vermutlich durch höhere Wägegenauigkeit und feinkörnigeres Material erzielen. Damit würde man sich aber von der vorgesehenen Zusammensetzung des Versatzmaterials entfernen. Die Relevanz dieses Effekts für die erwartete Endlagersituation wurde deshalb als gering eingeschätzt. Entgegen ursprünglicher Planung wird der Versuch daher nicht wiederholt.

Entsprechend der mit den Projektpartnern erarbeiteten Vorgehensweise wurden in AP3 Modellrechnungen zur Simulation der Oedometerversuche der BGR mit den Materialparametern aus dem BAMBUS-Projekt und Prognoserechnungen zu den Langzeitkompaktionsversuchen durchgeführt sowie die Materialparameter entsprechend angepasst. Darauf aufbauende Prognoserechnungen zur Porositätsentwicklung in den Langzeitkompaktionsversuchen lassen erwarten, dass die Porosität der stark angefeuchteten Probe im Projektzeitraum deutlich unter 5 % fallen wird, dass aber für die trockeneren Proben ohne kompaktionsbeschleunigende Maßnahmen wie z. B. Temperaturerhöhung lediglich ein Wert von ca. 12 % erreichbar ist.

Die Auswertung der Literaturquellen zu Ähnlichkeitsgesetzen für den Zweiphasenfluss in natürlichen Gesteinen wurde abgeschlossen. Zusammenfassend muss festgestellt werden, dass sich aufgrund der Vielfalt unterschiedlicher Ansätze für die Ähnlichkeitsbeziehungen keine Rückschlüsse auf ein Ähnlichkeitsgesetz für kompaktierendes Salzgrus ziehen lassen.

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

- Abschlussarbeiten an einem Ergebnisrapport zu AP1
- Fortsetzung des Langzeitkompaktionsversuchs in trockener Atmosphäre; Abstimmung mit den Projektpartnern über versuchsbeschleunigende Maßnahmen
- Neubeginn des Feuchtekompaktionsversuchs
- Fortsetzung der Modellrechnungen zum Langzeitkompaktionsversuch.
- Untersuchung der verwendeten Stoffmodellansätze im Hinblick auf ihre Anwendbarkeit im Bereich geringer Porositäten
- Retrospektive Analyse laufender Kriechkompaktionsversuche der BGR
- Vorstellung der Untersuchungsergebnisse zur Salzgruskompaktion im Rahmen der SALT-MECH7-Konferenz in Paris im April 2012

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10750</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaussage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein – Kurztitel: URSEL		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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**

07.09.2011 Projekttreffen von BGR, DBE TECHNOLOGY und GRS in Peine.

30.09.2011 4. Projekttreffen mit VNIPI PT in Peine.

19.-21.12.2011 5. Projekttreffen mit VNIPI PT in Moskau.

Auf der Grundlage der Ergebnisse der durchgeführten deterministischen Rechnungen und der Auswertungen von Literatur zu Sicherheitsbewertungen von Endlagern in magmatischen Gesteinen wurden Verteilungen für die sich als sensitiv herausgestellten Parameter abgeleitet. Die Verteilungen wurden auf dem Projekttreffen in Peine Ende September vorgestellt und im Nachgang dieses Treffens zur Durchführung vorläufiger probabilistischer Rechenläufe eingesetzt. Die Ergebnisse dieser Rechnungen wurden auf dem Treffen im Dezember in Moskau den Projektpartnern vorgestellt und das weitere Vorgehen diskutiert.

Parallel zu den sicherheitsanalytischen Rechnungen wurde die Modellierung der Grundwasserströmung in  $d^3f$  präzisiert. Die im September vorgestellten Ergebnisse führten zu einer intensiven Diskussion und Neubewertung der Randbedingung für die Modellierung der Grundwasserströmung. Auf dem Treffen im Dezember in Moskau wurden zudem auch erste Ergebnisse zum Stofftransport vorgestellt und diskutiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Auf der Grundlage der bisherigen Ergebnisse und Diskussionen werden sowohl die deterministischen als auch die probabilistischen sicherheitsanalytischen Rechnungen aktualisiert. Dies gilt sowohl hinsichtlich der Neubewertung der Randbedingungen als auch für Abhängigkeiten von Parametern bei den probabilistischen Parametern. Die Modellierung der Grundwasserströmung und des Schadstofftransportes wird ebenfalls auf der Grundlage neuer Daten zu den Randbedingungen aktualisiert. Die Ergebnisse der aktualisierten Rechnungen werden den anderen Projektpartnern als Bericht zur Verfügung gestellt und sollen auf dem nächsten Projekttreffen vorgestellt und gemeinsam diskutiert werden.

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.

### **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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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:

Am 19.12.2011 fand ein deutsch-russisches Arbeitstreffen in Moskau statt. Im Zuge dieses Treffens wurde seitens des russischen Projektpartners VNIPIPT der aktuelle Stand der Untersuchungen am Endlagerstandort vorgestellt. Seitens DBETEC wurden die Ergebnisse der Untersuchungen zur Größe der zu erwartenden Auflockerungszone vorgestellt. Die numerische Modellierung erfolgte mit dem Prozesslevelcode FLAC3D. Zur Simulation des Schädigungsverhaltens wurde das Hoek-Brown Stoffgesetz verwendet, das die Möglichkeit beinhaltet, den Klüftigkeitsgrad eines Gesteinsverbundes bei der Bestimmung der Gesteinsfestigkeit zu berücksichtigen. Dies geschieht über die Festlegung des Geological Strength Index (GSI). Nach Aussagen von VNIPIPT wurden in den Untersuchungsbohrungen ein Klüftigkeitsgrad von 3-5 Klüfte pro Meter angetroffen, was zu einem GSI von 75 führt. Die anderen notwendigen geomechanischen Gesteins- bzw. Gebirgseigenschaften wurden einer Publikation von VNIPIPT entnommen, in der die Ergebnisse der Laboruntersuchungen an Kernmaterial zusammengefasst und erläutert sind. Die Berechnungen ergaben eine Größe der Auflockerungszone, die je nach Lokation innerhalb einer Strecke im Bereich von 0,3 bis 1,0 m liegt. Die Auflockerungszone im Einlagerungsbohrloch liegt im Bereich von 0,1 m. Ein Vergleich mit in-situ Untersuchungen in Untertagelaboratorien in Schweden und Kanada ergab Auflockerungszonen in vergleichbaren Größen.

AP7:

Im Rahmen der Projektkoordination erfolgte die Vorbereitung und Durchführung eines weiteren deutsch-russischen Workshops in St. Petersburg zur Entsorgung schwach- und mittelaktiver Abfälle und zur Endlagerung in Tonsteinformationen. Seitens der russischen Kollegen erfolgten zum einen eine Darstellung der aktuellen geologischen Situation am geplanten Endlagerstandort und zum anderen eine Übersicht zu den durchgeführten Laboruntersuchungen an vorhandenen Kernproben. Von deutscher Seite wurde ein Vorschlag zu einem strukturierten Forschungsvorhaben vorgestellt, das neben der Konzeption eines Verschluss- und Versiegelungssystem auch Sicherheitsanalysen bezüglich der geotechnischen Barrieren und insgesamt der Langzeitsicherheit unter Berücksichtigung der hydrogeologischen Verhältnisse enthält.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP4:

Simulation eines 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 598.885,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Bischofer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Ziel des GRS-Teilprojekts VESPA ist es, thermodynamische Daten für I, Se und Cs in hochsalinaren Lösungen des Systems Na, K, Mg, Ca – Cl,  $\text{SO}_4$  –  $\text{H}_2\text{O}$  bei Temperaturen von 25 – 90 °C zu bestimmen.

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Literaturstudien

AP2: Bestimmung thermodynamischer Daten

AP3: Eingabe thermodynamischer Daten in die Referenzdatenbasis THEREDA

AP4: Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis

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

AP6: Koordination des Verbundvorhabens

AP7: Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Literaturstudien:

Die ergänzende Literaturstudie zu  $^{14}\text{C}$  wurde überarbeitet, ist aber noch nicht abschließend fertig gestellt.

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Die entwickelte Dampfdruckmesseinrichtung wies zunächst Dichtigkeitsprobleme auf. Die begonnene Testung der Dampfdruckmesseinrichtung im System „reines H<sub>2</sub>O“ musste abgebrochen werden, da der Drucksensor nach einiger Zeit offensichtlich falsche Werte anzeigte.

Eine Messzelle zur potentiometrischen Bestimmung der Aktivitätskoeffizienten der Hydrogenselenite wurde aufgebaut. Die Messungen für das binäre System NaHSeO<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O wurden bei 25 °C und 60 °C bereits durchgeführt.

Die Versuche zur Bestimmung der Löslichkeitskonstanten aus LDH-Mischkristallen (Fe-, Ni- und Co-LDHs) wurden mit jeweils 4 Parallelen in 5 Lösungen angesetzt. Eine Gleichgewichtseinstellung wurde noch nicht erreicht.

Vergleichsrechnungen für den Langzeitsicherheitsnachweis:

Abprache über die zu verwendenden Codes und die möglichen Rechnungen im Ton und Salz mit Mitarbeitern der Abteilung „Langzeitsicherheitsanalyse“. Weitergabe der Anforderung an die nötigen und in VESPA neu bestimmten Parameter für die Rechnungen.

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 3. Projekttreffens im Juli 2011 zum Verbundvorhaben VESPA.

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

Literaturstudien:

Die ergänzende Literaturstudie zu <sup>14</sup>C wird fertig überarbeitet und abschließend fertig gestellt.

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Testung der Dampfdruckmesseinrichtung (erneute Dichtigkeit, Wasserdampfdruckkurve).

Isopiestic Messungen für die binären Systeme CsCl-H<sub>2</sub>O, CsSO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O, NaI-H<sub>2</sub>O, KI-H<sub>2</sub>O, Mg<sub>2</sub>I-H<sub>2</sub>O, Ca<sub>2</sub>I-H<sub>2</sub>O bei 40 °C, 60 °C und 90 °C.

Durchführung der 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:

Erstellung einer Zusammenschau über die Daten, die in die Vergleichsrechnungen eingehen können, Kommunikation mit den anderen Partnern über weiteres Vorgehen. Vorstellung der geplanten Rechnungen bei den anderen Projektpartnern.

Koordination des Verbundvorhabens:

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

Erstellung einer Formatvorlage für den Abschlussbericht.

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

Generisches Poster zu VESPA wurde erstellt. Das generische Poster wurde im Rahmen der GDCh-Tagung 2011 und der HITAC-Tagung 2011 vorgestellt.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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: Erfolgreich konnten LDH-Mischkristallverbindungen hergestellt werden, in denen partiell das divalente Magnesium gegen divalentes Eisen, Cobalt und Nickel ausgetauscht wurde. Zur strukturellen Charakterisierung wurden EXAFS Messungen am KIT-INE durchgeführt.

AP2: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP3: Batch-Adsorptionsuntersuchungen an den synthetisierten LDH-Mischkristallphasen mit Iodid und Perotechnetat in Wasser, in Tonporenwasser (Mont-Terri Typ A1) und in Salzlauge ( $\text{MgCl}_2$ -reiche Lauge) sind angesetzt wurden. Aus kinetischen Untersuchungen zeigt sich bislang, dass in  $\text{MgCl}_2$ -reicher Lauge keine Rückhaltung für Iodid und Perotechnetat vorliegt. In Wasser und in Tonporenwasser ist eine Rückhaltung gegeben.

AP4: Noch nicht begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: Die ermittelten Daten aus den EXAFS-Messungen werden noch ausgewertet.

AP2: Die Arbeiten hierzu sind abgeschlossen.

AP3: Batch-Adsorptionsuntersuchungen an den synthetisierten LDH-Mischkristallphasen mit Iodid und Perotechnetat werden als Funktion des pH-Wertes und der Radionuklidkonzentration untersucht.

AP4: Beginn der Arbeiten im 2. Halbjahr 2012 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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

AP1:

- Bericht zur Literaturrecherche und Datenbewertung wurde erstellt.

AP2:

- Bereitstellung des notwendigen instrumentellen Versuchsaufbaus für Untersuchungen bei hohen Temperaturen und unter reduzierenden Bedingungen.

AP3:

- Batchexperimente
  - Sorption von Se(VI) und Se(IV) an  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>,  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>,  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> bei 25 °C
  - Sorption von Se(VI) an TiO<sub>2</sub> bis 60 °C und 6 mol/L NaCl zeigt eine Abnahme mit zunehmender Temperatur und Ionenstärke.
- Spektroskopie
  - Sorptionsversuche von Se(VI) an TiO<sub>2</sub> mittels ATR FT-IR zeigen die Bildung eines außersphärischen Komplexes und eine Abnahme der Sorption bei höheren Temperaturen und Ionenstärken.
  - Sorptionsversuche von Se(IV) und Se(VI) an  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> mittels ATR FT-IR und EXAFS zeigen die Bildung eines innersphärischen Komplexes für Se(IV) und eine Mischung aus inner- und außersphärischen Komplexen für Se(VI).

AP4:

- Modellierung und Datenbewertung
  - 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>.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

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

AP4: Bestimmung thermodynamischer Parameter für die Sorption von Selen an  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> und  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Jordan, N.; Müller, K.; Franzen, C.; Foerstendorf, H.; Weiß, S.; Heim, K.; Brendler, V.: Migration 2011., 18.-23.09.2011, Beijing, China.

Jordan, N.; Foerstendorf, H.; Scheinost, A. C.; Lützenkirchen, J.; Schild, D.; Weiß, S.; Heim, K.; Brendler, V.: Geological Disposal of Radioactive Waste: Underpinning Science and Technology, 18.-20.10.2011, Loughborough, England.

Franzen, C.; Jordan, N.; Müller, K.; Meusel, T.; Brendler, V.: HiTAC Workshop, 09.11.2011, Karlsruhe, Deutschland.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 bezüglich der aquatischen Chemie und Thermodynamik von Tc(IV), der Reduktionschemie von Tc(VII)/Tc(IV) in verschiedenen Medien, zum Einfluss der Reduktionskinetik auf die Tc-Migration in natürlichen Systemen sowie zum strukturellen Einbau von Selen in Mineralphasen (Pyrit, Calcit) inklusive der Herausstellung existierender Defizite, wurde abgeschlossen.



**AP1: Status:** Die Löslichkeitsexperimente von Tc(IV) wurden von Frau Ezgi Yalcintas im Rahmen ihrer am 1. August 2011 begonnenen Doktorarbeit fortgeführt. In 0.1 M NaCl Lösungen sind die Untersuchungen weitgehend abgeschlossen; Experimente in verschiedenen konzentrierten NaCl Systemen bei  $5 < \text{pH} < 14$  wurden im Berichtszeitraum gestartet. Die Untersuchung der Löslichkeit von Tc(IV)oxyhydroxidfestphasen in  $\text{CaCl}_2$  ist bis auf die weiter ausstehenden Festphasenanalysen abgeschlossen.

**AP2: Status:** Die Untersuchung von Tc-Redoxprozessen und Systematisierung im Rahmen des Eh/pH-Konzepts ist für das 0.1 M NaCl System abgeschlossen. Rechnungen basierend auf der NEA Datenbasis zeigen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Ergebnisse aus AP2 wurden von Dr. Kobayashi auf der Konferenz „Migration 2011“ (18-23 Sept. 2011, Beijing, China) und von Dr. Kobayashi und Fr. Yalcintas auf dem ABC-Salt Workshop (7.+8. Nov. 2011) in Karlsruhe mit Erfolg vorgestellt. Experimente zum Redoxverhalten von Tc(VII) in höher konzentrierten NaCl und  $\text{MgCl}_2$  Systemen wurden angesetzt.

**AP3: Status:** Für die Arbeiten zur Tc Wechselwirkung mit verschiedenen natürlichen Materialien und Eisenoxiden (Magnetit, Maghemit) konnte zum Oktober 2011 ein Doktorand (Yuri Totskiy von der Lomonosov Moscow State University aus der Arbeitsgruppe von Prof. St. Kalmykov) eingestellt werden. Die im Rahmen des EURATOM CP CROCK zur Verfügung stehenden anoxischen Probenmaterialien (Granodiorite aus Äspö, Schweden) wurden aufgearbeitet und ein neues Versuchsprogramm zu Batch- und Migrationsversuchen gestartet um die bisher beobachteten extrem langsamen Reduktionsraten zu verifizieren. Vergleichende Untersuchungen an gemahlten Tonproben (OPA & COx) zeigen eine starke Abhängigkeit der Sorption ( $K_d$ ) in beiden Systemen von der Kontaktzeit. Bis zu ~60 % reduziertes Tc ( $C_0 = 1 \cdot 10^{-7}$  mol/L) wurden via 0.025M PMBP Extraktion in Übereinstimmung mit den thermodynamischen Modellierungen unter Verwendung der gemessenen pH/pe Bedingungen gefunden. Spektroskopische XAFS Untersuchungen bei höheren Tc Konzentrationen ( $C_0 = 1 \cdot 10^{-4}$  mol/L) konnten nur oberflächenassoziierte Tc(VII)-Spezies identifizieren. Für den Pyrit, der für die reduzierenden Bedingungen im COx als verantwortlich angenommen wird, nur Bindungsplätze von  $\sim 10^{-8}$  mol/L anbietet, kann Tc(VII) bei den relativ hohen Konzentrationen vermutlich nicht vollkommen reduziert werden und bindet möglicherweise über Anionenaustausch an Calcit.

**AP4: Status:** EXAFS und polarisationsabhängige GI-EXAFS Messungen bestätigen, dass  $\text{Se(IV)O}_3^{2-}$  in der Calcitstruktur Carbonat substituiert, so dass von einer Mischkristallstöchiometrie  $\text{Ca}(\text{SeO}_3)_x(\text{CO}_3)_{(1-x)}$  ausgegangen werden kann. Copräzipitationsversuche in Durchflussreaktoren (MFR) zeigen, dass über einen weiten Se Konzentrationsbereich ( $10^{-13} - 10^{-7}$  mol/L) Se(IV) in Calcit eingebaut wird. Der auf Carbonat bezogene Verteilungskoeffizient liegt bei  $0.02 \pm 0.01$ . Die Konstanz des Verteilungskoeffizienten über einen weiten Konzentrationsbereich deutet auf eine ideale Solid-Solution Bildung hin. Das Ausmaß des Se(IV) Einbaus ist jedoch größer als thermodynamisch erwartet. Die Studien zur Wechselwirkung von Selenid mit Mackinawit sind abgeschlossen und die spektroskopischen Daten (EXAFS/XANES) sind im Laufe der letzten Berichtsperiode ausgewertet worden. Die experimentellen Arbeiten zur Wechselwirkung mit Pyrit wurden auf Grund technischer Probleme noch nicht begonnen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weiterführung der laufenden Löslichkeitsexperimente in carbonatfreier NaCl. Ausdehnung der Löslichkeitsuntersuchungen auf verdünnte bis konzentrierte  $\text{MgCl}_2$  Systeme. Charakterisierung löslichkeitsbestimmender Tc(IV)-Festphasen. Vergleich der experimentellen Daten mit geochemischen Modellrechnungen.
- AP2: Durchführung von Tc-Redoxexperimenten (Eh/pH) in konzentrierter NaCl bzw.  $\text{MgCl}_2$  Lösung. Systematisierung der Ionenstärkeabhängigkeit von Tc-Redoxprozessen. Redoxmessung in salinaren Systemen.
- AP3: Vergleichende Tc(VII) Sorptions- Untersuchungen werden an kristallinen Materialien aus dem russischen Standort für eine tiefengeologische Lagerung radioaktiver Abfälle (Niznekamsk Massiv) und synth. Eisenoxiden unter Verwendung von Fe-59 durchgeführt. Ein neues experimentelles Programm zu Tc(IV) Sorption in natürlichen Systemen wird gestartet.
- AP4: Free-Drift Versuche bei hohen Übersättigungen ( $\text{SI} = 1.2$  bis  $4.0$ ) und Aragonit – Calcit Rekristallisationsversuche (= Calcit Wachstum bei  $\text{SI} = 0.14$ ) sollen klären in wie fern die Übersättigung (Wachstumsrate) einen Einfluss auf den Se(IV) Einbau in Calcit hat. 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. für „Radiochimica Acta“ zu Tc-Redox Arbeiten aus AP2 ist in Vorbereitung. Manuskript zum Se(IV) Einbau in Calcit aus AP4 (Heberling et al.) ist in Vorbereitung.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 führte der Zuwendungsempfänger seine Modellberechnungen zur Konvergenz eines tiefen Bohrlochs in der Schachanlage Asse II durch und verglich seine Ergebnisse mit In-situ-Messdaten der Netherlands Energy Research Foundation ECN. Mit Berechnungen der isothermen Bohrlochkonvergenz bei der Gebirgstemperatur 42 °C ermittelte er CDM-Parameterwerte für das umgebende Steinsalz. Mit ihnen simulierte er die Aufheizung der Bohrlochwand in 19 Tagen auf 229 °C und die anschließende Abkühlung (HFCEP-Versuch der ECN). Dabei ergab sich eine gute Übereinstimmung mit den In-situ-Konvergenzmessdaten.

Vom 20.-21.09.2011 führten die Partner in Clausthal-Zellerfeld den 5. Projekt-Workshop durch (Veranstalter: TU Clausthal), auf dem sie aktuelle Arbeiten und Ergebnisse vorstellten und besprachen. Vom 09.-10.11.2011 präsentierte der Zuwendungsempfänger auf dem 2. US-German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation in Peine Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes. Ferner verfasste er zur Saltmech7-Konferenz in Paris (April 2012) Veröffentlichungen zum Verbundprojekt und zum CDM-Stoffgesetz.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird die Ergebnisse der Projektpartner aus den thermomechanischen Modellberechnungen der Bohrlochkonvergenz in der Schachanlage Asse II vergleichen. Außerdem wird er die vorliegenden Laborversuche zum thermomechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz mit dem CDM-Stoffgesetz nachrechnen sowie die Modellierung der Untertagestruktur „Dammjoch“ beginnen. Er wird Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes auf der Saltmech7-Konferenz (16.-19.04.2012 in Paris) präsentieren und den 6. und 7. Projektworkshop (TU Braunschweig, IfG Leipzig) vorbereiten und mit den Partnern durchführen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum CDM-Stoffgesetz und zu den vorlaufenden Verbundprojekten:

Hampel, A. & O. Schulze (2007): The Composite Dilatancy Model: A constitutive model for the mechanical behavior of rock salt. In: K.-H. Lux, W. Minkley, M. Wallner & H.R. Hardy, Jr. (Hrsg.): Basic and Applied Salt Mechanics; Proc. Sixth Conf. on the Mechanical Behavior of Salt (Saltmech 6), Hannover, Mai 2007, Taylor & Francis (A. A. Balkema Publ.), Lisse.

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 I (FKZ 02C1004-1054), Karlsruher Institut für Technologie, Projektträger PTKA-WTE.

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

Hampel, A., R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, K. Staudtmeister, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, K.-H. Lux, O. Schulze, U. Heemann, U. Hunsche (2010): Benchmarking of Geomechanical Constitutive Models for Rock Salt. In: Proc. 44th US Rock Mechanics Symposium (ARMA 2010), Salt Lake City/Utah/USA, 27.-30.06.2010, American Rock Mechanics Association (ARMA).

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011
<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 einen Projekt-Workshop am 20./21. September 2011 in Clausthal-Zellerfeld durch (veranstaltet vom Zuwendungsempfänger TU Clausthal).

Auf diesem Workshop wurden von den Partnern Simulationsergebnisse von thermo-mechanischen Berechnungen vorgestellt und diskutiert. Diesbezüglich präsentierte der Zuwendungsempfänger seine Ergebnisse der durchgeführten numerischen Simulationen zu den vereinbarten Versuchen IFC (freie Bohrlochkonvergenz) und HFCP (freie Bohrlochkonvergenz mit Erhitzer). Die vorgesehenen thermo-mechanischen Berechnungen konnten damit im 2. Halbjahr 2011 abgeschlossen werden. Es stehen lediglich noch Arbeiten für den Ergebnisvergleich zwischen den einzelnen Projektpartnern aus. Neben diesen Simulationsergebnissen stellte der Zuwendungsempfänger auf dem Projekt-Workshop den Stand seiner laborativen Untersuchungen vor.

Zusätzlich wurden im Berichtszeitraum numerische Re-Analysen von Verheilungsversuchen unternommen. Hinsichtlich der numerischen Benchmark-Simulation zur Verheilung wurde für die Re-Analyse der Untertagesituation „Dammjoch“ ein Berechnungsmodell erstellt und erste Simulationen durchgeführt. 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.

Von den vereinbarten Laborversuchen wurden beim Zuwendungsempfänger im Berichtszeitraum die beiden im ersten Halbjahr 2011 gestarteten Laborversuche beendet sowie ein weiterer Versuch neu aufgesetzt. Bei dem neu gestarteten Versuch 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 60 °C durchgeführt. Da bei den zuvor durchgeführten Versuchen Messungenauigkeiten in der Dilatanzmessung auftraten, wurde im Vorfeld des neuen Versuchs das Abdichtungssystem im Dilatanzmesszylinder modifiziert.

### 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.

### 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 316.242,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Salzer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Partner am 20.-21. September in Clausthal ein Projekt-Workshop (veranstaltet von TUC) durch. Auf den Workshops wurden Berechnungsergebnisse zu den gemeinsam vereinbarten und von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen vorgestellt und besprochen. Außerdem wurden Labor- und In-situ-Daten sowie Modellansätze zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz diskutiert und die Rahmenbedingungen für weitere Modellberechnungen gemeinsam festgelegt.

Das vorliegende Teilvorhaben 2 beteiligt sich mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley und dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach Günther/Salzer am Stoffgesetzvergleich 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 10 Kriechversuche abgeschlossen und 5 weitere begonnen. Außerdem wurden die geplanten, triaxialen Druckversuche bei unterschiedlichen Manteldrücken und Temperaturen (30 °C, 60 °C und 90 °C) durchgeführt.

Die Benchmark-Berechnungen zu den Bohrlochversuchen mit und ohne Erhitzer wurden im Berichtszeitraum auch mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley realisiert. Mit diesen Berechnungen wurde ebenfalls eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Werten erzielt. Diese Arbeiten wurden auf dem vierten Projektworkshop am 20. und 21. September in Clausthal den Partner vorgestellt und diskutiert. Es wurden Veröffentlichungen zum Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz und für das visko-elasto-plastische Stoffmodell für Saltmec7 in Paris angenommen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das IfG wird als Nächstes den in den Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz bereits eingefügten und validierten Modul zur Berücksichtigung der Verheilung in den visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley implementieren und testen. Außerdem wird es den fünften Projektworkshop gemeinsam mit den Partnern am 23. und 24. Januar 2012 an der TU Braunschweig durchführen und dort die Ergebnisse der triaxialen Druckversuche bei unterschiedlichen Manteldrücken und Temperaturen vorstellen und übergeben. Weiterhin sind erste Modellrechnungen mit dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz für das In-situ-Verhalten der Verheilung am Beispiel des Dammjochs geplant

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zu dem IfG-Stoffgesetz und zu den vorlaufenden Verbundprojekten:

Günther, R.-M., Salzer, K. and Popp, T. (2010): Advanced Strain – Hardening Approach Constitutive model for rock salt describing transient, stationary, and accelerated creep and dilatancy. 44<sup>th</sup> US Rock Mechanics Symposium and 5<sup>th</sup> U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, Salt Lake City, UT June 27–30, 2010

Hampel, A., Günther, R.-M., Salzer, K., Minkley, W., Pudewills, A., Leuger, B., Zapf, D., Staudtmeister, K., Rokahr, R., Herchen, K., Wolters, R., Lux, K.-H., Schulze, O., Heemann, U. and Hunsche, U. (2010): Benchmarking of Geomechanical Constitutive Models for Rock Salt. 44<sup>th</sup> US Rock Mechanics Symposium and 5<sup>th</sup> U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, Salt Lake City, UT June 27–30, 2010

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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

Ziel der thermomechanischen Nachrechnungen der in der Schachtanlage Asse II durchgeführten ECN-Experimente war, den Entwicklungsstand der Rechenprogramme und Stoffgesetze zur Erfassung der durch thermische Belastung hervorgerufenen Verformungen (Kriechen, Dilatanz und Verheilung) sowie die Spannungen zu zeigen. Im vorherigen Berichtszeitraum wurden 2D- und 3D-Modellrechnungen zum ersten ECN-Test in dem 300 m tiefen Bohrloch, das „Isothermal Free Convergence (IFC) Versuchs“ durchgeführt. Dabei wurde das vorhandene Kriechgesetz neu an die in situ gemessenen Konvergenzen über einen Zeitraum von 900 Tagen angepasst. Diese Ergebnisse wurden bei dem dritten und vierten Workshops präsentiert.

Im Berichtszeitraum wurde das Erhitzerexperiment (HFCEP) ebenfalls nachgerechnet, um die thermomechanischen Stoffgesetze für Steinsalz zu überprüfen. In diesem Versuch wurde eine 3 m lange Erhitzermesssonde mit einer Wärmeleistung von ca. 1700 W/m verwendet. Dabei wurden die Temperaturentwicklung und die Bohrlochkonvergenz an der Bohrlochwand über 22 Tage gemessen. Zuerst wurde ein 2D-axialsymmetrisches Modell untersucht. Die Temperaturentwicklung im Versuchsfeld und die hervorgerufenen thermomechanischen Effekte wurden mit dem Programmsystem ADINA gekoppelt berechnet. Der Vergleich dieser Rechenergebnisse mit den gemessenen Temperaturen und Konvergenzen wurde bereits bei dem 4. Workshop in Clausthal dargestellt. Weiterhin wurde auch ein 3D Finite-Element Modell für ein Viertel der Versuchsgeometrie hergestellt und untersucht, um einen direkten Vergleich der mit dem ADINA Programm erhaltenen Rechenergebnisse mit denen vom Programm FLAC-3D zu ermöglichen. Die Vorbereitungsarbeit zur numerischen Simulation des so genannten „Dammjoch“ im Asse Bergwerk wurde begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird die Rechenergebnisse aus den thermomechanischen Modellberechnungen der Bohrlochkonvergenz in der Schachtanlage Asse II für den Vergleich mit denen von Projektpartnern bereitstellen. Außerdem wird er die vorliegenden Laborversuche zum thermomechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz Stoffgesetz nachrechnen sowie die Modellierung der Untertagestruktur „Dammjoch“ beginnen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum Steinsalzstoffgesetz und zu den vorlaufenden Verbundprojekten:

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

Hampel, A., 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 I (FKZ 02C1004-1054), Karlsruher Institut für Technologie, Projektträger PTKA-WTE.

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

Hampel, A., R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, B. Leuger, D. Zapf, K. Staudtmeister, R. Rokahr, K. Herchen, R. Wolters, K.-H. Lux, O. Schulze, U. Heemann, U. Hunsche (2010): Benchmarking of Geomechanical Constitutive Models for Rock Salt. In: Proc. 44th US Rock Mechanics Symposium (ARMA 2010), Salt Lake City/Utah/USA, 27.-30.06.2010, American Rock Mechanics Association (ARMA).

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011
<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

Weiterfolgende bzw. abschließende Ergebnisse zu dem ECN Versuch wurden durchgeführt, vorgestellt und mit den anderen Projektpartnern verglichen und diskutiert. Mit dem zu dieser Berechnung angepassten Materialparametersatz und den zu berücksichtigenden Randbedingungen wurden die Berechnungen zum Erhitzer-Versuch HFCE durchgeführt und in den Projektworkshops vorgestellt und diskutiert. Die Modellierung des HFCE-Versuchs wurde modifiziert, so dass weitere Berechnungen erforderlich geworden sind, welche beim kommenden Workshop vorgestellt werden. Einige der Verheilungsversuche der TUC wurden mit unserem Stoffgesetz analysiert und vorgestellt. Gegenwärtig wird dieser Themenpunkt weiter bearbeitet. Des Weiteren wurden erste Modelle zum Dammjoch erstellt, welche im nächsten Projektworkshop vorgestellt werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Ergebnisse der HFCE Versuche sollen in einem Datensatz zusammengefasst und mit den Ergebnissen der anderen Projektpartners gegenübergestellt werden, so dass dieser Aufgabenteil abgeschlossen werden kann. Die Randbedingungen zum Dammjoch sollen unter den Projektpartnern besprochen und für erste Berechnungen, welche für das nächste Halbjahr vorgesehen sind, festgelegt werden. Die Verheilungsversuche der TUC sollen zunächst an einem Ein-Zonen-Modell numerisch analysiert und mit den Berechnungen der anderen Projektpartners verglichen werden. Außerdem sollen die Kriech- und Festigkeitsversuche des IfG untersucht und vorgestellt 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 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**

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich an dem Stoffgesetzvergleich im Teilvorhaben 6 mit dem Stoffgesetz für Steinsalz nach 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.

Auf dem vierten Projektworkshop am 20. und 21.09.2011 am Institut für Deponietechnik und Geomechanik der TU Clausthal wurden die Ergebnisse der numerischen Berechnungen mit FLAC3D für die COSA II Versuche "IFC" und "HFCE" vorgestellt. Außerdem wurden erste Ergebnisse der Nachrechnungen von Laborversuchen aus dem ersten Verbundvorhaben, die mit ANSYS durchgeführt wurden, gezeigt. Die Nachrechnung des "HPP" Versuchs ist optional.

Im Berichtszeitraum wurden die ersten Ansätze für einen Verheilungsansatz weiterentwickelt und in ANSYS umgesetzt. Die Überprüfung des Verheilungsansatzes erfolgte an Hand von Versuchen der TU Clausthal, wobei die Interpretation der Versuchsergebnisse, die eine größere Verheilung als Schädigung zeigen, noch zu diskutieren ist. Des Weiteren wurden die IfG-Versuche mit unterschiedlichen Spannungsdifferenzen in den Temperaturstufen 300 K, 333 K und 360 K nachgerechnet.

Außerdem wurde der nächste Workshop in Braunschweig vorbereitet und eine Befahrung der Asse am 24.01.2012 organisiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Für den Januar 2012 ist die Durchführung des 5. Workshops an der TU Braunschweig und eine Befahrung des Schachtes Asse II geplant.

Auf Basis der Ergebnisse der Verheilungsversuche und der ersten Nachrechnungen soll für das Stoffgesetz der Verheilungsterm besser angepasst werden. Außerdem ist ein Kriechraten-Effektivspannungs-Diagramm für unterschiedliche Temperaturen zu erstellen. Die von SANDIA übergebenen Versuchsdaten sollen ausgewertet und auf ihre Nutzbarkeit zur Bestimmung von Materialkennwerten für WIPP-Salz beurteilt werden. Im Folgenden soll ein ergänzendes Versuchsprogramm mit dem IfG und der TU Clausthal ausgearbeitet werden.

Die Versuche aus dem COSA II Report ("IFC" und "HFCE") werden mit dem ANSYS nachgerechnet.

### **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>Auftragnehmer:</b> Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10870</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Instrumente, Bedarf und Potentiale für Wissensmanagement in der Endlagerforschung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2010 bis 30.11.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 30.11.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 125.719,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Schmidt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist es, die modernen Methoden und Werkzeuge des Wissensmanagements aufzuzeigen, die prinzipiell für die Endlagerforschung zur Verfügung stehen und die Bedürfnisse und Erwartungen der Nutzer von Wissen aus dem Bereich der Endlagerforschung an solche Systeme zu erfassen, um durch Kombination verschiedener Wissensmanagementtools deren Vor- und Nachteile hinsichtlich ihrer Möglichkeiten, des Implementierungs- und Pflegeaufwands näher zu betrachten und zu bewerten.

Das Vorhaben trägt dazu bei, die Anwendungsmöglichkeiten von Instrumenten auszuloten, die in Wirtschaft und Verwaltung heute bereits eingesetzt werden. Das Ziel ist, mit deren Einsatz die Forschung transparenter zu machen und die Verfügbarkeit von Ergebnissen und deren Übersichtlichkeit zu verbessern.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Zusammenstellung von aktuellen Methoden und Werkzeugen des Wissensmanagements:

Hier soll einen breiter Überblick über den verfügbaren Stand der Technik beim Wissensmanagement geben. Die Zusammenstellung geht auf inhaltsorientierte Systeme detaillierter ein.

AP2: Ermittlung des Nutzungspotenzials:

Durch Befragung von in der Endlagerforschung tätigen Personen/Organisationen soll der bisherige Stand des Wissensmanagements und der bei Nutzern vorhandene Bedarf für solche Instrumente erhoben werden.

AP3: Entwicklung und Bewertung von Wissensmanagementmethoden für die Endlagerforschung:

Es werden Methoden und Werkzeuge des Wissensmanagement mit dem ermittelten Bedarf kombiniert und mögliche Szenarien entwickelt. Die Szenarien werden bewertet (z. B. nach Aufwand, Nutzerfreundlichkeit, Transparenz, Kompatibilität mit vorhandenen Teillösungen) und günstige Lösungswege aufgezeigt.

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

Im I. bzw. III. Quartal 2011 wurden die Arbeitspakete AP1 und AP2 abgeschlossen.

Die Arbeiten für AP1, der Darlegung der Grundbegriffe, Methoden und Techniken des Wissensmanagements, der Beschreibung verschiedener Anwendungsbeispiele für Wissensmanagement und dem Aufzeigen der Hemmnisse und Schwierigkeiten wurden abgeschlossen. Aus diesen Arbeiten wurden für AP3 Rahmenbedingungen und Voraussetzungen für die IT-Unterstützung des Wissensmanagements der Endlagerforschung erarbeitet.

Die Ergebnisse der in AP2 durchgeführten Telefoninterviews und des im März 2011 durchgeführten Statusgesprächs wurden zusammengefasst und ausgewertet. Die Antworten zu den verschiedenen Fragenkomplexen wurden dazu in erster Linie themenspezifisch ausgewertet und ggf. nach typisierten Organisationsprofilen aggregiert, so dass die einzelnen Ergebnisse veröffentlicht werden können, sich aber nicht mehr einer konkreten Organisation zuordnen lassen (Schutz der Einzeldaten). Die Befragung internationaler Institutionen wurde durchgeführt und ausgewertet.

Zu AP3 wurden aus den Ergebnisse von AP1 und AP2 die relevanten Aspekte für die Verbesserung des Wissensmanagements in den einzelnen Organisationen, zwischen den Organisationen und der Querschnittsaufgaben dargestellt und im Hinblick auf Nutzererwartungen, vorhandener technischer Stand in den Organisationen und verfügbaren WM-Tools analysiert und im Hinblick auf diese ausgewertet. Aufgrund der Vielfalt von Nutzererwartungen wurden sowohl typische als auch anwenderspezifische Situationen herausgearbeitet und die verfügbaren Instrumente daneben gestellt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Gemäß dem aktuellen Zeitplan wird der Abschlussbericht bis zum 31.05.2012 fertiggestellt. Projekt befindet sich im Abschluss.

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

Keine.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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:

Es wurden die Daten der Versuche zur Bestimmung der Lösegleichgewichte im  $\text{Mg}(\text{OH})_2$ - $\text{MgCl}_2$ - $\text{H}_2\text{O}$  System bei 60 °C und 80 °C und ausgewertet. Es wurde festgestellt, dass sich bisher nur metastabile Gleichgewichtszustände eingestellt haben. Unter veränderten Ansatzbedingungen (Einsatz von extrem schwach reaktivem MgO) und Verlängerung der Versuchszeiten sollen die stabilen Gleichgewichtszustände erreicht werden.

Es wird an der Veröffentlichung der 25 °C- und 40 °C-Daten gearbeitet.

AP2:

Die Daten zur Bestimmung der Lösegleichgewichte im  $\text{Mg}(\text{OH})_2$ - $\text{MgSO}_4$ - $\text{H}_2\text{O}$  System bei 25 °C und 40 °C wurden ausgewertet. Die 3-1-8 Phase scheint bei beiden Temperaturen die metastabile Phase in  $\text{MgSO}_4$ -Lösungen oberhalb 1,5 molal (unterhalb ist Brucit stabil) zu sein. Die 5-1-2 Phase ist offensichtlich die stabile Phase.

AP3:

Versuche mit der Rezeptur R1a (3-1-8 Phase als reine Bindemittelphase ohne Zusätze/Zuschläge) zeigten, dass auch unter Variation möglicher, verschiedener MgO-Reaktivitäten keine technologisch verarbeitbare Baustoffrezeptur hergestellt werden kann. Zur Stabilisierung der Baustoffsuspension wurde, wie für den Fall einer späteren Betonrezeptur, kristalliner Quarz, jedoch nur der feinkörnige Anteil zugemischt. Diese Rezeptur (R2a) wurde bezüglich der Kornverteilung und Phasenanteile optimiert. Anhand von Abbindevorversuchen und Viskositätsmessungen konnte nun eine technologisch verarbeitbare Baustoffrezeptur hergestellt werden.

Versuche mit der R1a-Rezeptur haben gezeigt, dass eine Gewährleistung der Massekonstanz besonders bei hohen Abbinde Temperaturen für die Interpretation der Laborergebnisse sichergestellt sein muss. D. h. sämtliche Probekörper müssen in gasdichten Behältern bzw. Apparaturen abbinden. Dazu wurden zahlreiche Stahlzellen mit Teflondichtungen hergestellt und werden z. T. noch getestet.

AP4:

Die Apparatur zur Bestimmung des Expansionsdruckes bei  $V = \text{konst.}$  wurde fertiggestellt und kalibriert (6 Zellen, davon 3 temperierbar). Die geplanten Messungen der freien Expansion im offenen Kegel nach hoher Abbinde Temperatur müssen entfallen, da das System nicht gasdicht ist und die Probekörper somit während der Abbinde reaktion oberflächlich austrocknen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Versuchsansätze zu Lösegleichgewichten bei hohen Temperaturen (AP1, AP2). Auswertung und Vergleich der halbjährlich zu prüfenden Reaktivitäten von MgO nach Alterung sowie für Neulieferungen (AP3). Großansatz der R2a-Rezeptur zur Untersuchung des temperaturabhängigen Phasen- und Gefügebildung sowie des Expansionsverhaltens (AP4) nach erfolgreicher Gasdichtheitsprüfung der Probekörper-Stahlzellen der Quelldruckapparatur .

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10890</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011
<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

Nach Abschluss der Anforderungsanalyse konzentrierten sich die Arbeiten im 2. Halbjahr auf die technische Konzeption und die Implementierung der VIRTUS-Softwareplattform.

AP1.2: Auf Basis der Anforderungsanalyse wurde mit der technischen Konzeption der VIRTUS-Softwareplattform begonnen. Im ersten Schritt wurde ein Konzept für die Gesamtsystemarchitektur der VIRTUS-Plattform erstellt. Das Konzept sieht vor, das VIRTUS-Gesamtsystem in zwei wesentliche Komponenten zu unterteilen, ein lokales System als Nutzerschnittstelle und einen zentralen Server zur Datenbereitstellung. Für die Nutzung der VIRTUS-Softwareplattform wurden verschiedene Workflows entwickelt, die auf einem vom Fraunhofer IFF entwickelten Pipelinekonzept aufsetzen, gespeichert werden können und somit für weitere Nutzer nachvollziehbar und reproduzierbar sind.

Die VIRTUS-Plattform bereitet die aus openGEO stammenden geologischen Modelldaten (BGR) ebenso Daten des Grubengebäudes (DBETec bzw. Eigenerstellung in VIRTUS) als Simulationseingangsdaten für die von den beteiligten Institutionen genutzten PLC-Simulatoren auf. Für die Übergabe dieser Daten wurde von BGR ein entsprechendes PLC unabhängiges, konsistentes Übergabeformat für das geologische Modell, das FE-Modell, Materialparameter und Belastungsmuster (Pattern) auf XML-Basis entworfen. Für die Übergabe des Simulationsergebnisses von den PLCs an VIRTUS wurde hinsichtlich der zu erwartenden Datenvolumen nach Vorgabe der Projektpartner von IFF ein binäres Übergabeformat definiert.

AP1.3: Zunächst wurde eine graphische Nutzerschnittstelle eingerichtet, welche die Ausgangsbasis für die folgenden Implementierungsarbeiten bildet. Darauf aufbauend wurde ein Importer entwickelt, der es ermöglicht, openGEO-Modelle in die VIRTUS-Plattform zu übernehmen und darzustellen. Erste Verarbeitungsschritte für importierte geologische Modelle, wie z. B. das Extrahieren relevanter Teilbereiche sowie die Reduzierung der Polygonanzahl von Modellflächen wurden implementiert.

AP2: Das Literaturscreening wurde im 2. Halbjahr durchgeführt und die Ergebnisse in speziellen Materialtabellen dokumentiert, welche die Grundlage für die gezielte parameter-spezifische Literaturoswertung bilden. Die zugehörige THM-Datenbank ist als Prototyp entwickelt (GRS) und wurde durch Eingabe eines ersten THM-Datensatzes erfolgreich getestet (GRS).

AP5: Eine erste 3D-THM-Modellierung zum Testen der Datenübernahme vom PLC an VIRTUS und zur Erprobung der aussagekräftigen Visualisierung verschiedener Ergebnisgrößen wurde vorgenommen (GRS).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Implementierung der noch fehlenden Bearbeitungsschritte für geologische Modelle (wie z. B. Glättung, Optimierung der Dreiecksqualität), Implementierung des Pipeline-Konzepts, Implementierung von Methoden zur Erstellung von Grubengebäuden, Einbauten, etc., Export von Experimentdaten in Richtung Prozess Level Code, Implementierung entsprechender PLC-Schnittstellen, Übernahme, Vorverarbeitung und Darstellung von PLC-Ergebnisdaten, Rückspielung der PLC-Ergebnisse und des für die PLC-Rechnungen vereinfachten geologischen Modells nach openGEO, Anbindung der VIRTUS-Softwareplattform an die Datenbank, Spezifikation & Aufbau der Server Hard- und Softwareinfrastrukturen, Auswertung der vorhandenen Primärliteratur mit Ableitung einer konsolidierten qualitätsgesicherten Datenbasis für die PLC-Simulationen sowie Dateneingabe in die THM-Datenbank.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10900</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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:

Zum Aufbau einer qualitätsgesicherten THM-Datenbank wird ein Literaturscreening zur Ermittlung des möglichen Datenbestandes durchgeführt. Die im vorigen Berichtszeitraum erstellte Literaturliste wurde nochmals durch neuere Einträge aktualisiert. Gemäß der mit GRS und BGR vereinbarten Aufteilung wurde eine Beschaffung sämtlicher Literatureinträge initiiert und, von wenigen Ausnahmen abgesehen, auch erfolgreich abgeschlossen. Die so erstellte Literatursammlung wurde anschließend Stück für Stück durchgesehen und hinsichtlich ihrer Relevanz für die THM-Datenbank bewertet. Auf diese Weise entstand eine reduzierte Literaturliste, die nur noch Referenzen enthält, in denen Aussagen zu den für die Simulation des THM-Verhaltens von Steinsalz und Salzgrus verwendeten Stoffgesetzen und zugehörigen Parametern zu finden sind.

Für die Erfassung der qualitätsgesicherten Daten wurde eine Liste der zu erfassenden Geomaterialien bzw. auch weiterer Materialien (z. B. Nebengesteine, Materialien in den Leitexperimenten usw.) abgestimmt, die in der Datenbank Berücksichtigung finden sollen. Hierbei soll auch nach Standorten unterschieden werden. Bei der Dateneingabe wird zunächst der „Standort VIRTUS“ (virtueller Standort) vorrangig mit Daten aufgefüllt werden, wobei die Daten aber auch jeweils dem Standort zusätzlich zugewiesen werden sollen, von dem sie stammen. Insgesamt werden somit geprüfte THM-Datenbasen für die vier Standorte Asse, Morsleben, Gorleben und VIRTUS entstehen.

Es wurde damit begonnen, die Literaturzitate verschiedenen Klassen von Stoffgesetzen zuzuordnen. Eine Unterteilung erfolgte in die Klassen: Thermik, Hydraulik, Mechanik sowie den gekoppelten Klassen Thermo-mechanik, Thermo-hydraulik, Hydro-mechanik und Thermo-hydro-mechanik. Diese Zuordnung in sogenannte Materialtabellen bildet die Grundlage für die gezielte parameter-spezifische Literatúrauswertung. Die zugehörige THM-Datenbank ist als Prototyp entwickelt. Diese vorläufige, auf Access-Basis beruhende Datenbank wurde mit den erforderlichen Eingabeformularen für Testzwecke bereitgestellt. Erste Erfahrungen mit der Eingabe eines vorläufigen Datensatzes ergaben ein zufriedenstellendes Bild. Kleine Verbesserungen wären zwar noch anzustreben, aber da es sich nur um eine vorläufige Datenbank handelt, wird darauf verzichtet. Die endgültige THM-Datenbank ist gemäß Virtuspflichtenheft von IFF bereitzustellen. IFF wird dazu einen Vorschlag für ein geeignetes Softwareprodukt machen. Ggf. ist das Microsoft-Datenbanksystem Microsoft SQL-Server geeignet. IFF wird nur die in die Access-Datenbank eingetragenen Daten übernehmen und in Abstimmung mit den Projektpartnern neue, für die jeweilige PLC Software geeignete Eingabeformulare bereitstellen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Auswertung der vorhandenen Primärliteratur mit Ableitung einer konsolidierten qualitätsgesicherten Datenbasis für die PLC-Simulationen
- Weiterentwicklung des Datenbankschemas
- 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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10910</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 372.697,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Behlau	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nach Abschluss der Anforderungsanalyse konzentrierten sich die Arbeiten im 2. Halbjahr auf die technische Konzeption und die Implementierung der VIRTUS-Softwareplattform.

AP1.2: Auf Basis der Anforderungsanalyse wurde mit der technischen Konzeption der VIRTUS-Softwareplattform begonnen. Im ersten Schritt wurde ein Konzept für die Gesamtsystemarchitektur der VIRTUS-Plattform erstellt. Das Konzept sieht vor, das VIRTUS-Gesamtsystem in zwei wesentliche Komponenten zu unterteilen, ein lokales System als Nutzerschnittstelle und einen zentralen Server zur Datenbereitstellung. Für die Nutzung der VIRTUS-Softwareplattform wurden verschiedene Workflows entwickelt, die auf einem vom Fraunhofer IFF entwickelten Pipelinekonzept aufsetzen, gespeichert werden können und somit für weitere Nutzer nachvollziehbar und reproduzierbar sind.

Die VIRTUS-Plattform bereitet die aus openGEO stammenden geologischen Modelldaten (BGR) ebenso Daten des Grubengebäudes (DBETec bzw. Eigenerstellung in VIRTUS) als Simulationseingangsdaten für die von den beteiligten Institutionen genutzten PLC-Simulatoren auf. Für die Übergabe dieser Daten wurde von BGR ein entsprechendes PLC unabhängiges, konsistentes Übergabeformat für das geologische Modell, das FE-Modell, Materialparameter und Belastungsmuster (Pattern) auf XML-Basis entworfen. Für die Übergabe des Simulationsergebnisses von den PLCs an VIRTUS wurde hinsichtlich der zu erwartenden Datenvolumen nach Vorgabe der Projektpartner von IFF ein binäres Übergabeformat definiert.

AP1.3: Zunächst wurde eine graphische Nutzerschnittstelle eingerichtet, welche die Ausgangsbasis für die folgenden Implementierungsarbeiten bildet. Darauf aufbauend wurde ein Importer entwickelt, der es ermöglicht, openGEO-Modelle in die VIRTUS-Plattform zu übernehmen und darzustellen. Erste Verarbeitungsschritte für importierte geologische Modelle, wie z. B. das Extrahieren relevanter Teilbereiche sowie die Reduzierung der Polygonanzahl von Modellflächen wurden implementiert.

AP2: Das Literaturscreening wurde im 2. Halbjahr durchgeführt und die Ergebnisse in speziellen Materialtabellen dokumentiert, welche die Grundlage für die gezielte parameter-spezifische Literaturlauswertung bilden. Die zugehörige THM-Datenbank ist als Prototyp entwickelt (GRS) und wurde durch Eingabe eines ersten THM-Datensatzes erfolgreich getestet (GRS).

AP5: Eine erste 3D-THM-Modellierung zum Testen der Datenübernahme vom PLC an VIRTUS und zur Erprobung der aussagekräftigen Visualisierung verschiedener Ergebnisgrößen wurde vorgenommen (GRS).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Implementierung der noch fehlenden Bearbeitungsschritte für geologische Modelle (wie z. B. Glättung, Optimierung der Dreiecksqualität), Implementierung des Pipeline-Konzepts, Implementierung von Methoden zur Erstellung von Grubengebäuden, Einbauten, etc., Export von Experimentdaten in Richtung Prozess Level Code, Implementierung entsprechender PLC-Schnittstellen, Übernahme, Vorverarbeitung und Darstellung von PLC-Ergebnisdaten, Rückspielung der PLC-Ergebnisse und des für die PLC-Rechnungen vereinfachten geologischen Modells nach openGEO, Anbindung der VIRTUS-Softwareplattform an die Datenbank, Spezifikation & Aufbau der Server Hard- und Softwareinfrastrukturen, Auswertung der vorhandenen Primärliteratur mit Ableitung einer konsolidierten qualitätsgesicherten Datenbasis für die PLC-Simulationen sowie Dateneingabe in die THM-Datenbank.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10921</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA- (TV1)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2011 bis 30.04.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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: Die größte technische Reife erreicht das Schachtverschlusskonzept "Salzdetfurth" mit den Hauptelementen Bentonitdichtelement und setzungsstabile Schottersäule. Nach diesem Konzept sind bereits drei Schächte langzeitsicher und flüssigkeitsdicht verwahrt worden. Für Standorte im Tonstein schlägt die NAGRA ein ähnlich aufgebautes Konzept vor. Für andere Vorschläge mit weiteren Elementen (z. B. Salzgrusfüllsäule) gibt es keine realisierten Referenzobjekte. Zu Dichtelementen aus Bitumen / Asphalt existieren Erfahrungen aus dem klassischen Bergbau. Zu bitumenverfüllten Schotterelementen laufen aktuelle Untersuchungen.

AP3: Für die Wirtsgesteine Salinar und Tonstein wurden die bekannten Daten zu den Randbedingungen in einem Schacht zusammengestellt. Eine Verallgemeinerung der geomechanischen Materialparameter für Standorte im Salinar ist nicht möglich. Für den Standort Gorleben werden die dafür entwickelten Stoffgesetze BGRa und BGRb angewendet. Für deutsche Standorte im Tonstein ist der Erkundungsgrad noch sehr gering.

Die Strömungs- und Transportprozessen werden für die Wirtsgesteine Steinsalz und Tonstein sowie für die Dichtmaterialien Bentonit und Bitumen / Asphalt betrachtet, untergliedert in Einphasen- und Zweiphasenströmung.

Zu den geochemischen Randbedingungen Es wurden bisher Daten zum Phasenbestand von Salzgestein, beispielhaft für den Salzstock Gorleben die Zusammensetzungen der Zechsteinabfolgen, speziell für die Leine- und Stassfurt-Sequenzen erfasst. Entsprechend der Salzmineralbestände wurden die Zusammensetzungen der Gleichgewichtslösungen berechnet und mit den in Gorleben vorgefundenen Lösungen verglichen. Die Wechselwirkungen der Lösungen mit ausgewählten Verschlussmaterialien wurden bewertet/abgeleitet. Für Tonstein wurden Daten am Beispiel des Opalinus Tonsteins erfasst.

Allg.: Vertragsabschluss mit dem Unterauftragnehmer IBeWa.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Arbeiten sind abgeschlossen.

AP3: Fertigstellung des Berichtes zu AP3.

AP5: Einbindung des Vorhabens in die Technologieplattform und Planung des Folgevorhabens. Der ursprünglich geplante Workshop mit ausländischen Partnern soll entfallen und stattdessen Konzepte für die Einbindung von Partnern über die Technologieplattform ausgearbeitet werden.

Allg.: Erstellung des Abschlussberichtes.

### 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 30.04.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 240.168,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3:

Im Rahmen dieses Arbeitspaketes wird u. a. die Größe der Auflockerungszone anhand indikativer numerischer Berechnungen für den Schacht in Gorleben sowie für zwei potenzielle Schächte in den zwei eignungshöffigen Tonsteinregionen in Deutschland abgeschätzt. Die Berechnungen werden mit dem Computercode FLAC3D durchgeführt. Im Berichtszeitraum wurde für alle drei Modellstandorte die Größe der Auflockerungszone ermittelt. Für den Schacht in Gorleben ergaben sich zwei interessante Aspekte. In der Anfangsphase der Schachterstellung wurde eine Auflockerungszone errechnet, deren horizontale Ausdehnung erwartungsgemäß mit der Teufe zunimmt. Nach Erreichen der durchschlägigen Bewetterung im Grubengebäude von Schacht zu Schacht kehrte sich dieses Verhalten um. Durch den bewetterungsbedingten Temperatureinfluss, der eine Absenkung der mittleren Temperatur von 20 °C ausmacht, wurde die Auflockerungszone im oberen, nicht ausgebauten Schachtbereich mit einer Größe von bis zu 7 m berechnet, wohingegen sie im unteren Bereich deutlich weniger in das Gebirge hineinreicht. Diese zunächst überraschenden Ergebnisse sind allerdings plausibel, da BGR Risse in der Schachtkontur detektiert hat, die mehrere Meter (4-5m) in das Gebirge hineinreichten. Diese Risse sind durch den oben beschriebenen Temperatureinfluss erzeugt worden. Das Problem wurde seinerzeit durch die Schachtheizung technisch gelöst. Die Risse haben sich wieder geschlossen. Für die beiden Modellstandorte im Tonstein wurde die zu erwartende Auflockerungszone je nach Standort und Teufe mit einer Ausdehnung von 0,3 bis 1,9 m rechnerisch ermittelt.

AP5:

Am 18. November fand im Hause der TU Bergakademie Freiberg Projektgespräch statt. Auf diesem Gespräch wurde neben der Diskussion über die aktuellen Arbeiten auch über ein abgestimmtes Konzept zur Einbringung eines Internationalen Verbundprojekts Schachtverschluss unter deutscher Federführung (BMWFi) in die „Implementing Geological Disposal Technology Platform (IGD-TP)“ diskutiert. Es wurde vereinbart, ein vorläufiges Versuchskonzept bis Ende Januar 2012 zu entwickeln und dem Koordinator der IGD-TP zur Verfügung zu stellen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Abschluss der Arbeiten zur Charakterisierung der Auflockerungszone in Salz und Tonsteininformationen
- AP4: Weiterführung der Arbeiten zur Formulierung von Anforderung und Auswahlkriterien für Schachtverschlüsse
- AP5: Erarbeitung eines detaillierten Versuchskonzeptes für einen in-situ Versuch im Rahmen der IGD-TP

### 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 Rahmen von AP1 wurden verschiedene Ziehungsverfahren verglichen. Die Ergebnisse weisen darauf hin, dass eine rein zufällig gezogene Stichprobe möglicherweise nicht immer optimal ist. Als Alternative kommt z. B. das Lp-Tau-Verfahren infrage, das eine gleichmäßigere Abdeckung des Parameterraums sicherstellt. Abschließende Erkenntnisse im Hinblick auf Endlagermodelle liegen noch nicht vor.

Die Bestandsaufnahme klassischer und moderner Methoden der globalen Sensitivitätsanalyse sowie ihrer Anwendung auf Endlagerprobleme wurde fortgeführt (AP1). Besonderes Augenmerk wurde dabei zunächst auf so genannte Metamodell- oder Emulations-Verfahren gerichtet. Von diesen wurde das State-Dependent-Parameter (SDP)-Verfahren für weitere Untersuchungen ausgewählt. Mit diesem Verfahren wurde bereits eine Reihe von numerischen Experimenten durchgeführt (AP3). Die Ergebnisse lassen eine weitere Untersuchung des Verfahrens sinnvoll erscheinen.

- Es wurden zunächst drei Testfälle definiert (AP2):
- ein Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle im Salzgestein,
- ein Endlager für Abfälle mit vernachlässigbarer Wärmeentwicklung im Salzgestein,
- ein Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle im Tongestein.

Auf die Festlegung eines Granit-Modells wurde zunächst verzichtet, da das grundsätzliche Verhalten ähnlich wie beim Ton-Modell sein wird. Ggf. wird ein solcher Testfall zu einem späteren Zeitpunkt festgelegt.

Um die effektive Anwendbarkeit verschiedener Ziehungs- und Auswerteverfahren zu gewährleisten wurden einige Programmierarbeiten durchgeführt.

Die Arbeiten wurden durch Teilnahme an den Fachkonferenzen MCM (Monte-Carlo-Modelling) und ESREL 2011 ergänzt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die begonnenen Arbeiten werden fortgesetzt. Zur Bewertung von SDP und anderen Metamodell-Verfahren sind weitere numerische Experimente anhand der verschiedenen Testfälle erforderlich. Dasselbe gilt für den Vergleich von Ziehungsverfahren.

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 Programmierarbeiten werden abgeschlossen und dokumentiert.

Es ist die Teilnahme an den Fachkonferenzen SIAM UQ (Uncertainty Quantification) und PSAM11/ESREL2012 vorgesehen, auf denen jeweils Zwischenergebnisse präsentiert werden sollen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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:

Die Messzellen, Verschraubungen, Schläuche und die Schlauchpumpe wurden beschafft. Aufgrund des hohen Gewichtes der Messzellen können diese nicht auf einem normalen Labortisch gelagert werden. Ein Schwerlasttisch und ein Transportwagen wurden beschafft (Firma Dreckshage, Bielefeld). Der Salzgrus wurde von der Firma esco, Tochter der k+s, bereitgestellt. Um vergleichbares Material zu verwenden wie im Projekt REPOPERM, wurde der Salzgrus auf die Korngröße 0.063 mm bis 8 mm gesiebt.

Zur Charakterisierung des Salzes wurde eine röntgendiffraktometrische Analyse durchgeführt. Der Salzgrus besteht wie erwartet zum Großteil aus Halit. Daneben enthält er Anteile von Anhydrit, Gips, Tonmineralen und Quarz. Eine chemische Analyse gesättigter Grasleben-Salzlauge auf typische, in diesen Mineralen enthaltene Elemente ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  und  $\text{SO}_4^{2-}$ ) wurde durchgeführt.

Eventuell kann in den Diffusionsversuchen eine gesättigte, synthetisch hergestellte NaCl-Salzlauge verwendet werden. Um Umlösungsprozesse auszuschließen, wurde Salzgrus einerseits mit Gralseben-Salzlauge und andererseits mit synthetischer Salzlauge versetzt und zeitabhängig beprobt. Die aus diesen Vorversuchen gewonnenen Proben werden derzeit auf die Konzentration an  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{I}^-$  und  $\text{SO}_4^{2-}$  analysiert.

Aufgrund von analytischen Problemen und im Hinblick auf möglicherweise auftretende Photooxidationsprozesse wird auf den Einsatz von Bromid als Tracer verzichtet. Zusätzlich zu den bereits ausgewählten Tracern Iodid und Caesium kann Kupfer als kationischer Tracer verwendet werden. In diesem Fall könnte mit Hilfe einer ionensensitiven Elektrode der Konzentrationsverlauf während der Experimente kontinuierlich aufgezeichnet werden. Die Einsetzbarkeit solcher Elektroden in gesättigter Salzlauge muss noch im Vorversuch geprüft werden. Die Hintergrundkonzentration der drei Tracer in der synthetischen und der Grasleben-Lauge wurden bestimmt. Diese liegen unter der Bestimmungsgrenze der ICP und damit deutlich unter den in den Experimenten einzusetzenden Tracerkonzentrationen.

Vorversuche zur Kompaktion von Salzgrus in den Messzellen zeigten, dass eine Kompaktion im trockenen Zustand zu einer unverhältnismäßig langen Kompaktionszeit führt. Es ist eine Kompaktion bei einem Wassergehalt von 1 % und einer stufenweise zu erhöhenden Kraft geplant.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Festlegung der zu verwendenden Salzlauge, Tracerkonzentrationen und Pumprate
- Herstellung der Salzgrusproben mit 5 unterschiedlichen Porositäten
- Bestimmung der Permeabilität der hergestellten Proben
- Beginn der Diffusionsexperimente

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10961</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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

Es wurden in ersten Batch- und TRLFS-Experimenten die pH-abhängige Sorption dreiwertiger Lanthanid/Actinidionen ( $\text{Eu}^{3+}/\text{Cm}^{3+}$ ) mit den Tonphasen Montmorillonit und Illit bei unterschiedlicher NaCl Konzentrationen ( $[\text{NaCl}] = 0.1, 1$  und  $4 \text{ mol/L}$ ) untersucht. Die Untersuchungen sollten erste Hinweise darauf geben, ob das 2SPNE SC/CE Modell von Bradbury&Baeyens (PSI) für eine Beschreibung der Sorption an Tonmineralien bei erhöhter Ionenstärke anwendbar ist. Für die Batch-Experimente wurde die Sorption von  $2 \times 10^{-7} \text{ M}$  Eu(III) an  $2 \text{ g/L}$  Ton in einem pH-Bereich zwischen 3 und 10.5 bei den jeweiligen Ionenstärken untersucht. Die TRLFS-Experimente wurden bei einer Cm-Konzentration von  $2 \times 10^{-7} \text{ M}$  in einem pH-Bereich 4.5 bis 6.8 durchgeführt. Der Illit wie auch der Montmorillonit wurden vom Paul-Scheerer-Institut (Schweiz) zur Verfügung gestellt. Die Sorptionskanten für Illit und Montmorillonit verschieben sich erwartungsgemäß mit zunehmender Ionenstärke hin zu höheren  $-\log[\text{H}^+]$ -Werten. Die Daten bei  $0.1 \text{ M}$  NaCl sind vergleichbar mit Daten von Bradbury&Baeyens (PSI). Die TRLFS-Messungen der Illit-Suspension zeigen bei der Speziation der verschiedenen Salzkonzentrationen keine signifikanten Unterschiede:  $\text{Cm}^{3+}$  bei ca.  $594 \text{ nm}$ ; Komplex 1 bei ca.  $599 \text{ nm}$ ; Komplex 3 bei ca.  $602 \text{ nm}$ . Daraus kann man schließen, da keine signifikanten Unterschiede der Reinkomponenten vorliegen, dass bei höherer Ionenstärke dieselben Spezies vorliegen wie in  $0.1$  molaren Lösungen. Die Lebensdauermessungen bei höheren Ionenstärken bestätigen dieses Ergebnis. Die Spektren des Montmorillonit verhalten sich im Grunde ähnlich wie die des Illit.

Es lässt sich auch hier vermuten, dass es sich um dieselben Spezies in allen Fällen handelt.

Für die Diffusionsversuche mit Illit wurden die Diffusionszellen in Inertgasboxen aufgebaut und kompaktierte Illit-Kerne hergestellt. Nach erfolgreichem Test der Komponenten mit inaktiven Elektrolytlösungen wurden die eigentlichen Experimente mit Eu(III),  $^{36}\text{Cl}$  und  $^3\text{H}$  begonnen.

Die ersten Experimente der Komplexierung von Np(V) mit Lactat wurden bei Ionenstärken bis  $2 \text{ M}$  NaCl und Temperaturen bis  $80^\circ \text{ C}$  durchgeführt. Die Np-Konzentrationen lagen bei  $4 \times 10^{-5} \text{ M}$ . und die Laktat-Konzentration wurde von  $5 \times 10^{-4}$  bis  $0.1 \text{ M}$  variiert. Mit zunehmender Komplexierung taucht in den Spektren eine neue Absorptionsbande bei  $985 \text{ nm}$  aus. Ein isobestischer Punkt deutet auf nur einen  $\text{NpO}_2$ -Laktat-Komplex hin. In den Spektren erkennt man sowohl einen Einfluss der Ionenstärke als auch der Temperatur auf die Absorptionsbanden. Eine eindeutige Korrelation der Temperatur bzw. der Ionenstärke konnte vorerst noch nicht abgeleitet werden, da die Einflüsse auf die Absorptionsbanden noch genauer ausgewertet werden müssen. Für die Laktatkomplexierung wurde eine vorläufige Bildungskonstante von  $\log K^0 = 2.2 \pm 0.2$  abgeschätzt.

Die ersten Studien zur Stabilität von Huminsäurekolloiden bei höheren Ionenstärken bzw. der durch Metallkomplexierung induzierte Agglomerations-Prozess der Huminsäuren – hier mit Eu(III) - wurden in  $\text{NaClO}_4$ -Lösung von  $0.01, 0.1, 1$  und  $3.0 \text{ mol/L}$  untersucht. Die Huminsäure-Konzentration lag bei  $10 \text{ mg/L}$  und  $1.3 \text{ g/L}$  und die Beladung der Huminsäure (HA) durch  $\text{Eu}^{3+}$  betrug  $50$  bis  $99 \%$  bei konstantem pH-Wert von  $6.05$ . Nach Abzentrifugieren der Batch-Proben wurden die überstehenden Lösungen mittels UV-Vis und ICP-MS auf HA und Eu(III)-Gehalte charakterisiert. Bis zu einer Ionenstärke von  $1 \text{ M}$  wird keine signifikante Menge an HA abgetrennt. Erst bei  $3 \text{ M}$   $\text{NaClO}_4$  kann ein Teil abgetrennt werden, wobei immer noch HA in Lösung verbleibt; diese Fraktion wird in zukünftigen Experimenten charakterisiert. Bei den Eu-Experimenten scheint die Eu-Fraktion, die mit dem Flokkulat assoziiert ist, mit der Beladung der Huminsäure zu korrelieren. Außerdem sieht man auch hier einen eindeutigen Ionenstärke-Effekt. Die Ergebnisse müssen derzeit noch näher quantifiziert werden.

### 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 940.707,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Schmeide	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Untersuchung des Einflusses hoher Salzgehalte auf spektroskopische Eigenschaften des U(VI) mittels UV/VIS, TRLFS, ATR FT-IR. Lösungen mit Salzfrachten bis zu 5 M konnten eingesetzt werden. Mittels UV/VIS und ATR FT-IR wurde eine U(VI)-Komplexierung durch den Leitelektrolyten Cl<sup>-</sup> qualitativ und quantitativ detektiert. Bei der TRLFS zeigen sich bei Erhöhung der Salinität eine Erhöhung der Lumineszenzintensität und eine Verlängerung der Fluoreszenzlebensdauer des freien UO<sub>2</sub><sup>2+</sup>-Ions. Eine Komplexierung durch ClO<sub>4</sub><sup>-</sup> wurde nicht festgestellt.
- Untersuchung der Desorption von Humin- und Fulvinsäuren (HS, FS) von Tonmineraloberflächen. Es wurde keine Desorption festgestellt, obwohl ein dynamisches Gleichgewicht von Adsorption und Desorption im Zustand der Oberflächensättigung nachgewiesen werden konnte (Traceraustauschversuche über vergleichbare Zeiträume). Offenbar unterscheidet sich die Konkurrenzsituation in ihrer Wirkung von einem Konzentrationsgradienten. Die Annahme eines ständigen Gleichgewichts in Transportmodellen ist somit unter bestimmten Bedingungen zulässig.
- Anhand der Auswertung von Langzeitbeobachtungen der Diffusion von [<sup>22</sup>Na]Na<sup>+</sup> in Opalinuston-Bohrkernen mittels PET wurden die Methoden zur Verbesserung des quantitativen Abbildungsverhaltens weiterentwickelt. Hierdurch wurde eine vorläufige Parametrisierung mit Hilfe der Anpassung eines anisotropen Finite-Element-Modells möglich, die grundsätzlich eine gute Übereinstimmung mit Untersuchungsergebnissen an Diffusionszellen aufweist, aber auch signifikante Anisotropieeffekte zeigt. Diese PET-Messungen und weitere Messungen an Modellkörpern unterschiedlicher Dichte wurden mit Hilfe von Monte-Carlo-Berechnungen simuliert, um die Auswirkung der Materialeigenschaften auf die Abbildungseigenschaften zu beurteilen und zu korrigieren.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung des Einflusses erhöhter Salinität auf die U(VI)-Sorptions an Montmorillonit.
- Start der Untersuchungen zur U(VI)-Diffusion im Opalinuston.
- Stabilitätsunters. von FS-Kolloiden gegen Flockung in Systemen mit hoher Ionenstärke: Konzentrationsabhängige Standversuche mit Ca<sup>2+</sup>; Flockungsversuche mit Tb-Huminstoff-Systemen in Vorbereitung für Isotopenaustauschexp. zur Reversibilität der Metall-Huminstoff-Wechselw.
- Probenauswahl anhand von PET-Untersuchungen mit [<sup>124</sup>I]I<sup>-</sup>.
- Entwicklung geeigneter Verfahren zur Korrektur von Streueffekten auf die PET-Bilder.
- Weiterentwicklung der FEM-basierten Auswerteprozedur.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Schmeide, K. et al.: Joint project: Interaction and transport of actinides in natural clay rock with consideration of humic substances and clay organics - Characterization and quantification of the influence of clay organics on the interaction and diffusion of uranium and americium in the clay. Final Report, BMWi Project No. 02E10156. HZDR, Dresden (2011).

Lippold, H. et al.: Contributions to modelling actinide transport in potential host rock formations: Elementary processes and influence of heterogeneous structures. Final Report, BMWi Project No. 02E10176. HZDR, Leipzig (2011).

Günther, A. et al.: Luminescence properties of uranium(VI) citrate and uranium(VI) oxalate species and their application in the determination of complex formation constants. *RCA* 99, 535-541 (2011).

Sachs, S. et al.: Influence of humic acids on the actinide migration in the environment: suitable humic acid model substances and their application in studies with uranium-a review. *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 290, 17-29 (2011).

Steudtner, R. et al.: Binary and ternary uranium(VI) humate complexes studied by attenuated total reflection Fourier-transform infrared spectroscopy. *Dalton Trans.* 40, 11920-11925 (2011).

Steudtner, R. et al.: Ternary uranium(VI) carbonato humate complex studied by cryo-TRLFS. *Radiochim. Acta* 99, 687-692 (2011).

Joseph, C. et al.: Effect of temperature and humic acid on the U(VI) diffusion in compacted Opalinus Clay. In: *The New Uranium Mining Boom. Challenge and lessons learned.* (B. Merkel, ed.), Springer Verlag, Heidelberg, 2011, p. 617-626.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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

Die in Lösungen mit höherem Salzgehalt (hohe Ionenstärke) auftretende Abweichung zwischen dem gemessenen und dem tatsächlichen pH-Wert kann mit Hilfe eines empirischen Korrekturparameters  $A$  korrigiert werden. Für eine pH-Elektrode von Schott (Blue Line pH 16) und eine von Ross (Halbmikroelektrode, 8103SC) wurde  $A$  für den sauren pH-Bereich bei verschiedenen Ionenstärken zwischen 1-5 M NaCl bestimmt. Die Experimente mit NaCl/HCl-Mischlösungen lieferten für die pH-Elektrode von Schott folgende Mittelwerte für  $A$ : 1 M: 0,07, 2 M: 0,25, 3 M: 0,42, 4 M: 0,62, 5 M: 0,78. Für die pH-Elektrode von Ross wurden ähnliche Werte für den Korrekturparameter  $A$  erhalten: 1 M: 0,07, 2 M: 0,21, 3 M 0,42, 4 M: 0,60, 5 M: 0,80.

Im Rahmen dieses Projektes wurde eine neue Kapillarelektrophorese (CE7100, Agilent Technologies, Waldbronn) angeschafft und mit der vorhandenen ICP-MS (7500ce, Agilent Technologies, Waldbronn) gekoppelt. Mit diesem CE-ICP-MS-System konnte eine gute Trennung der Gemische Eu(III)/Th(IV)/Np(V)/U(VI) sowie von Np(IV)/Np(V) bei einer Konzentration von  $\sim 200$  ppb erzielt werden. Als Leitelektrolyt diente hierbei 1 M  $\text{CH}_3\text{COOH}$  (pH 2,3). Die Trennungen wurden bei einer Spannung von 25 kV durchgeführt. Im Falle von Neptunium konnte eine Nachweisgrenze von ca.  $1 \times 10^{-9}$  mol/L für beide Oxidationszustände erreicht werden. Zur Validierung der aufgebauten Kopplung von CE mit ICP-MS wurden die Bildungskonstanten für Np(V)-Carbonatkomplexe bestimmt. Die erhaltenen Ergebnisse stimmen gut mit den von S. Topin (2009) ebenfalls mit CE-ICP-MS ermittelt Komplexbildungskonstanten überein.

Um das Sorptionverhalten von Tc(VII) an Opalinuston (OPA) zu untersuchen, wurden erste Batchexperimente in einem pH-Bereich von 3-9 und einer Tonkonzentration von 15 und 50 g/L unter aeroben Bedingungen durchgeführt. Als Hintergrundelektrolyt wurde synthetisches OPA Porenwasser (pH 7,6) verwendet. Die vorläufigen Ergebnisse deuten darauf hin, dass das Pertechnetatanion ( $\text{TcO}_4^-$ ) unter den gewählten experimentellen Bedingungen nur in geringem Maße an OPA sorbiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Bestimmung des Korrekturparameters  $A$  für die pH-Elektroden von Schott und Ross im alkalischen pH-Bereich der NaCl/NaOH-Mischlösung bei Ionenstärken von 1-5 M unter Ausschluss von atmosphärischen  $\text{CO}_2$ .
- Messung von Sorptionsisothermen für die Sorption von Np(V) an Montmorillonit bei höheren Ionenstärken ( $\leq 3$  M) und pH-Werten von 5,0 und 8,0.
- Untersuchung der Komplexierung von Np(V) mit Acetatliganden und der Redoxstabilität von Pu(III/IV/V/VI) in OPA-Porenwasser mittels des neuen CE-ICP-MS-Systems.
- Untersuchung des Sorptionsverhaltens von Tc(VII) an OPA unter anaeroben Bedingungen.

### 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 Radio-nukliden (Eu, Gd und U) an Tongestein bei Grundwasserbedingungen mit hohen Salinitäten (ternäres System bei salinaren Bedingungen)
- AP4: Untersuchungen zum Komplexierungsverhalten von Uran und Lanthanoiden (Eu, Gd) mit organischen Komplexliganden (Lactat,  $^{13}\text{C}$ -Lactat, extrahierte Tonorganik und Aldrich-Huminsäure zum Vergleich mit vorhandenen Ergebnissen) und mit anorganischen Komplex-liganden (Borat) im Übergang von wässrigen Lösungen auf salinare Systeme durch Speziation mittels  $^{11}\text{B}$  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 Vorversuche zur Sorption von Uran (VI) und Europium (III) an OPA bei hohen Salinitäten (bis 3,0 M NaCl) durchgeführt. Die Messungen mittels ICP-MS zeigten jedoch, dass die Proben vor der Analyse aufbereitet werden müssen, da die hohe Salinität in der ICP-MS trotz Verwendung eines HMI (high matrix introduction system) eine starke Empfindlichkeitsabnahme hervorruft. Zudem muss die pH-Messung der Proben angeglichen werden, da durch die Salinität starke pH-Abweichungen auftreten können. Trotz dieser Widrigkeiten konnten bereits erste Ergebnisse bzgl. des Einflusses der Salinität erzielt werden. In Gegenwart von einwertigen Konkurrenzionen (NaCl) wird trotz hoher Ionenstärke kaum eine Änderung der Eu bzw. U-Sorption im Vergleich zu 0,01M NaClO<sub>4</sub> beobachtet.

Erste (reproduzierbare) Voruntersuchungen zur Bor-Speziation zeigen, dass in Abhängigkeit des pH-Wertes einer Lösung von Borsäure in entionisiertem Wasser im <sup>11</sup>B NMR überlappende Signale bei unterschiedlichen chemischen Verschiebungen  $\delta$  zu finden sind. Dies ist durch die in der Literatur dokumentierte Einstellung eines chemischen Gleichgewichtes zwischen den unterschiedlich gearteten Borat-Anionen in wässriger Lösung zu erklären und resultiert in einer pH-abhängigen Speziesverteilung. Verschiedene in Lösung befindliche Borat-Anionen können demnach anhand ihrer unterschiedlichen chemischen Umgebung anhand von <sup>11</sup>B NMR-Spektren unterschieden werden. Eine nachfolgende Zugabe von dreiwertigem Europium in Form von wässrigem Europiumperchlorat zu einer solchen Borat-Lösung resultiert in einer Verschiebung des Signals im <sup>11</sup>B NMR zu tieferem Feld und ist auf den Einfluss des paramagnetischen Europium-Kations zurückzuführen. In bestimmten Fällen ist jedoch neben dieser Tieffeldverschiebung zusätzlich eine Änderung des Signalprofils (z. B. nur noch ein Signal statt mehrerer überlappender Einzelsignale) erkennbar, so dass offenbar eine vermeintlich stattfindende Komplexierung des Europium-Kations durch anionische Borat-Spezies anhand von <sup>11</sup>B NMR-Spektroskopie nachgewiesen werden kann.

Der Einfluss unterschiedlicher Ionenstärke auf die NMR-Untersuchungen wurde ansatzweise durch eine Versuchsreihe mit Variation der Ionenstärke bei gleichbleibender Borat-Konzentration in Lösung untersucht. Die Variation der NaClO<sub>4</sub>-Konzentration scheint bei konstantem pH-Wert keinen Einfluss auf die chemische Verschiebung  $\delta$  im <sup>11</sup>B NMR zu haben. Mit steigender Ionenstärke ist lediglich eine Verschlechterung des Signal-Rausch-Verhältnis erkennbar.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Zur Aufarbeitung der Batch-Versuche bei hohen Ionenstärken werden unterschiedliche Austauschharze auf ihre Eignung zur Aufkonzentration des Analyten hin untersucht. Bei positiver Eignung werden die Sorptionsversuche bei unterschiedlichen pH-Werten und erhöhten Ionenstärken (1M, 3M) wiederholt und zusätzlich der Einfluss der Temperatur mit einbezogen.

Die begonnenen Arbeiten zur Borat-Speziation in Abhängigkeit der Borat-Konzentration und des pH-Wertes sollen fortgesetzt und um den Parameter der Ionenstärke erweitert werden. Schließlich soll das Ausmaß der Komplexierung von Europium durch Borat-Anionen unter Variation der genannten Einflussgrößen erfasst werden. Durch mehrdimensionale NMR-Methoden können Informationen zur räumlichen Anordnung untersuchter Moleküle in Lösung (Struktur) erhalten werden. In weiteren Experimenten soll die Konformation der Borat-Anionen in Lösung durch die Anwendung von 2D-NMR-Methoden wie <sup>11</sup>B-<sup>11</sup>B und möglicherweise <sup>11</sup>B-<sup>17</sup>O NMR bzw. die der Europium-Borat-Komplexe (evtl. unter Ausnutzung von <sup>151</sup> bzw. <sup>153</sup>Eu NMR, z. T. auch in mehrdimensionalen Experimenten) abgeleitet werden. Mögliche Probleme in diesem Zusammenhang stellen neben dem Quadrupol-Effekt des Bor-Atoms die geringe natürliche Häufigkeit (0,037 %) des NMR-aktiven <sup>17</sup>O dar. Zur Verbesserung der Empfindlichkeit besteht neben dem Erwerb von kommerziell verfügbarem <sup>17</sup>O-angereichertem Wasser die Möglichkeit eine Anreicherung im Labor mit einfachen Methoden (langsameres Abdampfen und anschließende fraktionierte Destillation) selbst vorzunehmen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kautenburger, R. (2011): Batch is bad? Leaching of Opalinus clay samples and ICP-MS determination of extracted elements. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry* 26, 2089-2092.

Möser, C., Kautenburger, R. & H.P. Beck (2011): Migration of Europium and Uranium in Opalinus clay influenced by pH and temperature. *Mineralogical Magazine* 75, 1504.

Kautenburger, R., Möser, C. & H.P. Beck (2011): Metal mobility in clay formations – From batch experiments with mineral suspensions to column setup with compacted clay. *Mineralogical Magazine* 75, 1157.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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); AP2.1: Komplexe in salinärer Lösung; AP2.3: Am(III)-Komplexe mit Tonorganika

Eine detaillierte Untersuchung von Kantenoberflächen schichtgeladener Tonminerale (AP1.1) wurde anhand des substituierten Pyrophyllits als Modellsystem begonnen. Dabei wurden beidellitische ( $\text{Si}^{4+} \rightarrow \text{Al}^{3+}$ ) wie montmorillonitische Substitution ( $\text{Al}^{3+} \rightarrow \text{Mg}^{2+}$ ) betrachtet. Die Ladung der Defekte wurde durch ein Proton an der Oberfläche kompensiert. Für Defekte an



der Oberfläche ergibt sich für die substituierten Systeme die gleiche Stabilitätsreihenfolge verschieden orientierter Kantenflächen wie für den neutralen Pyrophyllit, (100) > (110) > (010), mit einem Energieunterschied zwischen der stabilsten und der am wenigsten stabilen Oberfläche von etwa 50 kJ/mol pro Elementarzelle. Die relative Stabilität verschiedener Kantenflächenorientierungen bleibt bei Bedeckung mit etwa einer Monolage Wasser erhalten. Verschiedene Positionen der Defekte wurden exemplarisch für die (010)-Oberfläche untersucht. Dabei zeigte sich für beidellitische wie für montmorillonitische Substitution, dass Defekte in der zweiten Atomlage unter der Oberfläche etwas stabiler sind als an der Oberfläche. Optimierung von Uranyl(VI) auf substituierten solvatisierten (010)-Kantenflächen (AP1.2) zeigte wie für Pyrophyllit, dass AlO-SiO-Plätze gegenüber AlOOH bevorzugt sind. Substitutionen an der Oberfläche stabilisieren die Adsorbatkomplexe, während Substitutionen in der zweiten Atomlage unter der Oberfläche zu einer leichten Destabilisierung gegenüber Pyrophyllit führen. Weiterhin wurden erstmals dynamische Modellierungen von Tonmineraloberflächen und Adsorptionssystemen auf quantenchemischen Niveau unternommen (A2.1). Die typischen Strukturen von (001)-Kaolinit- und (010)-Pyrophyllitoberflächen erwiesen sich als stabil. Auf der Pyrophyllitkantenfläche wurde die bekannte Bewegung von Protonen zwischen equivalenten Plätzen beobachtet. Der durch Optimierungen berechnete Energieunterschied zwischen Uranyl(VI) auf AlOOH- und SiO-AlO-Plätzen von 43 kJ/mol wurde in dynamischen Simulationen von 10 ps Dauer bestätigt (53 kJ/mol).

Als Referenzsystem zur Untersuchung der Komplexierung von Uranyl(VI) in salinärer Lösung wurden Uranylchloridkomplexe  $[\text{UO}_2\text{Cl}_n(\text{H}_2\text{O})]^{2-n}$  in Lösung modelliert (AP2.1). In Übereinstimmung mit anderen theoretischen Arbeiten verringert sich die Koordinationzahl CN der Komplexe von 5 nach 4 bei mehr als einem Cl-Liganden. Energieunterschiede zwischen Cis- und Transpositionen der Cl-Liganden sind sehr gering.

Modellrechnungen zu Am(III)-Mono- und -Diacetatkomplexen (AP2.3) zielen auf eine strukturelle und energetische Charakterisierung, da bis auf Komplexierungskonstanten noch keine einschlägigen experimentellen Ergebnisse vorliegen. Für Monoacetatkomplexe mit mono- und bidentater Ligandenkoordination in Lösung mit CN = 7–10 zeigt sich, dass der mittlere Am-O-Abstand nur von der Koordinationszahl CN abhängt. Unterscheiden lassen sich die Koordinationsarten lediglich durch den sehr verschiedenen Am-C-Abstand, da die Bindungen von Am zu Aqua- und Acetatliganden insbesondere für mittlere Koordinationszahlen und bidentate Koordination recht ähnlich sind. Dies gilt auch für die bisher untersuchten Diacetatkomplexe mit N = 8. Energetisch ist die bidentate Koordination der Liganden leicht bevorzugt. Als bevorzugte Koordinationszahlen kommen 7–8 in Frage.

#### 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

R. Ramakrishnan, A. V. Matveev, S. Krüger, N. Rösch: Self-Interaction Artifacts on Structural Features of Uranyl Monohydroxide from Kohn-Sham Calculations. *Theor. Chem. Acc.* 130, 361-369 (2011).

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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

#### AP1:

Es wird die Lumineszenz von Eu(III) in Lösungen mit NaCl, NaClO<sub>4</sub>, MgCl<sub>2</sub> und CaCl<sub>2</sub> bei pH 5 gemessen. Dabei wurden für die Messungen mit NaCl und NaClO<sub>4</sub> als Elektrolyte die Konzentrationen der Salze bis auf 5 mol/L erhöht. Für MgCl<sub>2</sub> und CaCl<sub>2</sub> wurde die jeweilige Salzkonzentration nur bis 1 mol/L erhöht.

#### AP2:

Zunächst wird die Ionenstärke erhöht und die Temperatur bei Raumtemperatur belassen. Es wurden Glycol- und Essigsäure als organische Liganden gewählt. Um das mögliche Spektrum an verschiedenen Komplexspezies vorliegen zu haben, wurde die Konzentration des Liganden bis zu 10 mol/L (Essigsäure) und bis zu 0.25 mol/L (Glycolsäure) variiert. Begleitend werden mit Hilfe literaturbekannter Komplexbildungskonstanten Speziationsdiagramme erstellt, mit denen die Lumineszenzspektren bestimmten Komplexspezies zugeordnet werden sollen.

Die Aussagekraft der Eu(III)-Lumineszenzmessungen soll mit Hilfe weiterer spektroskopischer Methoden erhöht werden. Hierfür wird die Raman-Spektroskopie verwendet. Dabei zeigte sich, dass es bei Zugabe von Eu(III) zu Lösungen von Glycol- und Essigsäure bei verschiedenen pH-Werten zu einem zusätzlichen Schwingungsübergang um 1 500 cm<sup>-1</sup> kommt.

Mittels Blitzlichtphotolyse können Energietransferprozesse zwischen Lanthanoid und Ligand beobachtet werden. Die bisher durchgeführten Experimente mit Salicylsäure wurden mit weiteren Liganden (z. B. Tropolon, Thiosalicylsäure, Anthranilsäure) fortgeführt.

#### AP3:

In diesem Arbeitspaket wurde mit der Synthese eines weiteren Modellpolymers begonnen. Zusätzlich wurden Lösungen bereits eingesetzter Polymere (Polyacrylsäure) vorbereitet und Messungen zum Einfluss der Ionenstärke auf die Lumineszenz der Lanthanoide in Komplexen mit PAA durchgeführt.

#### AP4:

Zu Beginn der Untersuchungen wurden Lösungen (0.01 mol/L) organischer Säuren (Essigsäure, Propionsäure) mit verschiedenen Modellphasen – Aluminiumoxid und Siliciumdioxid – sowie Kaolinit bei pH 4 und pH 5 in Kontakt gebracht und IR- sowie Raman-Spektren der Mineralphasen aufgenommen.

Der Einfluss der Probenpräparation (Reihenfolge der Zusammengabe der Reaktanden, Trennung von flüssiger und fester Phase, Waschschritte) auf die Lumineszenz des sorbierten Europium(III) war zusätzlich Gegenstand der Untersuchungen

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Die Experimente für AP1 werden mit D<sub>2</sub>O als Lösungsmittel begonnen. Für beide Lösungsmittel (Wasser und D<sub>2</sub>O) wird zusätzlich der pH-Wert variiert.
- Die laufenden Experimente in AP2 werden weitergeführt. Zusätzlich wird für ausgewählte Systeme begonnen, Aktivierungsenergien zu bestimmen. Weiterhin wird mit Untersuchungen zur Dampfdruckosmometrie angefangen.
- In die Untersuchungen in AP3 zur Konkurrenz von Kationen um Bindungsstellen in Polymeren wird das Spektrum um natürliche Polymere (Humin-/Fulvinsäuren) erweitert.
- In AP4 wird ein analytisches Verfahren entwickelt werden, mit dem sich ausgehend von der flüssigen Phase Rückschlüsse auf den sorbierten Anteil des Liganden ziehen lassen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Christina Schimmeck, „Lumineszenzspektroskopische Charakterisierung von Tropolon und  $\alpha$ -substituierten Benzoessäuren in Komplexen mit Europium(III)“, Bachelorarbeit, Universität Potsdam, Dezember 2011.

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 315.249,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Bernhard	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Einsatz der Mikrotitrationskalorimetrie

Direkte Bestimmung der thermodynamischen Daten (Enthalpie, Entropie) zur Wechselwirkung von Eu(III)/Am(III) mit Borat und organischen Modellliganden mittels 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

- Die Auswahl und die Bestellungen der beantragten Investitionen (UV-Vis-Spektrometer und Glovebox für Mikro-Titrationskalorimeter) wurden getätigt.
- Zum Einstieg in das neue Projekt wurde eine ausführliche Literaturrecherche zu thermodynamischen Daten zu Komplexen von Eu(III) und Am(III) mit organischen Liganden bei hohen Ionenstärken (bis  $I = 3 \text{ M}$ ) und erhöhten Temperaturen (bis  $T = 70 \text{ °C}$ ) durchgeführt. Außerdem wurde eine Recherche über Methoden zur Bestimmung des pH-Wertes bei hohen Ionenstärken durchgeführt. In Absprache mit dem KIT wurde eine geeignete pH-Elektrode und Messmethode ausgewählt. Erste Versuche zur Kalibrierung der Elektroden und zur pH-Wertbestimmung bei hohen Ionenstärken wurden ausgeführt.
- Erste Testmessung zum Eu(III)-Boratsystem mit dem Mikro-Titrationskalorimeter wurde durchgeführt. Bei kleinen Eu(III)-Konzentrationen ( $10^{-5} \text{ M}$ ) konnte bisher noch keine signifikante Wärmetönung zu einer möglichen Komplexbildung von Eu(III) mit Borat festgestellt werden.
- Das Eu(III)/Nd(III)-Borsäure-System wurde bei  $25 \text{ °C}$  und  $I = 0,1 \text{ M}$  mittels UV/Vis- und Laserfluoreszenzspektroskopie sowie potentiometrischer Titration untersucht. Bis pH 7 kann mit den spektroskopischen Methoden keine Komplexbildung nachgewiesen werden. Oberhalb pH 7 machten bisher Ausfällungen der Eu(III)/Nd(III)-Hydroxide eine Charakterisierung der Komplexbildung mit Borsäure unmöglich.
- Untersuchungen mittels Extraktionsverfahren (Extraktion von Eu(III) mit HDEHP in Anwesenheit von Borsäure) zur Bestimmung der Komplexbildung im Eu(III)-Borsäure-System lassen eine relativ große Komplexbildungskonstante ( $\log \beta = 7 \dots 8$ ) vermuten.
- Die potentiometrische Titration ist eine geeignete Methode um den pKS-Wert der Borsäure zu bestimmen. Der bestimmte pKS-Wert ( $\sim 9,2$ ) stimmt mit der Literatur überein. Zur Bestimmung des pKS von Borsäure bei hohen Ionenstärken und Temperaturen wird die potentiometrische Titration die Methode der Wahl sein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortgang der Arbeit zur Bestimmung der Komplexbildung von Lanthaniden mit Borsäure ( $> 25 \text{ °C}$ ,  $> I = 0,1 \text{ M}$ ) unter Verwendung gängiger Analysemethoden (UV/vis, TRLFS, Extraktion)
- Untersuchung der Polymerisierung von Borsäure und der Komplexbildungseigenschaften der daraus resultierenden polymeren Boratspezies gegenüber Eu(III)/Nd(III)
- Untersuchungen der Komplexbildung von Eu(III) mit Lactat/Propionat in Abhängigkeit der Ionenstärke mittels Mikro-Titrationskalorimetrie (Vergleich der Ergebnisse mit dem entsprechenden Cm-System von Uni Heidelberg)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

in Vorbereitung: “*Eu(III) Complexation with Salicylic Acid at Elevated Temperatures*” Astrid Barkleit, Margret Acker, Gert Bernhard, zur Einreichung in „*Inorganica Chimica Acta*“ oder „*Radiochimica Acta*“

J. Schott, M. Acker, A. Barkleit, V. Brendler, S. Taut, G. Bernhard, *The influence of temperature and small organic ligands on the sorption of Eu(III) on Opalinus Clay*, *Radiochimica Acta*, accepted, DOI: 10.1524/ract.2012.1921

<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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 pKs-Werte der verwendeten Ligandensysteme und pH-Wert-Messungen bei erhöhten Temperaturen
- AP2: Komplexierung von Cm(III) mit niedermolekularen organischen Substanzen bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen
- AP3: Komplexierung von Cm(III) mit Humin-/Fulvinsäuren/Kerogen bei höheren Ionenstärken sowie höheren Temperaturen
- AP4: Strukturelle Untersuchungen von Ln(III)/Am(III)-Komplexen mit (ton)organischen Liganden mittels Hochtemperatur-EXAFS-Spektroskopie

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen der durchgeführten Arbeiten wurde die Komplexierung von Cm(III) mit Propionat bei unterschiedlichen Ligandenkonzentration, Ionenstärken ( $\text{NaClO}_4$ ) und als Funktion der Temperatur untersucht. Die Ergebnisse zeigen, dass eine Erhöhung der Temperatur in einer deutlichen Verschiebung der Speziation in Lösung zugunsten der komplexierten Spezies resultiert. Diese verstärkte Komplexierung spiegelt sich in einem deutlichen Anstieg der thermodynamischen Stabilitätskonstanten ( $\log K_n^0$ ) mit steigender Temperatur wider. Der  $\log K_1^0([\text{Cm}(\text{Prop})]^{2+})$  Wert zeigt eine Zunahme von 0.2 Größenordnungen im untersuchten Temperaturbereich, während der  $\log K_1^0([\text{Cm}(\text{Prop})_2]^{+})$  Wert deutlich stärker um eine logarithmische Einheit ansteigt. Dabei wurde UV/Vis-Absorptionsspektroskopie eingesetzt, um den  $\text{p}K_s$ -Wert von Propionat als Funktion der Temperatur zu bestimmen. Anhand von Untersuchungen bei variablen Ionenstärken wurden die Ion-Ion-Wechselwirkungskoeffizienten von Cm(III) und Propionat mit  $\text{ClO}_4^-$  als Funktion der Temperatur ermittelt, welche im Rahmen der thermodynamischen Beschreibung der Wechselwirkung von Actinidionen und Ligandmolekülen bei erhöhten Salinitäten und erhöhten Temperaturen von großer Bedeutung sind. Des Weiteren wurden erste Untersuchungen zur Cm-Lactat-Komplexierung durchgeführt, um die unter endlagerrelevanten Bedingungen auftretenden Spezies zu identifizieren. Auch erste erfolgreiche Tests (Cm-Nitrat) in der von uns entwickelten Hochtemperatur-EXAFS-Zelle bestätigten die Einsetzbarkeit für zukünftige Komplexierungsuntersuchungen von Actiniden bis 200 °C.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Komplexierung von Cm(III) mit Propionat in unterschiedlichen Hintergrundelektrolyten ( $\text{NaCl}$ ,  $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{MgCl}_2$ ) bei erhöhten Temperaturen.
- Komplexierung von Cm(III) mit weiteren, komplexeren organischen Liganden (z. B. Lactat) bei erhöhten Temperaturen.
- Hochtemperatur-UV/Vis-Absorptionsspektroskopie zur pH- und  $\text{p}K_s(\text{Ligand})$ -Messung bei  $T > 25$  °C.
- Einsatz von Hochtemperatur-EXAFS zur Strukturaufklärung der Komplexe bei  $T > 25$  °C.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Skerencak, A., Höhne, S., Hofman, 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, eingereicht.

Skerencak, A., Höhne, S., Hofman, S., Marquardt, Ch., Panak, P.J., Complexation of Cm(III) with propionate in the temperature range from 20 to 90 °C, GDCh Wissenschaftsforum, Bremen, 4.-7. September, 2011.

Skerencak, A., Panak, P. J., Fanghänel, Th., TRLFS studies of actinide complexation at elevated temperatures, HiTAC Workshop, Karlsruhe, November 9th, 2011.

Skerencak, A., Panak, P.J., Hauser, W., Götz, R., Klenze, R., Fanghänel, Th., Spectroscopic and thermodynamic studies on the complexation of Cm(III) with  $\text{SO}_4^{2-}$  in the temperature range from 25 to 200 °C, 13th International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, Migration 2011, Beijing, September 18 – 23, 2011.

<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> 01.10.2011 bis 31.12.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 707.587,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Die wissenschaftliche Erfassung der THM-Prozesse umfasst neben in situ- und laborativen Analysen auch die Formulierung und rechnerische Implementierung THM-gekoppelter physikalischer Modelle sowie deren Validierung anhand von In-situ-Messdaten. Vor diesem Hintergrund besteht das Hauptziel des Vorhabens darin, die EDV-Programme *FLAC<sup>3D</sup>* und *TOUGH2* im Hinblick auf die Simulation von mechanisch-hydraulisch-thermischen Prozessen im Tonsteingebirge unter Endlagereinflüssen zu koppeln. Ausgangspunkt ist dabei das EDV-Programm *FLAC<sup>3D</sup>*, da die geomechanische Simulation in ihrer Beeinflussung durch die geohydraulischen Prozesse im Vordergrund stehen soll. Anhand entsprechender experimenteller Untersuchungen sollen noch fehlende physikalische Grundlagendaten ermittelt werden. Darüber hinaus soll mit Blick auf das zeitabhängige Gesteinsverhalten die in den Vorhaben 3607R02596 (BfS) und 02E10427 (BMWi) 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: Beschaffung von und Einarbeitung in Literatur zu bestehendem T-F-Kopplungsansatz.
- AP3: Beschaffung von Literatur zur mathematischen THM-Modellbeschreibung.
- AP4: Erarbeitung einer F-T-Schnittstelle für Modellgitter und Randbedingungen.
- AP5: Erarbeitung grundlegender F-T-Kopplungsroutinen.
- AP6: Aufbau erster Modellbeispiele (abstrahiert/realitätsnah).
- AP9: Durchführung zweier Projektgespräche mit der GRS zur Intensivierung der In-situ-Kooperation.
- AP11: Terminfestlegung in Absprache mit der GRS.
- AP12: Durchführung erster Wiederholungsmessungen am Standort Tournemire.
- AP13: Umrüstung von laborativen Prüfanlagen zur Regelung der Luftfeuchtigkeit.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP1: Vertiefung der Kenntnisse zum bestehenden Ansatz, Dokumentation.
- AP2: Beschaffung von Literatur zu laborativen Untersuchungen zum THM-Materialverhalten, Aufarbeitung eigener laborativer Befunde sowie Dokumentation.
- AP3: Einarbeitung in vorliegende Literatur, weitere Recherche und Identifizierung offener Fragestellungen.
- AP5: Erweiterung der Kopplungsroutinen (zunächst hinsichtlich der thermischen Prozesse).
- AP7: Durchführung erster Testsimulationen an abstrahiertem Modellbeispiel aus AP6.
- AP9: Vorstellung der geplanten In-situ-Arbeiten beim Mont-Terri-Konsortium im Februar 2012.
- AP11: Durchführung der Bohrkernbeschaffungskampagne erfolgt voraussichtlich im September 2012.
- AP12: Durchführung der nächsten In-situ-Untersuchungen am Standort Mont Terri erfolgt voraussichtlich im Juni 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**

Es wurde ein vereinfachtes EMOS-Simulationsmodells erstellt, welches bisher aufgetretene Probleme und Besonderheiten durchgeführter Rechenläufe berücksichtigt. Das Simulationsmodell wurde um die Fähigkeit zu probabilistischen Rechendurchläufen erweitert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Probabilistische Simulation mit vereinfachtem Modell und Auswertung der Ergebnisse im Hinblick auf Verfahren zur Vorselektierung von Parametern.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11061A</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> 01.09.2011 bis 31.12.2011	
<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**

Das Kick-Off Meeting des Projektes mit allen Projektpartnern fand am 18. November 2011 statt. Auf Grund der kurzen zu berichtenden Projektlaufzeit haben die bisher durchgeführten Arbeiten noch einen relativ geringen Umfang.

- AP1: Es wurden Auswahlkriterien zur Identifizierung untersuchungswürdiger Tonformationen in Deutschland zusammengestellt und auf einer Arbeitssitzung diskutiert.  
Es wurden Abschätzungen vorgenommen bezüglich der Mindestanforderung an die Mächtigkeit untersuchungswürdiger Tonformationen im Hinblick auf die minimal zulässige Transportdistanz in der Tonformation bei der Radionuklidausbreitung, zur Einhaltung von Schutzziele am Rand des ewG.
- AP3: Es wurde eine organisationsspezifische Liste möglicher relevanter FEPs zusammengestellt, die aus Sicht der GRS in den FEP-Katalog einfließen können. Die Diskussion der FEPs erfolgt erst im folgenden Berichtszeitraum.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP2: Erstellung eines Diskussionspapiers über das dem Endlager zu Grunde liegenden Sicherheitskonzeptes.
- AP3: Zusammenstellung der relevanten FEPs und Aufteilung der FEPs auf die einzelnen Organisationen zur Erstellung der FEP-Beschreibungen.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11061B</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> 01.09.2011 bis 31.12.2011	
<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:

Auf dem Arbeitstreffen am 18.11.2011 bei DBETEC wurde bzgl. eines generischen Standortes beschlossen, Deutschland nicht mehr als „weiße“ Landkarte zu sehen, sondern auf die Ergebnisse sowohl der Tonstudie der BGR als auch der generischen Endlagerstudie der DBETEC (GENESIS) aufzubauen. Die Festlegung eines generischen Standortes für dieses Vorhaben soll auf Basis geeigneter nachvollziehbarer Kriterien erfolgen. Um dem möglichen Vorwurf einer Vorfestlegung vorzubeugen, wurde beschlossen, nicht nur einen generischen Standort sondern zwei zu betrachten. Gemäß den beiden oben genannten Studien bieten sich Regionen in Nord- und Süddeutschland mit deutlich unterschiedlichen geologischen Gesamtsituationen an.

AP2:

Zum Nachweis der Integrität der (geo)technischen Barrieren wurde beschlossen, die gleiche Methode wie im abgeschlossenen Vorhaben ISIBEL anzuwenden (Methode der Teilsicherheitsbeiwerte). Es handelt sich dabei um ein semi-probabilistisches zuverlässigkeitsorientiertes Sicherheitsnachweiskonzept, das auf einem Risikoansatz basiert. Als Einlagerungskonzept werden die im Vorhaben ERATO favorisierten Varianten für Strecken- und Bohrlochlagerung zu Grunde gelegt. Für das Verschlusskonzept werden die Verschlusskonzepte der Nagra als Basis genommen, da aktuell noch keine selbsterstellten Konzepte für den Verschluss eines Endlagers im Tonstein verfügbar sind. In einem ersten Schritt wurde damit begonnen, einen konsistenten Datensatz für alle Nachweiskomponenten bzw. Materialien zu erstellen.

AP4:

Im abgeschlossenen Vorhaben GENESIS wurden bereits erste Auslegungsberechnungen für ein HAW-Endlager in nord- und süddeutschen Tonsteinformationen durchgeführt. Da diese Berechnungen zum Teil auf getroffenen Annahmen beruhen, ist zu analysieren, an welchen Stellen Unsicherheiten oder Informationslücken bestehen, die einer erfolgreichen Nachweisführung im Wege stehen. Analoges gilt für den Nachweis zum Schutz der Tagesoberfläche. Gänzlich neu ist die Notwendigkeit einer Berücksichtigung der Rückholung von Abfällen während der Betriebsphase. Hier wurde festgehalten, in einem ersten Schritt das vorliegende ERATO-Einlagerungskonzept zu analysieren, um herauszufinden, ob eine Rückholung unter den gegebenen Bedingungen praktikabel ist bzw. was am Konzept geändert werden müsste, um eine Rückholung praktikabel zu machen. Mit den genannten Arbeiten wurde begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Erzeugung eines konsistenten Datensatz für alle Nachweiskomponenten bzw. Materialien.

AP4: Analyse des vorliegenden ERATO-Konzeptes und Erarbeitung von Rückholoptionen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.





## **2.2 C-Vorhaben**

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1628</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung - Phase 2, Kurztitel: WeDa-II		
<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 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.462.376,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Moog	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Weiterentwicklung 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.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Projektmanagement

AP2: Datenbank

AP3: Schnittstellen

AP4: Datenerfassung

AP5: Datenbewertung

AP6: Qualitätsmanagement

AP7: Dokumentation

AP8: Thermodynamische Datenbasis für Phosphat

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Projektmanagement:  
Koordination des Gesamtvorhabens

Datenbank:  
Implementierung interner Berechnungen; Umsetzung von Datenbank-Änderungen gemäß Beschlüssen des Verbunds.

Schnittstellen:  
- Koordination der Programmierung und der begleitenden Tests zur Entwicklung einer grafischen Benutzeroberfläche für THEREDA.

Datenerfassung: -

Datenbewertung: -

Qualitätsmanagement: -

Dokumentation:  
- Erstellung von bzw. Mitarbeit an dem folgenden Technical Paper: "JSON formatted generic database structure"

Thermodynamische Datenbasis für Phosphat:  
- Beendigung isopiester Messungen  
- Berechnung von Pitzer-Parametern und Gleichgewichtskonstanten  
- emf-Messungen in Systemen mit Mg- oder Ca-Phosphaten

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichts, Erstellung zweier Publikationen zur Datenbasis für Phosphat.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Eine Publikation über eine thermodynamische Datenbasis für Cs im System der ozeanischen Salze befindet sich derzeit in Revision. Zwei Publikationen zur Datenbasis für Phosphat befinden sich in Vorbereitung.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1638</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Bentonit als Barrierematerial für den Abschluss von Untertagedeponien - Abschließende Versuche und eine Zusammenstellung von Wissenschaft und Technik (Kurztitel: Bentonit-Barrieren)			
<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 31.12.2011		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 934.111,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Xie	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Für die richtige Abschätzung der Dichtwirkung des Bentonits bzw. der durch den Bentonit transportierbaren Schadstoffmengen, ist die Kenntnis dieser Eigenschaften und Prozesse von ausschlaggebender Bedeutung. Die einzelnen Vorhabensziele zum Verständnis dieser Prozesse sind:

- Entwicklung des Verständnisses und Modellierung des Transports von Gasen durch hochkompaktierten Bentonit mit unterschiedlicher Sättigung des Porenraums an UTD-relevanten Salzlösungen,
- Modellierung des diffusiven Transports ausgewählter Schwermetalle durch eine mit Salzlösungen gesättigte Bentonitbarriere,
- Erstellung eines abschließenden Berichtes zum Kenntnisstand von Bentonit als Verfüll- und Dichtmaterial in Untertagedeponien (UTDs) für chemotoxische Abfälle.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Die experimentellen Arbeiten zum Gastransport umfassen Messungen zur Löslichkeit und zum Transport von Gasen unterschiedlicher Molekulargewichte in mit unterschiedlichen Lösungen gesättigten und teilgesättigten kompaktierten Bentonitproben.

AP2: Bei den Untersuchungen zum Schadstofftransport wird die Diffusion von Zn, Pb und Cd durch gesättigte Bentonitprobenkörper unterschiedlicher Trockendichte gemessen. Die Versuche erfolgen mit zwei unterschiedlich konzentrierten NaCl-Lösungen sowie, um auch realistische Bedingungen in einer UTD im Salinar zu erfassen, mit einer IP21-Lösung.

AP3: Abschlussbericht mit Zusammenfassung der Ergebnisse und Darstellung des Kenntnisstandes von Bentonitbarrieren.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Ein Versuch an einer angefeuchteten Probe ergab höhere Diffusionskoeffizienten als bei der Probe, die aus dem Material im Anlieferungszustand hergestellt worden waren. Nach der Beendigung dieses Versuchs wurde der Wassergehalt der Probe ermittelt. Dieser lag bei nur 2.1 %, so dass eine eindeutige Korrelation zu Feuchte nicht möglich ist. Daraufhin war vorgesehen, das Verhalten unabhängig von der Probenpräparation zu untersuchen. Dabei sollte ausgehend von einer trockenen Probe eine anschließende Feuchtezugabe erfolgen. Bei der Herstellung einer Probe aus zuvor getrocknetem MX-80 ergab, dass die Proben bei der Herstellung bei einer Probenhöhe von 15 mm keine ausreichende mechanische Stabilität besaßen, was zu einer Rissbildung der Proben in der Messzelle führte. Aus diesem Grund wurde die Probendicke vergrößert.

Abschließende Untersuchungen zur Löslichkeit von  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$  und  $\text{SF}_6$  in verschiedenen Lösungen unterschiedlicher Salinitäten (reines Wasser, 15 % NaCl-Lösung, 50 % NaCl-Lösung, 90 % NaCl-Lösung und 90 % IP21-Lösung) wurden vorgenommen. Insgesamt hat sich gezeigt, dass die Löslichkeit mit steigender Salinität der Lösungen abnahm, wobei die Gaskonzentrationen in den Lösungen relativ gering ausfallen.

Die numerische Auswertung hinsichtlich der Diffusionskoeffizienten ist in Bearbeitung.

AP2: Die Diffusionsuntersuchungen mit den Schadstoffen  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Cs}^+$  und  $\text{Cd}^{2+}$  in der NaCl-Lösung wurden abgeschlossen. Die Untersuchungen unter Verwendung der IP21-Lösung wurden durchgeführt. Die Ergebnisse zeigten, dass die Untersuchungen mit  $\text{Cs}^+$  wesentlich schneller und mit weniger Problem ablaufen. Im Gegensatz dazu waren die Untersuchungen mit  $\text{Pb}^{2+}$  und  $\text{Cd}^{2+}$  langsamer und problematischer. Die Gründe dafür liegen in den Unterschieden der Sorptions- sowie Komplektionseigenschaften. Die Sorptionskoeffizienten von Pb sowie Cd sind deutlich höher als die des Cs. Die chemischen Komplexbildungen von Pb und Cd in hoch salinaren Lösungen führte zur Ionenbildung mit sogar negativer Ladung (z. B.  $\text{PbCl}_3^-$ ,  $\text{PbCl}_4^{2-}$ ,  $\text{CdCl}_3^-$ ,  $\text{CdCl}_4^{2-}$ ). .

AP3: Der Abschlussbericht der mit Zusammenfassung der Ergebnisse und Darstellung des Kenntnisstandes von Bentonitbarrieren ist in Bearbeitung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP3: Verfassen der Abschlussberichte (in Englisch).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.



### **2.3 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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; Durchführung einer Studie zum Einsatz der Radarfernerkundung zur Überwachung von geologischen Endlagern; 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 sowie bei der LIBS Machbarkeitsstudie; dazu Projektsitzungen und Telefonkonferenzen.
- 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: Wissenschaftliche Beiträge, Teilnahme an der Sitzung „Exploring the Application of Game Theory to Verification Activities“ am 6./7.10.11 bei der IAEO in Wien.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen Exportkontrolle, nukleare Entsorgung in Deutschland sowie Deutschlands Rolle in der IAEO nach dem „Ausstieg“ (06.10.11).
- Training: Durchführung des Euratom Schulungsseminars „Kernmaterialüberwachung in den Mitgliedstaaten der Europäischen Union“ für deutsche Anlagenbetreiber im FZJ.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Safeguards-Web-Portal: Realisierung des Konzeptvorschlags.
- Geologische Endlagerung: Fortsetzung des Messprogramms im Erkundungsbergwerk Gorleben.
- 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, Weiterführung von DMCA, HM-5 Software, LIBS, ES.
- 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 neuen 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: Ausarbeitung von wissenschaftlichen Beiträgen zur spieltheoretischen sowie quantitativen Analyse für die Jahrestagungen von INMM und ESARDA sowie für das JNMM.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: DGAP-Expertensitzungen.
- Training: Durchführung eines Trainings von IAEO- und Euratom-Inspektoren im FZJ.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Minet, C., Eineder, M. Niemeyer, I.; High Resolution Radar Satellite Imagery Analysis for Safeguards Applications; ESARDA Bulletin, No. 46, December 2011, 57-64.

Beiträge in Proc. 52nd INMM Annual Meeting, Palm Desert, 17.-21. Juli 2011:

Avenhaus, R., Shelev, V.M.; The Early Years of International Safeguards – Lessons to be remembered.

Krieger, T., Avenhaus, R.; Decision Theoretical Analysis of Random Sampling Procedures Past- Present- Future.

Niemeyer, I., Listner, C.: Object-based Satellite Imagery for Safeguards Applications.

Stein, G., Rezniczek, A., Niemeyer, I., Dürr, M., Richter, B.; The Role of ‘Soft’ Factors in State Level Safeguards.



## **2.4 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> 01.07.2011 bis 31.12.2011	
<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 2007 bis 2010 werden mit höchster Priorität FuE-Arbeiten zu 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>Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fahrenbergplatz, 79098 Freiburg</b>		
02 E 10306	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse	📖 20
<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover</b>		
02 E 10910	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	📖 104
<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)	📖 48
02 E 10649	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)	📖 50
02 E 10729	Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)	📖 66
02 E 10730	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	📖 68
02 E 10760	Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausgabe zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL	📖 74
02 E 10900	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS	📖 102
02 E 10931	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA-(TV2)	📖 108
02 E 11061 B	Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein	📖 136
<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)	📖 84
<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)	📖 78
02 W 6259	Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden	📖 146







<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 | 40 |
|------------|---|----|




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

- |            |   |     |
|------------|---|-----|
| 02 C 1628  | Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Phase 2, Kurztitel: WeDa-II  | 140 |
| 02 C 1638  | Bentonit als Barrierematerial für den Abschluss von Untertagedepo-<br>nien - Abschließende Versuche und eine Zusammenstellung von Wis-<br>senschaft und Technik (Kurztitel: Bentonit-Barrieren) | 142 |
| 02 E 9894  | Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem To-<br>nendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptpro-<br>jekt   | 12  |
| 02 E 9944  | Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren<br>im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2  | 14  |
| 02 E 10075 | Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei<br>Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90   | 16  |
| 02 E 10336 | Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und<br>$r^3t$   | 22  |
| 02 E 10367 | Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanfor-<br>derungen  | 24  |
| 02 E 10377 | Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Ton-<br>formationen   | 26  |
| 02 E 10518 | Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in<br>Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) -<br>TV1   | 30  |
| 02 E 10548 | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit<br>von Endlagern   | 34  |
| 02 E 10558 | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strö-<br>mungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP1 - Kurztitel:<br>A-DuR   | 36  |
| 02 E 10608 | Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel:<br>WeDa   | 44  |
| 02 E 10669 | Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfte-<br>ten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2  | 54  |
| 02 E 10689 | Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel:<br>PEBS   | 58  |
| 02 E 10719 | Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbar-<br>keit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar<br>(KOMTESSA)   | 64  |
| 02 E 10740 | Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-<br>Versatz in einem HAW-Endlager   | 70  |




- 02 E 10750 Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaus- sage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL  72
- 02 E 10770 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungspro- dukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückho- lung (VESPA)  76
- 02 E 10890 Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS  100
- 02 E 10941 Erprobung und Weiterentwicklung moderner Methoden der Sensitivi- tätsanalyse im Hinblick auf den Sicherheitsnachweis für ein künftiges Endlager - MOSEL  110
- 02 E 10951 Diffusion in kompaktiertem Salzgrus – DIKOSA  112
- 02 E 11061 A Methodik und Anwendungsbezug eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Tonstein  134


**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  32
- 02 E 10618 Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechsel- wirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden  46
- 02 E 10971 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im na- türlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 2: Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf  116


**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)  80



**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  42

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




- 02 E 10447 Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilität  28

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


- 02 E 10659 Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Ver- schlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge  52
- 02 E 10830 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehenswei- sen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Ver- halten und zur Verheilung von Steinsalz (TV2: IfG)  88

- |   |  |
|---|--|
| <b>Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstraße 21, 55122 Mainz</b>   |  |
| 02 E 10981  | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 3: Universität Mainz <span style="float: right;">📖 118</span>  |
| <b>Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main</b>  |  |
| 02 E 10568  | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP2 - Kurztitel: A-DuR <span style="float: right;">📖 38</span>  |
| <b>Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover</b>   |  |
| 02 E 10850  | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB) <span style="float: right;">📖 92</span>   |
| <b>Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Straße 173, 79100 Freiburg</b>  |  |
| 02 E 10870  | Instrumente, Bedarf und Potentiale für Wissensmanagement in der Endlagerforschung <span style="float: right;">📖 96</span>  |
| <b>Projektträger Karlsruhe Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen</b>         |  |
| KWA 9005  | Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine <span style="float: right;">📖 150</span>  |
| <b>Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg</b>   |  |
| 02 E 11031  | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 8: Universität Heidelberg <span style="float: right;">📖 128</span>   |
| <b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen</b> |  |
| 02 E 10679  | Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2 <span style="float: right;">📖 56</span>   |
| 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 <span style="float: right;">📖 60</span> |
| 02 E 10800  | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA) <span style="float: right;">📖 82</span>  |
| 02 E 10840  | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE) <span style="float: right;">📖 90</span>   |
| 02 E 10961  | Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 1: Karlsruher Institut für Technologie <span style="float: right;">📖 114</span>  |




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

- 02 E 10709 Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate  62
- 02 E 10880 Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs  98
- 02 E 10921 Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle –ELSA-(TV1)  106


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

- 02 E 10860 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV6: TUBS)  94


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

- 02 E 10820 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)  86
- 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  130
- 02 E 11051 Optimierung der numerischen Effizienz von Verfahren zur Sensitivitätsanalyse im Hinblick auf Modelle zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern  132


<b>Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden</b>
--

- 02 E 11021 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 7: Technische Universität Dresden  126


<b>Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München</b>
--

- 02 E 11001 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 5: Technische Universität München  122

<b>Universität des Saarlandes, Campus Saarbrücken, 66123 Saarbrücken</b>
--

- 02 E 10991 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 4: Universität des Saarlandes  120

<b>Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam</b>
---

- 02 E 11011 Verbundprojekt: Rückhaltung endlagerrelevanter Radionuklide im natürlichen Tongestein und in salinaren Systemen – Teilprojekt 6: Universität Potsdam  124