

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

**PTE Nr. 40**

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

Berichtszeitraum: 1. Juli - 31. Dezember 2010

Projektträger Karlsruhe  
Wassertechnologie und Entsorgung  
(PTKA-WTE)

**Februar 2011**

## **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	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“,
- 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
1.4	<i>Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete</i> .....	11
<b>2</b>	<b>Formalisierte Zwischenberichte .....</b>	<b>13</b>
2.1	E-VORHABEN .....	13
2.2	C-VORHABEN .....	137
2.3	W-VORHABEN .....	173
2.4	BMWl-HAUSVORHABEN .....	177
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....</b>	<b>181</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>	📖 20
<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 Wirtsfornation -TemTon-	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 22
<b>02 E 10669</b>	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 84
<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>	📖 86
<b>02 E 10689</b>	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 88
<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>	📖 90
<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>TU Bergakademie Freiberg</b>	📖 92
<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>	📖 94

<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>	📖 96
<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>	📖 102
<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>	📖 104
<b>02 E 10870</b>	Instrumente, Bedarf und Potentiale für Wissensmanagement in der Endlagerforschung	<b>Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Freiburg</b>	📖 126
<b>02 E 10880</b>	Zusammenhang von Chemismus und mechanische Eigenschaften des MgO-Baustoffs	<b>TU Bergakademie Freiberg</b>	📖 128
<b>KWA 9003</b>	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	<b>Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Wasser-technologie und Entsorgung (PTKA-WTE)</b>	📖 178

## 1.2 Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse

- |                  |  |  |       |
|------------------|--|--|-------|
| <b>02 C 1577</b> | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1 | <b>Dr. Andreas Hampel, Mainz</b>   | 📖 158 |
| <b>02 C 1587</b> | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2 | <b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>  | 📖 160 |
| <b>02 C 1597</b> | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3 | <b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b> | 📖 162 |
| <b>02 C 1607</b> | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4 | <b>Leibniz Universität Hannover</b>  | 📖 164 |
| <b>02 C 1617</b> | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5 | <b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>  | 📖 166 |
| <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>                                       | 📖 168 |
| <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>                                       | 📖 170 |

<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>	📖 14
<b>02 E 9944</b>	Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 16
<b>02 E 10015</b>	Untersuchungen zum Gastransport in der Auflocke- rungszone in einem geologischen Endlager in Tonge- stein	<b>Technische Universi- tät Darmstadt</b>	📖 18
<b>02 E 10156</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwir- kung von U und Am im Ton	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 24
<b>02 E 10166</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein	<b>Johannes Guten- berg-Universität Mainz</b>	📖 26
<b>02 E 10176</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actiniden- transports in potenziellen Wirtsgesteinsformationen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementarpro- zess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungs- stelle Leipzig - Inter- disziplinäre Isoto- penforschung</b>	📖 28
<b>02 E 10186</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexbildung durch Humi- nstoffe und Sorption an Tonmineralien	<b>Technische Universi- tät München</b>	📖 30
<b>02 E 10196</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lan- thaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen	<b>Universität des Saar- landes, Saarbrücken</b>	📖 32
<b>02 E 10206</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere	<b>Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein- Leopoldshafen</b>	📖 34
<b>02 E 10216</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternä- ren Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid-Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen	<b>Universität Potsdam</b>	📖 36

<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>	📖 38
<b>02 E 10316</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen	<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>	📖 40
<b>02 E 10326</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen	<b>Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main</b>	📖 42
<b>02 E 10336</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 44
<b>02 E 10367</b>	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 46
<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>	📖 48
<b>02 E 10417</b>	Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer	<b>TU Dresden</b>	📖 50
<b>02 E 10427</b>	Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 52
<b>02 E 10437</b>	Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen	<b>Ruhr-Universität Bochum</b>	📖 54
<b>02 E 10447</b>	Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung	<b>IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack &amp; Partner, Freiberg</b>	📖 56
<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>	📖 58
<b>02 E 10528</b>	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 60
<b>02 E 10538</b>	Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 62

<b>02 E 10548</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 64
<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>	📖 66
<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>	📖 68
<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>	📖 70
<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>	📖 72
<b>02 E 10608</b>	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 74
<b>02 E 10618</b>	Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 76
<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>	📖 78
<b>02 E 10649</b>	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 80
<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>	📖 82
<b>02 E 10730</b>	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 98
<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>	📖 100
<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>	📖 106
<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>	📖 108

<b>02 E 10790</b>	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 110
<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>	📖 112
<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>	📖 114
<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>	📖 116
<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>	📖 118
<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>	📖 120
<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>	📖 122
<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>	📖 124
<b>02 E 10890</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 130
<b>02 E 10900</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 132
<b>02 E 10910</b>	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz – Virtus	<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>	📖 134



### 1.3 Kernmaterialüberwachung

**02 W 6259** Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden **Forschungszentrum Jülich GmbH**  174



## 1.4 Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete

<b>02 C 1466</b>	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrogeologie und Geochemie des Gesamtsystems	<b>Brandenburgische Technische Universität Cottbus</b>	📖 138
<b>02 C 1476</b>	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 2 (BGR): Geophysikalische Untersuchungen, Seismische Erkundung, Geologisches 3D-Modell, Bohrungen, Server-Datenbank, Koordination des Gesamtvorhabens	<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>	📖 140
<b>02 C 1486</b>	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung	<b>Technische Universität Clausthal</b>	📖 142
<b>02 C 1496</b>	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTECH): Grundlagen für Geomodellierung	<b>K-UTECH AG Salt Technologies, Sondershausen</b>	📖 144
<b>02 C 1506</b>	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie	<b>IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur- Hydro- und Umweltgeologie mbH, Stendal</b>	📖 146
<b>02 C 1516</b>	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung	<b>DHI-WASY GmbH, Berlin</b>	📖 148
<b>02 C 1526</b>	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität	<b>Johannes Gutenberg-Universität Mainz</b>	📖 150
<b>02 C 1536</b>	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung</b>	📖 152

- 02 C 1546** Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 9 (GGA-S1): Deckgebirgseigenschaften über einem bergbaubedingt destabilisiertem Untergrund, abgeleitet aus seismischen Beobachtungen **Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik (LIAG), Hannover**  154
- 02 C 1556** Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen **Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik (LIAG), Hannover**  156

## **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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.721.522,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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:

Bei den Messungen zur Untersuchung des Gaseintrittsdrucks bzw. der verbleibenden Gaspermeabilität ist insgesamt ein stetiger Anstieg der Gasfließrate festzustellen gewesen. Unter Berücksichtigung der zuletzt ermittelten Gasfließrate errechnet sich die Permeabilität zu ca.  $3E-17 \text{ m}^2$ . Nach der Erhöhung des Gasdrucks auf ca. 1.4 MPa trat eine starke Erhöhung des Gasflusses auf. Die Gaspermeabilität zu diesem Zeitpunkt berechnet sich zu ca.  $2E-15 \text{ m}^2$ . Von der bei der Aufsättigung injizierten Wassermenge von 28.4 l wurden ca. 7.84 l aus der Dichtung verdrängt. Zur Überprüfung einer Rückbildung der Durchlässigkeit nach einem Druckabbau, wurde der Gasdruck abgesenkt und dann wieder stufenweise erhöht und die zugehörigen Gasfließraten und die Wasserausträge registriert. Hierbei zeigte sich, dass die Druckreduzierung zu einer deutlichen Abnahme der Gaspermeabilität führt. Eine erneute Erhöhung des Gasdrucks führt zu wieder zu einem Ansteigen der Gaspermeabilität. Die Quelldrücke unterhalb des Packers liegen am Ende der Messungen bei 0.45 bzw. 0.4 MPa. Mit dem Ende der Injektionsversuche wurde der Injektionsdruck auf Null reduziert, so dass sich der Druck im Dichtelement zur Vorbereitung der Nachuntersuchungen abbauen kann.

Die Wasserinjektion zur Aufsättigung der Dichtungen in den 4 Bohrungen BSB 1, BSB 2, BSB 13 und BSB 15 dauern an. Die Injektionsdrücke belaufen sich wie bisher auf ca. 0.37 bis 0.39 MPa.

Aufgrund einer Beobachtung bei BSB 2, dass eine entnommene Wasserprobe aus der Fritte deutlich an  $\text{Ca}^{2+}$  zugenommen und an  $\text{Na}^+$  abgenommen hat, wurden im September 2010 und Mitte November erneut eine Beprobung vorgenommen. Die chemischen Analysen allein belegen nicht zwingend, dass die Lösung ausschließlich durch die Dichtung geflossen ist. Es kann aber davon ausgegangen werden, dass das Gesamtsystem bestehend aus der Dichtung und dem unmittelbaren Gebirgsbereich von der injizierten Lösung durchströmt wurde. Unter der Voraussetzung, dass das natürlich gesättigte Tongestein eine geringere Durchlässigkeit für Wasser haben dürfte als die aus 35 % Bentonit und 65 % Sand bestehende Dichtung, kann angenommen werden, dass ein deutlicher Anteil der Lösung durch die Dichtung geflossen ist. Um schneller zu messbaren Wasserflüssen an der Ausgangsseite zu kommen, erfolgte ein Auffüllen der Kapillarleitungen und der oberen Fritte. Nach dieser Prozedur war bei einem der Sensoren unterhalb des Packers eine Abnahme des Gesamtdrucks um ca. 0.04 MPa zu beobachten, wobei dieser Wert wieder ansteigt.

Bei der mit den Tonpellets der NAGRA bestückte Bohrung BSB 13 zeigte sich, dass seit 24.08.2010 der Druck an einem der in der Fritte oberhalb des Dichtelements installierten Druckaufnehmer wieder unter die obere Messbereichsgrenze von 3 MPa bis auf 1.48 MPa gefallen ist. Eine mögliche Erklärung könnte sein, dass die injizierte Lösung zu einer partiellen Setzung in dem betrachteten Bereich geführt hat. Die Abnahme setzt sich mit geringerer Rate fort. Eine Überprüfung der ausgangsseitigen Kapillarleitungen und der oberen Fritte hat gezeigt, dass noch keine Lösung im oberen Teil des Dichtelements vorhanden ist.

Bei BSB 15 waren keine grundsätzlichen Veränderungen in den Druckverläufen feststellbar.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Ausbau des Dichtmaterials für Nachuntersuchungen im Technikumsversuch 2
- Weiterführung der Aufsättigung der In-situ-Versuche und Ermittlung der Wasserpermeabilität sowie der Gaseintrittsdrücke mit verbleibender Gaspermeabilität
- Nachuntersuchung der erreichten Sättigung bei den In-situ-Versuchen

### 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 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 438.557,00 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.

## 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 gemessenen Resistivitätsverteilung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Messungen der Resistivität im Versatz und im Gebirge wurden weiter fortgesetzt. Der Streckenversatz in den beiden Messquerschnitten ist weitgehend gesättigt (Resistivitätswerte Werte um  $2 \Omega\text{m}$ ). Eine leichte Resistivitätserhöhung im obersten Streckenbereich in Sektion I ist vermutlich darauf zurückzuführen, dass permanent zutretendes Wasser abgepumpt wird, um den Wasserdruck in der versetzten Strecke gering zu halten, was unter der Firste zu einer leichten Entsättigung oder möglicherweise auch zu einer gewissen Setzung geführt hat.

Bei den Messungen im Buffer ist wegen des Ausfalls mehrerer Elektroden Ende 2005 eine tomografische Auswertung der Messungen nicht mehr möglich. Die Gründe für den Elektrodenausfall sind unbekannt, möglicherweise handelt es sich um Korrosionseffekte. Eine Klärung wird erst im Rahmen von Nachuntersuchungen möglich.

Bei den Messungen im Gebirge wurden nahe den Elektroden Resistivitätswerte um  $200 \Omega\text{m}$  gemessen, was charakteristisch für den wassergesättigten Beton ist, mit dem die Elektrodenbohrlöcher verfüllt sind. Außerhalb der Bohrlöcher beträgt die Resistivität  $2000$  bis  $10000 \Omega\text{m}$ , was dem gesättigten Gebirge entspricht.

AP2: Die Laborversuche zur Simulation der Versatzaufsättigung mit begleitender Geoelektrik wurden bereits 2008 erfolgreich abgeschlossen. Wassergehaltsbestimmungen an Proben aus dem Prototype Repository können erst nach Aufwältigung der Sektion II erfolgen.

SKB plant die Aufwältigung der EU zur Kofinanzierung anzubieten. GRS hat Interesse an der Teilnahme in einem solchen Projekt bekundet, das zwischen 2011 und 2013 durchgeführt würde.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung der In-situ-Messungen

AP2: Wassergehaltsbestimmungen an Proben aus dem Versuchsfeld und Inspektion von aus dem Versuchsfeld geborgenen Elektroden im Rahmen eines EU-kofinanzierten Projekts

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10015</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockerungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2005 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 717.292,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Hampe	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Untersuchung und Quantifizierung der transportrelevanten Parameter in einem geologischen Endlager in Tongestein zur Beurteilung der Vorgänge in der Auflockerungszone nach deren Wiederaufsättigung und Gasbildung in den Einlagerungsräumen. Es wird untersucht, unter welchen Bedingungen Korrosions- und Degradationsgase das in den Rissen und Poren vorhandene Formationswasser verdrängen können, und ob sich dadurch wieder Wegsamkeiten bilden können. Untersuchung der Beeinflussung der Selbstabdichtungsfähigkeit von Opalinston durch die Interaktion von Zementwasser mit Tonstein.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Erstellung der detaillierten Versuchsmatrix und Festschreibung der Variationsbandbreiten der Untersuchungsparameter.
- Modifikation vorhandener Versuchseinrichtungen. Die aus vorlaufenden Projekten vorhandenen Versuchseinrichtungen müssen der geänderten Probengeometrie und den Versuchsbedingungen angepasst werden.
- Untersuchung der Riss- und Porengeometrie mittels unterschiedlicher Verfahren. Neben etablierten Verfahren sollen innovative Methoden zur Untersuchung der Porosität und der Porengeometrie eingesetzt werden.
- Untersuchungen zum Einfluss von alkalischem Formationswasser auf die Gas- und Flüssigkeitsmigration durch die Auflockerungszone
- Durchführung der zentralen Experimente zum Durchlässigkeitsverhalten und Gastransport. In Abhängigkeit von Überlagerungsdruck, Gas- bzw. Flüssigkeitseintrittsdruck pH-Wert und Temperatur werden Änderung von Permeabilität, Flüssigkeitsdurchbruch sowie Verdrängung von Flüssigkeit durch Gas untersucht.
- Auswertung, Bewertung und Dokumentation

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

- Fortführung und Abschluss der Diffusionsuntersuchungen zur Quantifizierung des Anteils der Fickschen Diffusion und der Knudsendiffusion bei diffusivem Stofftransport.
- Fortführung und Abschluss der quantitativen Analyse der Hauptkationenspezies mittels AAS im synthetischen Formationswasser am Probenaustritt und Vergleich mit der Eintrittskonzentration zur Abschätzung des Auftretens von Adsorptions- und Desorptionsvorgängen bei der Durchströmung.
- Fortführung und Abschluss aller Permeationsversuche mit Formationswasser und gasförmigen Permeaten.
- Abschluss der Durchströmungsversuche mit Zementwasser.
- Versuchsabschluss einer Probe aus Mont Terri, die aus einer Tiefe von 6,5 m erbohrt wurde, und die seit ihrer Erbohrung vor ca. 3 Jahren unter einem Druck von 30 bar gelagert wurde.
- Abschluss der noch laufenden Untersuchungen zum Gasdurchbruch nach Probenaufsättigung und Wiederbeaufschlagung mit Gas.
- Detailaus- und -bewertung aller Versuche und Fertigstellung des Abschlussberichts.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine.

### **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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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:

Isopiestic Messungen für ternäre Systeme mit Fe(II)-Cl-H<sub>2</sub>O bei 40 °C, 60 °C und 90 °C.

Literaturstudie:

Keine Aktivitäten im Berichtszeitraum.

Löslichkeitsversuche:

Löslichkeitsversuche im System Fe(II)-K-Cl-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O (mit Arcanit bzw. Sylvin als eingesetztem Bodenkörper).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Dampfdruckmessungen:

Weiterführung der isopiestic Messungen für ternäre Systeme mit Fe(II)-Cl-H<sub>2</sub>O bei 40 °C, 60 °C und 90 °C. Nach Möglichkeit Beginn von Messungen für sulfatische Systeme.

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)-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O.

Nach Möglichkeit Beginn von Löslichkeitsversuchen im System Fe(II)-Na-Cl-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10086</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2006 bis 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 wurde das numerische Modell zur rechnerischen Simulation des im Untertagelabor Bure in Frankreich durchgeführten TED (Expérience thermique deux) Erhitzerversuches fertig gestellt und erfolgreich getestet. Unter Anwendung der Software zur Parameteridentifizierung „OptiSLang“ wurde eine Serie von Modellierungsläufen durchgeführt. OptiSLang übernimmt dabei die gesamte Steuerung des Prozesses dergestalt, dass OptiSLang die Eingangsparameter eigenständig variiert und anschließend einen neuen Rechenlauf mit dem Prozess-Level-Code FLAC3D startet. Die Variationen der Eingangsparameter geschehen unter statistischen Gesichtspunkten, so dass eine Vielzahl von Berechnungsläufen notwendig ist, um eine brauchbare Analyse vornehmen zu können. Erfahrungen zeigen, dass mindestens 40 Berechnungsläufe mit FLAC3D notwendig sind. Die Eingangsparameter werden allerdings seitens OptiSLang nur innerhalb des vom Benutzer vorgegebenen Variationsrahmens geändert. Dieser Prozess führte letztlich zu einem Parametersatz, der es ermöglicht, die aufgezeichneten Messwerte an allen Sensoren bestmöglich nachzubilden. Damit ist es möglich, das thermische Verhalten des Wirtsgesteins bestmöglich zu simulieren und damit für die nächsten anstehenden Phasen zu prognostizieren.

AP7 / AP8:

Im Rahmen der Simulation des Erhitzerversuches TBT (Temperature Buffer Test) im Untertagelabor Äspö in Schweden hinsichtlich des Verhaltens der geotechnischen Barriere Bentonit wurden, wie auch im TED-Versuch (AP6), mittels der Software „OptiSLang“ Sensitivitätsanalysen und eine automatische multi-parameter Kalibrierung durchgeführt. Besonderes Augenmerk wurde bei dieser Untersuchung auf den Einfluss des Quelldruckes auf den Anpassvorgang der berechneten Spannungskurven an die gemessenen Kurven gelegt. Der Quellvorgang wurde nach dem Grob'schen Gesetz simuliert. Berechnungen mit und ohne Quelldruckeinfluss ergaben, dass der Einfluss des Quelldruckes je nach beobachtetem Sensor, und damit der Lage der Sensoren im Buffer, unterschiedlich ist. Die effektive Spannung steigt bei Quelldruckeinfluss um 0,38 bis 0,66 MPa je nach betrachtetem Sensor und trägt damit 16 % bis 35 % zur effektiven Spannungsentwicklung bei.

### 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 und der mechanischen Verformung des Gebirges.

AP7: Fortführung der Modellberechnungen zur optimierten Parameteridentifikation im TBT-Versuch in Äspö.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10156</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 705.892,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Bernhard	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge für zuverlässige Prognosen zur Ausbreitung von Actiniden in Tongesteinen in Gegenwart von Huminstoffen (HS) und Tonorganika. Es sollen die Wechselwirkungen zwischen Actiniden (U, Am), HS und einem natürlichen Tongestein untersucht werden. Die Arbeiten gliedern sich in Komplexbildungsuntersuchungen sowie Batch- und Diffusionsexperimente im System Actinid-(HS)-Tongestein-Wasser. Die Datenbasis zur U(IV)/U(VI)-HS-Komplexierung soll vervollständigt werden. Erkenntnisse zum Einfluss N- und S-haltiger HS-Funktionalitäten auf die Metallionen-Komplexierung sind zu erwarten, die der abschließenden Einschätzung der Rolle verschiedener HS-Funktionalitäten bei der Metallionen-Komplexierung dienen. Quantitative Daten zur Sorption/Migration sowie qualitative Daten zu gebildeten Oberflächenkomplexen und Transport bestimmenden Prozessen werden generiert. Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam, Heidelberg, des Instituts für Interdisziplinäre Isotopenforschung Leipzig und des Instituts für Nukleare Entsorgung Karlsruhe.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Synthese stickstoff- und schwefelhaltiger Huminsäure-Modellverbindungen und spektroskopische Charakterisierung der Heteroatom-Funktionalitäten
- AP2: Untersuchung des Einflusses stickstoff- und schwefelhaltiger Funktionalitäten auf die U(VI)- und Am(III)-Komplexierung mit Huminsäuren und organischen Modellliganden
- AP3: Bestimmung der Konzentrations- und Temperaturabhängigkeit der Komplexbildungskonstante für die U(VI)-Huminsäure-Komplexierung
- AP4: Untersuchung der Bildung ternärer U(VI)-Carbonato-Humat-Komplexe
- AP5: Untersuchung der U(IV)-Komplexierung durch Humin- und Fulvinsäuren
- AP6: Identifizierung der für die Komplexierung von Actiniden in verschiedenen Oxidationszuständen relevanten funktionellen Gruppen der Huminstoffe
- AP7: Quantifizierung und Charakterisierung der von Tonen freigesetzten anorganischen und organischen Kolloide
- AP8: Untersuchungen zur U(VI)-Sorption an Opalinus-Ton und zum Einfluss von Huminstoffen auf die U(VI)-Sorption
- AP9: Diffusionsexperimente zum U(VI)-Transport in Opalinus-Ton

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Der Einfluss von kleinen organischen Liganden ( $1 \cdot 10^{-5}$  bis  $1 \cdot 10^{-2}$  M) auf die U(VI)-Sorption an Opalinuston wurde bei 25 °C untersucht. Mit steigender Ligandenkonzentration sinkt die U(VI)-Sorption, da U(VI) durch die Liganden in wässriger Lösung komplexiert und somit mobilisiert wird. Dabei nimmt der Einfluss der Liganden in folgender Reihenfolge zu: Ameisensäure < Milchsäure  $\approx$  Essigsäure  $\leq$  Propionsäure < Weinsäure < Citronensäure.
- Der Einfluss der Temperatur (10 bis 60 °C) auf die U(VI)-Sorption an Opalinuston wurde untersucht. In Abwesenheit von Liganden steigt die U(VI)-Sorption mit der Temperatur. Bis 50 °C:  $\Delta H = 30 \pm 1 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,  $\Delta S = 126 \pm 2 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ . Bei 60 °C wird eine stärkere Erhöhung des  $K_d$ -Wertes beobachtet. Die Temp.-Abhängigkeit der U(VI)-Sorption bis 50 °C wird durch Milchsäure nicht und durch Citronensäure wenig verändert ( $[\text{Ligand}] = 1 \cdot 10^{-5}$  bis  $1 \cdot 10^{-2}$  M).
- Die U(VI)-Komplexierung durch Milchsäure wurde bei pH 3 im Temperaturbereich 7 bis 65 °C mittels UV/Vis-Spektroskopie und TRLFS untersucht. Die Komplexstabilität steigt mit zunehmender Temperatur: 1:1-Komplexe:  $\log \beta_{11}$ : 2,75 (7 °C) bis 3,34 (65 °C),  $\Delta H = 18,7 \pm 1,8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,  $\Delta S = 119,2 \pm 6,1 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ; 1:2-Komplexe:  $\log \beta_{12}$ : 4,40 (7 °C) bis 5,64 (65 °C),  $\Delta H = 40,8 \pm 7,0 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,  $\Delta S = 230,4 \pm 22,5 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ .
- HTO-Through- und Outdiffusionsversuche mit Opalinuston ( $\rho \sim 2,4 \text{ g/cm}^3$ ) bei 25 und 60 °C unter anaeroben Bed. zeigten Diffusionskonstanten und Porositäten, die sehr gut mit Werten vom PSI übereinstimmen. Das zeigt auch, dass das für die Temperierung bei 60 °C entwickelte System (Heizplatten, Sandbad) für Diffusionsexp. bei erhöhter Temperatur geeignet ist.
- Die Comsolmodellierung der erhaltenen Diffusionsergebnisse konnte optimiert werden. Die Beachtung des Filterdiffusionskoeffizienten führt zu einer Erhöhung des Ton-diffusionskoeffizienten  $D_e$ . Der in den Filter eindiffundierte Ton beeinflusst  $D_e$  nicht signifikant. Eine deutliche Erleichterung in der Modellierung mit Comsol wird erreicht, wenn während des Versuchs auf ein Nachtracern verzichtet wird.
- U(VI)-Diffusion in Opalinuston in Abwesenheit (25 und 60 °C) und Gegenwart (60 °C) von Huminsäure unter anaeroben Bedingungen: Die Versuche wurden ohne Nachtracern durchgeführt und nach 3 Monaten gestoppt. Die Opalinustonbohrkerne wurden mittels abrasive peeling aufgearbeitet und U(VI)- bzw. HA-Diffusionsprofile ermittelt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung der Temperaturabhängigkeit der U(VI)-Komplexierung mit weiteren organischen Modellliganden.
- Bestimmung des Einflusses von Humin- bzw. Fulvinsäure auf die U(VI)-Sorption an Opalinuston im Temperaturbereich 10 bis 60 °C.
- U(VI)-Diffusion in Opalinuston in Gegenwart von Huminsäure bei 25 °C unter anaeroben Bedingungen. Bestimmung von  $D_e$  und  $\alpha$  (rock capacity factor) für die U(VI)-Diffusion in Opalinuston in An- und Abwesenheit von Huminsäure mittels Comsol.
- Bestimmung der Komplexbildungskonstante von Benzolsulfonsäure und Phenolsulfonsäure mit U(VI) mittels (Tiefemperatur-)TRLFS bei 410 nm.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Joseph, C., Schmeide, K., Sachs, S., Brendler, V., Geipel, G., Bernhard, G.: Sorption of U(VI) onto opalinus clay in the absence and presence of humic acid in opalinus clay pore water. Chem. Geology (2011), accepted.

Sachs, S., Bernhard, G.: Humic acid model substances with pronounced redox functionality for the study of environmentally relevant interaction processes of metal ions in the presence of humic acid. Geoderma (2011), accepted.

Křepelová, A., Sachs, S., Bernhard, G.: Influence of humic acid on the Am(III) sorption onto kaolinite. Radiochim. Acta (2011), accepted.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10166</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 798.450,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Reich	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Sorption von Np und Pu an natürlichem Tongestein wird unter umweltrelevanten Bedingungen untersucht sowie der Einfluss von Huminstoffen auf die Sorption in Batch- und Diffusionsexperimenten studiert. Um die Wechselwirkungsprozesse auf molekularer Ebene zu verstehen, werden die dominierenden Sorptionsspezies mit Hilfe spektroskopischer Methoden (XPS, XANES und EXAFS) bestimmt. Wichtige Fragestellungen sind die Reversibilität und Kinetik der Sorption sowie die Rolle von Huminstoffen und eventuell auch von Tonorganika. Diese Untersuchungen sollen die thermodynamische Datenbasis für Actiniden erweitern sowie Informationen zur Ableitung von Bewertungskriterien für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in Ton als Wirtsgestein, insbesondere über das Rückhaltevermögen von Tongestein gegenüber Radionukliden, liefern. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Institut für Radiochemie des Forschungszentrums Dresden-Rossendorf, dem Institut für Nukleare Entsorgung des Forschungszentrums Karlsruhe und der Universität des Saarlandes zusammengearbeitet.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Batchexperimente mit Np/Pu-Tongestein und Einfluss von Huminstoffen sowie Temperatur;
- Speziationsuntersuchungen in den Systemen Np/Pu-Tongestein mit XANES und EXAFS und in dem System Tongestein-Huminstoff mit XPS;
- Diffusionsexperimente mit Np und Pu in natürlichem Tongestein bei 25 und 60 °C sowie Einfluss von Huminstoffen;
- analytisch apparative Entwicklung, u. a. Kopplung CE-ICP-MS, CE-DAD und CE-RIMS.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nach der Charakterisierung neuer OPA-Bohrkerne (Mont Terri, BLT 14, Dichte zwischen 2390 und 2410 m<sup>3</sup>/kg) mittels HTO-Diffusion wurden Diffusionsversuche mit <sup>237</sup>Np(V) bei Raumtemperatur und 60 °C in OPA-Porenwasser durchgeführt. Des Weiteren wurde der Einfluss von Huminsäure (HS M42) auf die Diffusion von Np(V) an Luft untersucht. Die bei diesen Versuchen eingesetzten Konzentrationen betragen  $8 \times 10^{-6}$  mol/l im Falle von Np und 10 mg/l für HS. Die Dauer der Diffusionsversuche mit Np bzw. Np/HS betrug etwa einen Monat. Zur weiteren Charakterisierung der Tonproben wurden ca.  $1 \times 10^{-9}$  mol/l <sup>22</sup>Na<sup>+</sup> einen Tag vor Beendigung des Diffusionsexperiments zugesetzt. Nach Öffnen der Diffusionszellen und Entnahme der Bohrkerne wurden jeweils 40 Tonschichten abgeschliffen. Die insgesamt abgetragene Tonschicht hatte eine Dicke von etwa 1,5-1,6 mm. Die Np- und Na-Konzentrationen in jeder Schicht wurden mittels  $\gamma$ -Spektroskopie bestimmt. Die ersten Auswertungen für Np(V) an Luft bei Raumtemperatur ergaben folgende Parameter:

ohne HS:  $D_e = 2,3 \pm 0,2 \times 10^{-11}$  m<sup>2</sup>/s,  $\alpha = 110 \pm 3$ ,  $K_d = 46 \pm 3$  l/kg

mit HS:  $D_e = 1,8 \pm 0,1 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $\alpha = 81 \pm 2$ ,  $K_d = 34 \pm 2 \text{ l/kg}$

Die Anwesenheit von HS hatte allenfalls einen geringfügigen Einfluss auf die Np Diffusion. Des Weiteren liegen die Werte im Falle von Np(V) ohne HS im Vergleich zu früheren Ergebnissen bei allen Parametern etwas niedriger, was möglicherweise durch die Eigenschaften der neuen Bohrkern zu erklären ist. Im Falle des Experiments bei 60 °C sind die  $\gamma$ -spektroskopischen Messungen noch nicht abgeschlossen.

Während der Messzeit im Juli 2010 an der ROBL Beamline (ESRF) wurde die Speziation von Pu an OPA unter aeroben und anaeroben Bedingungen bei pH 7,6 in Abhängigkeit vom Pu-Oxidationszustand (III, IV, VI), pH, atmosphärischem CO<sub>2</sub> und Hintergrundelektrolyten (OPA Porenwasser, 0,1 M NaClO<sub>4</sub>) mittels EXAFS-Spektroskopie untersucht. Sowohl aus den gemessenen Pu L<sub>3</sub>-Kante XANES-Spektren als auch aus den mittels EXAFS bestimmten Pu-O Abständen ergibt sich, dass Pu(IV) der dominierende Oxidationszustand auf der Tonoberfläche nach der Sorption ist, unabhängig vom Ausgangsoxidationszustand des Plutoniums in Lösung. Die EXAFS-Spektren zeigten außerdem, dass Pu(IV) innersphärisch an OPA sorbiert wird. Dies stimmt gut mit früheren EXAFS-Ergebnissen an dem System Pu/Kaolinit überein.

Bei der  $\mu$ -XAS-Messzeit im Oktober 2010 an der MicroXAS Beamline (SLS) wurde die ortsabhängige Verteilung von Pu(III) und Pu(VI) bei der Wechselwirkung mit Opalinuston untersucht. Dazu wurden drei OPA-Dünnschliffe (20-30  $\mu\text{m}$ ) mit Pu(III)- und Pu(VI)-Lösungen kontaktiert. Eine weitere Probe war durch Diffusion von Pu(VI) in einen OPA-Bohrkern erhalten worden. Bei dem Vergleich der mittels Röntgenfluoreszenzmessung aufgenommenen lokalen Verteilungen der Elemente, z. B. Fe, Ca, Sr, Ti und Pu, konnten keine signifikanten Korrelationen festgestellt werden. XANES-Messungen an Pu-Hot-Spots zeigten, dass Pu(IV) mit großem Anteil vorliegt. Dieses Ergebnis stimmt gut mit den oben genannten EXAFS-Messungen an Pulverproben überein.

Die  $K_d$ -Werte für die Sorption von Th(IV) bzw. Pu(IV) an Opalinuston in 0,1 M NaClO<sub>4</sub> (pH = 7,6) wurden aus Sorptionsisothermen unter aeroben Bedingungen ( $p(\text{CO}_2) = 10^{-3,5} \text{ atm}$ ) bestimmt. Dabei wurde die Tonmenge von 0,5-8,0 g/l bei konstanter Actinidenkonzentration von  $4 \times 10^{-7} \text{ mol/l}$  bzw. die Actinidenkonzentration von 100 ppb bis 10 ppb bei konstanter OPA-Menge von 1 g/l variiert. Die ermittelten  $K_d$ -Werte aus der Mengen- und Konzentrationsisotherme des Th(IV) betragen  $131 \pm 11 \text{ m}^3/\text{kg}$ . Für Pu(IV) wurden  $K_d = 86 \pm 20 \text{ m}^3/\text{kg}$  bestimmt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Diffusionsversuche mit <sup>239</sup>Pu(VI) bei Raumtemperatur und bei 60 °C unter aeroben Bedingungen in An- und Abwesenheit von Huminsäure.
- EXAFS-Messzeit zum Thema „EXAFS study on the influence of humic acid on the sorption of Pu on natural clay“ wurde durch die ESRF und ACTINET-13 bewilligt und soll voraussichtlich im April 2011 stattfindenden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

S. Sachs, T. Reich, G. Bernhard, Study of the role of sulfur functionalities in humic acids for uranium(VI) complexation, *Radiochimica Acta* 98 (2010), 467-477.

D.R. Fröhlich, S. Amayri, J. Drebert, T. Reich, Sorption of Np(V) on Opalinus Clay: Effect of temperature and background electrolyte, Poster at the 11th International Symposium on Environmental Radiochemical Analysis, Chester, England, 15.-17.09.2010.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10176</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actinidentransports in potentiellen Wirtsgesteinsformationen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementarprozess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.146.371,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Lippold	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zielsetzung des Gesamtvorhabens besteht zum einen in der Bereitstellung von Bewertungsgrundlagen zum Einfluss organischer Kolloide auf die Migration von Actiniden in Tongestein. Dazu wird die Koadsorption an Tonmineralien und an natürlichem, organikhaltigem Ton in Abhängigkeit von geochemischen Parametern untersucht und modelliert. Mit Hilfe von Radiotracermethoden sollen die Voraussetzungen für eine Rekonstruktion ternärer Systeme anhand von Gleichgewichtsdaten binärer Systeme im Einzelnen geprüft werden.

Ziel ist außerdem die tomographische räumliche und zeitliche Erfassung von Konzentrationsverteilungen während des Transports von Lösungen und Kolloiden in Modellprobekörpern und Bohrkernen aus Ton, Tongestein und Kristallingestein, um realistische Transportparameter und Kalibrierdaten für die Entwicklung verbesserter Prognosemodelle zur Sicherheit nuklearer Endlager zu schaffen.

Das Projekt ist Bestandteil des Verbundvorhabens „Wechselwirkung und Transport von Actiniden im natürlichen Tongestein unter Berücksichtigung von Huminstoffen und Tonorganika“.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Untersuchung der Auswirkung niedermolekularer Tonorganika auf die Adsorption radiotoxischer Schwermetalle an Opalinuston
- AP2: Untersuchungen zur Aufklärung kinetischer Effekte bei der Wechselwirkung höherwertiger Metalle mit natürlichem organischem Material
- AP3: Längerfristige PET-Untersuchung heterogener Diffusionsprozesse in intakten Opalinuston-Proben bei Standardbedingungen
- AP4: Vergleichsuntersuchungen analog AP3 bei veränderten Zustandsbedingungen
- AP5: Prozessmodellierung für heterogene Diffusionsprozesse im realen Material

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Einfluss der tonspezifischen organischen Liganden Lactat und Propionat auf das Adsorptionsverhalten von Tb(III) als Analogon dreiwertiger Actinide wurde in ca. 300 Batchversuchen mittels radioaktiver Tracer ( $^{160}\text{Tb}$ ,  $^{14}\text{C}$ Lactat,  $^{14}\text{C}$ Propionat) in Abhängigkeit von Ligandenkonzentration und pH-Wert untersucht. Neben Opalinuston wurden auch die Tonminerale Montmorillonit und Illit als Adsorbentien eingesetzt. Bei porenwassertypischen Ligandenkonzentrationen erwies sich der Einfluss von Lactat auf die Metalladsorption an Montmorillonit und Illit als vernachlässigbar, während Propionat im untersuchten pH-Bereich von 3 bis 7 eine Verstärkung der Adsorption bewirkte. An Opalinuston wurde für beide Liganden ein adsorptionsverstärkender Effekt festgestellt. Aufgrund der gleichsinnigen Ladung von Ligand und Festkörperoberfläche wäre jeweils eine verringerte Adsorption zu erwarten gewesen. Die abweichenden Befunde liegen möglicherweise in der Bildung mehrkerniger Komplexe mit gelösten Mineralbestandteilen begründet. Die Präsenz von Lactat und Propionat in natürlichem Tongestein wirkt somit einer desorptiven Freisetzung von Actiniden im Falle einer pH-Wert-Abnahme entgegen.

Die Diffusionsexperimente an Opalinuston-Bohrkernen wurden fortgesetzt, indem das Ausbreitungsverhalten von  $^{124}\text{I}$ -markierter Porenwasserlösung bei 20 °C und 60 °C über mehrere Wochen mit PET beobachtet wurde. Es zeigte sich, dass trotz mehrmonatiger weiterer Aufsättigung noch keine vollständige Wassersättigung der Proben erreicht worden war, denn vor allem bei der höheren Temperatur war eine advective Transportkomponente zu verzeichnen, die nach einigen Wochen zur Austrocknung der zentralen Injektionsbohrung führte. In allen Fällen ergab sich gegenüber FEM-Diffusionssimulationen (FEM: Finite-Elemente-Methode) eine unerwartet hohe Ausbreitungsgeschwindigkeit. Vor dem Einsatz der längerlebigen  $^{58}\text{Co}$ -Markierung wurden die Proben deshalb weiter nachgesättigt.

Mittels Monte-Carlo-Simulationen der PET-Messungen konnte der Störeinfluss der Streustrahlung quantitativ berechnet und bewertet werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung der Adsorptions- und Desorptionskinetik von Humin- und Fulvinsäuren in Relation zur Austauschkinetik an gesättigten Tonmineral-Oberflächen
- Diffusionsuntersuchungen über 3 bis 6 Monate an Opalinuston-Bohrkernen mit Porenwasserlösung, markiert mit  $^{58}\text{Co}$ Hexacyano-Komplex
- Modellbildung zum Prozessverständnis der Tracerausbreitung in partiell gesättigtem Gestein, wie es in der Nähe von Bergwerksstrecken in der Auflockerungszone realistisch vorkommt
- Verbesserung der PET-Rekonstruktionsprozedur bezüglich der Streustrahlung, die im Bild eine Diffusionsfront vortäuschen kann

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Kulenkampff, M. Gründig, M. Wolf, J. Lippmann-Pipke, M. Richter, F. Enzmann: Direct quantitative observation of transport processes with Positron-Emission-Tomography. Vortrag, SSOM Symposium Transport in Porous Materials, Villigen, Schweiz, 19.-20.08.2010

H. Lippold, J. Lippmann-Pipke: Radiotracer studies on interaction processes related to humic-bound transport of radionuclides. Vortrag, 11<sup>th</sup> Int. Symposium on Environmental Radiochemical Analysis, Chester, Großbritannien, 15.-17.09.2010

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10186</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 732.546,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Rösch	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

- Quantenmechanische Modellierung der Komplexierung von Aktinoidenspezies durch Huminstoffe.
- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Aktinoidenspezies an Tonmineraloberflächen.
- Weiterentwicklung von Solvatationsmodellen.

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Actinidenmigration im natürlichen Tongestein“.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete:

AP1: Sorption an Tonmineralien

Das AP1 umfasst quantenmechanische Berechnungen periodischer Modelle von Tonmineralien sowie computerchemische Untersuchungen zur Adsorption von Aktinoidenspezies auf Tonmineraloberflächen mit Hilfe dieser Modelle.

AP2: Komplexierung durch Huminstoffe

In AP2 werden computerchemische Untersuchungen zu Komplexen von Actinoiden in wässriger Lösung durchgeführt. Schwerpunkte sind die Modellierung der Komplexierung durch natürliche Organika wie etwa Huminstoffe und die Untersuchung anorganischer Komplexe von Americium.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: Schichtgeladene Tonminerale; AP1.2: Adsorption an Tonmineralen; AP2.3: Komplexierung von Am(III).

Die Modellierung geladener Tonminerale wurde anhand des prototypischen Modellminerals  $\text{Na}_x\text{Al}_{4-x}\text{Mg}_x(\text{OH})_4[\text{Si}_8\text{O}_{20}]$  für  $x = 0.5$ , das Beidellit entspricht, fortgeführt (AP1.1).

Die Adsorption von Uranyl(VI) wurde auf der basalen (001)-Oberfläche von Beidellit untersucht. Hierbei wurden vor allem Plätze an geladenen Substitutionsdefekten in Betracht gezogen, da ideale basale Tonmineraloberflächen kaum reaktiv sind. Der Vergleich innersphärischer mono- und bidentater sowie außersphärischer Komplexe anhand von Modellen für kurzreichweitige Lösungsmittelleffekte ergab eine etwas höhere Stabilität für außersphärische Spezies. Fast immer Fällungen fand bei außersphärischen Komplexen eine Deprotonierung an der Oberfläche statt, so dass Uranylmonohydroxid als Adsorbat entsteht, wobei die Koordination 4 und 5 nahezu entartet auftritt. Bei innersphärischen Spezies erwies sich die monodentate Koordination als leicht vorteilhaft gegenüber der bidentaten. In wässriger Lösung konnten die Ergebnisse für außersphärische Komplexe bestätigt werden. Die Stabilität der außersphärischen Adsorption mit direktem Oberflächenkontakt des Komplexes konnte bestätigt werden durch Vergleich eines Adsorptionskomplexes mit direktem Kontakt der ersten Solvatschale zur Oberfläche und einer Spezies mit zwei Schichten Wasser zwischen Uranyl und Oberfläche.

Die Modellierungen zur Adsorption von Neptunyl(V) auf der oktaedrischen (001)-Oberfläche von Kaolinit, zunächst ohne Solvatation, wurden ergänzt und teilweise um explizite Solvatationseffekte erweitert (AP1.2). Während ohne Berücksichtigung der Solvatation inner- und außersphärische Komplexe sowie 4- und 5-fach koordinierte Spezies recht ähnliche Energien zeigten, deuten die Resultate mit Lösungsmittelleffekten darauf hin, dass monodentate Komplexe um etwa 50 kJ/mol stabiler sind als bidentate. Jedoch bleiben die Unterschiede zwischen 4- und 5-fach koordinierten Spezies gering. Ein Vergleich mit Uranyl(V) ergab, dass interessanterweise Struktur und relative Stabilität dieser verschiedenen geladenen Ionen auf gleichen Plätzen der (001)-Oberfläche von Kaolinit durchaus ähnlich sind.

Am(III)-Halogenide (AP2.3) dienen zur Verifikation der verwendeten Methode. Geometrische Parameter des Moleküls  $\text{AmF}_3$  wurden in sehr guter Übereinstimmung mit der Literatur erhalten. Am(III)-Aqua-Komplexe mit 8–10 Liganden wurden unter  $C_{2v}$ -Symmetrie voroptimiert. Freie Energien der Dissoziation eines Wasserliganden sind exotherm für 9- und 10-fache Koordination. Damit ist die 8-fache Koordination für Am(III) bevorzugt, während in der Literatur der Wert 9 favorisiert wird. Um diese Frage zu klären, werden Optimierungen ohne Symmetriebeschränkungen durchgeführt sowie Verschiebungen von Aqua-Liganden in die zweite Solvatschale modelliert. Die Ergebnisse dienen dann zur Modellierung von Am(III)-Acetat-Komplexen, um an experimentelle Arbeiten an der TU Dresden anzuschließen.

Für U(IV) und Np(IV) (AP1.2 und 1.5 alt) wurden systematisch die Aquaionen mit Koordination 8–10 in Lösung optimiert. In beiden Fällen erfordert die Abstraktion eines Aqua-Liganden aus der ersten Solvatschale von  $\text{An(IV)(H}_2\text{O)}_{10}$  etwa 25 kJ/mol und die eines zweiten etwa 50 kJ/mol. Dies zeigt, dass Koordinationszahlen 9–10 bevorzugt ist. Derzeit werden diese Rechnungen auf Monohydroxide ausgedehnt, wobei insbesondere die Möglichkeit einer geringeren Koordinationszahl untersucht wird.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.2: Adsorption von Tonmineralen

AP2.2: Temperaturabhängigkeit thermodynamischer Parameter

AP2.3: Komplexierung von Am(III)

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Quantum chemical modeling of uranyl adsorption on mineral surfaces *Radiochim. Acta* 98 (2010) 635.

A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Uranyl adsorption at (010) edge surfaces of kaolinite: A density functional study *Geochim. Cosmochim. Acta* 75 (2011) 706.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität des Saarlandes, Campus der Universität des Saarlandes, 66123 Saarbrücken		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10196</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 695.507,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Beck	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Forschungsvorhabens ist die Untersuchung des Einflusses verschiedener geochemischer Parameter (Konzentration an Metallen, pH, Konkurrenzen oder organische Komplexligenanden) auf die Sorption und Desorption von Uran sowie Lanthaniden (Europium, Terbium und Gadolinium) als deren Vertreter in Opalinuston. Die dabei erhaltenen Ergebnisse zur Migration der untersuchten Metalle an Opalinuston werden mit den aus Vorgängerprojekten erhaltenen Daten für das Modellmineral Kaolinit verglichen. Im zweiten Projektabschnitt wird mit Hilfe von miniaturisierten Säulenversuchen das Ausbreitungsverhalten der untersuchten Lanthaniden in Gegenwart verschiedener Modell- bzw. natürlich vorkommender Tonorganika (Salicylat, Citrat, Lactat sowie Huminsäure) unter Variation geochemischer Einflüsse in kompaktiertem Tonstein untersucht.

Von den in diesem Verbund tätigen Institutionen haben wir eine besondere thematische Nähe und Kooperation mit folgenden Einrichtungen: Institut für Nukleare Entsorgung des FZKA; Institut für Radiochemie des FZD; Institut für Kernchemie der Johannes-Gutenberg-Universität Mainz; Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung in Leipzig und dem Institut für Physikalische Chemie der Universität Potsdam.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Auswahl und Charakterisierung eines natürlichen Tongesteins
- AP2: Batch-Versuche zur Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter auf die Sorption von Lanthaniden und Radionukliden (Eu, Gd bzw. Tb und U) in natürlichen Tonformationen inklusive der darin enthaltenen Organika
- AP3: Batch-Versuche zur Untersuchung der Einflüsse von organischen Modellstoffen und natürlich vorkommenden tonorganischen Stoffen auf die Metall-Desorption bei natürlichem Tongestein
- AP4: Aufbau und Optimierung eines miniaturisierten Säulenversuchs und Vergleich der Ergebnisse des Säulenversuchs mit denen aus Batch- und Diffusions-Versuchen. Bestimmung wichtiger Parameter auf das Migrationsverhalten der Metalle im nativen Tongestein
- AP5: Räumlichen Verteilung und Ausbreitungsverhaltens der Schwermetalle und Tonorganika durch eine orts aufgelöste Analytik der Tonsäulen
- AP6: Extraktion und Charakterisierung von mobilen bzw. mobilisierbaren Tonorganika aus Opalinuston
- AP7: Untersuchung des Einflusses von unterschiedlichen Temperaturen auf die Metall-Sorption und Desorption an Tonstein und der enthaltenen Organika
- AP8: Simulation verschiedener Temperatur- und Druck-Szenarien mit den entwickelten miniaturisierten Säulenversuchen zur Untersuchung von kinetischen Effekten bei der Sorption und Mobilisierung von Metallen in kompaktem Tonstein durch enthaltene Tonorganika

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde das Sorptionsverhalten der Lanthanoide Eu, Gd und Tb am Opalinuston bei 25 und 60 °C miteinander verglichen. Dabei wurde beobachtet, dass mit steigender Temperatur bei pH 5 und 7,6 eine erhöhte Sorption der Lanthanoide (Ln) eintritt. Zudem konnte nachgewiesen werden, dass dieser Prozess reversibel ist. Es sind bei der Ln-Sorption bei Raumtemperatur vergleichbare Ergebnisse zu beobachten, auch wenn die Proben einmal bei 25 und einmal bei 60 °C vorkonditioniert wurden. Bei den Desorptionsversuchen der Ln vom Opalinuston bei 60 °C konnte beobachtet werden, dass im Vergleich zu den Ergebnissen bei Raumtemperatur nicht nur eine erhöhte Sorption eintritt, sondern auch eine erniedrigte Desorption. Bei allen Untersuchungen war der Einfluss von NOM (HA, Lactat) zu vernachlässigen.

Neben den Sorptionsuntersuchungen im Batch wurden noch Speziationsuntersuchungen von Europium mit modifizierter Huminsäure (40 % der Carboxyl- und 84 % der phenolischen Hydroxyl-Gruppen blockiert) durchgeführt. Dabei wurde die Huminsäure AHA-PB (Batch M173), welche von den Projektpartnern aus Dresden (FZD, Institut für Radiochemie) bereitgestellt wurde, zur Speziation eingesetzt. Im Vergleich zu normalen Aldrich-HA konnte eine verminderte Löslichkeit der modifizierten HA festgestellt werden. Deutlich verringerte Mengen an Metall-Kationen waren ausreichend, die Huminsäure auszufällen. Zudem wurde beobachtet, dass Peak 3, also die stark komplexierte Eu-Humat-Spezies deutlich verringert vorliegt. Durch die Abwesenheit der Hydroxyl-Gruppen ist auch eine gemeinschaftliche Chelat-Komplexierung von Carboxyl- und Hydroxyl-Gruppen, welche zur Ausbildung sehr starker Komplexbindungen führen kann, nicht mehr möglich.

Die Versuche mit den miniaturisierten Tonsäulen (20 x 3,5 mm, L. x i.D.) und kompaktiertem Ton (60 / 40 Gew.-% Opalinuston/Seesand) wurden weitergeführt. Die Durchbruchzeiten (bei Injektion von jeweils 2 µL der entsprechenden Probe) von Iodid als Inertmarker (10 µM) und Lactat (1000 µM) als natürliche Tonorganik wurden unter dem Einfluss verschiedener Temperaturen (20 und 60 °C) sowie zusätzlich bei Anwesenheit von 200 µM Eu bestimmt. Bei einem Fluss von 2,4 µL/min ergaben sich bei 20 °C ähnliche Durchbruchzeiten von Iodid (50,3±0,2 min, n=3) und Lactat (50,9±0,3 min, n=3). Bei Anwesenheit von 200 µM Eu in der Injektionslösung konnte eine signifikante Zunahme (+5,5 %) der Durchbruchzeit von Lactat (53,7±0,3 min, n=5) im Vergleich zum Inertmarker Iodid (+0,6 %) bestimmt werden (50,6±0,8 min, n=5).

Grundsätzlich ergaben sich bei 60 °C durchweg längere Durchbruchzeiten (wahrscheinlich aufgrund höherer Sorption am Ton, was ja schon in den Batch-Experimenten nachgewiesen werden konnte, s.o.). So verlängerten sich die Durchbruchzeiten von Iodid auf 55,2±0,1 min (n=3) und die von Lactat auf 57,7±1,0 min (n=3), was einer Zunahme von 9,7 bzw. 13,4 % entspricht.

Bei Anwesenheit von 200 µM Eu konnte bei 60 °C keine signifikante Änderung der Durchbruchzeiten von Lactat (55,9±1,5 min, n=5) und des Inertmarkers Iodid (54,2±1,0 min, n=5) nachgewiesen werden, wobei sogar ein Trend zu kürzeren Durchbruchzeiten bei Anwesenheit von Europium zu beobachten ist. Dies könnte darauf hindeuten, dass die Wechselwirkungen von Europium, Lactat und Ton temperaturabhängig sind.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Sorptions und Desorptionsuntersuchungen von Uranyl unter dem Einfluss von NOM an Opalinuston bei 60 °C in Porenwasser und NaClO<sub>4</sub>. Bestimmung von thermodynamischen Daten für Europium und Uran.
- Migrations-Tests mit einem neuen Säulen-Setup mit einer Art Verbund-Säule, bestehend aus 100 % Seesand (Länge ca. 5 mm), 100 % Opalinuston (ca. 10 mm) und 100 % Seesand (ca. 5 mm).
- Einfluss von Salicylat sowie Lactat auf die Sorption bzw. Desorption von Europium an kompaktiertem Opalinuston (im Miniatur-Säulenversuch).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kautenburger R., Möser C., Beck H.P. (2010) Einfluss von Temperatur und Organik auf die Mobilität von Lanthaniden in Opalinuston. Verbund-Workshop, Mainz (Vortrag).

Kautenburger R. (2010) Endstation Tonstein? Nachrichten aus der Chemie 58 (Vol. 7/8), 751-756.

Möser C., Kautenburger R., Beck H.P. (2010) CE-ICP-MS as Speciation Technique to Analyze the Complexation Behavior of Europium, Gadolinium and Terbium with Humic Acid. 15th Meeting of the International Humic Substances Society, Puerto de la Cruz, Teneriffa, Spanien (Poster).

Kautenburger R. (2010) Influence of Lanthanide Concentration and the Presence of Competing Metal Ions on Europium and Gadolinium Speciation with Humic Acid Analyzed by CE-ICP-MS. 15th Meeting of the International Humic Substances Society, Puerto de la Cruz, Teneriffa, Spanien (Vortrag).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10206</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.085.140,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marquardt	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Untersucht wird das Migrationsverhalten von Actiniden in der natürlichen Tonbarriere. Hierbei sollen die relevanten Prozesse auf molekularer Ebene aufgeklärt und verstanden werden. Neben der eingehenden Charakterisierung von Tonmineralien und der darin enthaltenen Tonorganika werden deren Wechselwirkungen mit Actinidionen untersucht. Notwendige Grundlagenuntersuchungen werden parallel durchgeführt, hinsichtlich Komplexierung der Actiniden mit Tonorganika und Huminstoffen. Das natürliche tonorganische System wird aus reinen Komponenten nachgebaut um ihre Entstehung, ihre Eigenschaften sowie ihren Einfluss auf die Actinidenmigration nachvollziehen zu können.

Zusammenarbeiten laufen mit dem Forschungszentrum Dresden, der Universität Mainz, Potsdam, Heidelberg, Köln, Universität des Saarlandes, IIF Leipzig sowie der TU München.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Die Rolle der niedermolekularen Komponenten (Formiat, Acetat, Propionat, Laktat, und andere) bei der Diffusion von Radionukliden in OPA;
- AP2: Der Einfluss von Kerogen auf die Diffusion/Sorption von Actiniden (An) in/an OPA;
- AP3: „Post mortem“-Analysen von Diffusionsexperimenten, die wegen technischer Schwierigkeiten in der laufenden Projektphase wiederholt werden müssen;
- AP4: pH-Messung bei erhöhten Temperaturen;
- AP5: Untersuchungen zur Sorption und Redoxverhalten von Np, Pu und Tc im OPA und Cox-System.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeiten zur Komplexierung von Cm(III) durch Propionat bei höheren Temperaturen wurden weiter fortgeführt. Mit einer Cm(III)-Konzentration von  $1 \times 10^{-7}$  M und variierenden Propionat-Konzentrationen bei einer Ionenstärke von 0.1 M NaClO<sub>4</sub> und Temperaturen von 20, 50 und 90 °C, wurden die Ergebnisse vom letzten Halbjahr verifiziert. Mit zunehmender Ligand-Konzentration und zunehmender Temperatur verschiebt sich das Emmissionsbanden-Maximum zu höheren Wellenlängen, d. h. eine Temperaturerhöhung verschiebt das Komplexierungsgleichgewicht zugunsten der komplexierten Spezies. Mittels einer Peakentfaltung konnten die Maxima den folgenden Cm-Spezies zugeordnet werden: Cm<sup>3+</sup> bei 593.8 nm, Cm(Prop)<sup>2+</sup> bei 597.1 nm und Cm(Prop)<sub>2</sub><sup>+</sup> bei 599.2 nm. Alle Fluoreszenz-Lebensdauern sowohl bei Raumtemperatur als auch bei Temperaturen bis 90 °C sind mo-

no-exponentiell. Auch mit Erhöhung der Propionat-Konzentration bleiben diese mono-exponentiell. Allerdings verlängert sich die Lebensdauer mit zunehmender Propionat-Konzentration von 70.8 auf 83.5  $\mu\text{s}$  (0.005 bis 0.03 molaren Lösungen), weil Wasser-Liganden aus der ersten Koordinationsschale vom Liganden verdrängt werden. Nach der Gleichung von Horrocks und Kimura ändert sich die Anzahl der  $\text{H}_2\text{O}$ -Moleküle in der ersten Schale des  $\text{Cm}^{3+}$  mit der Komplexbildung von 9 über  $8.3 \pm 0.5$  auf  $6.9 \pm 0.5$  Moleküle. Mit einer Temperaturerhöhung bis  $90^\circ\text{C}$  vermindert sich die Lebensdauer um etwa 5  $\mu\text{s}$ . Der  $\log K_1^\circ$  für (CmProp2+) zeigt im Temperaturbereich von  $T = 20 - 90^\circ\text{C}$  einen Anstieg um ca. 0.2 Größenordnungen (von  $3.34 \pm 0.02$  auf  $3.49 \pm 0.03$ ), während  $\log K_2^\circ$  für (CmProp2+) um eine Größenordnung (von  $1.77 \pm 0.21$  auf  $2.87 \pm 0.10$ ) ansteigt. Gegenüber den früheren Ergebnissen haben sich die Bildungskonstanten nur leicht geändert. Zur Ionenstärke-Korrektur wurde das SIT-Modell verwendet, wobei auch die  $\Delta\varepsilon_n(T)$  als Funktion der Temperatur untersucht wurden.  $\varepsilon_1$  kann als temperaturunabhängig innerhalb des experimentellen Fehlers angesehen werden ( $\varepsilon_1 = -0.13 \pm 0.01$ ), trotz eines leichten Anstiegs mit der Temperatur ab  $70^\circ\text{C}$ .  $\varepsilon_2$  ist definitiv temperaturunabhängig ( $\varepsilon_2 = 0.14 \pm 0.01$ ). Mittels der Van't Hoff-Gleichung wurde die Standardreaktionsenthalpie  $\Delta_r H^\circ$  für die erste und zweite Komplexbildungsreaktion zu  $5.76 \pm 1.10\text{ kJ mol}^{-1}$  und  $30.40 \pm 2.30\text{ kJ mol}^{-1}$  bestimmt. Für die Gibbs'sche Standardreaktionsenergie  $\Delta_r G^\circ$  und -entropien ergaben sich daraus folgende Werte:  $\Delta_r G_1^\circ = -19.0 \pm 1$ ,  $\Delta_r G_2^\circ = -10.9 \pm 0.3\text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta_r S_1^\circ = 83.2 \pm 0.4\text{ J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ ,  $\Delta_r S_2^\circ = 138.3 \pm 8\text{ J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ . Beide Komplexbildungsreaktionen zeigen eine positive Reaktionsentropie, d. h. beide Reaktionen werden durch die Entropie getrieben. Außerdem kann man aus den Ergebnissen auf eine Innersphere-Komplexbildung schließen.

Die Untersuchungen zur Kinetik der Sorption an Tongestein bzw. des Redoxverhaltens der redoxsensitiven Radionuklide Np, Pu und Tc wurden fortgeführt. Gegenüber früheren Betrachtungen wurde diesmal eine Gefäßwand-Sorption der Metallkationen berücksichtigt. Nach vier Monaten werden ca. 90 % des Pu, ca. 83 % des Np(V) und ca. 30 % Tc(VII) sorbiert. Daraus resultiert ein  $\log K_d$  von  $3.1\text{ m}^3\text{kg}^{-1}$  für Pu,  $1.1\text{ m}^3\text{kg}^{-1}$  für Np und  $0.030\text{ m}^3\text{kg}^{-1}$  für Tc(VII) bei einem M/V-Verhältnis von 20. Die Redoxspeziation der Radionuklide wurde mittels Flüssig-flüssig-Extraktion und PMBP als Extraktionsmittel in zeitlichen Abständen untersucht. Nach vier Monaten Reaktionszeit findet für das gelöste Pu - 10 % des totalen Pu-Gehaltes - ca. 50 % Pu(IV) und 50 % Pu(V). Das gleiche Ergebnis erhält man für Np: 50 % Np(IV) und 50 % Np(V). Da für die Versuche mit der geringen Metallkonzentration von  $1 \times 10^{-8}\text{ M}$  die Flüssigszintillations-Zählung zur Radionuklid-Bestimmung zu unempfindlich ist, wurde die Kapillarelektrophorese gekoppelt an eine ICP-MS als zweite Redoxspeziationmethode aufgebaut und eingesetzt. Getestet wurde die Methode vorerst nur an Np-Proben. Hier konnte gezeigt werden, dass sehr geringe Np-Konzentrationen von  $2 \times 10^{-9}\text{ M}$  ein gutes Signal/Rauschen-Verhältnis ergeben um eine vernünftige Speziation zu betreiben. Allerdings wurde für die Proben nur ein Np(V)-Signal detektiert, was im Widerspruch zu den Extraktionsergebnissen ist. Allerdings ist das automatische Probenaufgabesystem der CE noch nicht auf sehr redox-empfindliche Proben ausgelegt. Hier muss eine Verbesserung des Systems erfolgen, um zukünftig eindeutige Aussagen treffen zu können.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Actiniden-Komplexierungsverhalten mit extrahierten OPA-Kerogen, synthetischen Ton-Organika-Assoziaten und „kleinen“ organischen Molekülen werden untersucht.
- Experimente zur Cm(III)-Komplexbildung mit Lactat bei Temperaturen von 25 bis  $90^\circ\text{C}$  wurden begonnen und werden fortgeführt.
- Verbesserung des Probenaufgabesystems der CE-ICP-MS.
- Fortführung der Batch-Sorptionsversuchen von Np, Pu und Tc mit OPA- und Cox-Ton.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10216</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 413.157,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kumke	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im beantragten Forschungsvorhaben werden laserbasierte spektroskopische Methoden zur Untersuchung der Wechselwirkungen in ternären Systemen (weiter)entwickelt. Damit wird das Prozessverständnis in ternären Systemen auf molekularer Ebene erweitert und verbessert. Aus den experimentellen Arbeiten werden dann neue bzw. verbesserte thermodynamische und kinetische Kenngrößen zur Beschreibung der ternären Systeme ableitbar, die die Basis für ein umfassenderes Verständnis der molekularen Prozesse darstellen. Langzeitsicherheitsanalysen und Risikobewertungen von Endlagerstätten oder geologischen Barrieren werden durch das grundlegende Prozessverständnis so verlässlicher zu gestalten sein.

Das Projekt 02E10216 ist Teil des Verbundes „Wechselwirkung und Transport von Actiniden im natürlichen Tongestein unter Berücksichtigung von Huminstoffen und Tonorganika“. Thematisch eng verknüpft ist das Forschungsvorhaben mit den Teilvorhaben des Forschungszentrums Dresden-Rossendorf (AP1, AP2), des Instituts für Nukleare Entsorgung des FZK (AP1, AP2), der TU München (AP1) sowie des Instituts für Interdisziplinäre Isotopenforschung Leipzig (AP5).

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Interlanthanoid-Energietransfer in binären und ternären Systemen

AP2: Laser-Flash-Untersuchungen der Triplett-Zustände in binären und ternären Systemen

AP3: Anisotropie von Huminstoffen in binären und ternären Systemen

AP4: Kinetik der Sorption in binären und ternären Systemen (stopped-flow und Temperatursprung-Experiment)

AP5: Konkurrenz-Reaktionen der Wechselwirkungen zwischen Ln(III) und anderen Metallionen

*Arbeitspakete der Projektaufstockungsphase*

AP1-A: Modellliganden

AP2-A: Tonorganika

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

(AP1-A):

Die Komplexierung von Eu(III) durch Glykolsäure (und Salicylsäure) wurde bei verschiedenen Temperaturen (bis  $T = 60\text{ °C}$ ) untersucht. Dazu wurden Absorptions- und Emissionsspektren gemessen sowie Lumineszenzabklingzeiten des Europiums bestimmt. Die in den Proben vorliegenden Komplexspezies ließen sich durch Variation des Molenbruchverhältnisses zwischen Europium und Säure variieren. Parallel wurden – basierend auf u. a. Literaturdaten – Speziationsdiagramme erstellt. In den Versuchen wurde die Ionenstärke ( $I = 10^{-2}$ ) und der pH-Wert ( $\text{pH} = 5$ ) konstant gehalten.

Das Gleichgewicht zwischen 8-fach und 9-fach komplexierten Eu(III)-Aquaspezies wurde in Tieftemperaturexperimenten ( $T = 5\text{ K}$ ), in denen durch eine sehr hohe spektrale Auflösung ( $\rightarrow$  Eliminieren der inhomogenen spektralen Verbreiterung durch selektive Anregung von Isochromaten) STARK-Level aufgelöste Spektren er-

halten wurden, eingehend untersucht. Die Untersuchungen erfolgten sowohl mit H<sub>2</sub>O als auch mit D<sub>2</sub>O als Lösungsmittel. Aus den Experimenten konnte kein Isotopen-Effekt bei der Ausbildung des Gleichgewichts abgeleitet werden. Durch die Bestimmung der Lumineszenzabklingzeiten  $\tau$  in Wasser und Deuteriumoxid wurde die von Horrocks et al. etablierte empirische Beziehung zwischen  $\tau$  und der Anzahl koordinierter Wassermoleküle  $n$  auch für Werte mit  $n > 6$  experimentell mit Daten unterlegt und so die empirischen Koeffizienten der Gleichung angepasst. Der Einfluss der Ionenstärke (bis  $I = 4$ ) sowie des Anions wurde ebenfalls untersucht. Als Anionen wurden Chlorid und Perchlorat als vermeintlich schwache Liganden und Sulfat als starker, bidentat bindender Ligand eingesetzt. Diese Untersuchungen wurden in Deuteriumoxid durchgeführt, um so die Löscheffekte durch H<sub>2</sub>O zu eliminieren und somit die reinen Einflüsse der Anionen zu charakterisieren. Durch die Auswertung der STARK-Level-aufgelösten Emissionsspektren und der Lumineszenzabklingzeiten konnten die verschiedenen Effekte der Anionen auf die Komplexgeometrie bzw. die erste und zweite Koordinationsphäre des Eu(III)-Ions gezeigt und mit Eigenschaften der Ionen (z. B. Polarisierbarkeit, Ausbildung von bidentaten Komplexen) in Beziehung gesetzt werden.

Darüber hinaus wurden Untersuchungen mit weiteren Modellliganden (Anthranilsäure, Maltol, Deferipron) begonnen, in denen zunächst grundlegende spektroskopische Daten (z. B. Absorptionsspektren zur Erstellung von Job-Plots) erhoben wurden.

(AP2-A):

Es wurden Untersuchungen des Interlanthanid-Energietransfers zwischen Tb(III) (Donor) und Nd(III) (Akzeptor) auf verschiedenen Kaolinit-Oberflächen durchgeführt. Dazu wurden die Ionen aus flüssiger Phase an die Feststoffe sorbiert. In den Experimenten wurde mit einer konstanten Gesamtionenbeladung der Feststoffproben gearbeitet, wobei La(III) als Additiv eingesetzt wurde. Durch die Variation der Nd(III)-Konzentration ließ sich der mittlere Abstand zu sorbierten Tb(III)-Ionen verändern, der über die Bestimmung der Energietransfereffizienz bestimmt werden konnte. Auf diese Weise wurden für die untersuchten Proben Abstände von auf der Oberfläche sorbierten Ionen für interionische Entfernungen bis ca. 1 nm bestimmt. Untersuchungen unter Variation der Temperatur bis  $T = 60$  °C zeigten keine Veränderung in der Energietransfereffizienz, d. h., der mittlere Abstand der Ionen auf der Oberfläche war unverändert.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

(AP1-A):

Die Untersuchungen der Modellliganden in Komplexen mit Ln(III) (Ln(III) = Eu(III), Tb(III)) wird fortgesetzt, wobei der Einfluss der Temperatur bis  $T = 60$  °C auf die Speziation der Ln(III)-Ionen charakterisiert werden wird. Es wird eine ausführliche spektroskopische Charakterisierung durchgeführt, wobei speziell die Lumineszenzparameter (Abklingzeit, Asymmetrie-Verhältnis, spektrale Lage von Lumineszenzbanden) im Vordergrund der Untersuchungen stehen werden. Die so erhaltenen Systeminformationen werden hinsichtlich der Speziation des Eu(III) unter den gewählten experimentellen Bedingungen bewertet werden. Eine Auswertung der Temperaturabhängigkeit der verschiedenen Lumineszenzparameter mit Hinblick auf die Bestimmung von thermodynamischen Daten wird weiter vorangetrieben werden. Die Temperaturabhängigkeit der Lumineszenzeigenschaften von Eu(III)- (und eventuell Tb(III)-) Komplexen mit weiteren Modellliganden wird analog zu den bisher durchgeführten Messungen untersucht und analysiert werden.

(AP2-A):

Die Untersuchung des Interlanthanid-Energietransfers von Tb(III)/Nd(III) sorbiert an Tonmineraloberflächen wird auf weitere Modell-Tonminerale ausgedehnt werden. Es werden die Sorptionsbedingungen variiert werden (z. B. pH-Wert, Temperatur, Ionenstärke). Durch die Bestimmung der Energietransfereffizienz werden die mittleren Abstände zwischen den sorbierten Ionen bestimmt und korreliert. Des Weiteren werden die Sorptionsexperimente in Gegenwart von Modellliganden durchgeführt. Dabei wird die mögliche Veränderung der Sorption zunächst mit Ln(III) in Lumineszenzexperimenten qualitativ und quantitativ beschrieben werden. Im Anschluss daran werden Interlanthanid-Energietransferexperimente durchgeführt werden, um die Verteilung der sorbierten Ionen auf der Tonmineraloberfläche zu charakterisieren.

Es werden weiterhin Lumineszenzuntersuchungen an Kerogen bzw. Ln(III)-Kerogen-Komplexen durchgeführt. In diesen Experimenten werden Temperatur und eventuell Ionenstärke der Lösungen variiert werden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

B. Marmodée, K. Jahn, F. Ariese, C. Gooijer, M.U. Kumke; J. Phys. Chem. A 114 (2010) 13050–13054. „Direct spectroscopic evidence of 8- and 9-fold coordinated Europium(III) species in H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O”

K. Jahn (Diplomarbeit); „Speziation von Eu(III) in H<sub>2</sub>O und D<sub>2</sub>O bei ultratiefen Temperaturen – Einfluss von Anionen und Ionenstärke“, Potsdam Dez. 2010

<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 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 ersten neuen Datenformaten weiterentwickelt. Bearbeitet wurde das Projekt von Herrn Mirko Kränkel (AG Kröner).

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

In diesem Abschnitt wurden Darstellungsmethoden für Gebiete mit freien Rändern entwickelt. Basis hierfür war ein Ansatz basierend auf einer Levelsetfunktion, deren Nullstellenmenge, den Rand des Rechengebietes beschreibt. Hierzu muss in den Datenformaten ein weiterer Vektor für die Freiheitsgrade der Levelsetfunktion angegeben und in GRAPE eingelesen werden. Die Zeichenroutine bestimmt die Schnittlinie bzw. Schnittfläche der zu rendernden Primitiven und zeichnet dann die Subniveaumenge der Levelsetfunktion. Dazu muss falls auf dieser Menge weitere numerische Daten (Dichte, Geschwindigkeit,...) visualisiert werden sollen, die Werte an den Nullstellen der Levelsetfunktion entsprechend interpoliert werden.

Weiterhin wurde die Darstellung dreidimensionaler Klüfte für die bisher vorliegenden Daten fertiggestellt. Es ist nun möglich beliebige Querschnitte der Kluft sowie die Werte innerhalb und außerhalb einer Kluft getrennt zu betrachten.

Auf Seiten des Postprocessing wurden in den Probe-Methoden Schwierigkeiten in der Handhabung behoben und die Werteermittlung an mehreren Punkten gleichzeitig über eine Datei-basierte Ein/Ausgabe-Funktion automatisiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise weitergeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10316</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen		
<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 30.09.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 30.09.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 82.404,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Attinger	

## 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. Um die Anwendbarkeit der beiden Programmpakete auch auf die Wirtsformationen 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 Freiberg (Prof. Kröner), 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 Gruppe Attinger (Universität Jena) bearbeitet:

- AP5: Skalierung von halinen und thermohaliner Strömungen in heterogenen geologischen Medien
- WP1: Stabilitätsanalyse von halinen und thermohalinen Strömungen in heterogenen geologischen Medien
- WP2: Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen in heterogenen geologischen Medien

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Das vorige Stabilitätskriterium wurde nun auf heterogene Formationen erweitert. Das Kriterium kann 3 Stabilitätsregime vorhersagen: ein rein diffusives, ein stabil konvektives und ein nicht stabil-konvektives.
- Es wurde weiter untersucht, unter welche Bedingungen Heterogenität das System stabilisiert.
- Das Stabilitätskriterium wird zurzeit noch auf thermohaline Probleme erweitert.

Ergebnisse:

Grundsätzlich kann man bei dichte-getriebenen Strömungen feststellen, dass sie jeweils bis zu einer kritischen Wellenlänge für Störungen stabil sein können. Instabil sind die Strömungen dann für Wellenlängen größer der jeweiligen kritischen Wellenlänge. Heterogenitäten können stabilisieren, wenn die Korrelationslänge klein im Vergleich zur kritischen Wellenlänge ist. Der Grund dafür ist darin zu sehen, dass Heterogenitäten zu zusätzlicher Mischung oder Dispersion im Salztransport führen. Diese vergrößerte Dispersion wirkt dann in dem Sinne stabilisierend, dass die Instabilitäten zu größeren Wellenlängen hin verschoben werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Das Paper Stability of density-driven flows in heterogeneous media by J. L. Musuuza, F.A. Radu, and S. Attinger ist bei Advances in Water Resources in 2010 angenommen und erschienen.

Ein neues Paper The stability of density-driven flows in saturated heterogeneous media wurde bei Advances in Water Resources eingereicht.

Ein Vortrag wurde beim E-DuR Statustreffen im November 2010 in Braunschweig gehalten.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10326</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen		
<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 31.03.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 654.710,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Wittum	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projekts ist es, die Modellierung des Wärmetransports in  $d^3f$  (AP6) und die Modellierung freier Oberflächen in  $d^3f$  und  $r^3t$  (AP8) einzubringen.

Zur Einbeziehung der Kopplung muss zusätzlich die Energiegleichung aufgestellt und in das Modell eingekoppelt werden. Zur Diskretisierung werden die bestehenden Finite-Volumen-Verfahren und Galerkin-Methoden herangezogen. Das entstehende algebraische System wird mit Hilfe von Mehrgitterverfahren voll gekoppelt gelöst. Hierzu muss das bestehende Lösungsverfahren erweitert und in wesentlichen Teilen neu entwickelt und implementiert werden. Alles muss in die Parallelisierung einbezogen werden. Zur Modellierung der freien Oberfläche muss zunächst eine stabile Beschreibung der freien Oberfläche und des ortsabhängigen Eintrags in den Grundwasserleiter erstellt werden. Das effektive Modell aus AP5 (Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen) muss hier numerisch gelöst werden.

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 Institut für Numerische Simulation der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, dem Mathematischen Institut der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg 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 02C0254 und 02C0465) und vom 01.10.1998 – 31.12.2003 (FKZ 02E9148).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP6: Modellierung des Wärmetransports in  $d^3f$

AP8: Modellierung freier Oberflächen und Potentialströmungen in  $d^3f$  und  $r^3t$

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP6: Modellierung des Wärmetransports in  $d^3f$ .

Nach der Formulierung eines Modells, das die thermohalin-getriebene Strömung und die Thermodiffusion zusammenbringt, hat sich unsere Forschung auf die weitere Untersuchung besonderer Aspekte der thermohalin-getriebenen Strömung konzentriert. Der Schwerpunkt unserer Studien lag in der dreidimensionalen Visualisierung des Wärme- und Massentransports in homogenen porösen Medien, die mit einer aus Wasser und Lauge bestehenden Mischung gesättigt waren. Die berechneten Temperatur- und Laugenverteilungen haben es ermöglicht, den Verlauf der Massendichte der Mischung durch die Anwendung geeigneter konstituierender Gesetze zu bestimmen. Als Beispiel haben wir ein Problem erweitert, das von Oldenburg und Pruess vorgeschlagen wurde. Die mathematische Darstellung des Problems ist so konzipiert, dass ein aus hochkonzentrierter Wasser-Lauge-Mischung bestehender Lauge-Würfel, dessen Temperatur höher ist als die Temperatur der Umgebung, in die Mitte eines kubischen und mit Wasser gesättigten Gebiets eingebracht wird. Der Auftrieb und das Absinken des Lauge-Würfels sowie die Interpretation der in beiden Fällen erhaltenen Massen- und Temperaturverteilungen wurden analysiert und dienten als Anlass zur Untersuchung der physikalischen und numerischen Stabilität einer typischen Problemklasse im Bereich thermohalin-getriebener Strömung. Darüber hinaus wurde ein Teil der erhaltenen Resultate als Referenz verwendet, um die thermohalin-getriebene Strömung in geklüfteten porösen Medien zu verallgemeinern.

AP8: Modellierung freier Oberflächen und Potentialströmungen in  $d^3f$  und  $r^3t$ .

Die Levelset-Methode für die Berechnung der freien Grundwasseroberfläche wurde weiter entwickelt und mit  $d^3f$  umgesetzt. Die Genauigkeit wurde verbessert. Das Verfahren ist jetzt von zweiter Ordnung und gilt jetzt auch für unstrukturierte Gitter. Die erste Version dieses Verfahrens wurde im September 2010 zur Verfügung gestellt. Eine Webseite wurde vorbereitet, auf der eine ausführliche Beschreibung für die Verwendung aufgeführt ist (<http://sites.google.com/site/d3fmanual>). Mehrere zweidimensionale Beispiele wurden getestet und beschrieben. Ein drei-dimensionales Testbeispiel wird vorbereitet. Zur Nutzung dieser neuen Features in  $d^3f$  muss ein(e) Benutzer(-in) eine Anfangsposition der Grundwasseroberfläche definieren. Für die trivialen Fälle, wie z. B. eine Oberfläche, eine Ebene oder einen Teil einer Kugelfläche, existieren die entsprechenden UG-Befehle schon. Für eine allgemeine Situation kann eine entsprechende Levelset-Funktion in  $d^3f$  leicht implementiert werden. Die Nullmenge dieser Funktion definiert dann die Anfangsposition der Grundwasseroberfläche. Die Steuerung der numerischen Simulation für die Berechnung der dynamischen Position der Grundwasseroberfläche wird möglichst einfach gehalten. Der wichtigste zusätzliche Parameter in  $d^3f$  ist die Anzahl der Schritte für eine Korrektur der Levelset-Funktion und der extrapolierten Oberflächen-Geschwindigkeit. Diese Funktionen müssen während der Simulationen der Grundwasserströmung aktualisiert werden. Zudem wurde ein neues Verfahren für eine Extrapolation in Normalrichtung zur Grundwasseroberfläche in  $d^3f$  implementiert. Dieses wird benötigt, um die Geschwindigkeit, die nur an der Oberfläche definiert ist, in das ganze Gebiet zu extrapolieren.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Grillo, A., Lampe, M., Wittum, G. (2009): Modeling and simulation of thermohaline flow and thermodiffusion in porous media. *Journal of Porous Media*. (in press).

Grillo, A., Lampe, M., Wittum, G., (2010): Three-dimensional simulation of the thermohaline-driven buoyancy of a brine parcel. *Comput. Visual. Sci.*, 13, 287–297.

<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 31.03.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.288.348,00 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

AS4: Erstellung eines gemeinsamen Abschlussberichtes, Fortschreibung der Anwenderhandbücher und der Testfallsammlungen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am 8. und 9. November 2010 fand in Braunschweig das 8. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten. Es wurde ein Zeitplan für die Übergabe der noch ausstehenden dreidimensionalen Versionen der Programme  $d^3f$  und  $r^3t$  und der einzelnen Teile des Abschlussberichtes an die GRS vereinbart. Am 16. September fand ein weiteres bilaterales Arbeitsgespräch beim GCSC in Frankfurt statt.

Die Zusammenstellung der mathematischen Ansätze für die bei der thermohalinen Strömung relevanten Zustandsgrößen wurde ergänzt um entsprechende Parameter und Formulierungen für verschiedene Gesteine. Zudem wurden die gängigen Relationen für Dichte und Viskosität, die in verschiedenen Codes einschließlich  $d^3f$  verwendet werden, mit den abgesicherten Ansätzen aus der Zusammenstellung verglichen. Der Berichtsentwurf befindet sich zurzeit in der Qualitätskontrolle.

Eine zweidimensionale Version von  $d^3f$  für Rechnungen mit freier Modelloberfläche und eine dreidimensionale Version für das Rechnen im Kluftgestein wurden von der GRS übernommen. Sie befinden sich in der Testphase. Mit den Rechnungen für ein 3d-Modell mit einer Kluft wurde begonnen. 2d- und 3d-Modelle mit komplexeren Kluftsystemen wurden mit Hilfe von ArcGIS bzw. FRAC3D erstellt und mit dem Programm ProMesh in Frankfurt bzw. mit ARTE vernetzt. Letzteres gelang auch für den Testfall aus Äspö Task Force 8.

Eine neue Version des Grafikprogramms GRAPE wurde übernommen und getestet. Leider ist es noch immer nicht möglich alle Features zu testen, da noch nicht für alle Arten von Testfällen Ergebnisdateien vorliegen, insbesondere in  $r^3t$ . Hier werden jedoch keine größeren Probleme erwartet.

Zwei weitere Unteraufträge wurden an das Steinbeis-Zentrum Ölbronn vergeben. Der erste beinhaltet – wie es im Projekt von Anfang an geplant war – die Entwicklung von Benutzeroberflächen für  $d^3f$  und  $r^3t$ . Der zweite Unterauftrag soll das Einlesen und die Verarbeitung geometrischer Modelldaten aus GIS-Systemen ermöglichen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Testen der Benutzeroberflächen
- Testrechnungen mit mehreren Klüften
- Testrechnungen mit Wärmetransport und freien Oberflächen
- nächstes Statusgespräch am 05./06. Mai 2011
- Erstellung des Abschlussberichtes, Fortschreiben der Dokumentation und der Testfallsammlung

### 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 31.03.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.477.700,00 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

In dem zu berichtenden Zeitraum wurde im Wesentlichen an den Arbeitspaketen 2, 3 und 5 gearbeitet.

AP2: Folgende Module wurden für die neue Benutzerumgebung konzipiert und als Module Beschreibung (in xml) realisiert:

- statistisches Modul für die Spezifikation einer probabilistischen Rechnung. Andere Module wurden um Angaben für probabilistische Rechenläufe ergänzt.
- Segment-Modelle für Anwendungsfälle auf der Basis vorhandener Studien (ASSE, ERAM, ISIBEL II)
- Modul für die Spezifikation der Eigenschaften von Elementen.

Das Konzept für das Programm PreStatist wurde entwickelt. Dieses Programm liest diejenigen Daten aus der json-Eingabedatei aus, die einen probabilistischen Rechenlauf spezifizieren. Diese Daten werden in die erforderliche Form transformiert und automatisch an das externe Probabilistik-Werkzeug SIMLAB weitergeleitet.

AP3: Die Anpassung von LOPOS an die neue Daten-Schnittstelle (JSON-Format) wurde weitgehend abgeschlossen.

Die Umsetzung in C++ der grundlegenden Transportprozesse im Fernfeld (Fernfeld-Modul) befindet sich in einer fortgeschrittenen Phase.

Die Umsetzung des Programms PreStatist befindet sich in der Endphase.

AP5: Die Tests der angepassten LOPOS-Version für die Anwendungsfälle ERAM und ISIBEL II waren erfolgreich. Die Tests für ASSE waren dagegen bislang nur teilweise erfolgreich. Bei der Verwendung einiger Segmentmodelle brach das Programm ab. Die Analyse ergab, dass der Fehler schon in der Version von LOPOS vorlag, die als Basis für die aktuelle Weiterentwicklung verwendet wurde.

Das neue Programm zur Berechnung des Nuklidtransports im Fernfeld (CHET-Familie) wurde auf die Korrektheit der Umsetzung von grundlegenden Prozessen gegenüber analytischen Lösungen getestet. Die Tests waren weitgehend erfolgreich. Lediglich der Test von nichtlinearen Sorptionskonzepten ergab, dass das Programm in diesem Aspekt noch fachlich verfeinert werden muss. Die realisierten numerischen Algorithmen wurden auch auf ihre Stabilität und Genauigkeit untersucht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Biosphären-Module (EXCON, EXMAS) sollen an das Programmpaket angebunden werden.

In Rahmen des neuen Programms für den Transport im Fernfeld (CHET-Familie) ist noch Folgendes zu leisten:

- das umgesetzte Konzept, Rechenergebnisse in einem einzigen Result-Objekt zu speichern, um die Verarbeitung der Daten für die Ausgabe effektiv durchführen zu können, hat sich bei großen Datenmengen als problematisch erwiesen (viel Arbeitsspeicher erforderlich). Dieses Konzept soll geändert bzw. angepasst werden.
- das Programm soll bzgl. der Performance optimiert werden
- Berechnung und Ausgabe einiger Kontrollgrößen soll realisiert werden
- die Rechenergebnisse können bereits in spezifizierten Basisformaten cvs, csk, cok und czk ausgegeben werden. Es ist festzulegen, welche Daten und in welchen Formaten noch zusätzlich ausgegeben werden müssen. Die Ausgabefunktionalitäten sollen entsprechend erweitert werden.
- Programmtests gegenüber der realen Anwendungsfällen sollen durchgeführt werden

Die Routinen zur Simulation, Steuerung und Auswertung der statistischen Rechenläufe sollen fertiggestellt werden.

Umfangreiche Integrationstests aller (neu umgesetzten sowie alten angepassten) Module sollen durchgeführt werden.

Eine ausführliche Dokumentation soll erstellt 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 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.073.679,00 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: *Ergebniszusammenführung und Berichterstattung*.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### *Modellierung des Mine-By-Tests:*

Optimierung der 3D FE Netzgeometrie im Streckennahbereich, Fortführung der numerischen Untersuchungen

#### *Modellierung der Bohrlochverformung:*

Fortführung der numerischen Untersuchungen. Gegenüberstellung und Präsentation der Ergebnisse der numerischen Simulation (repräsentatives Berechnungsmodell DR Niche, siehe Veröffentlichung Nantes 2010) mit den ermittelten Messbefunden bei einer GRS internen Seminarveranstaltung zum Jahresabschluss. Jüngste Messbefunde (einschließlich November 2010) zeigen Andauern der Bohrlochverformung. Ergebnisse der numerischen Simulation zeigen Rückgang der Deformationsrate. Defizite im Bereich der physikalischen Modellierung anzusetzen.

#### *Laboruntersuchungen:*

- Ein Quellversuch wurde durch Luftbefeuchtung einer Tonsteinprobe bei Begrenzung der Axialverformung und ohne Radialbeanspruchung durchgeführt. Dabei wurden ein maximaler Axialquell- druck von 10,5 MPa und eine maximale Radialverformung von 6,5 % unter 100 % Luftfeuchtigkeit gemessen. An dieser Stelle brach sich die Tonsteinprobe in die unbegrenzte Radialrichtung durch.
- Drei triaxiale und sechs einaxiale Kriechversuche sind bei unterschiedlichen Belastungen bislang über ein Jahr fortgeführt worden. Deutliche Kriechverformungen wurden beobachtet. Zur Verbesserung der Steuerung der Versuchsbedingungen und zur Erhöhung der Messgenauigkeit wurde entschieden, die Versuchsanlagen Ende 2010 zu umrüsten. Danach (Mitte Feb. 2011) werden neue Kriechversuche gestartet.
- Die Wasserpermeabilitätsmessungen an 5 verheilten Tonsteinproben (D/L=50mm/50mm) sind bei einem Wasserdruckgradient von 200 (Injektionsdruck = 1 bar) unter Manteldrücken von 2 bzw. 3,5 MPa bislang über 5 Monate fortgeführt worden. Dabei wurde kein Wasserausfluss durch die Proben beobachtet. Das weist darauf hin, dass das Darcy-Gesetz für die in-situ realistische Wasserdruckgradienten in konsolidiertem Tonstein nicht gültig sein könnte.
- Zwei Verheilungsversuche wurden durch Injektion von synthetischem Tonwasser in stark geschädigten Tonsteinproben in Abhängigkeit von mechanischer Kompaktion von 1 bis 13 MPa und Temperaturänderung von 30 bis 90 °C durchgeführt. Die gemessene Wasserpermeabilität reduziert sich deutlich mit steigender Kompaktion bis zu 10-19 m<sup>2</sup>, während die Aufheizung nur leichte Permeabilitätserhöhung bewirkte.
- Zur Erhöhung der Steifigkeit des reinen Tonversatzes aus dem Rückstand von Streckenauffahrung wurde eine Reihe von Kompaktionsversuchen mit jeweils 30 % Zuschlag von Sand, Kies und Splitt gestartet. Dabei werden das Kompaktionsverhalten und auch die Abhängigkeit der Gas-/Wasserpermeabilität von der Porosität ermittelt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Ergebnisdokumentation der Messbefunde und Modellierungsergebnisse (Nagra TN)
- Weiterführung des Bohrlochttests zur Langzeitverformungen, Einbau MP Sonde im BL Nahbereich, Durchführung begleitender Modellierungen, Ergebnisdokumentation
- Weiterführung der Kriechversuche, Quellversuche und Permeabilitätsmessungen
- Weiterführung der Kompaktions-/ Permeabilitätsversuche am Tonrückstand als Versatzmaterial
- Bestimmung der thermischen Parameter für Tonstein und Tonversatz

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10417</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer		
<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 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 345.283,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Bernhard	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist eine Erweiterung und Ergänzung der thermodynamischen und kinetischen Datenbasis im System dreiwertiges Actinid-Tongestein-NOM. Die Arbeiten gliedern sich in temperaturabhängige Komplexbildungsuntersuchungen von Am(III) (punktuell Pu(III)) mit Huminstoff-Modellliganden, Huminstoffen und Tonorganika sowie in Batchsorptionsexperimente im System Am(III)-(Konkurrenzion U(VI))-(NOM)-Tongestein/Modellton-Wasser. Aus den gewonnenen Daten soll ein vollständiger thermodynamischer Datensatz (Enthalpie, Entropiewerte) generiert werden, der Aussagen über Sensitivität der Komplexbildung/Sorption auf Temperaturveränderungen bzw. Rückschlüsse auf Bindungsverhältnisse ermöglicht. Langzeitbatchsorptionsexperimente unter endlagerrelevanten Bedingungen dienen der Charakterisierung der zeitlichen Veränderung des Sorptionsverhaltens im System Am(III)-(NOM)-Tongestein-Wasser. Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Projekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam, Heidelberg, des Instituts für Interdisziplinäre Isotopenforschung Leipzig und des Instituts für Nukleare Entsorgung Karlsruhe.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Optimierung der Absorptionsspektroskopie mit einer Long-Path-Flow-Cell  
Etablierung und Optimierung dieser Methode für den Nachweis kleinster Am(III)-Konzentrationen ( $< 10^{-7}$  mol/l)
- AP2: Untersuchungen der Komplexreaktionen im System Am(III)-NOM und Am(III)-Modellligand  
Bestimmung der Komplexbildungskonstanten von Am(III) mit sauerstoffhaltigen Huminstoff-Modellliganden, mit verschiedenen Huminsäuren, mit Tonorganika unter Standardbedingungen ( $I = 0.1$  mol/l NaClO<sub>4</sub>, Temperaturen von  $20\text{ °C} > T > 80\text{ °C}$ , pH von  $2 > \text{pH} < 6$ , in Anwesen- bzw. Abwesenheit von U(VI) als Konkurrenzion) und unter endlagerrelevanten Bedingungen (synthetisches Porenwasser, reduzierende Bedingungen)
- AP3: Sorptionsuntersuchungen im System Am(III)-NOM-natürliches Tongestein unter den gegebenen natürlichen Bedingungen  
Durchführung temperaturabhängiger (Langzeit) Batchsorptionsversuchen im System Am(III)-(NOM)-Ton (natürliches Tongestein, Modellton)-Wasser unter Standardbedingungen ( $I=0.1$  mol/l,  $20\text{ °C} > T > 80\text{ °C}$ ,  $3 > \text{pH} > 10$ ) und unter endlagerrelevanten Bedingungen (Porenwasser)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die Komplexierung von Eu(III) und Am(III) mit Lactat (Lac) wurde mittels TRLFS und UV/Vis (nur Am) untersucht. Mit Eu(III) bildet sich unter den gewählten Bedingungen (10<sup>-5</sup> M Eu<sup>3+</sup>, 10<sup>-5</sup> – 0.1 M Lac, pH = 3.0 – 6.0) überwiegend der 1:1 Eu-Lac-Komplex. Die Stabilitätskonstante dieses Komplexes wurde für 6 verschiedene Temperaturen zwischen 25 und 65 °C bestimmt ( $\log\beta_{110} = 2.37 \pm 0.13$  bei 25 °C) und daraus die thermodynamischen Parameter  $\Delta H$  und  $\Delta S$  ermittelt ( $\Delta H = 7.6 \pm 0.3$  kJ mol<sup>-1</sup>,  $\Delta S = 71 \pm 1$  J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>). Die ermittelten Fluoreszenzlebensdauern weisen darauf hin, dass sich bei höheren Ligand-Konzentrationen noch höhere Komplexe bilden (1:2, 1:3). Eine Verschiebung des Emissionsmaximum von Am(III) von 691 nm zu 696 nm tritt durch die Komplexierung mit Lactat auf. Die Fluoreszenzlebensdauer Am(III) verlängert sich von ~24 ns (~9 Wassermoleküle) auf ~37 ns (~5 Wassermoleküle) im Am-Lac-System. Bei den gewählten experimentellen Bedingungen (5×10<sup>-6</sup> M Am<sup>3+</sup>, 5×10<sup>-4</sup> - 0.1 M Lac, pH = 6.0) bilden sich neben dem 1:1-Komplex (bis 10<sup>-2</sup> M Lac dominierend) bei höheren Ligandkonzentrationen auch die 1:2- und 1:3-Komplexe. Für den 1:1-Komplex wurden aus den Lumineszenzspektren die Stabilitätskonstanten bei 25 und 65 °C ermittelt ( $\log\beta_{110} = 2.22 \pm 0.13$  (25 °C),  $2.35 \pm 0.31$  (65 °C)), was wie beim Eu-Lac-System für eine endotherme, entropiegetriebene Reaktion spricht. Analoge UV/Vis-Messungen zeigen eine Verschiebung des Absorptionsmaximums von 503 nm (Am<sup>3+</sup>(aq)) zu 506 nm (Am-Lac-System). Für den 1:1-Komplex errechnet sich aus den UV/Vis-Spektren bei 25 °C eine Stabilitätskonstante von  $\log\beta_{110} = 2.21 \pm 0.12$ , die mit der aus TRLFS-Messungen ermittelten Konstante übereinstimmt.
- Zur Charakterisierung der Eu(III)-Sorption an Opalinuston in An- und Abwesenheit von Citronensäure wurden TRLFS-Untersuchungen durchgeführt. Die experimentellen Ergebnisse zeigen, dass unter Porenwasserbedingungen (pH = 7,6) eine sorbierte  $\equiv X-OEuCO_3OH-$  oder  $X-OEuCO_3-$  Spezies vorliegt. Es konnte nachgewiesen werden, dass die Citronensäure nur als Komplexbildner in der Lösung eine Rolle spielt und über die Bildung von Eu-Citratkomplexen die Eu-Sorption verringert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Ermittlung der thermodynamischen Daten der 1:2 und 1:3 Komplexe im Eu/Am-Lactatsystem, Am-Acetatsystem und Eu-Salicylatsystem
- Bestimmung der experimentellen Oszillatorstärken von Am/Eu und deren Komplexe mit den obigen Liganden aus den UV-Vis-Spektren und Vergleich mit berechneten (Lit.-)Werten
- Fortführung der temperaturabhängigen Sorptionsexperimente mit Eu (Am) zum Einfluss kleiner organischer Liganden

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Schott: Untersuchungen zum Einfluss der Temperatur und kleiner organischer Liganden auf die Sorption von Eu(III) am Opalinuston, Masterarbeit, TU Dresden, September 2010  
 A. Barkleit, G. Geipel, M. Acker, S. Taut, G. Bernhard: *Spectrochimica Acta Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy* (2010), 78(1), 549-552  
 M. Müller, M. Acker, S. Taut, G. Bernhard: *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* (2010), 286 (1, Oktober), 175-180  
 A. Barkleit, S. Tsushima, O. Savchuk, J. Philipp, A. Acker, S. Taut, K. Fahmy: "Eu<sup>3+</sup>-Mediated Polymerization of Benzenetetracarboxylic Acid Studied by Spectroscopy, Temperature-Dependent Calorimetry, and Density Functional Theory", *Inorganic Chemistry*, eingereicht November 2010, akzeptiert nach Revision

<b>Zuwendungsempfänger:</b> TU Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10427</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2010		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 586.331,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Überlegungen innerhalb der Bundesregierung, neben Salzgestein auch Tongestein als mögliches Endlager-, Wirts- und Barrierengestein in Betracht zu ziehen und vergleichende Untersuchungen zu sicherheitlichen Vor- und Nachteilen zumindest auf generischer Ebene vorzunehmen, erfordern eine intensive wissenschaftliche Auseinandersetzung mit den endlagerrelevanten Eigenschaften der Tongesteine und ihrer Reaktion auf den technologischen Eingriff mit Auffahrungen, Abfallablagerung und Stilllegungsmaßnahmen. Vor diesem Hintergrund ist in dem Vorhaben 02E9632 vom Unterzeichnenden der Übertragbarkeit von etablierten Stoffmodellen aus dem Salinarbereich auf das Tongestein nachgegangen worden.

Angesichts der Tatsache, dass in Deutschland die Möglichkeiten zur aktiven Forschung im Tongestein sehr begrenzt sind, ist eine Beteiligung an internationalen Projekten im Tongestein unerlässlich zur Erarbeitung eigener Erfahrungen und eines eigenen Modellierungs- und Simulationsinstrumentariums. Eine Mitarbeit des Unterzeichnenden im Programm „Excavation Damaged Zone (EDZ) in the argillaceous Tournemire site“ im Rahmen eines auf hohem wissenschaftlichen Niveau laufenden Projektes schließt inhaltlich konsequent an das Forschungsvorhaben 02E9632 an, so dass die dort erzielten Forschungsergebnisse in internationaler Zusammenarbeit unmittelbar auf ein sehr gut dokumentiertes Feldprojekt im Tonsteingebirge am Standort Tournemire mit Daten zu geologischer Struktur, mechanischen und hydraulischen Eigenschaften, Deformationen und konturnahen Rissbildungen (zeitabhängige Entwicklung der EDZ) angewandt werden können.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Datenbeschaffung und Datenaufarbeitung,
- AP2: Bohrkernbeschaffungskampagne,
- AP3: Beobachtung des zeitabhängigen Bohrlochverhaltens durch Kalibermessungen,
- AP4: Aufarbeitung vorhandener laborativer Erkenntnisse,
- AP5: Durchführung eigener laborativer Untersuchungen,
- AP6: Ableitung von standortbezogenen repräsentativen Materialdaten,
- AP7: Aufbau von 3-dimensionalen Berechnungsmodellen,
- AP8: Durchführung numerischer Simulationen zum Gebirgstragverhalten,

- AP9: Gegenüberstellung von Berechnungsergebnissen und Messdaten,  
AP10: Diskussion der Ergebnisse im internationalen Rahmen,  
AP11: Dokumentation der Forschungsarbeiten, Generalisierung der Befunde, Erarbeitung eines Abschlussberichtes.

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

- AP3: Durchführung von Wiederholungsmessungen in den im Laufe dieses Vorhabens bereits vermessenen Bohrlöchern am Standort Tournemire in Absprache mit IRSN.  
AP5: Durchführung von ergänzenden Kurzzeitversuchen sowie Abschluss der laufenden Langzeitversuche aus dem bestehenden laborativen Versuchsprogramm an Bohrkernmaterial der Lokation Tournemire.  
AP6: Ableitung von zeitabhängigen (mehrere Interpretationsansätze) und zeitunabhängigen Materialkennwerten zur Beschreibung des elastisch-plastisch-viskosen Materialverhaltens von Tonstein der Lokation Tournemire.  
AP8: Durchführung von Berechnungsvariationen mit den in AP6 neu abgeleiteten Materialparametern an Referenzmodellen aus AP7 zur Simulation des Mine-by-Tests.  
AP9: Gegenüberstellung der Ergebnisse aus den weiteren Variationen aus AP8 mit Arbeiten aus AP1.  
AP11: Weiterführung der Arbeiten zum Abschlussbericht.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP11: Redaktionelle Fertigstellung des Abschlussberichts.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10437</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen		
<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 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 290.316,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schanz	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In Vorläuferprojekten hat der Antragsteller die unterschiedlichsten Eigenschaften von gesättigten und ungesättigten Tonen untersucht. Dazu gehörten die Kompressibilität, der Quelldruck, das Quellpotential und in jüngster Zeit den Einfluss der Temperatur auf das gekoppelte hydraulisch mechanische Verhalten von Tonen. Die im Vorfeld durchgeführte Auswertung der internationalen wissenschaftlichen Literatur zur Endlagersicherheitsforschung führt zu dem eindeutigen Ergebnis, dass im Bereich der hydraulischen Konduktivität von expansiven Tonen/Bentoniten ein erheblicher Erkenntnismangel besteht.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Ziel des vorliegenden Forschungsantrags ist die Ableitung eines konstitutiven Modells zur Beschreibung der gesättigten hydraulischen Konduktivität von expansiven Tonen (Bentoniten).

Die hierzu notwendigen Untersuchungen umfassen sowohl experimentelle als auch theoretische Arbeiten. Ausgehend von der mikrostrukturellen Betrachtung von moderat bis hochverdichteten Tonen als Materialien mit unterschiedlichen Porensystemen (multimodale Porengrößenverteilung) wird mittels physikalischer und physiko-chemischer Konzepte der für die hydraulische Konduktivität relevante Anteil der Porengrößenverteilung und dessen Evolution zufolge Hydratation quantifiziert. Das Modell beinhaltet neben den mineralogischen Eigenschaften der Tone (u. a. CEC, spezifische Oberfläche, etc.) auch die physiko-chemischen Eigenschaften der Porenfluide (u. a. Ionenkonzentration, etc.). Das Modell ist wegen dieser zu Grunde liegenden Zusammenhänge direkt auf natürliche Tone zu übertragen. Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen zur Validierung und Verifizierung des Modells werden an unterschiedlichen Bentoniten isochorische Quelldruckversuche mit anschließender gesättigter Durchströmung durchgeführt und ausgewertet. Anwendungen des Modells ergeben sich u. a. im Bereich der Verwahrung von radioaktiven und toxischen Abfällen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### *Experimentelle Arbeiten*

Die Versuchsreihe zur Bestimmung des Quelldrucks und der hydraulischen Durchlässigkeit der drei Bentonite Calcigel, Kunigel und MX80 mit destilliertem Wasser als Porenfluid wurde abgeschlossen. Daraufhin ist eine Versuchsreihe mit einer hochkonzentrierten NaCl Lösung der Molarität  $10^{-2}$  M als Porenfluid begonnen worden. Jeder der Versuche dauert über einen Zeitraum von 3 bis 4 Monaten, in Abhängigkeit von der Trockendichte.

#### *Theoretische Arbeiten*

Es wurden drei existierende Modelle zur Berechnung der hydraulischen Durchlässigkeit angewendet (Kozeny Carman, laminare Strömung, Cluster Modell). Die bestehenden Modelle zur Ermittlung der hydraulischen Durchlässigkeit wurden auf der Grundlage der eigenen experimentellen Ergebnisse weiterentwickelt und anhand eigener Daten sowie Literaturdaten verifiziert.

#### *Numerisch Arbeiten*

Die Simulation wurde mit einem gekoppelten hydromechanischen Modell für teilgesättigte Böden durchgeführt. Darin wurde das Barcelona Basic Modell (BBM) für die numerische Berechnung des mechanischen Teils des Quellverhaltens von Bentoniten während des Sättigungsprozesses verwendet. Das Gesetz von Darcy in Verbindung mit dem Van Genuchten Modell wird angewendet, um den Infiltrationsprozess in ungesättigten Böden zu simulieren. Die experimentellen Quelldrücke stimmen in etwa mit den numerisch berechneten Quelldrücken überein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die laufenden Laborversuche werden bis zum Erreichen des maximalen Quelldrucks fortgeführt. Im Anschluss daran werden die Durchlässigkeitsmessungen durchgeführt. Zur Untersuchung der physiko-chemischen Interaktion wird das hochkonzentrierte Porenfluid verwendet. Basierend auf den Ergebnissen der Durchlässigkeitsmessungen der Bentonite wird der Zusammenhang zwischen der totalen Porenzahl,  $e_T$ , und der Mikro-Porenzahl,  $e_c$ , untersucht. Im Rahmen der Modellierung mittels Cluster-Modell werden neue Gleichungen zur Berechnung der hydraulischen Durchlässigkeit vorgeschlagen. Die theoretischen Modelle werden durch Integration der experimentellen Daten fortlaufend verbessert.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Rahmen der internationalen Konferenz "International Conference on Geotechnical Engineering" Lahore, Pakistan, November 5-6, 2010, wurden die drei folgenden Beiträge vorgestellt:

Swelling pressures and hydraulic conductivities of compacted bentonites: An experimental investigation.

Estimating hydraulic conductivity of compacted expansive clays using existing Models with different approach.

Experimental and Numerical Investigation of Swelling Pressure in Compacted Bentonite.

The following paper are in progress and completed 1st draft

Computing hydraulic conductivity of compacted bentonite using cluster model

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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.

## 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**

Softwareentwicklung:

- Weiterentwicklung der Ausgabeoptionen für die Ergebnisdarstellung in Tecplot (Postprocessing),
- Test Software.

Hardware Oberflächenpacker:

- Bau und Test einer zusätzlichen Versuchsausrüstung für die Erfassung der Schleiftiefe.

Hardware verlorener Drucksensor:

- Bau von drei kabellosen Sensoren (Edelstahlgrundkörper; Antennenhülsen; Elektronik für Messen, Senden und Empfangen; Stromversorgung),
- Fertigstellung des erforderlichen Datenloggers für die Datenerfassung außerhalb des Bauwerkes,
- Bau einer zusätzlichen Empfangs- und Sendeeinheit für die Kommunikation mit den Sensoren,
- Konzipierung und Planung einer zentralen Steuereinheit für den gleichzeitigen Betrieb von drei unabhängigen kabellosen Sensoren.

Tests:

- Einbau der drei kabellosen Sensoren am Standort des Bauwerkes im ERAM (2x Sohle, 1x Stoß),
- erfolgreiche Funktionstests der Sensoren vor dem Baustoffeinbau für die Parameter Druck und Temperatur,
- Test der Steuerungsoptionen für die kabellosen Sensoren,
- erfolgreiches Auslesen von Messdaten der kabellosen Sensoren nach dem Einbau des Baustoffes; erste Tests zur Erreichbarkeit der Sensoren.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fortsetzung des Projektes entsprechend Arbeitsprogramm (Abschnitt 2) mit den Arbeitspaketen 6-9.

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

Im Berichtszeitraum wurden keine abgeschlossenen Berichte erarbeitet.

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 886.153,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt ESTRAL (Partner: Forschungszentrum 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:

- Abschluss der Sorptionsexperimente und ihrer Auswertung mit den Systemen Sr/Cs-Orthoklas und Eu-Orthoklas/Muskovit. Durchführung der Titrationsexperimente für Orthoklas und Muskovit.
- Durchführung von Sorptionsexperimenten mit Eu an einem synthetischen Sediment (80 % Qz, 10 % Or, 10 % Mu).
- Aktualisierung der Mineralanteile in den drei festgelegten hydrogeologischen Sedimenteinheiten oGWL, GWGL, uGWL
- Festlegung der Variationsbreite (Minimum/Maximum) der zu betrachtenden Einflussgrößen (pH, DIC, Ionenstärke, Ca- und Al-Gehalt, Radionuklidkonzentration).

#### AP2:

- Überprüfung und Verbesserung des konzeptionellen Modells für die Variation der Einflussgrößen, deren Interaktion und Transport in  $r^3t$  → Berechnungsformeln (DIC, Konzentrationen an Protonen, Al und Ca), Minerallöslichkeiten, Aktivitätskoeffizienten als Funktion der Ionenstärke (auf Basis SIT-Modell).
- Durchführung ausgewählter, ergänzender Versuche zum U(VI)-Transport in einer quarzgefüllten Säule und Interpretation der Ergebnisse.
- Abschluss und Dokumentation der eindimensionalen PHREEQC-Rechnungen zur Meerwasserüberflutung eines Aquifers in Norddeutschland.

#### AP3:

- Anwendungsfälle für Strömungs- und Transportrechnungen wurden definiert und teilweise modelliert.

#### AP4:

- Dokumentation der Arbeiten zu AP1.1.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1:

- Ableitung von Protolysekonstanten für Orthoklas und Muskovit aus den Titrationsexperimenten und von Parametern für die Oberflächenkomplexmodellierung für alle untersuchten Systeme mit dem Programm UCODE.
- Überprüfung des Bottom-Up Ansatzes durch Simulation der Sorption von Eu an dem synthetischen Sediment und Vergleich mit den experimentellen Werten.

#### AP2:

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

#### AP3:

- Durchführung von Transportrechnungen zu den ersten Testfällen mit dem modifizierten Code  $r^3t$ .

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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:

- Aktualisierung der Mineralanteile in den drei festgelegten hydrogeologischen Sediment-einheiten oGWL, GWGL, uGWL
- Festlegung der Variationsbreite (Minimum/Maximum) folgender zu betrachtender Einflussgrößen E1 – E6 (pH, DIC, Ionenstärke, Ca- und Al-Gehalt, Radionuklidkonz.)
- Zusammenstellung der SCM-Parameter (pK1/pK2, logK, spez. Oberfläche) für die ausgewählten Mineral/Sorbens-Paare
- Einarbeitung relevanter Komplexbildungskonstanten und deren Reaktionsgleichungen in die projektspezifische thermodynamische Datenbank ESTRAL.dat
- Fertigstellung der Struktur des PHREEQC-Inputfiles zur Kd-Berechnung
- Erzeugung von Kd-Matrizen mittels Kopplung der Codes UCODE und PHREEQC für das Testbeispiel Am<sup>3+</sup>-Sorption an Quarz und Fe(III)-mineralen im oberen Grundwasserleiter (oGWL)

#### AP2:

- Überprüfung und Verbesserung des konzeptionellen Modells für die Variation der Einflussgrößen, deren Interaktion und Transport in r<sup>3</sup>t → Berechnungsformeln (DIC, Konzentrationen an Protonen, Al und Ca), Minerallöslichkeiten, Aktivitätskoeffizienten als Funktion der Ionenstärke (auf Basis SIT-Modell)

#### AP4:

- Überprüfung und Aktualisierung folgender Dokumente:
  - AP1.1 Compilation of minerals and elements
  - AP1.2 Assessing data situation
  - AP1.4 Environmental parameters
  - AP1.5 Calculation of smart K<sub>d</sub>-values

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1:

- Komplettierung der SCM-Parameter einschließlich deren Bandbreiten und Normierung auf Ionenstärke 0, Übertragung in ESTRAL-Datenbank im PHREEQC-Format
- Beginn von Sensitivitätsanalysen bezüglich der Einflussgrößen E1 – E6

#### AP2:

- Überprüfung des Modells zur Variation der chemischen Stoffgrößen im r<sup>3</sup>t-Code
- Konzept zu Ablage und Abfrage mehrdimensionaler, nicht-äquidistanter Tabellen

#### AP4:

- Aktualisierung aller Arbeitsdokumente

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10538</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen – Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2008 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 907.527,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Herbert	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen dieses Vorhabens werden experimentelle und modelltheoretische Grundlagen geschaffen, um die im Nahbereich eines HAW-Endlager zu erwartenden Wechselwirkungen von Bentonitbarrieren mit Eisenbehältern qualitativ und quantitativ beschreiben zu können. Untersucht werden in einem experimentellen Programm, die hydraulischen Veränderungen des Porenraums kompaktierter Bentonite sowie die Alteration der Bentonite selbst. Unter endlagerrelevanten Randbedingungen werden erstmalig eine Reihe voneinander abhängiger Größen in komplexen Versuchen gleichzeitig erfasst. Dazu gehören: physikalische Parameter (Quelldrücke), hydraulische Parameter (Porositäten und Permeabilitäten), mineralogische Daten (Eisenkorrosionsprodukte und die Umwandlung von Tonmineralen), chemische Parameter (Diffusionskoeffizienten) und thermische Daten (temperaturabhängige Reaktionsfortschritte). Damit werden Daten für die Modellierung gekoppelter THMC-Prozesse zur Verfügung gestellt. Die anschließenden Modellrechnungen sollen zeigen, inwieweit die gekoppelten Prozesse modellierbar sind.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Porositäts- und Permeabilitätsänderungen in hochkompaktierten Bentoniten durch Oxidation von Fe<sup>2+</sup> im Porenraum bei Umgebungstemperatur.
- AP2: Änderung der Diffusionskonstanten ausgewählter Kationen und Anionen im kompaktierten Bentonit durch Ausfällung von Fe-Korrosionsprodukten im Porenraum bei Umgebungstemperatur.
- AP3: Zeitlicher Verlauf der Wechselwirkungen Eisen-Bentonit bei 25 °, 60 ° und 90 °C mit dem Ziel, die Änderung der Bentoniteigenschaften mit der realen Fe-Korrosionsgeschwindigkeit bei erhöhten Temperaturen zu korrelieren.
- AP4: Montmorillonitumwandlung mit und ohne Eisen im geschlossenen und offenen System bei Umgebungstemperatur zur Überprüfung der von Herbert et al. 2008 postulierten Abhängigkeiten von Ladung und Quelldruck.
- AP5: Modellierung des reaktiven Stofftransports und der hydro-thermo-mechanisch-chemischen Wechselwirkungen zwischen Eisen und Bentonit.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1 und AP3:

Im Berichtszeitraum wurden die noch ausstehenden Versuche mit 0,001 und 0,0001 mol  $\text{FeCl}_2$  in Opalinustonwasser und NaCl-Lösung durchgeführt. Diese Versuche sind noch nicht abgeschlossen.

AP2:

Die Versuche zur Bestimmung der Diffusionskonstanten wurden weiter durchgeführt. Als Lösung wurde eine gesättigte NaCl-Lösung eingesetzt, die mit  $10^{-5}$  mol/Liter Cd, Zn und Pb dotiert worden ist. Ein Versuch mit einer Rohdichte von  $1,6 \text{ g/cm}^3$  mit gesättigter NaCl musste erfolglos abgebrochen werden, weil durch die lange Durchströmungsphase die Fritten verstopft waren. Es zeigte sich in den chemischen Analysen der Transportlösung, dass das Schwermetall Zn zu stark vom Bentonite absorbiert wird und messtechnisch Schwierigkeiten bereitete. Daher wurde Zn durch Cs ersetzt und die Versuche mit Cs wiederholt. Die Ergebnisse der verwertbaren Versuche mit Zn sind unten in einer Tabelle aufgeführt. Zurzeit laufen vier Versuche. Zwei mit gesättigter NaCl-Lösung und einer Bentonitrohichte von  $1,6 \text{ g/cm}^3$ . Ein dritter Versuch läuft mit NaCl-Lösung mit 50 % Sättigung und Bentonit mit der Rohdichte  $1,8 \text{ g/cm}^3$ . Der vierte Versuch läuft mit Opalinustonwasser und Bentonit der Rohdichte von  $1,44 \text{ g/cm}^3$ . Die Ergebnisse werden Ende März 2011 vorliegen.

AP3:

Die Arbeiten zu AP3 mit MX-80 und Friedlandton laufen noch. Der eingesetzte Friedlandton musste aufwendig vorbehandelt werden. Beide Tonarten wurden in Glasgefäße abgefüllt, mit gesättigter NaCl-Lösung, IP-21 Lösung und Opalinustonwasser befüllt. Pro Lösung wurde jeweils eine Probe mit 0,1 mol  $\text{FeCl}_2$  und eine ohne  $\text{FeCl}_2$  eingesetzt und mit Stickstoff begast. Die Proben werden bei  $25^\circ$ ,  $60^\circ$  und  $90^\circ \text{C}$  im Trockenschrank gelagert. Teilproben werden nach 100 und 200 Tagen Reaktionszeit in Greifswald untersucht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Beendigung der Laborversuche mit 0,001 und 0,0001  $\text{FeCl}_2$  für Opalinustonwasser und NaCl-Lösung.

AP2: Die Versuche zur Bestimmung der Diffusionskonstanten mit IP-21 mit elementarem Eisen werden voraussichtlich im Mai 2011 zum Abschluss kommen

AP3: Die experimentellen Arbeiten mit 100 Tagen Reaktionszeit werden Ende Februar und die mit 200 Tagen Reaktionszeit Mitte Mai abgeschlossen sein. Bis Mitte Juni wird die mineralogische Untersuchung in Greifswald abgeschlossen sein.

AP4: Die experimentellen Arbeiten zu diesem AP laufen in Greifswald. Auch Arbeiten, einschließlich der Auswertung der Ergebnisse werden im Mai 2011 zum Abschluss gebracht.

AP5: Die Arbeiten werden aufgenommen und im Mai 2011 beendet.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zwei Zwischenberichte der Universität Greifswald zu den Ergebnissen der bisherigen mineralogischen Untersuchungen liegen vor.

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.034.833,00 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:

- Methods for Safety Assessment (MeSA), Phase II: Fertigstellung des Issue Papers „Indicators for safety assessment“. Vorstellung der Ergebnisse und eines Arbeitsplans für abschließende Arbeiten zur Erstellung eines NEA-Statusberichts über Indikatoren bei der IGSC.
- Teilnahme an der jährlichen Sitzung der IGSC.

- Prüfung der letzten Version des Abschlussberichts zum NEA-Sorptionsprojekt III. Der Bericht soll im ersten Halbjahr 2011 erscheinen.
- Organisation und Durchführung eines Workshops „Verfüllen und Verschließen“ in Braunschweig gemeinsam mit PTKA zur Erstellung des aktuellen Wissensstands und Identifizierung des noch notwendigen Forschungsbedarfs für ein HLW-Endlager im Salz.

#### TA2:

- VIRTUS: Abnahme der Demonstratoren des Vorprojekts. Abstimmung und Festlegung des Inhalts für das Hauptprojekt VIRTUS+.
- Bohrung am Standort Ruprechtov zur Untersuchung der Auswirkungen des Sauerstoffeintrags und Probenahme und Untersuchung zur Störungszonen im Kaolin. Weiterführende Untersuchungen und Auswertung zu den Uranmineralphasen.
- Diskussion der Modellrechnungen für die zu betrachtenden Biosphärensysteme für veränderte klimatische Bedingungen und Festlegung der Modellierung von Übergängen.
- Abschluss der Modellrechnungen zur nicht-isothermen Aufsättigung unter Berücksichtigung der Zwischenschichtwasserdiffusion. Ergänzung des Statusberichts um diesbezügliche Ergebnisse. Weiterführung der Aufsättigungsexperimente. Teilnahme an der Folgeveranstaltung für die Task Force on EBS.
- Durchführung und Auswertung weiterer Injektionstests im Rahmen der Nachuntersuchungen zum selbstheilenden Versatz (SVV) am Standort Teutschenthal.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung des RWMC.
- MeSA-Arbeitsgruppe: Koordination der Arbeiten zum Thema Indikatoren und Mitarbeit bei der Erstellung eines NEA-Statusberichts „Indicators for Safety Assessment“.
- Weiterführung der Arbeiten zu aktualisierten Radionuklidinventaren für HAW-Kokillen.
- Durchführung der Modellrechnungen für Endlager in Tonformationen zur Überprüfung der Anwendbarkeit der von GRS Köln vorgeschlagenen Indikatoren.

#### TA2:

- Diskussion der Modellrechnungen für die Berücksichtigung von Klimaübergängen in Biosphärenmodellen.
- Durchführung von transienten Strömungs- und Transportrechnungen für Klimazyklen über Zeiträume von einigen 100.000 Jahren für ein Deckgebirge eines Endlagers im Salinar.
- Grundwasserprobenahme am Standort Ruprechtov und Erstellung eines Statuspapiers mit allen neuen Ergebnissen zur Uranmineralisation.
- Fertigstellung des Statusberichts und Weiterführung der nicht-isothermen Aufsättigungsexperimente von Bentonit. Prognoserechnungen zum Aufsättigungsexperiment mit VIPER. Teilnahme an der Task Force on EBS Phase 2.
- Weiterführung der Nachuntersuchungen zum selbstheilenden Versatz (SVV) am Standort Teutschenthal.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J; Ruebel, A. (eds.): Grundsatzfragen Hydrogeologie – Workshop der GRS in Zusammenarbeit mit dem PTKA-WTE. Braunschweig, 5.-6. November 2009. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit. Bericht GRS 264. Dezember 2010.

<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 30.09.2012		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.074.250,00 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 9. November 2010 fand in Braunschweig das 3. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten.

Die Beschreibung des Testfalls Äspö Task 6c der Task Force on Groundwater Flow and Transport of Solutes (TF GWFTS) von SKB und die Aufbereitung der Geometrie- und Hydraulikdaten wurde fortgesetzt. Die Zusammenstellung der Modelldaten für die Strömung in den deterministischen Klüften ist abgeschlossen.

Ein geometrisches Modell mit den 10 deterministischen Klüften wurde mit FRAC3D erzeugt und mit Hilfe des Gittergenerators ARTE vernetzt. Die AG Wittum führt anhand dieses Beispiels derzeit Optimierungsarbeiten durch. In einem nächsten Schritt sollen dann neben den explizit bekannten auch die synthetischen Klüfte eingebaut und modelliert werden.

Die Ergebnisse der NAGRA aus dem EFP-Projekt müssen noch aufbereitet werden. Für eine Einzelkluft existiert bereits ein Rockflow-Modell, das als ein erster, einfacher Testfall adaptiert werden soll.

### **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. Parallel erfolgt die Erweiterung um die synthetischen Klüfte.
- Mit der Modellierung des eines 2d-Testfalls und des einfacheren 3d-Testfalls von der NAGRA wird begonnen.
- Das nächste Statusgespräch wird am 6. Mai 2011 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 un stetigen 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 bearbeitet:

AP3: Entwicklung eines numerischen Lösers für das mesoskalige Referenzmodell

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

- AP7: Algorithmen und Softwarewerkzeuge zur inversen Modellierung und Schätzung der relevanten Parameter des Strömungsproblems  
AP9: Benchmarking und Vergleichsrechnungen

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

Es wurden Studien über den Vergleich zwischen äqui- und nieder-dimensionaler Kluftmodellierung durchgeführt. Zu diesem Zweck wurden auf den klassischen Henry- und Elder-Problemen basierende Testbeispiele entworfen. Anhand dieser Beispiele wurde evaluiert, welche Parameter einen Einfluss auf die Qualität des Ergebnisses haben. Dabei wurden vor allem die geometrische Lage der Kluft, die Kluftdicke und das Verhältnis zwischen den Permeabilitäten in Kluft und Medium als entscheidende Parameter identifiziert. Es wurde festgestellt, dass bei zunehmender Kluftdicke eine Modellierung mit dem nieder-dimensionalen Modellansatz keine zufriedenstellenden Ergebnisse mehr liefert. Dies wird vor allem dadurch hervorgerufen, dass in der Kluft auftretende Effekte mit dem nieder-dimensionalen Ansatz nicht aufgelöst werden. Beobachtungen haben gezeigt, dass sich u. a. Wirbel in den Klüften bilden. Im Weiteren streben wir nun eine genauere Untersuchung der Wirbel an, um quantitativ feststellen zu können, wann eine Rechnung mit dem niederdimensionalen Modell ausreichend ist.

Um eine genauere Untersuchung der Wirbel durchführen zu können, wird eine 3-dimensionale Darstellung benötigt. In Hinblick darauf wurden bereits erste Schritte getätigt und es wurde mit der Implementierung der dafür nötigen Verfeinerungsalgorithmen begonnen. Um die Simulationen auf realistischen Geometrien umzusetzen, wurden weitere Algorithmen implementiert, mit denen Gitter so aufbereitet werden können, dass sie den speziellen Anforderungen der Diskretisierungen genügen. Zum einen wurden dazu Methoden erstellt, mit denen Schnitte zwischen verschiedenen Klüften und zwischen Klüften und vordefinierten Geometrien gittertopologisch aufgelöst werden können. Dies ist eine Voraussetzung für das Expandieren der Klüfte, wie es für die Diskretisierungen benötigt wird. Dieser Expansionsalgorithmus wurde ebenfalls erweitert, sodass nun auch mehrere sich in einer Linie oder in einem Punkt schneidende Klüfte berücksichtigt werden können. Insgesamt haben wir so wichtige Schritte in Richtung der effizienten Rekonstruktion realer Geometrien in Hinblick auf die speziellen Anforderungen unserer Diskretisierungen gemacht. Zusätzlich wurden die Algorithmen nun auch für 2d implementiert, was das effiziente Erstellen verschiedenster Testgeometrien stark vereinfacht.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

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

Grillo, A., Logashenko, D., Stichel, S., Wittum, G. (2010): „Simulation of Density-Driven Flow in Fractured Porous Media”. Adv. Water Resour. 33(12), 1494-1507 (2010).

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 290.377,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Attinger	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den Programmpaketen  $d^3f$  und  $r^3t$  stehen Werkzeuge zur Verfügung mit denen die Modellierung der Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien mit expliziter Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen möglich ist. Die in allen potenziellen Wirtsgesteinen bzw. den überlagernden geologischen Formationen auftretenden Inhomogenitäten und Klüfte sind aber für eine gesamtheitliche Betrachtung zu berücksichtigen.

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). Überdies werden die Präprozessoren zur Dateneingabe den erweiterten Anforderungen angepasst.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Frankfurt (Prof. Witum), 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

Bisher wurden Arbeiten in den einzelnen Kompartimenten geklüfteter Medien durchgeführt. Dabei bearbeitete die Katharina Ross Skalierungsansätze für die Kluftmatrix und Dr. Falk Hesse entwickelte Skalierungsansätze für hochdimensional modellierte Klüfte.

Arbeiten Katharina Ross:

Im Berichtszeitraum führte Katharina Ross eine genauere Analyse der Eigenschaften der Dispersionskoeffizienten für Medien ohne Skalenseparation durch. Diese Medien sind durch eine unendliche Korrelationslänge der Heterogenitäten charakterisiert. Die Kovarianzfunktion bei finiten Korrelationslängen ist eine Gauß-Funktion,

bei infiniten Korrelationslängen ist sie eine algebraische Funktion. Durch geeignete Umformungen konnten wir unsere Ausdrücke auf eine Überlagerung von Gauß-Funktionen zurückführen und deshalb die Ergebnisse für finite Korrelationslängen (Dentz et al. (2000) anwenden und unsere Ergebnisse damit vergleichen.

Unsere Ergebnisse für die longitudinale Komponente der Dispersionskoeffizienten zeigen, dass die infinite Korrelationslänge auf die Strömungssituation keine Auswirkungen hat, da

- in isotropen Medien die hydraulische Leitfähigkeit unabhängig von der Korrelationslänge ist und
- in anisotropen Medien die hydraulische Leitfähigkeit abhängig vom Verhältnis der Korrelationslängen in den verschiedenen Richtungen ist, diese sind aber alle infinit.

Die Fluktuationen der Strömung sind unabhängig vom Grad der Anisotropie und ein Effekt der infiniten Korrelationslängen ist erst in der Transportsituation beobachtbar.

Dort konnten die bisherigen Ergebnisse in drei Beobachtungen untergliedert werden:

- Einerseits bleibt der Unterschied zwischen den beiden Größen Dens (ensemble bzw. Makrodispersion) und Deff (effektive Dispersion) im hypothetischen Fall von punktförmigen Injektionsquellen für alle Zeitskalen bestehen. Die beiden Größen beschreiben die Dispersion und unterscheiden sich in ihrem Mittelungsprozess und sind bei Dentz et al. (2000) definiert. Beide Größen charakterisieren daher zwei fundamental unterschiedliche Eigenschaften.
- Zweitens hat auch eine räumliche Ausdehnung der Injektionsquellen keinen Einfluss auf das zeitliche Verhalten der Dispersionskoeffizienten, da keine endliche Korrelationslänge der Heterogenitäten mehr vorhanden ist.
- Außerdem wurde das Potenzgesetz des Zeitverhaltens untersucht und mit den Ergebnissen von Fiori (2001) verglichen. Dabei zeigte sich, dass unsere Ergebnisse für Deff gut mit Fiori übereinstimmen, aber nicht für Dens. Der Unterschied zwischen unserem Verfahren und dem von Fiori liegt in der unterschiedlichen Behandlung der Geschwindigkeits-Kovarianz-Funktion, die einen entscheidenden Einfluss auf das zeitliche Verhalten der Dispersionskoeffizienten hat.

Arbeiten von Falk Hesse:

Des Weiteren beschäftigten sich die Arbeiten von Falk Hesse im Berichtszeitraum mit der Frage der Gültigkeit niedrig dimensionaler Darstellung von Klüften bei der Simulation von Radionukliden. Diese Darstellung ist gültig solange keine Konzentrationsgradienten quer zur Kluft auftreten. In Analogie zu Hesse et al. (2009) wird als relevante Größe der Quotient zwischen der Konzentration am Rand der Kluft sowie der quer zur Kluft gemittelten Konzentration verwendet. Die Ergebnisse zeigen, dass bei zeitabhängigen Simulationen zu Beginn starke Gradienten auftreten und eine niederdimensionale Repräsentation der Klüfte hier zu Fehlern führt. Des Weiteren kann schneller reaktiver Zerfall von Radionukliden diesen Effekt soweit verstärken, dass kluftskalige Gradienten sogar im Gleichgewicht auftreten. Die Abhängigkeit dieses Effektes von den Simulationsparametern konnte analytisch abgeleitet werden. Erste Ergebnisse zeigen weiterhin, dass in einer Zerfallskette die Fehler des kurzlebigen Radionuklids sich überproportional auf langlebige Zerfallsprodukte auswirken.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Bestimmung der transversalen Dispersionskoeffizienten & Analyse hinsichtlich des Einflusses der infiniten Korrelationslängen.
- Ein weiterer wichtiger Arbeitsschritt betrifft die Upscaling-Methode Coarse Graining, die auf heterogene geklüftete Medien ohne Skalenseparation erweitert werden soll unter Berücksichtigung einzelner eingebetteter Klüfte. Effektive Mischungsparameter sind in allen nicht-ergodischen Situationen wichtig. Das Coarse Graining erlaubt uns die Wahl eines räumlichen Filters entsprechend der realen (physischen) Mischung.
- Komplettierung der Untersuchungen zu kluftskaligen Gradienten und Anfertigung einer Veröffentlichung. Dazu sollen die Arbeiten von Alfio Grillo als möglicher Vergleich benutzt werden.
- Anwendung der von Katharina entwickelten effektiven Beschreibung für die Gesteinsmatrix zur Interpretation der skalenabhängigen Matrixdiffusion.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Ein Vortrag beim A-DuR Projektreffen in Leipzig am 10. April,

ein Vortrag beim A-DuR Projektreffen in Leipzig am 9. November 2010,

ein Vortrag beim AGU Fall Meeting in San Francisco am 17. 12. 2010 in der Session H 54C: Mixing and Reactive Transport: From Pore to Field Scale III.

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 die Endlagerung, von großer Bedeutung, Modellfehler abschätzen zu können. Ursachen für Unsicherheiten können unterschiedlicher Natur sein: keine genaue Kenntnis der strukturgeologischen Bedingungen (Kluftsysteme, 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. 2011). Dabei ist folgende Systematik von Testaspekten vorgesehen.

Dabei ist folgende Systematik von Testaspekten vorgesehen.

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP8: Unsicherheitsanalyse

- Die Particle-Tracking (RWPT) Methode wurde für 3D Probleme erweitert. Ein erstes 3D Testbeispiel wurde analysiert und als Benchmark aufbereitet (Sun et al. 2011, Taron et al. 2011, sec. 6).

- Bezüglich der Genauigkeit numerischer Verfahren wurden Vergleiche zwischen FEM (OGS) und FVM (TOUGH) Berechnungen angestellt für Transportprozesse in heterogenen Klüften (Taron et al. 2011, sec. 7).
- Eine gemischte finite Elemente Methode (MFEM) wurde für teilgesättigte Problemstellungen implementiert und auf numerische Genauigkeit untersucht (Radu et al. 2011).

#### AP9: Testbeispiele

- Es wurden neue Testbeispiele für Sorptions- und Zerfallsprozesse in heterogenen Klüften entwickelt und betrachtet (Taron et al. 2011, sec. 8). Diese Testbeispiele sind insbesondere geeignet für Codevergleiche im Rahmen des Verbundvorhabens.
- Für die hydromechanisch gekoppelte Simulation von Klüften wurde eine Erweiterung der finiten Elemente Methode (XFEM) in OGS vorgenommen und mit analytischen Lösungen verifiziert (Watanabe et al. 2011, Taron et al. 2011, sec. 10).
- Das zunächst anvisierte Grimsel-Scherzonen Testbeispiel für die Simulation von Kluftnetzwerken erwies sich als noch zu kompliziert. Probleme bei der Vernetzung des Kluftnetzwerks müssen zunächst behoben werden. Daher wurde ein vereinfachtes Kluftnetzwerkmodell (ebenfalls aus dem Grimsel Kontext) mit ca. 10 diskreten Klüften in Angriff genommen.

Zu den Ergebnissen in dieser Berichtsperiode wurde der laufende Fortschrittsbericht aktualisiert (Taron et al. 2011).

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Projektphase stehen folgende Arbeiten im Vordergrund:

- Unsicherheitsanalyse (AP8): Der Methodenvergleich zur Bewertung der Eignung und der Genauigkeit numerischer Methoden für die Simulation von Transportprozessen in Kluftsystemen soll konsequent weitergeführt werden (FEM vs FVM, MFEM, XFEM, Particle methods)
- Testbeispiele (AP9): Die Benchmarksammlung wird systematisch weiterentwickelt, Schwerpunkt sind Transportprozesse in Kluftnetzwerken. Die GRS bereitet hierfür ein neues Testbeispiel für den Modellvergleich (ug, OGS, evtl. TOUGH2) vor.
- Kluftnetzwerkmodelle: Geplant sind die Weiterentwicklung von Partikel-Methoden sowie die Erweiterung der XFEM für Kluftnetzwerke.
- Visualisierungsmethoden: Für die Prozess- und Unsicherheitsanalyse werden Möglichkeiten der stereoskopischen 3D Visualisierung genutzt (OGS-3D).

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kolditz O, Görke U.-J., Shao H (eds.) (2011): OpenGeoSys – Developer Benchmark Book 5.0.12, Internet Report, available through [www.opengeosys.net](http://www.opengeosys.net), Helmholtz Centre for Environmental Research, Applied Environmental System Analysis, TU Dresden.

Radu F.A., Wang W, Kolditz O (2011): Convergence analysis for a mixed finite element scheme for flow in strictly unsaturated porous media, J Nonlinear Analysis, SI Real World Applications, submitted.

SunY, Park C-H, Wang W, Kolditz O (2011): Simulation of solute transport in porous media using random walk particle tracking method. PARTICLES 2011, Thematic ECCOMAS Conference, 26.-28.10.2011, Barcelona, accepted

Taron J, Watanabe N, Sun YY, Park C-H, Kolditz O (2011): 3. A-DuR Project Progress Report. Technical Report, UFZ, Environmental Informatics, [https://svn.ufz.de/svn/ogs/branches/josh/Projects/ADuR/A\\_DuR\\_Project](https://svn.ufz.de/svn/ogs/branches/josh/Projects/ADuR/A_DuR_Project)

Watanabe N, Wang W, Kolditz O (2011): Flow and mechanics in discrete fracture-matrix rock systems: Hydromechanical behavior utilizing an extended Finite Element Method, SIAM. Mathematical and Computational Issues in Geosciences, Long Beach, 21.-24.03.2011, accepted.

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 von H<sub>2</sub>S und Bestimmung der Aktivitätskoeffizienten von 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  $\text{H}_2\text{S}$  in salinaren Lösungen wurde weitergeführt. Die bereits vorliegenden Messungen mit  $\text{NaCl}$ -haltiger Salzlösung bei  $15\text{ °C}$  wurden für  $40\text{ °C}$  ergänzt. Dazu kamen Messreihen für die Salze  $\text{KCl}$ ,  $\text{CaCl}_2$  und  $\text{MgCl}_2$  für jeweils  $15$  und  $40\text{ °C}$ . Die eingesetzten Salzkonzentrationen der Lösungen variierten im Verlauf der Versuche für  $\text{NaCl}$  von c  $5,4\text{-}0,83$  [mol/kg], für  $\text{KCl}$  von c  $4,5\text{-}0,6$  [mol/kg], für  $\text{CaCl}_2$  von c  $4,7\text{-}0,54$  [mol/kg] und für  $\text{MgCl}_2$  von c  $4,5\text{-}0,64$  [mol/kg]. Nach Einstellung der jeweiligen Gas/Lösungsgleichgewichte wurde die Druckdifferenz zu einem vorab definierten Referenzwert (Startbedingungen) gemessen. Aus diesen experimentell bestimmten Daten konnten die Sättigungskonzentrationen von  $\text{H}_2\text{S}$  und der Aktivitätskoeffizient für die angegebenen Salze und der jeweiligen Konzentration berechnet werden. Parallel zu den Versuchsreihen wurden Kontrollmessungen zur Qualitätssicherung des Versuchsaufbaus und der verwendeten Geräte durchgeführt. Diese umfassten zum einen die Überwachung der Messgenauigkeit der Druckmessköpfe, zum anderen wiederholte Blindmessungen ( $\text{H}_2\text{S}$  mit Wasser ohne Zugabe von Salzlösung) für die verwendeten Systeme, um evtl. Undichtigkeiten der Systeme zu identifizieren. Eine Literaturlauswertung zum Thema thermodynamischen Stabilität ausgewählter Schwermetallsulfide und –sulfidokomplexe wird derzeit durchgeführt. Dafür wurden 15 Elemente (6 Aktiniden, 4 Spalt und Aktivierungsprodukte und 5 Schwermetalle) ausgewählt. Die Literatur wird derzeit weiter ausgewertet. Die Arbeiten zu thermodynamischen Hintergrundsalzen wurden aufgenommen. Alle vorgesehenen Löslichkeitsversuche sowie eine Reihe von isopiestic Versuchen wurden mittlerweile begonnen und werden in Kürze analysiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Messungen der Löslichkeit von  $\text{H}_2\text{S}$  in salinaren Lösungen. Die Versuche sollen für salinare Lösungen der Salze:  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{MgSO}_4$  und  $\text{K}_2\text{SO}_4$  bei  $15\text{ °C}$ ,  $25\text{ °C}$  und  $40\text{ °C}$  durchgeführt werden.
- Konstruktion einer Messapparatur, die die Bestimmung von Hydrogensulfid-Aktivitäten in ozeanischen Salzlösungen ermöglicht. Ggf. Erprobung einer anderen Messmethode.
- Weiterführung der mit SCIFINDER durchgeführten Literaturlauswertung zum Thema thermodynamischen Stabilität ausgewählter Schwermetallsulfide und –sulfidokomplexe. Identifizierung vorliegender Datenlücken.
- Messungen des Dampfdrucks über relevanten Hintergrundsalzlösungen.
- Beginn der Entwicklung von Werkzeugen zur Unsicherheitsanalyse geochemischer Rechnungen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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)
- Isolierung Gesamt-DNA aus a) Opalinus Ton von der Oberfläche (MT-2-SF): Identifizierung von Kontaminanten z. B. durch das Bohren des Kerns, b) Opalinus Ton behandelt mit  $1 \times 10^{-6}$  M U(VI) in 0.1 M NaClO<sub>4</sub> (MT-2+U) und c) Opalinus Ton behandelt mit 0.1 M NaClO<sub>4</sub> (MT-2-U); 16S rRNA Gene wurden mittels PCR unter Verwendung der Primer 16S<sub>7F</sub> und 16S<sub>1513R</sub> von der Gesamt-DNA amplifiziert; Klonbibliotheken in Erarbeitung; Analyse der konstruierten Klonbibliotheken durch Restriktions-Fragment-Length-Polymorphism (RFLP); Anwendung des Ribosomal Intergenic Spacer Amplification (RISA) Ansatzes. Fortsetzung der Kultivierungsversuche der bisherigen Ton-Isolate (*Sporomusa* spp. und *Paenibacillus* spp.); Planung/Durchführung von Anreicherungsexperimenten zur Isolierung weiterer Opalinus-Ton spezifischer Bakterien

- Untersuchungen zur Wechselwirkung planktonischer Zellen (metabolisch aktiv und weitgehend inaktiv) des Äspö-Bakteriums *P. fluorescens* mit U(VI) und Cm(III); Reinheitskontrolle mittels *in situ* PCR und RFLP
- Untersuchungen zur Generierung von *P. fluorescens*-Biofilmen (steril und aerob); erste Tests mit Sensoren zur U(VI)-Antwort; Reinheitskontrolle der Biofilme mittels *in situ* PCR und RFLP

Ergebnisse AP1 & AP2: Die Bohrkernoberfläche ist von anderen Bakterien besiedelt (wahrscheinlich infolge des Bohrprozesses) als das Innere des Kerns. Die RISA Analysen zeigten, dass die Behandlung des Tons mit U(VI) und Perchlorat keinen deutlichen Einfluss auf die bakteriellen Populationen hatte (Gründe: [U(VI)] zu niedrig, kurze Kontaktzeit, Fehlen von Nährstoffen).

Ergebnisse AP3 & AP4: U(VI) und *P. fluorescens* (planktonische Zellen, metabolisch inaktiv): Zellen können große Mengen U(VI) akkumulieren (bis 540 mg U/g bei pH 6); Akkumulation ist stark pH-abhängig (Maximum bei pH 6); 2 Koordinationsumgebungen des zellgebundenen U(VI): Lumineszenz-Lebensdauern betragen 1,52 und 0,47  $\mu$ s; Emissionsspektren deutlich rotverschoben (+ ~ 10 nm); bei pH 7 und 8 breite Emissionsbanden Hinweis für zusätzlich gebundenes OH<sup>-</sup>; Zellen setzen signifikante Mengen PO<sub>4</sub><sup>3-</sup> frei, U(VI)-Kontakt reduziert Freisetzung mitunter drastisch.

Cm(III) und *P. fluorescens* (planktonische Zellen, metabolisch inaktiv): intensive WW schon bei geringen Zellkonzentrationen ( $\geq 0.002$  g/L) zwischen pH 3 und 8, Desorptionsexperimente (0.01 M EDTA) zeigten, dass 90-100 % des Cm wieder abgelöst werden (Biosorption), 2 Cm(III)-Spezies an der Zellwand detektiert: a) Emission bei 599.5 nm (421  $\mu$ s) und b) Emission bei 602 nm (111  $\mu$ s); Anregungsspektren zeigten bei pH 6 eine deutliche Rotverschiebung der Banden (+ ~ 2.5 nm) im Vergleich zum Cm<sup>3+</sup> (aq.).

U(VI) und steril kultivierter *P. fluorescens* Biofilm: Durch die Zugabe von UO<sub>2</sub>(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> zum Nährmedium, [U(VI)]  $1 \times 10^{-5}$  M, zeigte sich eine Stressreaktion der Mikroorganismen, die durch einen Anstieg des Redoxpotentials im Biofilm von  $70 \pm 20$  mV zu  $259 \pm 20$  mV und einer geringen O<sub>2</sub>-Konzentration, bzw. hohen O<sub>2</sub>-Zehrung deutlich wurde. Der Nachweis einer Immobilisierung von Uran kann erst durch weiterführende Untersuchungen erbracht werden.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Planung/Durchführung anaerober Sorptionsexperimente im System Opalinus-Ton + Ton-Isolat+U(VI)
- Fortsetzung der direkten Diversitätsuntersuchungen
- Fortsetzung der Arbeiten zur Isolierung weiterer Opalinus-Ton spezifischer Bakterien durch Anwendung geeigneter Medien, Optimierung der Kultivierung der gewonnenen Ton-Isolate in Flüssig- und Festmedium
- Untersuchungen zur Wechselwirkung der Ton-Isolate *Sporomusa* sp. und *Paenibacillus* sp. mit Cm und U
- Fortsetzung der Versuche zur Generierung und Charakterisierung eines Biofilms des Äspö-Bakteriums *P. fluorescens*; Untersuchungen zur U(VI)-Wechselwirkung
- Auswertung U(VI)-Speziation mit metabolisch aktiven Zellen von *P. fluorescens*
- Planung/Durchführung potentiometrischer Titrations der zu untersuchenden Bakterien (*P. fluorescens*, *Sporomusa* sp. und *Paenibacillus* sp.) zur Bestimmung der jeweiligen funktionellen Gruppen im Zellmembransystem
- Start der ersten Versuche zur Probenpräparation für Strukturuntersuchungen mittels XAS
- Vervollständigung der Datenbank Wechselwirkung von Mikroorganismen mit Actiniden

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zwei Beiträge im Jahresbericht des IRC 2009: FZD-530 (2010),  
[www.hzdr.de/FWR/DOCS/JB2009Netz.pdf](http://www.hzdr.de/FWR/DOCS/JB2009Netz.pdf)

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 13 Europäische Endlagerinstitutionen sowie Sandia (USA) und RWMC (Japan) beteiligt sind. Dieses Projekt 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:

Im Berichtszeitraum wurde die Frage nach den eigentlichen Zielen und Strategien einer Endlagerüberwachung, insbesondere auch für den Zeitraum nach Verschluss des Endlagers, unter den Projektpartnern näher erörtert. Es zeigte sich, dass die Ansichten über allgemeine Zielsetzungen und Strategien bei den europäischen Partnern unterschiedlich waren. Zur detaillierten Diskussion dieses Themas fand am 01.09.2010 ein Arbeitstreffen in Amsterdam statt. Es konnte eine von allen getragene allgemeine Zielsetzung gefunden werden, die derzeit in Berichtform dokumentiert wird. Als entscheidend kann festgehalten werden, das als übergeordnetes Ziel die Definition von „Monitoring“, die im Rahmen des EU-Vorhabens „Thematic Network on Monitoring“ erarbeitet wurde, übernommen werden soll. Es wurde festgelegt, das die routinemäßige Überwachung der Betriebssicherheit und Safeguardsaspekte nicht berücksichtigt werden sollen.

Als Kernelemente sollen (i) die Bestätigung der im „Safety Case“ getroffenen Aussagen gelten sowie (ii) die Unterstützung bei Entscheidungsprozessen vor Schließung des Endlagers.

AP2:

Am 30.11. und 01.12.2010 fand der vierte interne Workshop im Rahmen dieses Vorhabens in Peine im Hotel Schönau statt. Der Workshop wurde von DBETEC ausgerichtet. Im Rahmen dieses Workshops wurden Strategien diskutiert, wie im internationalen Maßstab Prozesse und Parameter identifiziert werden können, die für eine Endlagerüberwachung relevant sind. Wesentlicher Punkt war dabei die Transparenz und die Nachvollziehbarkeit der Entscheidungen zur Überwachung einzelner Parameter. In diesem Zusammenhang wurde ein „Screening“-Verfahren im Vorlauf zu dem Workshop entwickelt und an einem Fallbeispiel erprobt. Im Rahmen von Gruppendiskussionen wurde dieses Verfahren auf Basis der Testergebnisse weiter entwickelt.

Ein weiterer Schwerpunkt lag in der Diskussion, in welcher Weise Überwachungsaktivitäten zu einer allgemeinen Vertrauensbildung beitragen können. Des Weiteren wurden die aktuellen Arbeiten in den übrigen Arbeitspaketen diskutiert sowie der Ablauf der weiteren Arbeiten inhaltlich und zeitlich festgelegt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Inhaltliche Vorbereitung zwei weiterer Workshops, einem projektinternen bei RAWRA in Prag zur inhaltlichen Diskussion der Arbeiten in den einzelnen Arbeitspaketen und eines offenen Workshop zur Einbeziehung von „Expert Stakeholdern“ und deren Ansichten und Anforderungen hinsichtlich einer langzeitlichen Endlagerüberwachung.

AP2: Fortführung der Fallstudien zur langzeitlichen Überwachung eines Endlagers in ausgewählten Wirtsformationen unter Berücksichtigung unterschiedlicher Endlagerkonzepte.

AP3: Aufarbeitung und Dokumentation des Standes von Wissenschaft und Technik im Bereich geotechnischer und geophysikalischer Überwachungssysteme.

### 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 30.09.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 mechanischen Modellierungen mittels 3DEC und den Polyederstrukturen (Voronoidiagramm) wurden weitergeführt, um relevante Mikroparameter für weiterführende numerische Modellierungen zu kalibrieren. Das Handling der Polyedermodelle im Zusammenhang mit der Modellierungssoftware konnte durch die Entwicklung einer Bereinigungsroutine verbessert werden. Ferner wurde das zunächst gewählte Modellierungskonzept nach Gesprächen mit der BA Freiberg weiter optimiert. Mit dem Test und der Bewertung des veränderten Ansatzes wurde begonnen. Ergebnisse des erweiterten Modellierungskonzeptes sind erfolgversprechend, zeigen jedoch, dass der Kalibrierungsaufwand (Veränderungen im Stoffmodell etc.) höher ist als erwartet.

#### AP2:

Aus den mit Natronwasserglas verklebten natürlichen Steinsalzproben wurden Dickschliffe hergestellt, so dass mit der visuellen Überprüfung der Klebestellen begonnen werden konnte. Weiterhin erfolgte die Probenpräparation zur Identifizierung der im vorliegenden Untersuchungsspektrum auftretenden MOC/MOS-Phasen. Die Literaturrecherche zur Übertragbarkeit auf natürliche geochemische Prozesse wurde weitergeführt.

#### AP3:

Die Planungen und Vorbereitungen für die In-situ-Injektionsarbeiten in einem norddeutschen Salzbergwerk wurden abgeschlossen. Ein Durchführungs- und Untersuchungsprogramm wurde entworfen und Abstimmungen mit Fachfirmen dazu vorgenommen. Vorbereitung des Versuchstandortes auf dem Kali Werk Niedersachsen Riedel wurden abgeschlossen. Es wurden Indexversuche zur Bestimmung der Anfangspermeabilität (initiale Konturpermeabilität) durchgeführt, ausgewertet und die initiale Konturpermeabilität ermittelt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1:

- Bewertung des erweiterten Modellierungskonzeptes und Anpassung der modelltechnischen Mikroparameter
- Permeabilitätsentwicklung der generierten Rissnetzwerke mittels hydraulischer Modellierungen
- Entwicklung eines Konzeptes zur Simulation eines Injektionsversuches

#### AP2:

- Betreuung und Auswertung der Versuche zur chemischen Langzeitstabilität
- Untersuchungen zur Identifizierung der MOC/MOS-Phasen

#### AP3:

- In-situ-Injektionen sowie Permeabilitätsmessungen und Messwertauswertung

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

von Borstel, L.E.; Engelhardt, H.-J.; Schirmer, T. (2010): Sorelphasen: Neubildungen bei der Reaktion von Natronwasserglas mit MgCl<sub>2</sub>-reichen Mineralen bzw. Salzlösungen.

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 vom 30.11. bis 2.12.2010 das 3. FORGE-Jahrestreffen in Prag (CZ) statt, wobei im Rahmen der Arbeitspaketsitzung die bisherigen Zwischenergebnisse für das Arbeitspaket WP 3.3 „Interface Laboratory Experiments“ vorgestellt und diskutiert wurden. Die Zwischenergebnisse wurden zusätzlich als Poster präsentiert.

AP3: Die im Rahmen des Vorhabens neu konstruierten Durchströmungszellen zur wechselseitigen Wasser- bzw. Gasinjektion werden aktuell für die kontrollierte Aufsättigung von Bentonitformsteinen entlang von Trennflächen eingesetzt. Dabei werden sowohl unterschiedliche Durchströmungsgeometrien (radial bzw. axial) als auch verschiedene Belastungen realisiert.

Die Aufsättigung der Bentonit-Proben erforderte mehr Zeit als vorgesehen. Mit der Gasinjektion wird Anfang des Jahres 2011 begonnen.

AP5: Zur Bestimmung der Kontaktflächenscherfestigkeit zwischen Bentonit-Formsteinen sowie zwischen Bentonit und der natürlich rauen Gebirgsoberfläche (Granit) wurden weitere Scherversuche an Bentonit-Proben mit ihrem initialen Feuchtigkeitsgehalt durchgeführt. Die Untersuchungen bestätigen den vorläufigen Reibungswinkel von 21°. Für die gleichzeitige Injektion von Wasser während der Scherung wurde eine Versuchsanordnung entwickelt, deren Eignung aktuell überprüft wird.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

AP5: Untersuchung der Scherfestigkeit von Bentonit-Formsteinen zu strukturierten Tonstein- bzw. Kristallinoberflächen (Simulation der entsprechenden Oberflächenrauigkeit) – Durchführung von Fluidinjektionstests während der Scherung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

IfG (2010). Hydro-Mechanical Properties and Gas Transport of Interfaces among Blocks of Sealing Materials. by T. Popp, T. Fabig & K. Salzer. FORGE General Assembly, November 30th - December 2nd 2010 in Prague (CZ): Poster.

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 263.900,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Hauptziel des Vorhabens ist es, ein verbessertes Verständnis der Wechselwirkung zwischen Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen sowie der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erreichen. Auf dieser Basis soll die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation bewertet werden. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Der Beitrag des INE konzentriert sich auf experimentelle Arbeiten im Labor und in Untertagelabors sowie die begleitende Erstellung von Strömungs- und Transportmodellen. Die Arbeiten der GRS fokussieren sich auf die Anwendung und Qualifizierung von Rechenprogrammen für die Langzeitsicherheitsanalyse. Im vorliegenden Bericht werden die Arbeiten der GRS beschrieben.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelle Arbeiten (INE)
- AP1.1: Laborprogramm zu Mechanismen der Kolloid-RN-Kluftmineral-Wechselwirkung
- AP1.2: In-situ-Experimente zur kolloidgetragenen RN-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/INE)
- AP2.1: Parametrisierung von TRAPIC (GRS)
- AP2.2: Vorausberechnung für das CFM Experiment (GRS)
- AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
- AP2.4: Modellrechnungen zum Standort Äspö (GRS)
- AP2.5: Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen (INE)
- AP3: Integration und Abschlussdokumentation (GRS/INE)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Durchführung der  $d^3f$ - und  $r^3t$ -Rechnungen für das in der ersten Jahreshälfte durchgeführte neue CFM Homolog-Experiment. Die Simulationen für das Homolog-Experiment 10-01 zeigen relativ gute Ergebnisse. Der Transport des idealen Tracers Uranin konnte nach Adaptierung von Ein- und Ausstrom mit den gleichen hydraulischen Parametern wie für das Experiment 08-02 gut beschrieben werden. Der Wiedererhalt für die Kolloide zeigt mit aus der Filtrationstheorie abgeleiteten Raten eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment, während aus den Batch-Experimenten abgeleitete Raten für die Desorption der Homologe von den Kolloiden etwas zu hohe Wiedererhalte ergeben.

Abschätzende Rechnungen zum Experiment 10-03 am gleichen Dipol unter geringeren Ausstromraten zur Realisierung längerer Transportzeiten.

AP3: Durchführung eines weiteren Arbeitsgesprächs mit dem FZK-INE zur Diskussion der Ergebnisse und Vorbereitung von Beiträgen für das CFM Modeller Group Meeting. Teilnahme am Treffen der CFM Modeller Group in Schönenwerd mit Präsentation und Diskussion der Ergebnisse der neuen Modellrechnungen und zukünftiger Feldversuche.

Präsentation der bisherigen Ergebnisse der  $d^3f$ - und  $r^3t$ -Modellrechnungen zum kolloidgetragenen Schadstofftransport auf dem International Groundwater Symposium der IAHR im September 2010 in Valencia.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Durchführung zusätzlicher  $r^3t$ -Rechnungen zum Homolog-Experiment 10-01. Aktualisierung der Parameter zur Wechselwirkung von Kolloiden mit Kluftfüllmaterial und Berücksichtigung von reversiblen Prozessen.

Durchführung weiterer  $d^3f$ - und  $r^3t$ -Rechnungen für das Experiment 10-03 nach Erhalt aller Eingangsdaten und erster Rechnungen für das im Dezember 2010 unter reduzierten Ausstrombedingungen von 25 ml/min durchgeführte Feldexperiment mit konservativem und sorbierendem Tracer.

Zusammenstellung aller experimentellen Daten und Entwicklung eines Quellterms für  $r^3t$  zur Berücksichtigung der Kolloid- und Radionuklidmobilisierung aus dem Bentonitkörper in dem geplanten integrierten Experiment.

AP3: Durchführung eines weiteren Arbeitsgesprächs mit dem FZK-INE zur Diskussion der Ergebnisse in Braunschweig.

Teilnahme an dem nächsten Treffen der CFM Modeller Group mit Präsentation der Ergebnisse der neuen Modellrechnungen in Karlsruhe.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Flügge, J., Küntzel, M., Schäfer, T., Gaus, I., Noseck, U.: Modeling colloid-bound radionuclide transport at the Grimsel test site. In: "Proceedings of the International Groundwater Symposium by IAHR", Valencia, Spain, September 22-24, 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 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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

AP1: Status:

Ein neues Laborprogramm in Abstimmung mit GRS ist angelaufen. Der über das Projekt finanzierte Postdoktorand Dr. Laurent Truche hat zum September 2010 eine Assistenzprofessor an der Universität Nancy angenommen, konnte jedoch sehr zeitnah durch Herrn Dr. Patrick Höss Mitte September 2010 ersetzt werden. Für die

zweite Doktorandenstelle konnte bisher leider immer noch kein geeigneter Kandidat/-in gefunden werden. Schwerpunkt der Arbeiten des 2. Halbjahres 2010 lag auf der Durchführung und Analyse von Migrationsversuchen unter Variation der Verweilzeit in der Migrationsscherzone und Etablierung eines geochemischen Hintergrund-Monitoringprogramms.

- Im August 2010 wurde ein konservativer Tracertest (Run 10-02) mit Uranin und KI unter einer Extraktionsfließgeschwindigkeit von 10mL/min durchgeführt, der zur Planung/Abschätzung eines weiteren Homologtest unter höheren Scherzonen- Verweilzeiten (ca. 50h) benutzt wurde. Der unerwartet hohe Wiedererhalt von Uranin (90.1 %) und Iodid (94,3 %) und der gleichzeitig höhere hydraulische Gradient im Vergleich zu früheren Versuchen (z. B. Run CFM09-01) weisen auf den Einfluss großräumiger hydraulischer Schwankungen (Stauseespiegelschwankungen) hin. Gleichzeitig zeigte sich, dass die Bromid bzw. Iodid ionenselektiven Elektroden ein nicht akzeptabel hohes Signalrauschen aufweisen, und eine Probennahme- und Laboranalyse auch der konservativen Tracertests notwendig ist, welche alleinig vom INE durchgeführt wird. In dem Mitte September gestartete „Homolog“- Test (Run CFM10-03) mit den Elementen Eu, Tb, Th, Hf, unter Anwesenheit von Bentonitkolloiden und einer Extraktionsfließgeschwindigkeit von 10mL/min konnte ein Wiedererhalt des konservativen Tracers Uranin von nur ~20,4 % quantifiziert werden, währendem der Kolloid- Wiedererhalt überraschenderweise bei  $\sim 40 \pm 10$  % (ICP-MS Al-Analyse) lag. Der Wiedererhalt der eingesetzten Elemente konnte mit  $51 \pm 2$  % Th(IV),  $50 \pm 11$  % Hf(IV),  $15 \pm 7$  % Eu(III) und  $6 \pm 2$  % Tb(III) quantifiziert werden, währendem die Analysen der Proben mittels LIBD und S-Kurven LIBD noch andauern. Die bisher durchgeführten Kolloid/Homolog- Tracertests zeigen einen kolloidassoziierten Radionuklidtransport auch bei hohen Verweilzeiten, und keine signifikante Verringerung der Wiedererhalte von CFM10-01 ( $t_{\text{first arrival}} = 593\text{min}$ ) zu CFM10-03 ( $t_{\text{first arrival}} = 1626\text{min}$ ) mit der 2,75 fach höheren Aufenthaltszeit in der Scherzone. Dies kann möglicherweise auf unterschiedliche Dissoziationskinetiken/Bindungsplätze zurückzuführen sein. Der niedrige Wiedererhalt des Uranins im Vergleich zum kolloidalen Tracer wird im Moment noch untersucht.
- Die ersten anoxisch in Gasdruckzylindern abgefüllten Proben sind bezüglich Eh, pH, Anionen, Kationen, gelöster organischer Kohlenstoff (DOC) und Kolloidkonzentration sowie –größenverteilung am INE analysiert worden. Probenahme und –transport wurden und werden optimiert um eine möglichst artefaktfreie Quantifizierung der natürlichen Schwankungsbreite der Kolloidkonzentration innerhalb eines hydrogeologischen Jahres zu gewährleisten und Unsicherheiten des Kolloidaustrags im „integralen CFM Experiment“ zu minimieren.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1:

Ergänzende Batch-Experimente an synthetischen Montmorillonit (Kollaboration Univ. Nancy und Univ. Mulhouse) mit Pu, Np, Am zur genauen Bestimmung der Kolloidanlagerungswahrscheinlichkeit  $\alpha$  sind geplant.

AP1.2:

Das Radionuklid- Migrationsexperiment wurde auf Grund der Unsicherheiten bezüglich der Wiedererhalte und des realen Migrationspfades auf das 1. Halbjahr 2011 verlegt. Die Analyse dieser Proben mittels ICP-MS, LIBD und S-Kurven LIBD (Kolloidkonzentration und –größenverteilung) obliegt dem INE.

AP2.5:

Modellrechnungen zu den *In situ*-Experimenten Run 10-01/10-03 werden weitergeführt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

*Peer-reviewed eingereicht oder in Vorbereitung:*

Schäfer, Huber, Seher, Missana, Alonso, Kumke, Eidner, Claret, Enzmann, (2011, accepted) Nanoparticles and their influence on radionuclide mobility in deep geological formations. *Appl. Geochemistry*.

Geckeis, Rabung, Schäfer (2011, in press) Actinide - Nanoparticle interaction: generation, stability and mobility. In *Actinide Nanoparticle Research*, Kalmykov, S. N.; Denecke, M. A., Eds. Springer-Verlag: Berlin, Heidelberg.

Flügge, Küntzel, Schäfer, Gaus, Noseck (2010, accepted) In Modeling colloid-bound radionuclide transport at the Grimsel Test Site, International Groundwater Symposium by IAHR, Valencia (Spain), September 22-24, 2010; Valencia (Spain), 2010.

Huber, Kunze, Geckeis, Schäfer (2011, accepted) Sorption reversibility studies on the interaction of radionuclides with FEBEX bentonite colloids/nanoparticles under Grimsel groundwater conditions in the presence of fracture filling material. *Appl. Geochemistry*

Filby, Plaschke, Geckeis (2009, in prep.) AFM force spectroscopy study of carboxylated latex colloids interacting with mineral surfaces. *J. Colloid and Interface Science*.

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 und ANDRA 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

Der Vertrag zur Kofinanzierung ist mittlerweile mit der EU-Kommission abgeschlossen worden. Zur Finanzierung der insgesamt erforderlichen Laboruntersuchungen wurde eine Mittelaufstockung beantragt und bewilligt.

Die Planung des Erhitzerversuches in Mont Terri wurde weitergeführt, allerdings ergaben sich Verzögerungen auf dem Gebiet der Einbringtechnik des Buffermaterials, speziell mit Blick auf das von Nagra verwendete reine Bentonitmaterial. Insgesamt haben Verzögerungen dazu geführt, dass der geplante Aufheizbeginn von April auf Juni 2011 verschoben werden musste. Inzwischen sind die Planung und auch die praktischen Arbeiten jedoch so weit fortgeschritten, dass weitere Verzögerungen unwahrscheinlich sind.

Zur Durchführungsplanung und Festlegung der Positionen der zusätzlich einzubauenden Sensoren wurden von CIMNE, GRS und TK Consult Auslegungsrechnungen durchgeführt. Die Simulationen werden im Projektverlauf fortgesetzt und weiterentwickelt. Der Einbau der GRS-Minipiezometer wird im Februar 2011 erfolgen.

Die ersten Untersuchungen zur Ermittlung der wärmetechnischen Parameter wurden an Ton-Sand-Pellets bestehend aus 35 % MX-80 und 65 % Sand im Ausgangszustand und nach Trocknung bei 105 °C vorgenommen. Das Ton-Sand-Material wurde sowohl im Ausgangszustand und nach Trocknung bei 105 °C untersucht. In diesem Zusammenhang erfolgte auch die Bestimmung des aktuellen Wassergehalts, der sich zu 3.49 % ergab. Die Einbaudichten betragen beim Material im Ausgangszustand 1519 kg/m<sup>3</sup> und beim getrockneten Material 1441 kg/m<sup>3</sup>. Unter Berücksichtigung des Wassergehalts ergibt sich die reduzierte Einbautrockendichte des Materials im Ausgangszustand zu 1468 kg/m<sup>3</sup> und entspricht in sehr guter Übereinstimmung der Einbaudichte des zuvor getrockneten Materials. Die Wärmeleitfähigkeit des Materials im Ausgangszustand betrug 0.353 W/(m\*K) und die des getrockneten Materials 0.276 W/(m\*K). Erste Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit weisen im Bereich von 25 °C bis 105 °C auf eine Zunahme mit steigender Temperatur hin.

Bezüglich der Langzeitsicherheitsuntersuchungen wurde im Oktober 2010 in Wettingen ein erstes Treffen der beteiligten Projektpartner durchgeführt, bei dem der Aufbau des zu erstellenden Deliverables zum aktuellen Status der entsprechenden nationalen Programme diskutiert wurde.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Laboruntersuchungen zu Wärmeleitfähigkeit, Temperaturleitfähigkeit und Wärmekapazität von Tonstein und Sand-Bentonit-Material
- Installation und Durchführung des Erhitzerversuches in Mont Terri
- Modellierung des Erhitzerversuches und Extrapolation auf lange Zeiträume; zusätzlich Koordinierung des Arbeitspakets Modellierung
- Analyse der Ergebnisse der experimentellen Arbeiten und der Prozessmodellierung hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Tonendlagers

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10699</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt KIT: Thermodynamische Datenbasis für Radionuklide		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 312.095,00 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:

Die Daten für das fünfwertige Neptunium werden zurzeit für das System der ozeanischen Salze evaluiert und auf interne Konsistenz zu THEREDA bezüglich des SIT- und Pitzer-Wechselwirkungsmodell überprüft. Die Reaktion des fünfwertigen Neptunylaquoion mit Wasser – Hydrolyse – und die damit gebildeten Spezies wurden zunächst bearbeitet, sowohl die gelösten als auch die festen Hydrolyse-Spezies:  $\text{NpO}_2\text{OH}(\text{am, fresh})$ ,  $\text{NpO}_2\text{OH}(\text{am, aged})$ ,  $\text{NpO}_2\text{OH}(\text{aq})$  und  $\text{NpO}_2(\text{OH})_2^-$ . Im Moment wurden zwei Datensätze aufgestellt, der SIT-konsistente NEA-Datensatz und ein Pitzer-konsistenter Datensatz.

Dokumentation:

Zur Ergänzung des sehr umfangreichen und unhandlichen Abschlussberichts der ersten THEREDA-Phase wurde ein kurzer und zusammenfassender Abschlussbericht in englischer Sprache erstellt, der momentan nochmals überarbeitet wird. Weiterhin wurde zur Dokumentation der durchgeführten Testrechnungen ein technischer Bericht erstellt, der den Nutzern über die THEREDA-Homepage zur Verfügung gestellt wird. Er dient dazu, die Qualität der Exporter und der Daten zu dokumentieren. Ein Exporter ist ein Werkzeug zur Erzeugung der Eingabe-Parameterdateien einzelner Rechencodes, die für eine Modellierung benötigt wird. Wegen gewisser Probleme mit den Exportern wurde der Bericht allerdings noch nicht freigegeben.

Die Exporter zur Parameterdatei-Erzeugung mussten mehrmals getestet werden, um die Parameterdateien fehlerlos in die jeweiligen geochemischen Rechencodes einlesen zu können. Als neuer Testfall wurde die Löslichkeit von Polyhalit in einer gesättigten Lösung aus Halit gewählt. Die Rechnungen wurden zum einen bei einer Temperatur von 298.15 K, zum anderen bei 373.15 K fixiert. Testrechnungen wurden mit den automatisch erzeugten Parameterdateien für EQ3/6, Geochemists Workbench und PhreeqC durchgeführt. Die vergleichende Auswertung der Rechnungen mit den Rechnungen der anderen Projektpartner läuft noch. Es zeigte sich aber schnell, dass die Parameterdateien noch nicht vollständig von den Exportern fehlerfrei erzeugt werden und nochmals überarbeitet werden müssen.

Da sich die Programmierung der Internet-Oberfläche zur Dateneingabe und- abfrage als sehr unfänglich erwies, wurde entschieden, diese Arbeiten in einem Unterauftrag an ein Unternehmen zu geben. Hierzu wurde ein Aufstockungsantrag erstellt und eingereicht. Die Arbeiten an dem Abfrage-Tool sollen im Mai 2011 beginnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die thermodynamischen Daten für fünfwertiges Neptunium in carbonat-, sulfat- und phosphathaltigen Wässern werden zusammengestellt und begutachtet.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Präsentation der Ergebnisse beim ABC-Workshop der WIPP in Carlsbad (NM, USA) und der Plutonium-Futures „The Science“-Konferenz in Keystone (CO, USA).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> TU 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 178.770,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Voigt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Aufbauend auf dem bisher in Phase-I des Projektes THEREDA erstellten temperaturabhängigen (0 – 110 °C) Pitzer-Modell des 7-Komponenten-Systems bestehend aus dem hexären System der ozeanischen Salze einschließlich der sauren und basischen Lösungen (Na-K-Mg-Ca-SO<sub>4</sub>-Cl-H-OH-H<sub>2</sub>O) werden in diesem Vorhaben auch die Carbonate der Alkali- und Erdalkalimetalle sowie die Gleichgewichte mit CO<sub>2</sub> im gleichen Temperaturbereich konsistent eingearbeitet. Dabei wird auch die Abhängigkeit der Lösegleichgewichte vom CO<sub>2</sub>-Partialdruck berücksichtigt.

Im Ergebnis des Vorhabens wird eine einheitliche, konsistente thermodynamische Datenbasis für geochemische Modellierungen zur Verfügung stehen, mit der das geochemische Milieu in Salinalgesteinen 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:

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Gemeinsam mit Kooperationspartnern wurden weitere Testrechnungen durchgeführt, um Unzulänglichkeiten bei der automatischen Generierung von Datenfiles zu beseitigen.
- AP5: Ein Technical Paper zur Implementierung der Zustandsfunktionen für reines CO<sub>2</sub> im Druckbereich bis 300 bar und T bis 120 °C wurde erstellt.  
Mit der Beschreibung des Systems CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O im gleichen Parameterbereich wurde begonnen.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung von AP5.1 abschließen und 5.2 Systemkomplex 1 und 2 im nächsten halben Jahr bearbeiten.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Publikation in Pure and Applied Chemistry eingereicht,  
W. Voigt: CHEMISTRY OF SALTS IN AQUEOUS SOLUTIONS: APPLICATIONS, EXPERIMENTS, THEORY

<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 31.05.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.0777.890,00 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

- AP1: Da vergleichbare Arbeiten bereits in der Vorläufigen Sicherheitsanalyse Gorleben (VSG) durchgeführt werden, wurde beschlossen, diesen AP zu streichen und die restlichen Mittel an den Projektträger zurückzugeben (siehe 8.).
- AP2: Zu diesem AP wurden im Berichtszeitraum keine Arbeiten durchgeführt.
- AP3: Zu diesem AP wurden im Berichtszeitraum keine Arbeiten durchgeführt (siehe 8.).
- AP4: Die Freisetzung gasförmiger Radionuklide aus einem Endlager für hochaktive Abfälle im Salz wurde abgeschätzt. Die Ergebnisse wurden dokumentiert und beim HAW-Arbeitskreis vorgestellt. Als Ergebnis ist festzuhalten, dass die Freisetzung gasförmiger Radionuklide unter Umständen einen relevanten Ausbreitungspfad darstellen kann und dieser in der Langzeitsicherheitsanalyse betrachtet werden muss.  
Die Literaturstudie der Prozesse zur Lösungsmigration im Wirtsgestein Salz wurde abgeschlossen und Abschätzungen der in ein Bohrloch zutretenden Wassermengen für einen potenziellen Endlagerstandort im Salz durchgeführt. Die Dokumentation der Ergebnisse wurde begonnen.
- AP5: Die Arbeiten an AP5 wurden im ersten Halbjahr 2010 unterbrochen, um inhaltliche Überschneidungen mit der VSG zu vermeiden. Ein Teil der Mittel wurde an den Projektträger zurückgegeben. Zu diesem AP wurden im Berichtszeitraum keine Arbeiten durchgeführt (siehe 8.).
- AP6: Im zweiten Halbjahr 2010 erfolgte die Erstellung eines vorläufigen Berichtes zu AP6. Die Absprache der Ergebnisse mit den Projektpartnern wurde begonnen. Eine erste Diskussion mit der BGR fand am 14.10.2010 in Hannover statt.
- AP7: Die Ergebnisse aus ISIBEL wurden auf der EUROSAFE 2010 im November in Köln vorgestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Die Aufnahme der Arbeiten ist erst im zweiten Halbjahr Jahr 2011 geplant, wenn erste wesentliche Ergebnisse der VSG vorliegen. Gegebenenfalls erfordert dies eine inhaltliche Anpassung des AP.
- AP3: Die Aufnahme der Arbeiten ist erst im zweiten Halbjahr Jahr 2011 geplant, wenn erste wesentliche Ergebnisse der VSG vorliegen. Gegebenenfalls erfordert dies eine inhaltliche Anpassung des AP. Die Planung der Arbeiten erfolgt im ersten Halbjahr 2011.
- AP4: Abschluss der Arbeiten zum Arbeitspunkt der Lösungsmigration im Wirtsgestein Salz. Auswahl eines Rechencodes zur Durchführung der Modellierung des Zweiphasenflusses im Nahfeld eines Endlagers im Salz und Beginn der Planung der durchzuführenden Rechnungen.
- AP5: Im zweiten Halbjahr 2011 soll die Überprüfung des probabilistischen Instrumentariums an Hand der Ergebnisse aus der Szenarientwicklung der VSG durchgeführt werden.
- AP6: Weitergehende Diskussion des Berichtes mit BGR und DBETEC und Überarbeitung des Berichtes zu Natürlichen Analoga.
- AP7: Zu diesem AP sind in 2011 vorerst keine weiteren Arbeiten geplant.

### 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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
- 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 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 wurde untersucht, welche Streckfaktoren der Verteilungsfunktionen für welche Quantile und Zuverlässigkeitsniveaus den EUROCODES zugrunde liegen. Als Anwendungstest wurde die Versagenswahrscheinlichkeit eines hypothetischen Dichteelementes aus Salzbeton in Bezug auf eine ausgewählte Grenzzustandsfunktion ermittelt. Weiterhin wurde die Einordnung barrierewirksamer FEPs und ihrer Zuordnung zu den ingenieurtechnischen Einwirkungen und Einwirkungskombinationen fortgesetzt.

AP3: (Thermomechanische Berechnungen)

Der planmäßige Einlagerungsbetrieb geht von einer unterbrechungsfreien Beschickung des Bohrlochs aus. Dabei wird unmittelbar nach der Einlagerung eines Behälters seine Überschüttung mit Salzgrus vorgenommen. Durch diese Überschüttung erfolgt kein konvektiver Energietransport im Bohrloch, sondern die Wärme des Behälters wird durch Wärmeleitung in das Wirtsgestein übertragen. Der Vorteil dieser direkten Wärmeeinleitung in das Gebirge besteht darin, dass sich das Temperaturniveau im bislang unverfüllten Teils des Bohrlochs nicht ändert und dass es somit auch nicht zu einer temperaturbedingten Konvergenzerhöhung im Bohrloch und insbesondere im Bereich der Bohrlochschleuse kommt.

Wird eine Unterbrechung des Einlagerungsbetriebs unterstellt, heizen sich die freien Oberflächen des Bohrlochs im Laufe der Zeit auf und ein konvektiver Energietransport wird möglich. In Modellrechnungen wurde untersucht, welche Menge an zusätzlicher Salzgrusüberschüttung bei einer Betriebsunterbrechung erforderlich ist. Dabei wurden unterschiedliche Füllstände im Bohrloch und unterschiedlich lange Betriebsunterbrechungen betrachtet. Im Ergebnis zeigte sich, dass bei einer maximalen Betriebsunterbrechung von 6 Monaten eine zusätzliche Überschüttung von ca. 5 m erforderlich ist, um einen Temperaturanstieg an der freien Kontur von mehr als 5 K zu vermeiden.

### 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> 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 343.109,00 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 Berichtserstellung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2:

Im Vergleich von Laboruntersuchungen hatten die Arbeiten in BAMBUS Vorhaben gezeigt, dass eine Parameteridentifikation auf der Basis der BGR-Ergebnisse aus Oedometerversuchen zu einem unnatürlich hohen Spannungsexponenten führt. Demgegenüber war eine Identifikation mit plausiblen Exponenten für die FZK-Daten, gewonnen mit einer Triax-Zelle, möglich. Die Ursache wurde seitens der BGR in der Versuchsauswertung gesehen. In der vorangegangenen Phase dieses Vorhabens wurde eine Verbesserung der Versuchsauswertung unter Berücksichtigung der Eigenschaften der Prüfstandmaschine erzielt. Um einerseits die verfügbaren Daten zu erschließen und andererseits die im Projekt geplanten Laboruntersuchen nachvollziehen zu können und darauf aufbauend das Stoffmodell für Salzgrus weiter entwickeln zu können, ist mit der Entwicklung eines zu dem im Vorprojekt verwendeten vergleichbaren numerischen Modells in FLAC3D begonnen worden. Testrechnungen zeigen das Potenzial des Ansatzes auf, führen aber zurzeit noch zu Schwierigkeiten im Kontaktalgorithmus.

Für die mikrostrukturellen Untersuchungen wurden Versuche zur Präparationstechnik gemacht, um zu erkennen, ob eine Visualisierung von Porositäten in kompaktiertem Salzgrus erfolgversprechend ist. Zu diesem Zweck wurde eine kompaktierte Salzgrusprobe aus dem aufgewältigten Material des in der Asse durchgeführten TSS-Versuches herangezogen. Um in mineralogischen Dünnschliffpräparaten den offenen Porenraum vom geschlossenen Porenraum unterscheiden zu können, wurde die Probe zunächst mit blau gefärbtem Harz getränkt. Anschließend wurde die Probe durchgesägt und dann mit rot gefärbtem Harz behandelt, so dass auch der geschlossene Porenraum sichtbar gemacht werden kann. Anhand zweier Dünnschliffe konnte dann der offene und geschlossene Porenraum identifiziert werden.

AP3:

In Vorbereitung auf die geplanten Modellberechnungen zur Langzeitsicherheit wurden neben möglichen Zutrittsszenarien auch die Modellgrundlagen diskutiert. In diesem Zusammenhang wurden insbesondere die Kernelemente zur Gewährleistung der Langzeitsicherheit betrachtet. Diese sind neben der geologischen Barriere der Schachtverschluss und der Streckenverschluss. Für beide Verschlussarten wurde ein vorläufiges Konzept als Grundlage für die Modellberechnungen erstellt. Parallel dazu wurde eine Parameterliste erstellt, in der jeder einzelnen Komponente der Verschlüsse die für die Berechnungen notwendigen Parameterwerte nach aktuellem Kenntnisstand zugewiesen wurde.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung der Bestimmung der zeitabhängigen Randbedingungen (Temperatur-, Spannungs- und Feuchteänderung) für die in AP3 vorgesehenen Modellberechnungen.

AP2: Fortführung der Arbeiten am 3D-Modell, Entwicklung eines vereinfachten semi-analytischen Modells und Planung der Versuchsdurchführung für die mikrostrukturellen Untersuchungen.

AP3: Die bei DBETEC verwendeten Stoffgesetze zum Versatzverhalten sollen auf ihren Gültigkeitsbereich hinsichtlich Spannung / Kompaktionsgeschwindigkeit, Temperatur, Feuchteinfluss und Porosität überprüft werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10740</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> 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> 01.05.2010 bis 30.06.2010	
<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

Insgesamt fanden im Berichtszeitraum 5 Treffen der Projektpartner zur Steuerung des Gesamtprojekts und zu den einzelnen APs statt.

Zu AP1 wurde ein Einlagerungshorizont in einem Salzstock definiert, der Grundlage für die im Projekt REPOPERM Phase 2 angestellten Untersuchungen sein soll. Dieser Horizont ist in seiner Geometrie einerseits nah an einer konkreten Planung orientiert, andererseits aber soweit abstrahiert, dass die gewonnen Erkenntnisse ihre Gültigkeit auch für später erfolgende Optimierungen

behalten. Eine diesbezügliche Beschreibung wurde erstellt und muss von den Projektpartnern noch bestätigt werden.

Die Arbeitsgruppe zu AP2 hat den Ablauf der geplanten Versuche zum Kompaktionsverhalten optimiert. Statt der geplanten Vielzahl parallel laufender Oedometerversuche werden zwei Versuche mit jeweils mehreren Zellen und wechselnden Versuchsbedingungen vorgesehen: ein Langzeitkompaktionsversuch (drei gleiche Probekörper mit unterschiedlicher Anfangsfeuchtigkeit) und ein Feuchtekompaktionsversuch (drei Probekörper mit unterschiedlicher Vorkompaktion in wechselnd feuchter Atmosphäre). Beschaffung der Zellen und vorbereitende Arbeiten sind weitgehend abgeschlossen.

Ergänzend zu neuen Ergebnissen der BGR über die Relevanz von Wasserdampf in der Porenatmosphäre für die Salzgruskompaktion sind Versuche zur Adsorption von Wasser an der Salzoberfläche als Funktion der Luftfeuchtigkeit (Adsorptionsisotherme) entwickelt und begonnen worden.

Der Versuch zum Auspressverhalten von kompaktierendem Salzgrus wurde ebenfalls geplant. Jüngste Ergebnisse der GRS zu einem ähnlich gelagerten Versuch haben jedoch gezeigt, dass Auskristallisation von Salz aus einer gesättigten Lauge sogar durch eine kontrollierte Beheizung nicht verhindert werden kann. Der geplante Versuch wurde daher ausgesetzt.

Die Arbeitsgruppe zu AP3 hat sich bezüglich der Stoffgesetze ausdrücklich zum Ziel gesetzt, neben der Erarbeitung von Stoffmodellen für die trockene und feuchte Salzgruskompaktion auch verlässlicher Parameter zu bestimmen. Dazu wurden Anforderungen an ein Stoffgesetz zur Salzgruskompaktion aus modelltheoretischer Sicht entwickelt und dokumentiert. Durch einen Vergleich der bereits in die jeweiligen Programmsysteme der Projektpartner integrierten Stoffmodellansätze soll geprüft werden, ob diese Anforderungen erfüllt werden. Grundlage hierfür werden zunächst ein „Ein-Element“ Modell (1D) sowie der BGR Versuch „Oedo-99“ unter Verwendung der bekannten Parameter (BAMBUS), für die die erforderlichen Daten bereitgestellt wurden. Mögliche Defizite in den Stoffgesetzen sollen korrigiert und später anhand des Langzeitkompaktionsversuchs überprüft werden. Mit den diesbezüglichen Arbeiten wurde begonnen.

Es wurden 18 Literaturquellen über Ähnlichkeitsgesetze in natürlichen Böden beschafft und gesichtet.

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

- Abschlussarbeiten an einem Ergebnisrapport zu AP1.
- Beginn des Langzeitkompaktionsversuchs und des Feuchtekompaktionsversuchs.
- Abschluss der Versuche zur Bestimmung der Adsorptionsisotherme und Auswertung.
- Entwicklung und Vorbereitung einer Alternative zum Auspressversuch.
- Vergleich der gefundenen Ähnlichkeitsgesetze und Bewertung der Relevanz für die Zweiphasenflussparameter von kompaktierendem Salzgrus.
- Erstellung eines vereinfachten THM-Modells für die Ausbreitung von Lösung in den Richtstrecken auf der Basis der Ergebnisse aus AP1 und AP3 und Beginn der Rechnungen.
- Abschluss der Arbeiten zum „Ein-Element“ Modell.
- Durchführung von Modellrechnungen zum Versuch „Oedo-99“.
- Erstellung eines Modells des GRS-Versuchs zur Langzeitkompaktion.

#### **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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 270.970,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Fein	

## 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

Im zweiten Halbjahr 2010 fanden fünf Projekttreffen statt:

- 20.08.2010 Kick-Off-Meeting bei DBE TECHNOLOGY in Peine
- 17.09.2010 Vorbereitung erstes gemeinsames Projekttreffen in Peine
- 05.-06.10.2010 1. Projekttreffen mit VNIPI PT in Moskau
- 23.11.2010 Vorbereitung zweites gemeinsames Projekttreffen in Peine
- 08.12.2010 2. Projekttreffen mit VNIPI PT in Braunschweig

AP5:

Auf der Grundlage des von VNIPI PT überarbeiteten Endlagerkonzepts wurden die für das sicherheitsanalytische Modell benötigten Parameter zusammengestellt und mit der russischen Seite abgesprochen.

Auf der Grundlage dieser Diskussionen wurde ein Modell erstellt und mit diesem Modell vorläufige sicherheitsanalytische Rechnungen durchgeführt. Die ersten Ergebnisse wurden mit VNIPI PT auf dem zweiten Projekttreffen in Braunschweig diskutiert.

Parallel wurde ein Konzept der für die Validierung der sicherheitsanalytischen Bewertung notwendigen hydrogeologischen Modellierungen des Untersuchungsgebietes mit  $d^3f / r^3t$  erstellt und ebenfalls mit den deutschen und russischen Partnern diskutiert.

AP6: Zu diesem AP wurden im Jahr 2010 noch keine Arbeiten durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP5: Auf der Grundlage der Diskussion auf dem zweiten Projekttreffen wird das sicherheitsanalytische Modell überarbeitet und die sicherheitsanalytischen Rechnungen präzisiert. Die Ergebnisse und das weitere Vorgehen werden auf dem dritten Projekttreffen im Februar in Moskau diskutiert.

AP6: Zusätzlich zu der erwarteten Endlagerentwicklung wird der Einfluss von Ungewissheiten mit Hilfe von probabilistischen Untersuchungen bestimmt, um die Wirksamkeit und Robustheit des gesamten Barrieresystems zu beurteilen. Hierdurch sollen Aussagen über die Robustheit der Sicherheitsfunktionen gewonnen und damit Konsequenzen für die Langzeitsicherheit abgeschätzt werden.

### 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 05. und 06. Oktober 2010 fand ein erstes Arbeitstreffen in Moskau unter Beteiligung der Projektpartner GRS, BGR, DBE TECHNOLOGY und VNIPI PT statt. Auf diesem Treffen wurden seitens der russischen Kollegen erste Daten bezüglich der geplanten untertägigen Anlagen, des angedachten Einlagerungskonzeptes und der geologischen Situation vorgestellt, diskutiert und an DBE TECHNOLOGY vertragsgemäß übergeben. Ein wesentliches Element stellten dabei die Kriterien dar, die seitens der russischen Kollegen aufgestellt wurden, um die Endlagerentwicklung aus thermischer Sicht zu beurteilen. Dies sind: (i) die Temperatur des Wirtsgesteins soll eine Temperatur von 80 °C nicht überschreiten, (ii) die Temperatur an der Erdoberfläche (-20 m) soll sich um nicht mehr als 2 °C erhöhen, (iii) die Temperaturen an der Kontur der Einlagerungsstrecken soll zu keiner Zeit mehr als 25 °C betragen und (iv) die Temperatur des Bentonitbuffers soll 100 °C nicht überschreiten.

Basierend auf den übergebenen Daten wurde ein erstes numerisches Modell entwickelt, das die geometrische Situation der untertägigen Anlage unter Ausnutzung von Symmetriebedingungen widerspiegelt. Anschließend wurden erste thermische Berechnungen durchgeführt, um die thermische Belastung der geotechnischen Barriere Bentonit als Folge der Behälterwärme bewerten zu können. Im Gegensatz zu früheren Ansätzen wurde seitens der russischen Kollegen die Wärmeabgabe der Behälter durch Veränderung des Inventars signifikant reduziert. Die Wärmeabgabe liegt deutlich unter der auf deutscher Seite bekannten HAW-Kokille. Die durchgeführten Berechnungen ergaben, dass auf Basis der bisher übergebenen und verwendeten Daten alle der oben angegebenen Temperaturkriterien problemlos eingehalten werden können. Es kommt an keiner Stelle zu einer Überschreitung der Grenztemperatur.

Darüber hinaus wurde wunsch- bzw. vertragsgemäß eine Studie über den internationalen Stand bei der Entsorgung langlebiger radioaktiver Abfälle erstellt und auf dem Arbeitstreffen am 08.12.2011 in Peine zusammen mit den Berechnungsergebnissen den russischen Kollegen präsentiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP4:

Numerische Simulation der Streckenauffahrung im Bereich des geplanten untertägigen Endlagers und Ermittlung der Ausdehnung der Auflockerungszone (EDZ) an einem ausgewählten Beispiel.

Simulation der Temperatúrausbreitung nach Einbringen der Behälter und beispielhafte Charakterisierung des thermo-mechanischen Einflusses auf die bestehende Auflockerungszone.

Simulation einer 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 Literaturstudien zu Iod, Selen und Cäsium wurden im ersten Entwurf erstellt.

Zu  $^{36}\text{Cl}$  wurde zusätzlich die Literatur zusammengestellt, die mögliche Rückhalteprozesse dieses Isotops an für die Endlagerung relevanten Gesteinsformationen beschreibt.

Für die ergänzende Literaturstudie zu  $^{14}\text{C}$  wurde die Literaturrecherche durchgeführt und mit der Auswertung begonnen.

Koordination des Verbundvorhabens:

Das Kick-Off Meeting zum Verbundvorhaben wurde organisiert und nachbereitet. Für die Literaturstudien wurde ein erster Entwurf eines gemeinsamen Literaturberichts angefertigt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Literaturstudien:

Die Literaturstudien zu Iod, Selen und Cäsium werden überarbeitet und abschließend fertiggestellt.

Bestimmung thermodynamischer Daten:

Durchführung von Vortests zur Bestimmung der Äquilibrierungszeit von isopiesticen Versuchen im Cs-System.

Anschließend isopiestiche Messungen für binäre und ternäre Cs-Systeme bei 40°, 60° und 90 °C.

Schließung einer Datenlücke im System  $\text{CaCl}_2\text{-CsCl-H}_2\text{O}$  bei 25 °C.

Vortests mit Hydrogenseleniten zur Bestimmung thermodynamischer Daten.

Koordination des Verbundvorhabens:

Vor- und Nachbereitung des 2. Projekttreffens zum Verbundvorhaben VESPA.

Fertigstellung des gemeinsamen Literaturberichtes.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 Pertechetat an LDH-Verbindungen und
- Untersuchungen zur Rückhaltung der anionischen Radionuklidspezies (Selenit, Iodid und Pertechetat) an den synthetisierten Mischkristall-LDH-Verbindungen

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Synthese und Charakterisierung von modifizierten LDHs.

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

AP3: Rückhaltung anionischer Radionuklidspezies an den modifizierten LDHs

AP4: Ergebnisdokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Synthese einer Mischkristall-LDH-Verbindung, in der partiell zweiwertiges Magnesium gegen zweiwertiges Nickel ausgetauscht wurde, ist abgeschlossen. Das aufgenommene Röntgendiffraktogramm zeigt eine phasenreine kristalline Verbindung.
- AP2: Eine aktuelle Literaturstudie wurde erstellt. LDHs sind Tonminerale die eine hohe Rückhaltung für anionische Spezies besitzen. Insbesondere calcinierte Formen besitzen die höchsten Rückhaltekapazitäten. Vorhandene Konkurrenz-Ionen können allerdings die Rückhaltekapazität vermindern bzw. gänzlich unterbinden. Die bisherigen Bestimmungen der Anionenaustauschkapazitäten wurden mit „reinen“ LDH Phasen durchgeführt. Betrachtet man allerdings Endlagerkonzepte, so kann unter diesen Bedingungen die Bildungen von Mischkristall-LDH-Verbindungen erwartet werden. Im Vergleich zu den „reinen“, LDH Phasen sind für diese Mischkristall-LDH-Verbindungen noch keine Untersuchungen zur Bestimmung der Anionenrückhaltekapazitäten für Iodid, Pertechnetat und Selenit durchgeführt wurden. Der von dem FZJ durchgeführte Teilbereich im Verbundprojekt VESPA nimmt sich dieser Fragestellung an.
- AP3: Noch nicht begonnen.
- AP4: Noch nicht begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die weitere Charakterisierung der Mg-Ni-Al-LDH Verbindung mittels REM/EDX und FT-IR ist geplant. Die Synthese von Mischkristall-Verbindungen, in denen das zweiwertige Magnesium durch zweiwertiges Cobalt bzw. durch zweiwertiges Eisen partiell ausgetauscht werden soll, wird angestrebt.
- AP2: Die Ergebnisse der Literaturstudie werden während des Verbundtreffens (25. Januar 2011) den anderen Partnern vorgestellt und dann in einem gemeinsamen Literaturteil eingebunden.
- AP3: Beginn der Arbeiten im 2. Halbjahr 2011 geplant.
- AP4: Beginn der Arbeiten im 2. Halbjahr 2012 geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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:

- Abschluss der Literaturrecherche und Datenbewertung erfolgten

AP2:

- Bereitstellung des notwendigen instrumentellen Versuchsaufbaus für Untersuchungen bei hohen Temperaturen

AP3:

- Sammeln von Referenzdaten
  - Bei 25 °C für später geplante Untersuchungen bei höheren Temperaturen
  - Bei Modeloxiden
  - Bei moderaten Ionenstärken
- Bereitstellung des notwendigen instrumentellen Versuchsaufbaus für Untersuchungen bei hohen Temperaturen
  - Batchsorptionsexperimente
  - ATR FT-IR Spektroskopie

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Start der Untersuchungen zur Komplexbildung von Se mit den kationischen Liganden Calcium, Magnesium und Eisen
  - Für alle Oxidationszustände
  - Bei hohen Temperaturen (45 und 65 °C)
  - Bei hohen Ionenstärken (bis zu 6 M)
  - Als Methoden: potentiometrische Titration und ATR FT-IR Spektroskopie

AP3:

- Start der Untersuchungen zur Oberflächenkomplexbildung von Se mit verschiedenen Modelmineraloxiden und mit Alumosilikaten
  - Kaolinit, Illit und Montmorillonit als Modellsysteme für Tone
- Bei höheren Temperaturen (45 und 65 °C)
- Batchexperimente und spektroskopische Untersuchung der Oberflächen

AP4:

- Bestimmung erster thermodynamischer Parameter
- Für Sorptionsprozesse

### 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 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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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 Dokumentation des 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) wurde im Zwischenberichtszeitraum durchgeführt und die existierenden Defizite bezüglich der Thermo-

dynamik und Qualität der Daten aufgezeigt. Die Teilbeiträge werden editorisch von dem Projektpartner GRS bearbeitet und zu einem gemeinsamen Verbundprojektbericht zusammengefasst. Die Form dieses Berichts wird beim anstehenden Projektmeeting Januar 2011 diskutiert werden.

AP1: *Status:*

Es wurden Vorarbeiten zur elektrochemischen Präparation von Tc(IV) Ausgangslösungen abgeschlossen und die radiochemische Analytik auf die Bedingungen der geplanten Löslichkeitsexperimente optimiert. Es konnten erste Löslichkeitsexperimente in verdünnten NaCl und CaCl<sub>2</sub> Lösungen durchgeführt und mit Literaturdaten verglichen werden. Die Daten bestätigten die aus AP0 bekannten Unstimmigkeiten und liefern Informationen für die geplanten weiterführenden Experimentserien. Eine Doktorandenstelle zu Themen aus AP1 und AP2 wurde ausgeschrieben und soll baldmöglichst in 2011 besetzt werden.

AP2: *Status:*

Zur Untersuchung von Technetium Redoxprozessen wurden verschiedene homogene sowie heterogene redoxaktive Matrixlösungen angesetzt und die zeitliche Entwicklung des Redoxpotentials verfolgt. Nach hinreichender Equilibrierung und Zugabe von Tc(VII) wurde die Reduktion von Tc(VII) zu Tc(IV) anhand deutlich abfallenden Tc-konzentrationen in Lösung verfolgt. Diese ersten Ergebnisse liefern Hinweise, dass die Reduktion von Tc in den Lösungen weitgehend konsistent anhand der Eh/pH Systematik interpretiert werden kann.

AP3: *Status:*

Die experimentellen Studien zur Tc(VII) Reduktion in Anwesenheit von Kluffüllmaterial (Äspö & Grimsel) wurden gestartet und zeigen bisher keine beobachtbare Verringerung der Tc- Lösungskonzentration (~2000h), bzw. Tc(VII) Reduktion. Vergleichende Untersuchungen an gemahlene Tonproben (OPA & COx) hingegen deuten auf eine Tc(VII) Reduktion hin. Über den Versuchszeitraum wird gleichzeitig die Entwicklung der Eh/pH Bedingungen gemessen um einen Vergleich mit thermodynamisch prognostizierten Oxidationszuständen zu ermöglichen. Erste Proben wurden mit XPS und XAFS analysiert, die Auswertung dieser Daten erfolgt im nächsten Zwischenberichtszeitraum. Eine Doktorandenstelle zu diesem Arbeitspaket ist ausgeschrieben und die Stelle kann voraussichtlich im Frühjahr 2011 besetzt werden.

AP4: *Status:*

Copräzipitationsversuche in Durchflussreaktoren zeigen, dass bei sehr niedrigen Se Konzentrationen ( $10^{-13}$  –  $10^{-7}$  mol/L) Se(IV) bevorzugt in Calcit eingebaut wird. Der empirische Henderson-Kracek Verteilungskoeffizient (Verhältnis in Festphase/Verhältnis in Flüssigphase) liegt bei Werten von 6 – 21. EXAFS Messungen bestätigen, dass Se(IV)O<sub>3</sub><sup>2-</sup> in der Calcitstruktur Carbonat substituiert. Unter anoxische Bedingungen ist die Reduktion von Se(IV) zu Se(-II) optimiert worden. EXAFS Messungen an Selenid-dotiertes Mackinawit zeigen, dass Se in einem reduzierten Zustand vorliegt, wie erwartet für Substitution von S(-II) in der Mackinawitstruktur.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die Löslichkeit von tetravalenten Technetiumfestphasen wird systematisch in verdünnten bis konzentrierten carbonatfreien NaCl und CaCl<sub>2</sub> Lösungen als Funktion von pH, Eh, Equilibrierungszeit und Ionenstärke bestimmt.
- AP2: Die verschiedenen Serien von Tc-Redoxexperimenten werden weiter verfolgt und ggf. durch neu angeordnete Systeme ergänzt. Begleitende Modellrechnungen mit evaluierten thermodynamischen Daten sind vorgesehen.
- AP3: Im Rahmen des CP CROCK ergibt sich die Möglichkeit neues, unter anoxischen Bedingungen gebohrtes Kluffüllmaterial aus Äspö (Schweden) zu erhalten (Frühjahr 2011), so dass eine vergleichende Serie von Batch-Experimenten mit diesem Material geplant ist.
- AP4: Entsprechende Durchflussreaktorversuche, wie mit Se(IV) bereits durchgeführt, sollen auch mit Se(VI) folgen. Batch Sorptionsversuche und weitere EXAFS und GIXAFS Messungen sollen zeigen wie Se(IV) und Se(VI) an der Calcitoberfläche adsorbieren bzw. ob sie auch unter Calcit-Gleichgewichtsbedingungen in Calcit eingebaut werden. Neben Einbauversuche sollen auch Selenid Adsorptionsversuche an Mackinawit durchgeführt und mit EXAFS charakterisiert werden. REM-EDX Daten sollen Information bezüglich Morphologie und Elementverteilung geben. Die Umwandlung von Mackinawit in Pyrit soll getestet werden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> 01.10.2010 bis 31.12.2010	
<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

Nach dem Vorhabenbeginn am 01.10.2010 schlossen die Projektpartner zunächst eine Kooperationsvereinbarung zur Zusammenarbeit im Verbundprojekt. Auf dem ersten Projektworkshop am 27. und 28.10.2010 beim IfG Leipzig wurde gemeinsam das Programm der im Vorhaben von den Partnern IfG und TU Clausthal durchzuführenden Laborversuche geplant und die von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen und -versuche besprochen. Im Detail wurden die Randbedingungen der ersten thermo-mechanischen Berechnungen einer Bohrlochkonvergenz bei erhöhter Temperatur in der Schachanlage Asse II festgelegt, zu der In-situ-Messdaten der niederländischen Energy Research Foundation (ECN) vorliegen.

Der Zuwendungsempfänger koordiniert das Vorhaben und betreut die Kooperation mit den Sandia Nat. Lab. 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). Nach der Bewilligung des Vorhabens entwarf er zunächst die Kooperationsvereinbarung und stimmte sie mit den Partnern ab. Außerdem bereitete er den Startworkshop vor und verfasste anschließend das Protokoll. Für sein Teilvorhaben beschaffte, installierte und testete er im Berichtszeitraum die neuen Versionen der von ihm verwendeten Berechnungsprogramme Mathcad (V. 15) und FLAC3D (V. 4.0).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird als Nächstes sein FLAC3D-Modell zur Berechnung der Bohrlochkonvergenz erstellen und die ersten vereinbarten Modellberechnungen durchführen und auswerten. Außerdem wird er den zweiten Projektworkshop vorbereiten und gemeinsam mit den Partnern am 09. und 10. Februar 2011 beim KIT in Karlsruhe 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 (FKZ 02C1004-1054), Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 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 (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> 01.10.2010 bis 31.12.2010	
<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**

Nach dem Vorhabenbeginn am 01.10.2010 schlossen die Projektpartner zunächst eine Kooperationsvereinbarung zur Zusammenarbeit im Verbundprojekt. Auf dem ersten Projektworkshop am 27. und 28.10.2010 beim IfG Leipzig wurde gemeinsam das Programm der im Vorhaben von den Partnern IfG und TU Clausthal durchzuführenden Laborversuche geplant und die von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen und -versuche besprochen. Im Detail wurden die Randbedingungen der ersten thermo-mechanischen Berechnungen zur Re-analyse einer messtechnisch beobachteten Bohrlochkonvergenz bei erhöhter Temperatur in der Schachanlage Asse II festgelegt, zu der In-situ-Messdaten der niederländischen Energy Research Foundation (ECN) vorliegen.

Der Zuwendungsempfänger stellte auf dem Startworkshop die Modifikationen im Stoffmodell Lux/Wolters zur Beschreibung von Schädigungsprozessen sowie Schädigungsrückbildungsprozessen (Verheilung), die in diesem Projekt simuliert werden sollen, vor. Außerdem wurden bereits durchgeführte laborative Untersuchungen zum Verheilungsverhalten an Asse-Speisesalz aus bisherigen Veröffentlichungen grafisch dargestellt. Im weiteren Berichtszeitraum bereitete der Zuwendungsempfänger die zu diesen Versuchen vorhandenen laborativen Rohdaten auf, um diese zur weiteren Verwendung den anderen Projektpartnern zur Verfügung zu stellen. Für das Teilvorhaben wurden die Stoffmodellmodifikationen im numerischen Berechnungsinstrumentarium mit der neuen Berechnungsprogrammversion FLAC3D (V. 4.0) zur Vorbereitung der in diesem Vorhaben durchzuführenden numerischen Simulationen getestet.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Zuwendungsempfänger wird als Nächstes die Versuchsdaten von bereits im Vorfeld dieses Vorhabens durchgeführten Laborversuchen den anderen Projektpartnern zur Verfügung stellen und ein FLAC3D-Modell zur Berechnung der Bohrlochkonvergenz erstellen sowie laborative Untersuchungen zur Verheilung für die Modellkennwertbestimmung retrospektiv analysieren.

### **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> 01.10.2010 bis 31.12.2010	
<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

Nach dem Vorhabenbeginn am 01.10.2010 schlossen die Projektpartner zunächst eine Kooperationsvereinbarung zur Zusammenarbeit im Verbundprojekt. Auf dem ersten Projektworkshop am 27. und 28.10.2010 beim IfG Leipzig wurde gemeinsam das Programm der im Vorhaben von den Partnern IfG und TU Clausthal durchzuführenden Laborversuche geplant und die von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen und -versuche besprochen. Im Detail wurden die Randbedingungen der ersten thermo-mechanischen Berechnungen einer Bohrlochkonvergenz bei erhöhter Temperatur in der Schachanlage Asse II festgelegt, zu der In-situ-Messdaten der niederländischen Energy Research Foundation (ECN) vorliegen.

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

Im Berichtszeitraum hat das IfG die Planung der Laborversuche vorbereitet und auf dem Startworkshop mit den Partnern vorgestellt. Für sein Teilvorhaben beschaffte, installierte und testete es im Berichtszeitraum die neuen Versionen der von ihm verwendeten Berechnungsprogramme Mathcad (V.15) und FLAC3D (V. 4.0) und führte erste Programmmodifikationen zur Berücksichtigung von Temperatur und Verheilung durch.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das IfG wird als Nächstes die Laborversuche mit den Partnern endgültig abstimmen und beginnen sowie sein FLAC3D-Modell zur Berechnung der Bohrlochkonvergenz erstellen und die ersten vereinbarten Modellberechnungen durchführen und auswerten. Außerdem wird es den zweiten Projektworkshop gemeinsam mit den Partnern am 09. und 10. Februar 2011 beim KIT in Karlsruhe durchführen.

### 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. 44th US Rock Mechanics Symposium and 5th 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. 44th US Rock Mechanics Symposium and 5th U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, Salt Lake City, UT June 27–30, 2010

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> 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> 01.10.2010 bis 31.12.2010	
<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

Nach dem Vorhabenbeginn am 01.10.2010 schlossen die Projektpartner zunächst eine Kooperationsvereinbarung zur Zusammenarbeit im Verbundprojekt. Auf dem ersten Projektworkshop am 27. und 28.10.2010 beim IfG Leipzig wurde gemeinsam das Programm der im Vorhaben von den Partnern IfG und TU Clausthal durchzuführenden Laborversuche geplant und die von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen und -versuche besprochen. Im Detail wurden die Randbedingungen der ersten thermomechanischen Berechnungen einer Bohrlochkonvergenz bei erhöhter Temperatur in der Schachanlage Asse II festgelegt, zu der In-situ-Messdaten der niederländischen Energy Research Foundation (ECN) vorliegen.

An dem Stoffgesetzvergleich beteiligt sich das INE (Teilvorhaben 3) mit dem im Rahmen des ersten Verbundprojekts entwickelten Stoffmodell und verwendet primär für die Modellberechnungen des Gebirgsausschnittes der Grube Angersdorf das Finite-Element Programm ADINA.

Nach der Bewilligung des Vorhabens, im Rahmen des ersten Workshops in Leipzig präsentierte der Zuwendungsempfänger die Hintergründe der ECN In-situ-Versuche und die Zusammenfassung der Rechenergebnisse vom COSA- Projekt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Der Zuwendungsempfänger wird als Nächstes das Modell zur Berechnung der Bohrlochkonvergenz erstellen und die ersten vereinbarten Modellberechnungen durchführen und auswerten. Außerdem wird er den zweiten Projektworkshop vorbereiten und gemeinsam mit den Partnern am 09. und 10. Februar 2011 beim KIT in Karlsruhe durchführen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum INE Stoffgesetz und zum Vorgänger-Verbundprojekt:

Pudewills, A. (2007): BMBF-Verbundprojekt Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen, Wissenschaftliche Berichte, FZKA-7314, Juni 2007.

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.

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.

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> 01.10.2010 bis 31.12.2010	
<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 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

Nach dem Vorhabenbeginn am 01.10.2010 schlossen die Projektpartner zunächst eine Kooperationsvereinbarung zur Zusammenarbeit im Verbundprojekt. Auf dem ersten Projektworkshop am 27. und 28.10.2010 beim IfG Leipzig wurde gemeinsam das Programm der im Vorhaben von den Partnern IfG und TU Clausthal durchzuführenden Laborversuche geplant und die von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen und -versuche besprochen. Im Detail wurden die Randbedingungen der ersten thermo-mechanischen Berechnungen einer Bohrlochkonvergenz bei erhöhter Temperatur in der Schachanlage Asse II festgelegt, zu der In-situ-Messdaten der niederländischen Energy Research Foundation (ECN) vorliegen.

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich an dem Stoffgesetzvergleich im Teilvorhaben 4 mit dem von ihm entwickelten Stoffgesetz Lubby-MDCF und verwendet für die Modellberechnungen das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Fa. Itasca).

Das für das Teilvorhaben eingesetzte Stoffgesetz wurde in die neu erworbene Version des verwendeten Berechnungsprogramms FLAC3D (Version 4.00) implementiert. Zudem wurden Testberechnungen durchgeführt, um die Plausibilität der Ergebnisse zu prüfen.

Mit der Erstellung des Flac3D-Modells zur Berechnung der Bohrlochkonvergenz wurde begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Als nächstes wird das FLAC3D-Modell zur Berechnung der Bohrlochkonvergenz überarbeitet und die ersten vereinbarten Modellberechnungen durchgeführt und ausgewertet. Zum zweiten Projektworkshop am 09. und 10. Februar 2011 beim KIT in Karlsruhe werden die Ergebnisse vorgestellt und mit den Berechnungen der Projektpartner verglichen und diskutiert.

### 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> 01.10.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 198.091,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Stahlmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP9: Erstellung des Abschlussberichts und Veröffentlichung der Projektergebnisse

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

Nach dem Vorhabenbeginn am 01.10.2010 schlossen die Projektpartner zunächst eine Kooperationsvereinbarung zur Zusammenarbeit im Verbundprojekt. Auf dem ersten Projektworkshop am 27. und 28.10.2010 beim IfG Leipzig wurde gemeinsam das Programm der im Vorhaben von den Partnern IfG und TU Clausthal durchzuführenden Laborversuche geplant und die von allen Partnern zu berechnenden Untertagestrukturen und -versuche besprochen. Im Detail wurden die Randbedingungen der ersten thermo-mechanischen Berechnungen einer Bohrlochkonvergenz bei erhöhter Temperatur in der Schachtanlage Asse II festgelegt, zu der In-situ-Messdaten der niederländischen Energy Research Foundation (ECN) vorliegen.

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich an dem Stoffgesetzvergleich im Teilvorhaben 6 mit dem von Stoffgesetz für Steinsalz nach Döring und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen zurzeit das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D der Firma. Itasca. Im Berichtszeitraum wurden die Unterlagen für die Modellrechnungen gesichtet. An einem Testmodell sind die ersten Vorstudien für die durchzuführenden Berechnungen der Erhitzerversuche durchgeführt worden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Zuwendungsempfänger wird als Nächstes sein FLAC3D-Modell zur Berechnung der Bohrlochkonvergenz erstellen und die ersten vereinbarten Modellberechnungen durchführen und auswerten. Zudem wird die Implementierung des Stoffgesetzes nach Döring in das FEM-Programmsystem ANSYS umgesetzt und anhand von Nachrechnungen verifiziert. Zusätzlich werden einzelne Modifikationen im Stoffgesetz zum Spannungs-Dehnungsverhalten und zur Temperaturabhängigkeit vorgenommen. Hiermit soll eine Optimierung der realitätsnahen Abbildung des Zeit-Verformungs- und Spannungs-Verformungs-Verhaltens von Steinsalz erreicht werden.

### **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> 01.10.2010 bis 31.12.2010	
<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:

Diese Bestandsaufnahme soll einen breiten Überblick über den verfügbaren Stand der Technik beim Wissensmanagement geben. Die Zusammenstellung erfolgt so, dass auf inhaltsorientierte Systeme detaillierter eingegangen wird, weil diese bei möglichen Anwendungen im Bereich Endlagerforschung relevanter sind.

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. Daraus werden Vorschläge erarbeitet, wie Bedürfnisse und Wünsche in einem System berücksichtigt werden können (im Sinne eines übergeordneten und priorisierten „Pflichtenhefts“ für WM-Systeme).

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 IV. Quartal wurden ausschließlich Arbeiten der Arbeitspakete AP1 und AP2 bearbeitet.

Hauptschwerpunkt der Arbeiten für AP1 lag in der Darlegung der Grundbegriffe, Methoden und Techniken des Wissensmanagements. Außerdem wurden verschiedene Anwendungsbeispiele für Wissensmanagement beschrieben und dabei auch die Hemmnisse und Schwierigkeiten aufgezeigt. Daraus können im weiteren Projektverlauf Rahmenbedingungen und Voraussetzungen für die IT-Unterstützung des Wissensmanagements der Endlagerforschung erarbeitet werden.

Für die Ausarbeitung des Fragebogens in AP2 wurden zunächst die Ziele der Befragung festgelegt. Dann wurden Überlegungen über den Aufbau und Auswertung des Fragebogens angestellt. Schließlich wurden übergeordnete Fragen formuliert: zur allgemeinen Situation der zu befragenden Organisationen, zum Umgang mit Dokumenten, mit personengebundenem Wissen und den bereits zu Verfügung stehenden Wissensmanagement-Tools.

Weiterhin wurden organisatorische Vorbereitungen zur Durchführung eines Statusgesprächs (im März 2011) zur Diskussion der vorläufigen Ergebnisse aus den Arbeitspaketen AP1 und AP2 durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Gemäß dem aktuellen Zeitplan wird für das erste Halbjahr 2011 geplant:

- Fortführung der Arbeiten zu den AP1 und AP2
- Durchführung eines Statusgesprächs (s.o.)
- Aufnahme der Arbeiten zum AP3

### **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> 01.12.2010 bis 31.12.2010	
<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**

Es wurden zur Aufnahme der experimentellen Arbeiten neue Angebote zur Gerätebeschaffung eingeholt sowie die notwendigen Substanzen (MgO, Salze) bestellt/beschafft. Es erfolgte die Planung der aufzunehmenden Arbeiten in Absprache mit allen am Projekt beteiligten Mitarbeitern.

AP2: Langzeitversuche zur Ermittlung der Lösegleichgewichte im Chlorid- und Sulfat-System bei 40 °C laufen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP3: Charakterisierung der ausgewählten MgO-Typen; AP1: Abbindereaktionen der MgO-Typen in eingestellten Temperatur-Zeit-Fenstern mit Verfolgung der Phasenbildung

AP4: methodische Aufbauten zur Messung des Expansionsverhaltens

### **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> 01.11.2010 bis 31.12.2010
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.547.015,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Rothfuchs

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Zum Projektbeginn wurde von den Partnern des Verbundprojekts unter Einbeziehung des über einen Unterauftrag der GRS eingebundenen Fraunhofer IFF die im Arbeitsprogramm des Projekts VIRTUS beschriebene umfassende Anforderungsanalyse zur Erfassung der Anforderungen an die



<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> 01.11.2010 bis 31.12.2010	
<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 Endlager bzw. Untertagelabor 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 40 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. Es leistet damit insgesamt einen Beitrag zur zeitnahen Entwicklung eines fundierten Safety Case für ein HAW-Endlager in einer salinaren Formation.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1:

Zum Projektbeginn wurde von den Partnern des Verbundprojekts unter Einbeziehung des über einen Unterauftrag der GRS eingebundenen Fraunhofer IFF die im Arbeitsprogramm des Projekts VIRTUS beschriebene umfassende Anforderungsanalyse zur Erfassung der Anforderungen an die zu entwickelnde Softwareplattform begonnen. Dabei standen zunächst noch einmal das Dokument „Anforderungen an VIRTUS-Software, Stand 1.7.2010“ sowie die im Vorprojekt angedachten Grundzüge des Datenmanagements bzw. des VIRTUS-Datenbanksystems im Vordergrund. Im Ergebnis soll bis Mai 2011 ein Fachkonzept/Pflichtenheft entstehen, das sämtliche Anforderungen und die durch die VIRTUS Softwareplattform bereitzustellenden Funktionalitäten enthält.

Im Hinblick auf den Import der geologischen Daten aus openGeo in die Prozesslevel Codes (PLC) wurde ein erstes Fachgespräch zwischen BICAD, DBETEC und GRS geführt mit der Feststellung, dass die Formen der geologischen Flächen für die PLC zum Teil viel zu komplex sind und daher vor der Übernahme vereinfacht werden müssen. Weiterhin führt die Triangulation der openGEO-Flächen zu einer Vernetzung, die für die PLCs meist sehr ungünstig ist und in der Form daher nicht übernommen werden kann. Es ist zur Zeit kein gängiges Verfahren bekannt, das aus den triangulierten komplexen Flächen Vollvolumenkörper generieren kann, die als Grundlage für die Netzgenerierung in den PLCs dienen können. Es ist daher ein mehrschrittiges Verfahren zur Herbeiführung einer Lösung der Modellübergabe erforderlich. Dieser Aufgabenumfang war zu Beginn von VIRTUS noch nicht absehbar.

#### AP2:

Bezüglich der Auswertung der Primärliteratur wurde auf dem ersten Arbeitstreffen vereinbart, zunächst die Vollständigkeit der im Vorprojekt zusammengestellten Literaturlisten zu überprüfen. Jede Institution übernimmt dies für die eigene Literatur und ergänzt, soweit auch bereits bei eigenen Arbeiten benutzt, auch externe Literaturstellen. Jede Institution überprüft ebenfalls die Parameterlisten, die in den Abschlussberichten des Virtus-Vorprojekts enthalten sind nochmals auf Vollständigkeit. Dabei wird auch zu überlegen sein, welche Geomaterialien bzw. auch weitere Materialien (z. B. Nebengesteine, Materialien in den Leitexperimenten usw.) in der Datenbasis Berücksichtigung finden sollen. Diese Arbeiten sollen bis Ende Februar 2011 abgeschlossen sein. Danach beginnt die detaillierte Literaturliteraturlisten mit Erstellung der ersten QM-Protokolle ab August 2011.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Auswertung der vorhandenen Primärliteratur mit Ableitung einer konsolidierten qualitätsgesicherten Datenbasis für die PLC Simulationen (GRS, DBETEC, BGR)
- Entwicklung eines Datenbankschemas (GRS, DBETEC, BGR)
- Erstellung der Bedienoberfläche und Integration der DB in VIRTUS (GRS)
- Dateneingabe, Revisionen von Datenbankstruktur und Eingabeoberfläche (GRS, DBETEC, BGR)
- Erarbeitung einer Lösung für den Datenaustausch zwischen VIRTUS und PLCs (GRS, DBETEC, BGR)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorphase Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz, (VIRTUS +), Projektbericht des Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und –automatisierung (IFF) im Auftrag der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Unterauftrag 2950, Magdeburg, 27. Oktober 2010.

<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> 01.11.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 372.697,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Behlau	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1:

Zum Projektbeginn wurde von den Partnern des Verbundprojekts unter Einbeziehung des über einen Unterauftrag der GRS eingebundenen Fraunhofer IFF die im Arbeitsprogramm des Projekts VIRTUS beschriebene umfassende Anforderungsanalyse zur Erfassung der Anforderungen an die zu entwickelnde Softwareplattform begonnen. Dabei standen zunächst noch einmal das Dokument „Anforderungen an VIRTUS-Software, Stand 1.7.2010“ sowie die im Vorprojekt angedachten Grundzüge des Datenmanagements bzw. des VIRTUS-Datenbanksystems im Vordergrund. Im Ergebnis soll bis Mai 2011 ein Fachkonzept/Pflichtenheft entstehen, das sämtliche Anforderungen und die durch die VIRTUS Softwareplattform bereitzustellenden Funktionalitäten enthält.

Im Hinblick auf den Import der geologischen Daten aus openGEO in die Prozesslevel Codes (PLC) wurde ein erstes Fachgespräch zwischen BICAD, DBETEC und GRS geführt mit der Feststellung, dass die Formen der geologischen Körper für die PLC zum Teil viel zu komplex sind und daher vor der Übernahme vereinfacht werden müssen. Weiterhin führt die Triangulation der openGEO-Hohlkörper zu einer Vernetzung, die für die PLCs meist sehr ungünstig ist und in der Form daher nicht übernommen werden kann. Es ist zur Zeit kein gängiges Verfahren bekannt, das aus den triangulierten komplexen Hohlkörpern Vollvolumenkörper generieren kann, die als Grundlage für die Netzgenerierung in den PLCs dienen können. Es ist daher ein mehrschrittiges Verfahren zur Herbeiführung einer Lösung der Modellübergabe erforderlich. Dieser Aufgabenumfang war zu Beginn von VIRTUS noch nicht absehbar.

#### AP2:

Bezüglich der Auswertung der Primärliteratur wurde auf dem ersten Arbeitstreffen vereinbart, zunächst die Vollständigkeit der im Vorprojekt zusammengestellten Literaturlisten zu überprüfen. Jede Institution übernimmt dies für die eigene Literatur und ergänzt, soweit auch bereits bei eigenen Arbeiten benutzt, auch externe Literaturstellen. Jede Institution überprüft ebenfalls die Parameterlisten, die in den Abschlussberichten des Virtus-Vorprojekts enthalten sind nochmals auf Vollständigkeit. Dabei wird auch zu überlegen sein, welche Geomaterialien bzw. auch weitere Materialien (z. B. Nebengesteine, Materialien in den Leitexperimenten usw.) in der Datenbasis Berücksichtigung finden sollen. Diese Arbeiten sollen bis Ende Februar 2011 abgeschlossen sein. Danach beginnt die detaillierte Literaturlauswertung mit Erstellung der ersten QM-Protokolle ab August 2011.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Auswertung der vorhandenen Primärliteratur mit Ableitung einer konsolidierten qualitätsgesicherten Datenbasis für die PLC-Simulationen (GRS, DBETEC, BGR)
- Entwicklung eines Datenbankschemas (GRS, DBETEC, BGR)
- Vorarbeiten für die Erstellung und Modifizierung des virtuellen geologischen Standortmodells auf die speziellen Gegebenheiten der jeweiligen Versuche (BGR).
- Dateneingabe, Revisionen von Datenbankstruktur und Eingabeoberfläche (GRS, DBETEC, BGR)
- Erarbeitung einer Lösung für den Datenaustausch zwischen VIRTUS und PLCs (GRS, DBETEC, BGR)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorphase Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz, (VIRTUS plus), Projektbericht des Fraunhofer-Institut für Fabrikbetrieb und –automatisierung (IFF) im Auftrag der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Unterauftrag 2950, Magdeburg, 27. Oktober 2010



## **2.2 C-Vorhaben**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Konrad-Wachsmann-Allee 1, 03046 Cottbus		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1466</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrogeologie und Geochemie des Gesamtsystems		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.217.647,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Voigt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des TV1 ist die Erkundung der Lösungsdynamik im und am Salzsattel durch eine kombinierte geohydraulische und geochemische Analyse des Gesamtsystems und seiner Teilsysteme (unverfestigtes und verfestigtes Deckgebirge, Salinargebirge, Grubenbaue) unter Nutzung moderner Untersuchungs- und Modellierungswerkzeuge. Das TV1 wird in enger Zusammenarbeit mit den anderen Teilvorhaben des Verbundes durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Geohydraulische Analyse und Entwicklung eines hydrogeologischen Modells
- AP1.1: Erkundung durch Flachbohrungen
  - AP1.1.1: Konzeption der Bohrungen
  - AP1.1.2: Ausschreibung und Vergabeverfahren der Bohrungen
  - AP1.1.3: Kontrolle der Bohrarbeiten und begleitende Tests
  - AP1.1.4: Auswertung der Bohrerkundung
- AP1.2: Monitoring und Spezialuntersuchungen zur Analyse von Strömungsvorgängen und Austauschprozessen
  - AP1.2.1: Konzeption, Erweiterung und Auswertung des Monitoring zur GW-Beschaffenheit und GW-Dynamik
  - AP1.2.2: Orts- und zeitaufgelöstes Monitoring der Grundwasserdynamik im Deckgebirge durch Sohldruckmessungen
- AP1.3: Überführung des geologischen Modells und des Hohlraummodells in ein hydrogeologisches Strukturmodell
- AP2: Geochemische Analyse und Modellierung der Lösungsvorgänge
  - AP2.1: Typisierung und Charakterisierung der Lösungen anhand ihrer hydrochemischen Beschaffenheit und ihres Lösungspotentials
  - AP2.2: Geochemische Modellierung der Lösungsvorgänge ausgewählter Szenarien/ Reaktionssysteme
  - AP2.3: Räumliche Analyse der lösungsanfälligen Bereiche im hydrogeologischen Modell
- AP3: Zusammenfassende Bewertung der Dynamik und Austauschprozesse im Gesamtsystem unter Berücksichtigung geochemischer und hydraulischer Modellierung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Fortführung der hydrodynamischen Monitoring-Programme
- Teufenorientierte Präzisionsdruckmessungen in den Grundwassermessstellen der Grubenbaue und des Hauptanhydrites
- Erarbeitung einer Modellierungsdatenbasis zur exakten Abbildung der Temperaturabhängigkeit der Sättigungsverhältnisse im Temperaturbereich 10-30 °C, hydrogeochemische Modellierungen zu Sättigungsverhältnissen, Reaktionen und Stoffumsätzen
- Diskussion der Ergebnisse des TV 1 mit den anderen Teilvorhaben
- Präsentation der Ergebnisse auf der Abschlusstagung des Forschungsverbundes vom 18.-20.11.2010 in Staßfurt
- Erarbeitung des Abschlussberichtes des TV 1 (02C1466)
- Erarbeitung von Publikationen

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Erarbeitung des integrierten Abschlussberichtes des Gesamtvorhabens in Kooperation mit den Verbundpartnern

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Jahnke, Bohn, Walter, Voigt (2010): Hydrogeologische und hydrochemische Verhältnisse der ehemaligen Staßfurter Kalisalzgruben an der Westflanke des Staßfurter Sattels und des Deckgebirges. EDGG Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Geologischen Gesellschaft für Geowissenschaften 244

Jahnke, Bohn, Herrmann, Walter, Voigt (2010): Abschlussbericht TV 1 „Hydrogeologie und Geochemie des Gesamtsystems“ des Forschungsverbundvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes“

Stadler, S., Sültenfuß, J., Jahnke, C. & Bohn, A. (2010): Isotope hydrological and geochemical indicators for groundwater migration and salt and freshwater interaction in the former potash and rock salt mining town of Stassfurt, Germany. Eingereicht bei: Chemical Geology

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1476</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 2 (BGR): Geophysikalische Untersuchungen, Seismische Erkundung, Geologisches 3D-Modell, Bohrungen, Server-Datenbank, Koordination des Gesamtvorhabens		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.728.199,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Gerardi	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Teilvorhaben (TV2) wird ein digitales Höhenmodell und ein geologisches 3-D Modell der Salzstruktur und des Deckgebirges zusammen mit den tektonischen Strukturen und den Grubenhöhlräumen für Staßfurt erstellt. Ungeklärte geologische und hydrogeologische Sachverhalte werden durch Bohrungen untersucht. Die Ergebnisse werden mit einer Datenbank in Internet verfügbar gemacht. Mittels airborne LIDAR-Messungen, Elektromagnetik, Magnetik und Radiometrie werden tektonische Strukturen des Arbeitsgebietes abgebildet. Die Bodengeophysik präzisiert die gefundenen Strukturen. An Messstellen in Flachbohrungen erfolgt ein Langzeitgrundwassermonitoring. Die gewonnenen Daten dienen der hydraulischen Modellierung im TV6. Durch das seismologische Langzeit-Monitoring sollen Bruchereignisse identifiziert und geortet werden, um so das Hohlraum- und das geomechanische Modell (TV3) verifizieren zu können.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das TV2 umfasst folgende Arbeitspakete:

**Geophysik (AP1) Laser Scanning / Multispektralaufnahmen:** Digitales 3D-Höhenmodell zur Abbildung der Morphologie, geologisch-tektonischer Gegebenheiten und Messung von Höhenänderungen

**Geophysik (AP2) Hubschraubergeophysik:** Zur geophysikalischen Vermessung großer Flächen mittels Elektromagnetik, Magnetik und Radiometrie.

**Geophysik (AP3) Hochauflösende Bodengeophysik:** Follow-up der Laserscannermessungen /Multispektralaufnahmen und der Hubschraubergeophysik zur Messung von Lösungsaufstiegsbahnen.

**Geophysik (AP4) Hohlschneckenbohrungen mit dem BGR-Bohrgerät:** Erstellen von Flachbohrungen bis ca. 60 m Teufe und Ausbau zu Grundwassermessstellen.

**Geophysik (AP5) Grundwasser Langzeit-Monitoring in Flachbohrungen:** Bestimmung der Salzfracht der Wässer auf Störungszonen (Anomalien durch hochsaline Wässer, Frischwasser).

**Geophysik (AP6) Temperaturmessungen in Bohrungen:** Messung der Temperaturverteilung.

**Geophysik (AP7) Seismologisches Monitoring:** Betrieb neuer Seismometerstationen im vorhandenen Messnetz zur Lokalisierung seismischer Ereignisse und Bestimmung dynamischer Parameter.

**Geologische 3D- und Hohlraummodellierung:** Erstellung eines geologischen 3D-Modells und eines 3D-Hohlraummodells.

**Datenbank und Koordination des Gesamtprojekts:** Erstellung einer Server-Datenbank als Fachinformationssystem für das Projekt, bildliche (Scanner) und textliche Bohrkerndokumentation. Koordination des Forschungsverbundvorhabens.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP Aerogeophysik:** Aus den Inversionsmodellen der Hubschrauberelektromagnetik (HEM) wurde eine Versalzungs-Tiefen-Karte abgeleitet. Ferner wurden die HEM-Vertikalschnitte hinsichtlich diverser Salzwasseraufstiegszonen und Gipskarstbildungen untersucht. Diese Ergebnisse sind auf der Abschlusstagung Staßfurt 2010 sowie auf der AGU in San Francisco präsentiert worden.

**AP Bodengeophysik / Grundwasser Monitoring:** Ein geoelektrisches 2D Profil bei der Salzstelle Hecklingen lieferte keine eindeutigen Hinweise zum Verlauf einer prognostizierten Störungszone. Weiter wurden zwei Profile bei Rathmannsdorf zur Eingrenzung von Störungszone (Grundwasser-aufstieg) vermessen. Zwei Messprofile wurden über gravimetrischen Anomalien östlich von Schacht Leopoldshall III vermessen. Hier koinzidierte eine als Gipskarst interpretierte gravimetrische Anomalie, ein Bereich verminderter Schwere, mit einem Bereich mit oberflächennah erhöhtem spezifischem Widerstand. Die Verknüpfung Gravimetrie, Geoelektrik und HEM zeigt den Vorteil der Methodenkombination für die Deutung oberflächennaher Anomalien. Das gravimetrische Differenzen-Modell Staßfurt wurde u. a. für die Bewertung der Senkungsvorgänge (TV4) genutzt die Milieusondenmessungen in den Bohrungen GWE 3 und GWE 4 zur hydrogeologischen Modellbildung (TV1).

**AP Laserscanbefliegung:** Mit der Spezialsoftware LIS-Desktop wurde durch TV4 und TV2 das Höhendifferenzmodell unter Verwendung von Satellitenradarmessungen (Quelle BGR/DLR) erstellt.

**AP Seismologisches Monitoring:** Die Seismometerstationen (STF1 – STF6) wurden kontinuierlich betrieben und gewartet. In der Bohrung GWE-STF1 wurde ein 3-Komponenten-Geophonsystem in ca. 300m Tiefe installiert. Diese Stationen werden kontinuierlich betrieben.

**AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung:** Es erfolgte die Diskretisierung der Flächen des geologischen 3D-Modells: Top Leine-Steinsalz, Top Aller-Folge, Top und Basis Hutgestein, Basis Quartär sowie die Konstruktion von Profilen an den Projekt-/Modellgrenzen für die Bildung von Modellkörpern (Blockbild). Die Modellflächen Basis Quartär, Basis Tertiär, Top und Basis Hutgestein, Top Kaliflöz Staßfurt, Top Staßfurt-Steinsalz liegen in der Endfassung vor. Zur Vorbereitung der Übergabe der Projektbohrdatenbank an das LAGB Sachsen-Anhalt war eine Vereinheitlichung der Nomenklatur und Symbolschlüssel erforderlich.

**AP Server-Datenbank, Tiefbohrung und Koordination des Gesamtprojekts:** Die Datenbankpflege wurde fortgesetzt. Die zur Messung der Fließbewegungen im Bereich des Grubengebäudes Leopoldshall I/II vorgesehene Bohrung G4 konnte nicht reaktiviert werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das Projekt ist abgeschlossen, es erfolgt die Schlussberichterstattung der Arbeitspakete des Teilvorhabens und Publikation der Ergebnisse in Tagungsbeiträgen und einer Monographie.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Johannes Gerardi (Hrsg.) (2010): „Staßfurt 2010 – Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden“- Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften (EDGG), 2010. Heft 244, [ISBN] 978-3-86944-028-6], 264 S., Hannover. Tagungsband mit Beiträgen von:

- Dresbach, C., Pusch, M., Mingerzahn, G., Fleig, S., Hammer, J. & Behlau, J. (2010): 3D-Modelle der Kali- und Steinsalzbergwerke des Staßfurter Sattels und geologisches 3D-Modell der Region Staßfurt. – S. 46-62, 15 Abb., 1 Tab;
- Keyser, M. & Hartmann, G. (2010): Seismologisches Monitoring im Bergschadengebiet von Staßfurt.- S. 125-143;
- Krause, Y., Noell, U., Furche, M., Grisseemann, C. (2010): Der Beitrag hochauflösender Bodengeophysik zur hydrogeologischen Charakterisierung von Destabilisierungsprozessen in Bergschadengebieten am Beispiel der Stadt Staßfurt.- S. 82-91;
- Siemon, B. & Kerner, T., 2010. Möglichkeiten der Aerogeophysik zur hydrogeologischen Erkundung der Umgebung des Staßfurt-Egelter Sattels. – S. 73-81;

Kerner, T., Siemon, B. & Meyer, U., 2010. Airborne geophysical mapping of groundwater mineralisation in the Stassfurt potash mining district, Germany. In: Proceedings of AGU Fall Meeting, 13.-17.12.2009, San Francisco, USA.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1486</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 327.815,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Entwicklung von Modellierungsansätzen für die numerische Simulation bruchhafter Deformationen und der ablaufenden geomechanischen Prozesse zur Prognose der Oberflächenentwicklung über abgesoffenen oder gefluteten Salzbergwerken.

- Entwicklung eines Instrumentariums, mit dem die Ursachen für die Entstehung von Tagesbrüchen quantifiziert und prognostiziert werden können. Anhand von Laboruntersuchungen soll eine Einschätzung des mechanischen Materialverhaltens der in situ anstehenden Gesteine unter besonderer Berücksichtigung der für die Initialisierung rupturer Deformationsprozesse mit der potentiellen Folge von Tagesbrüchen ursächlichen Mechanismen erfolgen.
- Entwicklung von Modellierungsansätzen für die numerische Simulation bruchhafter Deformationen.
- Differenzierte rechnerische Simulation der ablaufenden geomechanischen Prozesse und exemplarische Prognose des Gebirgsverhaltens bei gekoppelter Berechnung bruchhafter und bruchfreier Deformationen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Literaturrecherche zu Tagesbruchmechanismen (Fallbeispiele / Modellierungsansätze).
- AP2: Herstellung von Lagerungsbehältern für Kernmaterial Salzton / Kalisalz.
- AP3: Felsmechanische Laborversuche / Ableitung von Grenzwerten und Randbedingungen für die Initialisierung bruchhafter Deformationen.
- AP4: Entwicklung von Modellierungsansätzen für die numerische Simulation bruchhafter Deformationen und Implementierung in FDM/FEM Software.
- AP5: Exemplarische Prognose des Gebirgstragverhaltens bei gekoppelter Berechnung bruchhafter und bruchfreier Deformationen.
- AP6: Analyse der Berechnungsergebnisse hinsichtlich der Möglichkeit zur Ableitung eines Bewertungsschemas für die Einschätzung der Tagesbruchwahrscheinlichkeit (beschränkt auf ja/nein, nicht aber wann) am Beispiel der Stadt Staßfurt in Verbindung mit den bergbaulich und hydrogeologisch orientierten Teilvorhaben.
- AP7: Schlussbericht

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

Forschungsarbeiten sind im ersten Halbjahr 2010 abgeschlossen worden.

Vortrag der Ergebnisse im Nov. 2010 anlässlich der Abschlusstagung in Staßfurt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks.

Veröffentlichung der Ergebnisse in EDGG Heft 244: Düsterloh, U.; Tedeeva, S.: Geomechanische Berechnungen zur Interpretation von Tagesbrüchen und Oberflächenabsenkungen im Bergschadensgebiet Staßfurt, EDGG, Heft 244, S. 189-200, 2010, ISBN 978-3-986944-028-6.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Erstellung Schlussbericht

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

Düsterloh, U.; Tedeeva, S.: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks – Geomechanische Modellierung, EDGG, Heft 242, S. 67-80, 2009, ISBN 978-3-86944-012-5.

Düsterloh, U.; Tedeeva, S.: Geomechanische Berechnungen zur Interpretation von Tagesbrüchen und Oberflächenabsenkungen im Bergschadensgebiet Staßfurt, EDGG, Heft 244, S. 189-200, 2010, ISBN 978-3-986944-028-6.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> K-UTEC AG Salt Technologies, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1496</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTEC): Grundlagen für Geomodellierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 643.387,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Allendorf	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im TV4 sind aktuelle geologisch- geotechnische Daten zu ermitteln, zurückliegende Bergschadensentwicklungen zu rekonstruieren und Aussagen abzuleiten, die als Basisdaten für die Modellerstellung dienen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Beistellung geologischer Informationen zur Salzstruktur aus UT- Aufschlüssen einschließlich notwendiger Rechercharbeiten.
- AP2: Ableitung eines digitalen Geländemodells aus Laserscandaten - 1. Befliegung.
- AP3: Ableitung eines digitalen Geländemodells aus Laserscan - 2. Befliegung.
- AP4: Planungs- und Forschungsleistungen für Tiefbohrungen des LAGB, Sachsen -Anhalt, zur Erweiterung der Datenbasis für die Geomodellierung.
- AP5: Ingenieurtechnische Koordinierung und Begleitung/geowissenschaftliche Bearbeitung der geplanten Tiefbohrungen/Bohrungen.
- AP6: Aufbau eines 3D-Hohlraummodells mit Darstellung der Hohlraumentwicklung.
- AP7: Geochemische Modellierung der Lösungsvorgänge im Salz- und Deckgebirge.
- AP8: Zusammenstellung mechanischer Eigenschaften des deformierten/gefluteten Gebirges.
- AP9: Ausweisung der durch geogene und anthropogene Bruchvorgänge vorgeschädigten Gebirgsbereiche.
- AP10: Darstellung von Ergebnissen des seismischen Monitorings der lokalen seismischen Station Staßfurt im Vergleich mit dem seismologischen Monitoring (BGR).
- AP11: Untersuchungen zur Einschätzung der noch vorh. Tagesbruchwahrscheinlichkeit.
- AP12: Validierung der geomechanischen Berechnungsergebnisse zur OT- Deformation anhand der in-situ durchgeführten Senkungsbeobachtungen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2+3:

Nach der Präsentation der ersten Auswerteergebnisse zum Jour Fixe (29.06.2010) wurden die Datensätze von letzten Ungereimtheiten bereinigt (z. B. fehlende Datenbereiche 2007 ergänzt). Die eingesetzte Software LIS Desktop wurde von der 32 bit auf eine 64 bit Version verbessert. Die Differenzenberechnungen wurden damit bis zu einer Rasterweite von 0.5 m durchgeführt und abgeschlossen. Vergleichende Betrachtungen mit PS- IN SAR Daten (Radar), Nivellement und gravimetrischen Messungen wurden vorgenommen. Mit der Präsentation der Ergebnisse zur Abschlusstagung im November 2010 wurde die Bearbeitung des Arbeitspaketes abgeschlossen.

AP5:

Die Zusammenstellung der Erkundungsergebnisse der Bohrungen GWE STF 1 und GWE STF 2 wurde abgeschlossen. Die Berichte (technische Berichte) wurden der BGR und dem Projektträger übergeben. Zudem erfolgte die Erstellung der technischen Kurzberichte zu den Bohrungen GWE STF 3 und 4.

AP6:

Dokumentation der Montanhistorie im Bergschadensraum mit den Schwerpunkten Auffahrungszeiträume, Versatz von Grubenbauen, Zuflüsse, Flutung der Grubenbaue, Betriebsgeschichte der Bergwerke und zeitlicher Ablauf des Senkungs- und Bergschadensgeschehen. Dazu erfolgten Anfang 2010 weitere Archivrecherchen im Landeshauptarchiv Dessau und im Landeshauptarchiv Wernigerode. Die gewonnenen Erkenntnisse aus den Recherchen der K-UTEK sowie anderer Projektpartner (BGR) werden aktuell zusammengetragen sowie ein aktualisiertes Kartenwerk der Versatzsituation der Gruben am Staßfurter Sattel erstellt (K-UTEK).

AP6:

Die Archivrecherchearbeiten zu den Themenschwerpunkten aus AP6, 7, 9, 11 und 12 wurden bis An Die gewonnenen Erkenntnisse aus den Archivrecherchen der K-UTEK sowie anderer Projektpartner (BGR) wurden weiter zusammengetragen und ein aktualisiertes Kartenwerk der Versatzsituation der Gruben am Staßfurter Sattel erstellt (K-UTEK). Die Ergebnisse der Recherchen zur Montanhistorie wurden zur Abschlussstagung präsentiert und damit abgeschlossen.

AP7:

Berechnung des Hohlraumvolumens und der Auflösung der Salzgesteine für die Gruben Leopoldshall I/II sowie v. d. Heydt/v. Manteuffel/Achenbach. Abschluss der Arbeiten erfolgte mit der Präsentation der Ergebnisse zur Abschlussstagung Staßfurt 2010.

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

Zusammenfassung aller Ergebnisse und Verfassen des Abschlussberichtes des Teilvorhabens 4 (K-UTEK).

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

K-UTEK AG / IHU GmbH (Mai 2008): Abschlussbericht – Erstellung von Erkundungs- und Forschungsbohrungen im Bereich Kali- und Steinsalzbergbau in Staßfurt.

*Kurztitel:* Bohrerkundung / Risikobewertung, Bergschadensraum Staßfurt 2005 – 2008.

ALLENDORF, A., ABRAHAM, K., SCHICHT, T. (2010): LIDAR- Auswertungen, Kernscanarbeiten sowie Koordinierung, Betreuung und Bearbeitung von geowissenschaftlichen Tiefbohrungen im Raum Staßfurt. In: Gerardi, J. (Hrsg.): Forschungsverbundvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“. – Exkursionsführer und Veröffentlichungen der DGG, Heft 242; Hannover.

ALLENDORF, A. (2010): Montanhistorie der Kaligruben am Staßfurter Sattel – Grundlagen. In: Gerardi, J. (Hrsg.): Forschungsverbundvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“. – Exkursionsführer und Veröffentlichungen der DGG, Heft 244; Hannover.

SCHICHT, T., ALLENDORF, A. (2010): Auswertung von LIDAR- Messungen zur Erkennung möglicher altbergbaubedingter Senkungs- und Bruchvorgänge im Untersuchungsraum Staßfurt. In: Gerardi, J. (Hrsg.): Forschungsverbundvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“. – Exkursionsführer und Veröffentlichungen der DGG, Heft 244; Hannover.

#### **Poster:**

BGR (Matthias Keyser) / K-UTEK AG (Anne Allendorf): Geophysikalische Erkundung - LIDAR und seismologisches Monitoring; GEO Dresden 2009.

ALLENDORF, A., SCHICHT, T. (2010): Auswertung von LIDAR- Messungen zur Erkennung möglicher altbergbaubedingter Senkungs- und Bruchvorgänge im Untersuchungsraum Staßfurt. Abschlussstagung Staßfurt 2010.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur- Hydro- und Umweltgeologie mbH, Dr.-Kurt-Schumacher-Str. 23, 39576 Stendal		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1506</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 662.064,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Stahl	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des geplanten Vorhabens ist die Entwicklung eines interdisziplinären Prognosemodells für urbane Räume über abgesoffenen oder gefluteten Salzbergwerken mit bergschadensbedingten Veränderungen im Deckgebirgsstockwerk als Grundlage für ein ökologisch begründetes nachhaltiges Gestaltungs- und Flächennutzungskonzept. Diese methodischen Forschungsarbeiten mit überregionalem Anwendungsbezug sollen exemplarisch am Standort Staßfurt bearbeitet werden.

Die Aufgabenschwerpunkte des Teilvorhabens TV5 liegen in der Erfassung, Bewertung und Darstellung der Struktur- und Hydrogeologie. Dazu werden die vorhandenen Altdaten aufbereitet und mit den im Verbundvorhaben neu gewonnenen Informationen z. B. aus Bohrungen, gebirgsmechanischen Untersuchungen, geophysikalischen Messungen oder hydrochemischen Analysen zusammengeführt. Diese Daten werden in einem dreidimensionalen strukturgeologischen Modell zusammengefasst und für in die geohydraulischen Modellierung der Dynamik des Untersuchungsgebiet überführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Teilvorhaben 5 - Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie gliedert sich in die folgenden Arbeitspakete:

- AP1: Geologisches Modell
- AP2: Erweiterung der Datenbasis durch Bohrungen und geophysikalische Messungen
- AP3: Hydrogeologische Analyse von Strömungsvorgängen und Austauschprozessen
- AP4: Erstellen der Abschlussdokumentation

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

Die Schwerpunkte der bisherigen Arbeiten lagen in den Arbeitspaketen 1, 2 und 3. Im Projektverlauf wurden die geologischen sowie die hydrogeologischen und hydrochemischen Daten erfasst, zusammengestellt, geprüft und aufbereitet, um sie dann den Projektpartnern zur Verfügung zu stellen.

Im 2. Halbjahr 2010 lag der Hauptschwerpunkt der Arbeiten auf der Auswertungen und Interpretation der Ergebnisse der ergänzenden geowissenschaftlichen Erkundungsbohrungen GWE STF 3 und 4.

Am Standort der GWE STF 3 kam es während des Pleistozäns zur Ausbildung einer 60 m tiefen Subrosionssenke, die durch eine langsame Absenkung durch lokal verstärkten Karst im Gipshut entstand. Das Auftreten von gipskarstbedingten, oberflächennahen Hohlräumen, die durchaus auch das latente Potential zur Entstehung von Erdfällen besitzen können, konnte auch im Zuge des Flachbohrprogramms nachgewiesen werden. Insbesondere das Profil der Bohrung GWE STF 3 mit den zahlreichen teils offenen, teils sedimentgefüllten, karstgenerierte Schlotten und Spalten belegt komplexe Strömungs- und Transportvorgänge im und vor allem auch in den Gipshut. Analog dazu ist auch die Oberfläche des Gipshutes durch typische Karsterscheinungen wie Spalten, Schlotten, Karren oder fossile Erdfälle geprägt, die während der gesamten Entwicklungsgeschichte des Gipshutes Fallenstrukturen für die jeweils darüberliegenden Sedimentabfolgen bildeten.

Die Bohrung GWE STF 4 erreichte eine Endteufe von 65 m uGOK und spiegelt, abgesehen von den obersten Metern, eine normale Abfolge des Unteren Buntsandsteins (Calvörde-Folge) wider.

Vom 18. bis 20. November 2010 erfolgte die öffentliche Abschlusstagung „Staßfurt 2010 – Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden in Staßfurt. Die Arbeiten des TV5 wurden in einem Vortrag „Zusammenfassung der Ergebnisse des Tief- und Flachbohrprogramms“ präsentiert. Es erfolgten umfangreiche Diskussionen im Forschungsverbund sowie mit dem Beirat und den anwesenden Fachkollegen und interessierten Bürgern der Region.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten im Teilvorhaben werden inhaltlich wie geplant, jedoch mit zeitlicher Verzögerung fortgeführt. Im Bereich der Hydrogeologie soll noch die Bohrung G3 aufgewältigt und ergänzend untersucht werden. Der Hauptschwerpunkte der weiteren Tätigkeiten bestehen in der Diskussion der aktueller Arbeitsergebnisse mit den Projektpartnern und der Erstellung einer koordinierten Abschlussdokumentation.

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

Zusammenfassung der Ergebnisse des Tief- und Flachbohrprogramms; Frank Wackwitz, Hans-Dietrich Thormeier, Uwe Stahl; EDGG Heft 244, S. 32-45; 2010

<b>Zuwendungsempfänger:</b> DHI-WASY GmbH, Waltersdorfer Str. 105, 12526 Berlin		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1516</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 367.179,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Diersch	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Forschungsvorhaben zielt auf die Modellierung der Strömungs- und Salzwassertransportprozesse orientiert in einer mehrstufigen Vorgehensweise auf den Aufbau eines regionalen dreidimensionalen Strömungs- und Salzwassertransportmodells mit notwendiger Detailliertheit zur Simulation entsprechender Prozesse in aufgelassenen Salzbergwerken und ihrer Deckgebirge.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- TA1: Prinzipstudien zu Strömungs- und Transportprozessen an Profilschnitten  
 TA2: Aufbau von Finite-Element-Modellen für 2D- und 3D-Schematisierungen  
 TA3: Simulationen von Strömungs- und Transportprozessen an ausgewählten Modellszenarien  
 TA4: Vergleich von Modellierungsergebnissen mit In-situ-Befunden

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Umfangreiche Simulationen von dichtegekoppelten Strömungs- und Transportprozessen für ausgewählte Modellszenarien und Vergleiche von Modellierungsergebnissen mit In-situ-Befunden waren Mittelpunkt der durchgeführten Arbeiten. Nachfolgend sind relevante Arbeitsschritte sowie erzielte Ergebnisse zusammenfassend dargestellt.

#### *Durchführung dichtegekoppelter 3D-Stofftransportberechnungen:*

Nach erfolgreicher Nachkalibrierung unter Berücksichtigung der endgültigen Geometrie der maßgeblichen hydraulischen Einheiten im Untersuchungsgebiet wurde das 3D-Strömungsmodell zu einem 3D-Stofftransportmodell erweitert. Das finale 3D-Stofftransportmodell umfasst 28 Schichten mit ca. 1,6 Mio. finite Elementen.

Die Parametrisierung des 3D-Stofftransportmodells erfolgte in Abstimmung mit der BTU Cottbus (TV1). Auf dieser Basis wurde die Stofftransportmodellierung mit der Annahme von einer gesamten Salzkonzentration i. H. v. 350 g/l in den Salzhorizonten (Aller-Steinsalz, Roter Salzton, Leine-Steinsalz, Leine Salzton, Kaliflöz und Staßfurt-Steinsalz) ausgeführt. In der Diskussion mit den geophysikalischen Sachbearbeitern (TV2) konnte eine qualitativ gute

Übereinstimmung der Konzentrationsverteilung mit den Ergebnissen der Elektromagnetik bestätigt werden. Da die heute beobachtete Verteilung der Salzkonzentrationen im Untersuchungsgebiet offensichtlich auf hydrogeologische Prozesse über einen sehr langen Zeitraum und die anthropogene Beeinflussung im letzten Jahrhundert zurückzuführen ist, wurde die Simulation der Salzkonzentrationen unter Berücksichtigung der Dichteeffekte für die folgenden Szenarien durchgeführt:

- Simulation der geogenen räumlichen Salzkonzentrationsverteilung (Basisverteilung),
- Szenarienberechnung Salzwassertransport mit anthropogenen Beeinflussungen und
- Szenarienberechnung Salzwassertransport ohne anthropogenen Beeinflussungen.

Die Ergebnisse wurden mit verfügbaren Messdaten ausgewertet und lassen quantitative Bewertungen natürlichen Salzausträge und der anthropogenen Beeinflussungen zu. Im Laufe der Bearbeitung konnten Erkenntnisse hinsichtlich der Modellierung erlangt werden, u. a.:

- Die Berechnung eines derartig großräumigen dichtegekoppelten 3D-Massentransportmodells erwies sich als sehr anspruchsvoll und rechentechnisch aufwendig.
- Perspektivisch bietet das hier aufgebaute 3D-Strömungs- und Massentransportmodell die Möglichkeit, die grundsätzlichen Zusammenhänge abzubilden, spezifischen Fragestellungen zur Aufdeckung kausaler Zusammenhänge nachzugehen und Monitoringsysteme zu unterstützen.

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

- Fertigstellung des Endberichtes TV6 gemäß Vorgaben für das Forschungsverbundvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“.

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

Rühaak, W., 3D modelling of brine flow using FEFLOW, MIKE by DHI 2010 Conference, September 6-8, Copenhagen.

Diersch, H.-J.G., Luo, J. & Rühaak, W., 2010: Numerische Strömungs- und Massentransportmodellierung im Bereich des ehemaligen Kalibergbaus Staßfurt - In: Erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden, Abschlussstagung Forschungsvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“ 18. – 20. November 2010, Staßfurt. EDGG, Heft 244.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1526</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 254.420,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Enzmann

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Vorhaben ist Teil des Arbeitspaketes zur zerstörungsfreien Strukturanalyse repräsentativer Bohrkernproben. Die Erkenntnisse die aus den Strukturdaten und Fluidsimulationen ermittelt werden, sollen u. a. als Inputparameter in die (1) geochemischen Lösungssimulationen (TV1, BTU) und (2) großskaligen hydrogeologischen Grundwasser-transportmodelle (TV6, WASY) fließen. Die Arbeiten erfolgen in enger Zusammenarbeit mit dem IIF (TV8).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Durchführung der CT Experimente an Bohrkernproben
- AP1.1: Bereitstellung der Bohrkernproben in Absprache mit den beteiligten Projektpartnern
- AP1.2: Scannen aller Bohrkernproben mit dem DMT-CoreScanner und Datenintegration in die Datenbank „Saltcorebase“
- AP1.3: Unterstützung bei bohrlochgeophysikalischen Messungen
- AP1.4: Durchführung der CT Experimente und Optimierung der Messverfahren und räumlichen Auflösung (FuE mit BAM)
- AP1.5: Übergabe der Proben an das IIF für die PET Experimente
- AP2: Auswertung der CT Daten
- AP2.1: 3D-Visualisierung der Datensätze
- AP2.2: Abgleich mit CoreScanner-Daten und Integration / Dokumentation in der Datenbank „Saltcorebase“
- AP2.3: Generierungen von Simulationsdatensätzen basierend auf CT-Daten
- AP2.4: Durchführung von Fluid- und Tracermigrationssimulationen und Dokumentation der Ergebnisse
- AP2.5: Verifikation und Abgleich der Simulationsergebnisse mit den PET-Experimenten und Dokumentation in Saltcorebase
- AP2.6: Präzisierungen von Input-Parametern für die Auslaugungs- und Transportmodelle der beteiligten Projektpartner

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Arbeitspakete 1 sind abgeschlossen. Die endgültige Integration der Ergebnisse in die BGR Saltcorebase wird noch diskutiert und geprüft, teilweise ist dies schon geschehen. Dies betrifft auch die Ergebnisse der AP2.1 und 2.2. Im AP1.4 sind erhebliche Probleme durch Strahlaufhärtungseffekte aufgetreten. Im Rahmen des Projektes wurde ein hybrides Verfahren zur Korrektur dieser Effekte entwickelt und angewandt. Eine Publikation ausschließlich zu diesem Thema ist in Vorbereitung.

AP2.3: Zwischenergebnisse des AP sind im EDGG-Sonderband (Enzmann et al., 2009, 2010 sowie in Wolf et al., 2010) erschienen.

Im AP2.4 wurden auf Basis der im AP2.3 entwickelten Datensätze Simulationen mit Gitter Boltzmann-Methoden durchgeführt. Diese liefern als Modellergebnis effektive Transportparameter der an den Bohrkernen gemessenen Mikrostrukturen. Die Arbeiten an den 3D und 4D Fluidmigrations- und Tracertransportsimulationen sind abgeschlossen. Nachsimulationen werden im Rahmen von laufenden Diplomarbeiten noch durchgeführt. Hierbei zum Einsatz kommt eine neue Software, die im Rahmen einer Forschungs Kooperation mit dem Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik weiterentwickelt wird (GeoDICT, [www.geodict.de](http://www.geodict.de)). Diese Software arbeitet auf massiv parallelen Rechnern. Die Ergebnisse dieser Simulationen (AP2.5.) zeigen qualitative und näherungsweise quantitative Übereinstimmungen zwischen den Simulationen basierend auf den XCT Datensätzen und den PET-Experimenten aus TV8. Die Auswertung der simulierten Daten und experimentellen Daten zeigen stark heterogene Fließpfade in diesen Systemen. Ein Ergebnis der Simulationen sind effektive Permeabilitätsensoren, die als präzisierte Eingangsparameter in makroskopische Modelle finden können (AP2.6.). Repräsentative Ergebnisse der Simulationen und deren Visualisierung sind in Enzmann et al. (2010) veröffentlicht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Alle im Teilvorhaben gelaufenen Arbeiten werden im Abschlussbericht ausführlich dokumentiert und die Ergebnisse dargestellt. Gemeinsam mit den Teilvorhaben 8 sind weitere Veröffentlichungen der Ergebnisse der in den TP bearbeiteten Salinarkernproben in Vorbereitung. Letzte Arbeiten beziehen sich auf die Integration der XCT- und Simulationsergebnisse in Form von CT Schnitten und Simulationsanimationen in die Saltcorebase der BGR im Teilvorhaben 1.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

F. Enzmann, Z. Jovanovic, J.-O. Schwarz, J. Tuckermann, J. Göbbels, M. Kersten (2010): Hochauflösende Computertomographie und Computersimulationen an Bohrkernen der Staßfurt-Forschungsbohrungen. EDGG Exkursionsführer & Tagungspublikationen 2010, 244, 213-223.

J. Kulenkampff, M. Gründig, M. Wolf, J. Lippmann-Pipke, M. Richter, F. Enzmann (2010): Direct quantitative observation of transport processes with Positron-Emission-Tomography. SSOM Symposium Transport in Porous Materials, Villigen.

M. Wolf, J. Kulenkampff, F. Enzmann, M. Gründig, M. Richter, J. Lippmann-Pipke, H. Mittmann (2010): 3D-Visualisierung und Quantifizierung von Fluidströmungen in Salinargestein mittels Positronen-Emissions-Tomographie. EDGG Exkursionsführer & Tagungspublikationen 2010, 244, 200-212.

J. Kulenkampff, M. Wolf, F. Enzmann, M. Gründig, M. Richter, J. Lippmann-Pipke (2010): Matching of fluid flow observations in geological material (GeoPET, mm3 resolution) with lattice Boltzmann simulations in  $\mu\text{m}$  resolved structures. Abstract H41D-1116 presented at 2010 Fall Meeting, AGU, San Francisco, Calif., 13-17 Dec.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1536</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 173.362,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kulenkampff	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit tomographischen Radiotracerverfahren (PET) werden an Bohrkernen aus verschiedenen Gesteinsformationen des Staßfurter Gebietes lokale Transport- und Lösungsprozesse untersucht und in Verbindung mit den an der JGU Mainz (TV7) durchgeführten CT-Messungen Daten zur Modellierung dieser Prozesse ermittelt. Die zu untersuchenden Bohrkern- und Lösungszusammensetzungen werden in Absprache mit den Verbundpartnern (BTU Cottbus, TV1; TU Clausthal, TV3; K-UTEC Sondershausen, TV4; IHU Stendahl, TV5) ausgewählt. Die zu erwartenden Ergebnisse erweitern das Prozessverständnis und die Datenbasis für die geochemische und geohydrologische Modellierung. In Kooperation mit den Verbundpartnern werden die wissenschaftlichen Grundlagen für die entsprechenden Modelle erweitert und damit die Genauigkeit der Modellansätze erhöht. Eine Übertragung auf die Feldskala wird mit Hilfe von Fluoreszenztraceruntersuchungen in Zusammenarbeit mit der BTU Cottbus (TV1) unternommen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung und Test geeigneter PET-Tracer
- AP2: Beschaffung und Inbetriebnahme eines Animal-PET
- AP3: Probenahme und Anpassung der Injektionsmethodik
- AP4: PET-Untersuchung des Fluidtransports an Proben aus dem Deckgestein
- AP5: PET-Untersuchung der Transport- und Löseprozesse an Proben aus der Lagerstätte
- AP6: PET-Untersuchung nach geomechanischer Belastung
- AP7: Bestimmung der räumlichen Verteilung der Transport- und Kinetikparameter
- AP8: Fluoreszenztraceruntersuchungen
- AP9: Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP4-7: Die Auswertung eines großen Teils der Messdaten wurde aktualisiert.

Anhand der Monte-Carlo PET-Simulationen konnten Streueffekte grundlegend quantitativ charakterisiert werden (Ort, Anzahl der Streueffekte, Ablenkungswinkel, Energieverlust). Hiermit lassen sich Messfehler und Abbildungsartefakte qualifiziert bewerten. Die Möglichkeit einer physikalisch fundierten direkten Inversion der Tracerkonzentration aus den Messwerten - gegenüber der bisher angewendeten iterativen Bildrekonstruktion mit a-priori Korrekturen der gemessenen Projektionen - wird geprüft.

Der Abgleich mit LBM-Simulationen (TV7) war grundsätzlich möglich und erfolgreich. Es zeigte sich, dass die Aussagekraft der PET-Bilder gegenüber den LBM-Ergebnissen durch Artefakte begrenzt wird, die überwiegend auf Streueffekten beruhen. Die LBM-Ergebnisse werden dagegen begrenzt durch die Detektierbarkeitsschwelle feiner Strukturen, die jedoch gemäß der PET-Ergebnisse signifikant zum Transport beitragen können.

Bezüglich der Übertragung der Prozesse von der Bohrkernskala auf die Feldskala gibt es weiterhin Forschungsbedarf. In den Labormessungen deutet sich an, dass Transport - und damit auch Reaktionen wie Lösung, Fällung und Alteration - in höherem Maße als erwartet längs lokalisierter Pfade vonstatten geht. Dies würde bedeuten, dass die Eignung von großskaligen Kontinuumsmodellen für Prognosezwecke überprüft werden sollte, weil sich die Transportpfade eher lokal ändern.

AP9: In Vorbereitung des Abschlussberichtes wurde die Dissertation von M. Wolf abgeschlossen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Erstellung des Abschlussberichtes
- Veröffentlichung gemeinsam mit TV 7
- Verbesserung der Streukorrektur.

Langfristig, über die Projektlaufzeit hinaus, stellen die erfassten experimentellen Datensätze eine hervorragende Grundlage dar für die Entwicklung und Anwendung verbesserter Bildrekonstruktionsverfahren und folglich für ein verbessertes Verständnis von Transportvorgängen im Salinargestein, für die Fortentwicklung von Verfahren zur räumlich aufgelösten Parametergewinnung und für den Abgleich mit ab-initio Computersimulationen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Kulenkampff, M. Gründig, M. Wolf, J. Lippmann-Pipke, M. Richter, F. Enzmann: Direct quantitative observation of transport processes with Positron-Emission-Tomography. SSOM Symposium Transport in Porous Materials, Villigen.

M. Wolf, J. Kulenkampff, F. Enzmann, M. Gründig, M. Richter, J. Lippmann-Pipke, H. Mittmann: 3D-Visualisierung und Quantifizierung von Fluidströmungen in Salinargestein mittels Positronen-Emissions-Tomographie. EDGG Exkursionsführer & Tagungspublikationen 2010(2010) 244, 200-212.

J. Kulenkampff, M. Wolf, F. Enzmann, M. Gründig, M. Richter, J. Lippmann-Pipke: Matching of fluid flow observations in geological material (GeoPET, mm3 resolution) with lattice Boltzmann simulations in  $\mu\text{m}$  resolved structures. Abstract H41D-1116 presented at 2010 Fall Meeting, AGU, San Francisco, Calif., 13-17 Dec.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik (LIAG), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1546</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 9 (GGA-S1): Deckgebirgseigenschaften über einem bergbaubedingt destabilisiertem Untergrund, abgeleitet aus seismischen Beobachtungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 265.635,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Polom	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des TV9 ist die gebirgsmechanische Analyse und Bewertung des Tragverhaltens des Gebirges über und in den abgesoffenen und z. T. verbrochenen Grubenbauen sowie Ursachenforschung zur Hydrodynamik im oberflächennahen und tieferen Grundwasserstockwerk mit ihren vielfältigen Wechselwirkungen und Lösungsvorgängen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Erfassung der realen physikalischen Strukturierung der Formation und ihrer internen elastomechanischen Eigenschaften mittels eines 2D-seismischen Profilnetzes unter kombinierter Verwendung von P- und S-Raumwellen und Überführung in das geologische Modell.

Einbindung dieses Profilnetzes in die punktuell vorliegenden Informationen aus Flach- und Tiefbohrungen (BTU Cottbus) zur schlüssigen Verknüpfung und Extrapolation in die Fläche.

Anschließende Verschneidung mit anderen Flächen- bzw. Rauminformationen aus der Aerogeophysik, Geoelektrik, Elektromagnetik und dem seismologischen Monitoring (alle BGR).

Zur Teufenkalibrierung der seismischen Oberflächenmessungen und zur Verifizierung anderer bohrlochgeophysikalischer Daten (K-UTEC) werden zusätzlich vertikalseismische Profile (VSP) unter Verwendung einer digitalen 3K-Geophonsonde und vibrationsseismischer P- und S-Quellen in den Tiefbohrungen sowie in ausgewählten Flachbohrungen durchgeführt.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde das Prozessing und die Interpretation der bislang noch nicht, bzw. aufgrund der Projektprioritäten oder ihrer Lage außerhalb des Kerngebietes nur ansatzweise bearbeiteten seismischen Profile fortgesetzt. In diesem Zusammenhang wurden die auf der Nordostflanke des Salzsattels gelegenen Profile „Bahndamm“ (nordöstlich an die ehemalige Schachanlage Friedrichshall anschließend) sowie „Plattenweg Rathmannsdorf“ (östlich von Rathmannsdorf gelegen) bearbeitet. Beide Profile zeigen eine vergleichsweise gute Reflektivität der Salinarstrukturen sowie eine Abbildung der Basalanhydrit-Reflexion in ca. 1200 m Tiefe. Aufgrund der schon in vorangehenden Berichten erläuterten fehlenden Bohrungskalibrierung im Bereich der Nordostflanke und insbesondere der dort starken Strukturneigungen sind die Teufenkonversionen dieser Profile allerdings sehr kritisch einzustufen und möglicherweise bis zu 30 % zu tief konvertiert. Im Bereich des 3D-Experiments Strandbad erfolgte eine teufenkonsistente Zusammenführung der 2D- und 3D-Datensätze, mit Unterstützung der in der Bohrung STF 4 bis etwa 60 m unter Gelände ermittelten Formationsgeschwindigkeiten.

Darüber hinaus wurde eine weiterführende Datenbearbeitung der S-Wellenprofile im Bereich des Stadtzentrums entwickelt, um die Signalgehalte der oberflächennahen Zone bis etwa 50 m Tiefe zu extrahieren und von den überlagernden Luftschall-Signalen und den unterhalb der Oberflächenversiegelung in der oberflächennahen Langsamschicht geführten Wellen zu trennen. Durch diese Art der Aufbereitung konnte die Extraktion oberflächennaher S-Wellen-Geschwindigkeiten verbessert werden. Auch ließen sich so oberflächennahe Strukturformationen im Übergangsbereich der quartären Überdeckung zum Bundsandstein ableiten. Diese deuten auf erhebliche Ondulationen in dieser Übergangzone hin. Im Verlauf des Profils „Großer Markt“ deutet sich eine lokale Senkungsstruktur an, die im Profilverlauf mit etwa 80 m Länge angeschnitten wurde.

Nach intensiver Datensichtung der in den Projekt-Bohrungen STF 3 und STF 4 durchgeführten Akustik-Logs und der anschließenden Verifizierung der Messdaten und -Ergebnisse in Abstimmung mit der ausführenden Firma BLM Gommern konnte die Auswertung dieser akustischen Bohrlochmessungen in Hinblick auf die Generierung seismischer Referenzgeschwindigkeiten erfolgreich fortgesetzt werden. Das vergleichsweise aufwändige Verfahren wurde notwendig, da sich durch Verwendung einer neuen Sonde im Vergleich zur Bohrung STF 2 erhebliche Unstimmigkeiten im Mess- und Auswerteverfahren ergeben hatten, die aus den technischen Berichten allein nicht erschlossen werden konnten. Die nun verifizierten Daten zeigen im Bereich der Bohrung STF 4 ab ca. 20 m Tiefe mit ca. 2500 m/s Formationsgeschwindigkeiten, die auf eine vergleichsweise stabile Formationssituation hindeuten. In der Bohrung STF 3 wurden dagegen ab 85 m Tiefe starke Variationen der Signalgeschwindigkeiten sowie starke Signalstreuung ermittelt, die auf eine ca. 15 m mächtige Zone intensiver Verkarstung an der Basis des Hutgesteins hindeuten.

Vom 21.-24.9.2010 wurden abschließende Messarbeiten im Umfeld des aktuellen Großenkungsgehehens südlich von Bernburg und im Bereich der Bohrung STF 3 vorgenommen. Die Datenbearbeitung und Interpretation wird über den Förderzeitraum hinaus im Rahmen laufender Forschungsarbeiten des LIAG abgeschlossen. Die ebenfalls geplante Aufnahme eines S-Wellen-Referenzprofils in einem Gebiet mit ungestörtem Deckgebirge konnte nicht mehr durchgeführt werden und muss nachfolgenden Forschungsarbeiten verbleiben. Eine durch Anpassungsprobleme begründete eingehende Einsichtnahme in das übernommene seismische Datenmaterial aus dem Vorgängerprojekt zeigte Inkonsistenzen hinsichtlich des Bezugs der geodätischen Messdaten sowie sehr anspruchsvolle Anlagen der Profilverführungen auf. Die für eine konsistente Anbindung dieses Datenmaterials notwendigen weiteren Aufarbeitungs- und Anpassungsarbeiten an die Rahmenbedingungen des Projektverbundes sollen am LIAG im Verlauf eines Trainingsprogramms für seismische Datenbearbeitung parallel zur Erstellung des Abschlussberichts abgeschlossen werden.

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

Abschließende Prozessing- und Interpretationsarbeiten, Generierung einheitlicher geodätischer Basisinformationen zu den Profilverführungen aus dem aktuellen und dem Vorgängerprojekt, Vereinheitlichung der Profilabbildungen und Bezugsniveaus, Dokumentation und Archivierung des Datenmaterials. Erstellung des Abschlussberichts des Teilprojekts TV9, Mitarbeit am zusammenfassenden Abschlussbericht.

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

Polom, U., Heinze, B., 2010. Ergebnisse des reflexionsseismischen Untersuchungsprogramms im Raum Staßfurt. Sonderband zur öffentlichen Abschlusstagung am 18.-20.11.2010, EDGG, Heft 244, 20 S.

Heinze, B., Polom, U., 2010. Seismische Erkundung des Deckgebirges – Poster im Verlauf der öffentlichen Abschlusstagung am 18.-20.11.2010, Staßfurt.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik (LIAG), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1556</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 253.554,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Frechen	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Teilvorhabens TV10 ist die isotopenhydrologische Charakterisierung der Grundwässer zum Nachweis von hydraulischen Verbindungen und dem Zu- und Abflussverhalten der Wasserreservoirs der gefluteten Salzbergwerke.

- Isotopenhydrologische Untersuchung der untertägigen Wässer sowie des Vorfluters im Bereich der Stadt Staßfurt
- Quantifizierung von Mischungen zwischen Wässern und Salzlösungen unterschiedlicher Herkunft
- Rekonstruktion lokaler Wasserfließsysteme
- Interpretation der hydrodynamischen Zusammenhänge als Ergebnis des multidisziplinären Gesamtkonzeptes der Arbeitsgruppe.

Die Auswahl geeigneter Bohrungen, Pegel und Wasserbrunnen für die Beprobung im Untersuchungsgebiet findet in enger Abstimmung mit den Projektpartnern, insbesondere BTU Cottbus (TV1), K-UTEC (TV4) und IHU Stendal (TV5) statt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das TV10 umfasst folgendes Arbeitsprogramm:

- Pflege des Datenbestandes inkl. Datenrecherche und Erweiterung des Altdatenbestandes
- Isotopenhydrologische Probennahme vor Ort aus den Tiefbohrungen und aus den Flachpegeln
- Isotopenhydrologische Messanalytik im Labor. Untersuchung der stabilen Isotope, Tritium, Tritium/<sup>3</sup>Helium, <sup>14</sup>C-Datierung, FCKW und SF<sub>6</sub>.
- Dateninterpretation:
  - Bestimmung der Altersstruktur der salinaren Wässer und damit der Verweilzeiten und des Zu- und Abstroms
  - Rekonstruktion der lokalen Wasserfließsysteme bzw. der hydrodynamischen Verhältnisse
  - Beurteilung der Migration von Wasser und Lösungen, mit denen ein weiterer Lösungsangriff innerhalb der Flutungsräume verbunden sein kann
- Publikation der Ergebnisse auf Tagungen und in einschlägigen Fachzeitschriften.

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

Die Analytik der Grundwasserproben auf  $^2\text{H}$ ,  $^{18}\text{O}$ ,  $^{14}\text{C}$  (LIAG Hannover),  $^3\text{H}$ ,  $^3\text{He}/^4\text{He}$ ,  $^{20}\text{Ne}/^{22}\text{Ne}$  (Universität Bremen), FCKW/SF<sub>6</sub> (Spurenstofflabor Oster, Wachenheim) wurde beendet. Die Auswertung und Modellierung der einzelnen Umwelttracer-Ergebnisse zur Bewertung von Grundwasserverweilzeiten in den einzelnen Aquifer-Stockwerken sind beendet. Auf der Abschlusskonferenz in Staßfurt wurden die Ergebnisse des TV10-Isotopenhydrologische Untersuchungen vorgestellt und publiziert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Im 1. Halbjahr 2011 werden die Arbeiten zum Abschlussbericht fertig gestellt sowie die Publikation der isopenhydrologischen Ergebnisse in enger Zusammenarbeit mit der BTU Cottbus in nationalen und internationalen Fachzeitschriften zum Abschluss gebracht.

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

Stadler, S., Sültenfuß, J, Jahnke, C., Bohn, A (eingereicht): Isotope hydrological and geochemical indicators for groundwater migration and salt and freshwater interaction in the former potash and rock salt mining town of Stassfurt, Germany.

Stadler, S. (2010): Isotopen- und Umwelttracersysteme zur Charakterisierung verschiedener Aquifereinheiten in Staßfurt. In: Gerardi, J. (Hrsg.): Staßfurt 2010 – erkennen, analysieren, bewerten und prognostizieren der zukünftigen Entwicklung der Bergbaufolgeschäden Exkurs. f. und Veröffentl. DGG, 244: 155-160; Hannover.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1577</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 31.07.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.07.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 238.963,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hampel	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel (FKZ 02C1577), IfG Leipzig (02C1587), KIT Karlsruhe (02C1597), Universität Hannover (02C1607) und TU Clausthal (02C1617) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Einlagerung von gefährlichen Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern.

Dieses Folgevorhaben setzt inhaltlich das Verbundprojekt "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) fort. Im Folgevorhaben führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem 3D-Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einem realen Untertagebauwerk im Steinsalz durch. Dabei wird auch die Permeabilitätsentwicklung in der Auflockerungszone einbezogen sowie eine Langzeitextrapolation des mechanischen Verhaltens vorgenommen. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Start-Workshop der Projektpartner
- AP2: Planung und Durchführung des untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der Laboruntersuchungen
- AP3: Vorbereitung der Modellrechnungen einschließlich der Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter
- AP4: 3D-Modellberechnungen eines untertägigen Grubenausschnitts mit FEM / FDM
- AP5: Erstellung von Ergebnisberichten durch die Projektpartner
- AP6: Vergleich der Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen, Ausarbeitung von Empfehlungen
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner
- AP8: Durchführung eines öffentlichen Ergebnis-Workshops
- AP9: Schriftliche Dokumentation der Ergebnisse (Abschlussbericht und Veröffentlichung)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

An dem Stoffgesetzvergleich beteiligte sich der Zuwendungsempfänger im Teilvorhaben 1 mit dem von ihm in Kooperation mit der BGR Hannover entwickelten Composite-Dilatanz-Modell (CDM) und verwendete für die Modellberechnungen eines Ausschnitts der Grube Angersdorf das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Fa. Itasca).

Im Berichtszeitraum setzte der Zuwendungsempfänger die Erstellung des detaillierten Ergebnisberichtes zu seinem Teilprojekt, den Vergleich der Simulationsergebnisse der Projektpartner und die Erstellung des gemeinsamen Syntheseberichtes fort.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das BMBF-Verbundprojekt endete am 31.07.2010.

Inhaltlich wird der Stoffgesetzvergleich ab dem 01. Oktober 2010 im Rahmen des BMWi-Verbundprojektes „Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz“ weitergeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum CDM-Stoffgesetz und zum Vorgänger-Verbundprojekt:

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. (2007): Vergleich aktueller Stoffgesetze für die Modellierung von Untertagebauwerken im Steinsalz. – In: C. Drebenstedt, W. Kudla, H. Konietzky & B. Jung (Hrsg.): Modellierung, Simulation und Visualisierung von Prozessen in Bergbau und Bauwesen; Freiburger Forschungsforum, 58. Berg- und Hüttenmännischer Tag 2007, Freiburger Forschungshefte, C515 Geotechnik, TU Bergakademie Freiberg, S. 211-224.

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.

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.

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> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1587</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 31.07.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.07.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 281.450,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Salzer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel (FKZ 02C1577), IfG Leipzig (02C1587), FZ Karlsruhe (02C1597), Universität Hannover (02C1607) und TU Clausthal (02C1617) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Einlagerung von gefährlichen Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern.

Dieses Folgevorhaben setzt inhaltlich das Verbundprojekt "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) fort. Im Folgevorhaben führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem 3D-Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einem realen Untertagebauwerk im Steinsalz durch. Dabei wird auch die Permeabilitätsentwicklung in der Auflockerungszone einbezogen sowie eine Langzeitextrapolation des mechanischen Verhaltens vorgenommen. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Start-Workshop der Projektpartner
- AP2: Planung und Durchführung des untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der Laboruntersuchungen
- AP3: Vorbereitung der Modellrechnungen einschließlich der Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter
- AP4: 3D-Modellberechnungen eines untertägigen Grubenausschnitts mit FEM / FDM
- AP5: Erstellung von Ergebnisberichten durch die Projektpartner
- AP6: Vergleich der Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen, Ausarbeitung von Empfehlungen
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner
- AP8: Durchführung eines öffentlichen Ergebnis-Workshops
- AP9: Schriftliche Dokumentation der Ergebnisse (Abschlussbericht und Veröffentlichung)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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 FLAC-3D.

Im Berichtszeitraum hat das IfG die Erstellung des detaillierten Ergebnisberichtes zu seinem Teilprojekt abgeschlossen und die Mitwirkung bei der Erstellung des gemeinsamen Syntheseberichtes fortgesetzt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das BMBF-Verbundprojekt endete am 31.07.2010.

Inhaltlich wird der Stoffgesetzvergleich ab dem 01. Oktober 2010 im Rahmen des BMWi-Verbundprojektes „Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz“ weitergeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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. 44th US Rock Mechanics Symposium and 5th 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. 44th US Rock Mechanics Symposium and 5th U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, Salt Lake City, UT June 27–30, 2010

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> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1597</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 31.07.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.07.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 112.677,76 EUR	<b>Projektleiter:</b> Pudewills	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel (FKZ 02C1577), IfG Leipzig (02C1587), FZ Karlsruhe (02C1597), Universität Hannover (02C1607) und TU Clausthal (02C1617) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Einlagerung von gefährlichen Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern. Dieses Folgevorhaben setzt inhaltlich das Verbundprojekt "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) fort. Im Folgevorhaben führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem 3D-Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einem realen Untertagebauwerk im Steinsalz durch. Dabei wird auch die Permeabilitätsentwicklung in der Auflockerungszone einbezogen sowie eine Langzeitextrapolation des mechanischen Verhaltens vorgenommen. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Start-Workshop der Projektpartner
- AP2: Planung und Durchführung des untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der Laboruntersuchungen
- AP3: Vorbereitung der Modellrechnungen einschließlich der Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter
- AP4: 3D-Modellberechnungen eines untertägigen Grubenausschnitts mit FEM / FDM
- AP5: Erstellung von Ergebnisberichten durch die Projektpartner
- AP6: Vergleich der Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen, Ausarbeitung von Empfehlungen
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner
- AP8: Durchführung eines öffentlichen Ergebnis-Workshops
- AP9: Schriftliche Dokumentation der Ergebnisse (Abschlussbericht und Veröffentlichung)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

An dem Stoffgesetzvergleich beteiligte sich das INE (Teilvorhaben 3) mit dem im Rahmen des ersten Verbundprojekts entwickelten Stoffmodell und verwendet primär für die Modellberechnungen des Gebirgsausschnittes der Grube Angersdorf das Finite - Element Programmsystem ADINA. Im Berichtszeitraum setzte der Zuwendungsempfänger die Erstellung des detaillierten Ergebnisberichtes zu seinem Teilprojekt, den Vergleich der Simulationsergebnisse der Projektpartner und die Erstellung des gemeinsamen Syntheseberichtes fort.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das BMBF-Verbundprojekt endete am 31.07.2010.

Inhaltlich wird der Stoffgesetzvergleich ab dem 01. Oktober 2010 im Rahmen des BMWi-Verbundprojektes „Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz“ weitergeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum Stoffgesetz und zum Vorgänger-Verbundprojekt:

Pudewills, A. (2007): BMBF-Verbundprojekt Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen, Wissenschaftliche Berichte, FZKA-7314, Juni 2007.

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.

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.

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 C 1607</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 31.07.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.07.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 132.635,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Rokahr	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel (FKZ 02C1577), IfG Leipzig (02C1587), FZ Karlsruhe (02C1597), Universität Hannover (02C1607) und TU Clausthal (02C1617) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertage-Einlagerung von gefährlichen Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern.

Dieses Folgevorhaben setzt inhaltlich das Verbundprojekt "Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen" (Laufzeit: 01.04.2004 bis 30.11.2006) fort. Im Folgevorhaben führt jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem 3D-Benchmark-Modellberechnungen zur Spannungs-, Verformungs-, Dilatanz- und Schädigungsentwicklung in einem realen Untertagebauwerk im Steinsalz durch. Dabei wird auch die Permeabilitätsentwicklung in der Auflockerungszone einbezogen sowie eine Langzeitextrapolation des mechanischen Verhaltens vorgenommen. Das Projekt dient einer realitätsnäheren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf deren Einsatz bei der praktischen Anwendung der Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Start-Workshop der Projektpartner
- AP2: Planung und Durchführung des untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der Laboruntersuchungen
- AP3: Vorbereitung der Modellrechnungen einschließlich der Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter
- AP4: 3D-Modellberechnungen eines untertägigen Grubenausschnitts mit FEM / FDM
- AP5: Erstellung von Ergebnisberichten durch die Projektpartner
- AP6: Vergleich der Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen, Ausarbeitung von Empfehlungen
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner
- AP8: Durchführung eines öffentlichen Ergebnis-Workshops
- AP9: Schriftliche Dokumentation der Ergebnisse (Abschlussbericht und Veröffentlichung)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger hat im aktuellen Berichtszeitraum im Rahmen des AP5 den Einzelbericht des Teilprojektes 4 erstellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das BMBF-Verbundprojekt endete am 31.07.2010.

Inhaltlich wird der Stoffgesetzvergleich ab dem 01. Oktober 2010 im Rahmen des BMWi-Verbundprojektes „Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz“ weitergeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Aktuelle Literatur zum IUB-MDCF Stoffgesetz und zum Vorgängerprojekt:

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. \*)

\*) In: K.-H. Lux, W. Minkley, M. Wallner & H.R. Hardy, Jr. (Hrsg.): Basic and Applied Salt Mechanics; Proc. of the Sixth Conf. on the Mechanical Behavior of Salt (Saltmech 6), Hannover, Mai 2007, Taylor & Francis (A.A. Balkema Publ.), Lisse.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1617</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 31.07.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.07.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 187.145,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel (FKZ 02C1577), IfG Leipzig (02C1587), FZ Karlsruhe (02C1597), Universität Hannover (02C1607) und TU Clausthal (02C1617) hat das Ziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren und dauerhaften Untertageeinlagerung von gefährlichen Abfällen in Steinsalzformationen zu verbessern.

Dieses Verbundvorhaben schließt sich inhaltlich an das BMBF-Verbundvorhaben „Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen“ an. Auch in diesem Folgevorhaben sollen in enger Kooperation mit den Projektpartnern Erfahrungen auf dem Gebiet der Salzmechanik ausgetauscht werden. Anhand von 3D-Benchmark-Modellberechnungen untersucht jeder Partner mit seinem Stoffgesetz und Programmsystem die Phänomene Kriechen, Dilatanz, Schädigung, Bruch, Nachbruchverhalten und Permeabilitätsentwicklung in einem realen Untertagebauwerk im Steinsalz und führt eine Langzeitextrapolation des mechanischen Verhaltens durch. Das Projekt dient einer realistischeren Einschätzung der Stoffgesetzfähigkeiten im Hinblick auf ihren Einsatz bei der praktischen Anwendung zur Berechnung und Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagegedeponien im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Start-Workshop
- AP2: Planung und Durchführung des untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der Laboruntersuchungen
- AP3: Vorbereitung der Modellrechnungen einschließlich Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter
- AP4: 3D-Modellrechnungen mit FEM / FDM
- AP5: Erstellung von Einzelberichten durch die Projektpartner
- AP6: Vergleich der Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen, Ausarbeitung von Empfehlungen
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner
- AP8: Durchführung eines Ergebnis-Workshops
- AP9: Schriftliche Dokumentation der Projekt-Ergebnisse

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

- AP1: Der Start-Workshop wurde im August 2007 durchgeführt.
- AP2: Die beim Projektpartner TUC geplanten laborativen Untersuchungen sind abgeschlossen.
- AP3: Sowohl die Modelldiskretisierung als auch die Bestimmung der Stoffmodellkennwerte sind abgeschlossen.
- AP4: Die 3D-Modellrechnung des Grubenausschnittes Angersdorf wurde unter Verwendung einer neuen Programmversion durchgeführt und abgeschlossen.
- AP5: Die Erstellung des Einzelberichts ist im vorliegenden Berichtszeitraum abgeschlossen worden und liegt in der Entwurfsfassung zur Einreichung vor.
- AP6: Die Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen wurden verglichen und Empfehlungen erarbeitet.
- AP7: In den Berichtszeitraum fand kein weiterer Workshop statt.
- AP8: Der Ergebnisworkshop wurde am 09. Juni 2010 an der TU Clausthal durchgeführt.
- AP9: Die Ergebnisse des Verbundvorhabens wurden im Rahmen des 44th US Rock Mechanics Symposium (27.-30. Juni 2010) veröffentlicht.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Das Vorhaben wurde zum 31.07.2010 abgeschlossen.

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

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>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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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:

Weiterführung der Arbeiten an Skripten zur Eingabeüberprüfung in THEREDA; Umsetzung von Datenbank-Änderungen gemäß Beschlüssen des Verbunds

Schnittstellen:

- Fertigstellung eines Pflichtenheftes als Grundlage für eine web-basierte Bedienoberfläche für THEREDA (Fremdauftrag in 2011)
- Modifikation an der provisorischen Excel-Eingabeoberfläche

Datenerfassung:

- Weitere Auswertung von Literatur: u. a. Identifizierung relevanter Festphasen von Calcium- und Magnesiumphosphaten für die Planung von Löslichkeitsversuchen
- Weiterführung von isopiesticen Versuchen, insbesondere für Systeme mit den Spezies  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$  und  $\text{HPO}_4^{2-}$
- Vorbereitung der Daten für Zn, Pb, Cd

Datenbewertung: -

Qualitätsmanagement: -

Dokumentation: -

- Erstellung von Technical Papers: Debye-Hückel-Parameter, Wasserdampfdruck, und Dielektrizitätskonstante, Technische Dokumentation der Datenbank (fortlaufende Aktualisierung)

Thermodynamische Datenbasis für Phosphat:

- Durchführung isopiesticer Messungen in den folgenden Systemen:  $\text{K}_2\text{HPO}_4\text{-KCl-H}_2\text{O}$ ,  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-K}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{HPO}_4\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{HPO}_4\text{-Na}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{HPO}_4\text{-K}_2\text{HPO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-K}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-K}_2\text{HPO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{NaH}_2\text{PO}_4\text{-Na}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{NaH}_2\text{PO}_4\text{-Na}_2\text{HPO}_4\text{-H}_2\text{O}$  und  $\text{KH}_2\text{PO}_4\text{-NaCl-H}_2\text{O}$
- Literatúrauswertung zu den Mg- und Ca-Phosphaten

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Projektmanagement:

- Koordination des Gesamtvorhabens

Datenbank:

- Korrekturen und Anpassung gemäß Beschlüssen des Verbunds (insbesondere im Vorfeld der Programmierarbeiten für die Bedienoberfläche), Verknüpfung von RES<sup>3</sup>T- und THEREDA-Daten
- Fortführung der Arbeiten an Skripten für die Durchführung von internen Berechnungen

Datenerfassung und Datenbewertung:

- Zn, Pb, Cd

Thermodynamische Datenbasis für Phosphat:

- Fortsetzung der Literatúrauswertung
- Fortsetzung der isopiesticen Versuche

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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: Die Untersuchungen zur Diffusion von Gasen wurden an einer trockenen Probe mit einer Einbaudichte von  $1.6 \text{ g/cm}^3$  bei einer Einbauhöhe von 15 mm fortgesetzt. Als Gase wurden  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2$  und  $\text{CH}_4$  verwendet. Da sich in den vorherigen Messungen ge-

zeigt hatte, dass die Diffusionsvorgänge unerwartet lange dauerten wurde der Probekörper mit dem Gasgemisch vorgesättigt. Anschließend erfolgte die Einstellung des Konzentrationsgradienten zwischen Ein- und Ausgangsseite. Mit diesem Verfahren konnte eine Diffusion der eingesetzten Messgase festgestellt werden. Die ermittelten Messwerte wiesen relativ große Schwankungsbreiten auf. Diese Messungen befinden sich in der Auswertung. Da die Konzentrationsschwankungen möglicherweise auf eine Änderung des Gasstroms an der Ausgangsseite der Probe bedingt sein können, wird zur besseren Korrelation der Versuche der Gasstrom mittels eines Massenflusskontrollers überprüft. Zudem werden Vorkehrungen zur genaueren Einhaltung der Temperatur der Messapparatur getroffen.

AP2: Die Diffusionsuntersuchung mit den Schadstoffen  $Pb^{2+}$ ,  $Cs^+$  und  $Cd^{2+}$  in NaCl-Lösung wurden weitergeführt.

Die geplante Untersuchung mit Zn wurde wegen eines chemischen Messtechnikproblems mittels des ICP-MS aufgrund der hohen NaCl-Konzentration durch Cs ersetzt.

Bei der Diffusionsuntersuchung nach der klassischen Methode (eine Seite mit null Konzentration, andere Seite mit Schwermetallen) wurde festgestellt, dass die Schwermetalle sehr stark von den Tonmineralen absorbiert werden. Dazu gehören Prozesse wie Sorption/Desorption, Ionenaustausch, chemische Reaktion zur Ausfällung usw. Aus diesem Grund fällt die Versuchsdauer sehr lange aus. Diese Retardationseffekte sind theoretisch für die Ermittlung der Diffusionskoeffizienten nicht relevant. Aufgrund dieser theoretischen Basis wurde eine neue Methode zur Bestimmung von Diffusionskoeffizienten entwickelt, um den Messungsdauer zu verkürzen. Dazu wurde die Probe mit geringerer Schwermetallkonzentration eingesetzt. Danach erfolgten die Messungen zur Bestimmung des Diffusionskoeffizienten mit konstantem Konzentrationsgradienten. Um die neue Methode zu testen, wurden theoretische Analysen und Laboruntersuchungen durchgeführt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Diffusionsmessungen von  $CO_2$ ,  $CH_4$  und  $H_2$  als Gasphase in teilgesättigten Probekörpern.
- Testen der Funktion von Simulationsprogrammen für ungesättigte Materialien
- Modellierung der Untersuchungsergebnisse

AP2:

- Weiterführung der Diffusionsuntersuchungen mit Schwermetallen
- Vergleichsuntersuchung mit dem neuen Verfahren
- Modellrechnung unter Berücksichtigung von hoher Salinität

AP3:

Weiterführung der Literaturstudie über Bentonitbarrieren für UTD.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Xie, M., O. Kolditz, and H. C. Moog (2011), A geochemical transport model for thermo-hydro-chemical (THC) coupled processes with saline water, *Water Resour. Res.*, doi:10.1029/2010WR009270, in press.

M. Xie (2010): New experimental method for ion diffusion parameter determination in compacted bentonite saturated with highly saline, *Int. Symp. Transp. Porous Media*, Aug. 19-20, 2010 PSI, Switzerland.



### **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> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<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: Planung und Beginn eines geophysikalischen Messprogramms; Durchführung einer Studie zum Einsatz der Radarfernerkundung zur Überwachung von geologischen Endlagern.
- Datenfernübertragung: Fortsetzung des Dialogs mit Euratom zum vorgeschlagenen technischen Ansatz in Abstimmung mit den Betreibern und dem BMWi.

- ESARDA: Mitarbeit in den Arbeitsgruppen „Containment and Surveillance“, „Verification Technologies and Methodologies“, „Training and Knowledge Management“ und der „Reflection Group“ sowie Leitung und Mitarbeit in der Arbeitsgruppe „Implementation of Safeguards“; Mitarbeit im Steering Committee und Editorial Committee.
- Safeguardstechniken: Projektleitung bei der Entwicklung des IAEA Next Generation Surveillance System (NGSS) und des Digital Multi-channel Analyzer (DMCA) sowie bei der Machbarkeitsstudie zur Laser-based Breakdown Spectroscopy (LIBS).
- Satellitenfernerkundung: Durchführung einer Studie zur Erkennung von Uranminen; Projektleitung zweier Studien zum Einsatz der Fernerkundung für Safeguardsanwendungen der IAEA.
- 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 IAEA und Euratom; Erstellung der Deklaration für Deutschland nach dem Zusatzprotokoll; Erstellung von Vorlagen zur Einführung von Integrated Safeguards für spezielle Anlagen; Teilnahme an Besprechungen; Kommentierung von Entwürfen/Vorlagen Dritter.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Ausarbeitung und Präsentation von wissenschaftlichen Beiträgen zur spieltheoretischen sowie quantitativen Analyse.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzung bei der DGAP zu den Themen Abrüstung (French View, Global Zero) und Irans Waffentechnologie (21.10.2010).

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Safeguards-Web-Portal: Realisierung des Konzeptvorschlags.
- Geologische Endlagerung: Durchführung eines Messprogramms im Erkundungsbergwerk Gorleben; Fortsetzung der Studie zum Einsatz der Radarfernerkundung zur Überwachung von geologischen Endlagern.
- Datenfernübertragung: Beginn einer Realisierung für State-of-Health-Daten.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Gremien.
- Safeguardstechniken: Projektabschluss für NGSS, Weiterführung von DMCA.
- Satellitenfernerkundung: Projektleitung zweier Studien zum Einsatz der Fernerkundung bei der IAEA.
- 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.
- IAEA-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Ausarbeitung von wissenschaftlichen Beiträgen zur spieltheoretischen sowie quantitativen Analyse für die Jahrestagungen von ESARDA, INMM und ESARDA/INMM.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzungen bei der DGAP.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Brutscher, J., Birnbaum, A., Keubler, J., Jung, S., Koestlbauer, M., Richter, B., Schwalbach, P., and von Zweidorf, A., 'Concept and Development Status of the Digital Upgrade of the Mini Multi-channel Analyser', Proc. IAEA Symposium on International Safeguards, IAEA-CN-184/031.
- Button, P., Niemeyer, I., Okko, O., Paquette, J.-P., Parsons, G., and Tadono, T. (2010) 'Use of SAR Satellite Imagery for Geological Repositories Monitoring, Proc. IAEA Symposium on International Safeguards, IAEA-CN-184/298.
- Niemeyer, I., Richter, B., Dürr, M., and Bosbach, D. (2010) 'The New Safeguards R & D Structure in Germany - Coordinating the German Support Programme to the IAEA', ESARDA Bulletin 45: 8-9.
- Niemeyer, I., Richter, B., and Stein, G. (2010) 'The NPT Review Conference 2010: Perspectives for International Safeguards', Proc. INMM 51<sup>st</sup> Annual Meeting, Baltimore.
- Niemeyer, I., Listner, C., Buchholz, T., Hillmann, M. (2010) 'Monitoring Uranium Mining and Processing Sites: Some Findings from an Airborne Hyperspectral Survey of Uranium Mining Legacies under Rehabilitation', Proc. INMM 51<sup>st</sup> Annual Meeting, Baltimore.
- Remagen, H.H., Niemeyer, I., Richter, B., Dürr, M., Rezniczek, A., and Stein, G. (2010) 'International Safeguards in Germany - Status and Expectations', Proc. IAEA Symposium on International Safeguards, IAEA-CN-184/298.



## **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 9003</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> 01.01.2008 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2010 bis 31.12.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 935.030,00 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 Basis bzw. in Anlehnung an bestehende WTZ-Abkommen, wie z. B. mit Russland, erfolgen.

Das Vorhaben hat die Koordinierung und Intensivierung der Arbeiten deutscher Wissenschaftler in den auf die "alternativen Wirtsgesteine" Ton/Tonstein und Granit ausgerichteten internationalen Forschungsprogrammen zum Ziel.

Die von BMWi geförderten Vorhaben werden ausführlicher in den formalisierten Zwischenberichten in Kapitel 2.1 beschrieben. Die BGR und das FZK/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, FZK/INE, BGR)

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

(Vorhaben 02E9894, 02E10045, 02E10086, 02E10377, 02E10427, 02E10437, 02E10618, FZK/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 Barriere-

ren, 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 FP6 und 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), Tournemire (Modellansatzvalidierung)

- 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  | 38  |
| <b>Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Konrad-Wachsmann-Allee 1, 03046 Cottbus</b> |   |     |
| 02 C 1466   | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrologie und Geochemie des Gesamtsystems   | 138 |
| <b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover</b>     |   |     |
| 02 C 1476   | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 2 (BGR): Geophysikalische Untersuchungen, Seismische Erkundung, Geologisches 3D-Modell, Bohrungen, Server-Datenbank, Koordination des Gesamtvorhabens | 140 |
| 02 E 10910  | Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS   | 134 |
| <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-   | 22  |
| 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)                              | 78  |
| 02 E 10649  | Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)   | 80  |
| 02 E 10729  | Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)   | 96  |
| 02 E 10730  | Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager   | 98  |
| 02 E 10760  | Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsausgabe zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein - Kurztitel: URSEL  | 104 |
| 02 E 10900  | Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS   | 132 |
| <b>DHI-WASY GmbH, Waltersdorfer Str. 105, 12526 Berlin</b>                                      |   |     |
| 02 C 1516   | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung  | 148 |

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

- |            |  |       |
|------------|--|-------|
| 02 C 1577  | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1 | 📖 158 |
| 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)      | 📖 114 |

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

- |            |   |      |
|------------|---|------|
| 02 E 10156 | Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton | 📖 24 |
| 02 E 10528 | Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2                                       | 📖 60 |
| 02 E 10618 | Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden   | 📖 76 |

<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig</b>
---

- |            |  |       |
|------------|--|-------|
| 02 C 1536  | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen  | 📖 152 |
| 02 E 10176 | Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actinidentransports in potentiellen Wirtsgesteinsformationen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementarprozess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport | 📖 28  |
| 02 E 10790 | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  | 📖 110 |

<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) | 📖 108 |
| 02 W 6259  | Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden  | 📖 174 |

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

- |            |   |      |
|------------|---|------|
| 02 E 10316 | Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen              | 📖 40 |
| 02 E 10578 | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP3 - Kurztitel: A-DuR | 📖 70 |

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

- |                   |   |   |
|-------------------|---|---|
| <b>02 C 1628</b>  | Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Phase 2, Kurztitel: WeDa-II  |  168   |
| <b>02 C 1638</b>  | Bentonit als Barrierematerial für den Abschluss von Untertagedepositionen - Abschließende Versuche und eine Zusammenstellung von Wissenschaft und Technik (Kurztitel: Bentonit-Barrieren) |  170   |
| <b>02 E 9894</b>  | Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt   |  14    |
| <b>02 E 9944</b>  | Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2   |  16    |
| <b>02 E 10075</b> | Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90  |  20    |
| <b>02 E 10336</b> | Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d <sup>3</sup> f und r <sup>3</sup> t  |  44    |
| <b>02 E 10367</b> | Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen   |  46    |
| <b>02 E 10377</b> | Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen  |  48    |
| <b>02 E 10518</b> | Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1   |  58  |
| <b>02 E 10538</b> | Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit  |  62  |
| <b>02 E 10548</b> | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern  |  64  |
| <b>02 E 10558</b> | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d <sup>3</sup> f und r <sup>3</sup> t - TP1 - Kurztitel: A-DuR                           |  66  |
| <b>02 E 10608</b> | Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa  |  74  |
| <b>02 E 10669</b> | Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2  |  84  |
| <b>02 E 10689</b> | Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS  |  88  |
| <b>02 E 10719</b> | Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)   |  94  |
| <b>02 E 10740</b> | Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrusversatz in einem HAW-Endlager  |  100 |

02 E 10750 Verbundprojekt: Untersuchungen zur Robustheit der Sicherheitsaus-  
sage zu HAW-Endlagersystemen in magmatischen Wirtsgestein -  
Kurztitel: URSEL  102

02 E 10770 Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungspro-  
dukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückho-  
lung (VESPA)  106

02 E 10890 Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz - VIRTUS  130

**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  72

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

02 E 10447 Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilität  56

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

02 C 1587 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehenswei-  
sen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Lang-  
zeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorha-  
ben 2  160

02 E 10659 Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Ver-  
schlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und  
zum Gebirge  82

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)  118

**IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur- Hydro- und Umwelttech-  
nologie mbH, Dr.-Kurt-Schumacher-Str. 23, 39576 Stendal**

02 C 1506 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke  
und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung,  
Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie  146

**Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik, Stilleweg 2, 30655 Hannover**

02 C 1546 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke  
und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 9 (GGA-S1): Deck-  
gebirgseigenschaften über einem bergbaubedingt destabilisiertem Un-  
tergrund, abgeleitet aus seismischen Beobachtungen  154

02 C 1556 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke  
und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Iso-  
topenhydrologische Untersuchungen  156

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

02 C 1526 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität  150

02 E 10166 Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein  26

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

02 E 10326 Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme  $d^3f$  und  $r^3t$  - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen  42

02 E 10568 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit  $d^3f$  und  $r^3t$  - TP2 - Kurztitel: A-DuR  68

**K-UTEC AG Salt Technologies, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen**

02 C 1496 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTEC): Grundlagen für Geomodellierung  144

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

02 C 1607 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4  164

02 E 10850 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV4: LUH-IUB)  122

**Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Straße 173, 79100 Freiburg**

02 E 10870 Instrumente, Bedarf und Potentiale für Wissensmanagement in der Endlagerforschung  126

**Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Wasser-technologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen**

KWA 9003 Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine  178

**Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstraße 150, 44801 Bochum**

02 E 10437 Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen  54

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

- |            |  |       |
|------------|--|-------|
| 02 C 1597  | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3   | 📖 162 |
| 02 E 10206 | Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere  | 📖 34  |
| 02 E 10679 | Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2   | 📖 86  |
| 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 | 📖 90  |
| 02 E 10800 | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld eines Endlagers und Möglichkeiten ihrer Rückholung (VESPA)  | 📖 112 |
| 02 E 10840 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV3: KIT-INE)   | 📖 120 |

<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 | 📖 92  |
| 02 E 10880 | Zusammenhang von Chemismus und mechanischen Eigenschaften des MgO-Baustoffs  | 📖 128 |

<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) | 📖 124 |
|------------|---|-------|

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

- |           |  |       |
|-----------|--|-------|
| 02 C 1486 | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung   | 📖 142 |
| 02 C 1617 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5 | 📖 166 |

02 E 10427 Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC  52

02 E 10820 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermo-mechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz (TV5: TUC)  116

**Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt**

02 E 10015 Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockerungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein  18

**Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden**

02 E 10417 Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer  50

**Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München**

02 E 10186 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien  30

**Universität des Saarlandes, Campus Saarbrücken, 66123 Saarbrücken**

02 E 10196 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen  32

**Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam**

02 E 10216 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen  36