

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

**PTE Nr. 39**

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

Berichtszeitraum: 1. Januar - 30. Juni 2010

Projektträger Karlsruhe  
Wassertechnologie und Entsorgung  
(PTKA-WTE)

**August 2010**

## **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

[http://www.fzk.de/fzk/idcplg?IdcService=FZK&node=1152&document=ID\\_067865](http://www.fzk.de/fzk/idcplg?IdcService=FZK&node=1152&document=ID_067865)

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.....	123
2.3	W-VORHABEN.....	163
2.4	BMWl-HAUSVORHABEN.....	167
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....</b>	<b>171</b>

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



# 1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

## 1.1 Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche

<b>02 C 1204</b>	Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leicht löslichen Salzgestein (Carnallit); Teil 2: Erprobung von Funktionselementen in situ	<b>GTS Grube Teutschenthal Sicherungs GmbH &amp; Co. KG</b>	📖 124
<b>02 C 1335</b>	Qualifizierung von Strömungsbarrieren in Salzformationen, Phase 1 bis Phase 4	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 126
<b>02 E 10045</b>	Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 20
<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>	📖 26
<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>	📖 28
<b>02 E 10669</b>	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 104
<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>	📖 106
<b>02 E 10689</b>	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 108
<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>	📖 110

- |                   |  |   |       |
|-------------------|--|---|-------|
| <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<br/>Freiberg</b>   | 📖 112 |
| <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>  | 📖 114 |
| <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>   | 📖 116 |
| <b>KWA 9003</b>   | Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine   | <b>Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Wasser-technologie und Entsorgung (PTKA-WTE)</b> | 📖 168 |



## 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>   | 📖 148 |
| <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>  | 📖 150 |
| <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> | 📖 152 |
| <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>  | 📖 154 |
| <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>  | 📖 156 |
| <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>                                       | 📖 158 |
| <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>                                       | 📖 160 |

<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 Auflockungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein	<b>Technische Universität Darmstadt</b>	📖 18
<b>02 E 10055</b>	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 22
<b>02 E 10065</b>	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 24
<b>02 E 10116</b>	Barriereintegrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs in Tonformationen (BET)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 30
<b>02 E 10156</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 32
<b>02 E 10166</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein	<b>Johannes Gutenberg-Universität Mainz</b>	📖 34
<b>02 E 10176</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actinidentransports in potenziellen Wirtsgesteinsformationen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementarprozess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung</b>	📖 36
<b>02 E 10186</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien	<b>Technische Universität München</b>	📖 38
<b>02 E 10196</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen	<b>Universität des Saarlandes, Saarbrücken</b>	📖 40
<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>	📖 42


<b>02 E 10216</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid-Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen	<b>Universität Potsdam</b>	📖 44
<b>02 E 10276</b>	Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 46
<b>02 E 10296</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Visualisierung und Datenanalyse	<b>Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn</b>	📖 48
<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>	📖 50
<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>	📖 52
<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>	📖 54
<b>02 E 10336</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 56
<b>02 E 10357</b>	Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern	<b>Forschungszentrum Jülich GmbH</b>	📖 58
<b>02 E 10367</b>	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 60
<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>	📖 62
<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>	📖 64
<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>	📖 66
<b>02 E 10437</b>	Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen	<b>Ruhr-Universität Bochum</b>	📖 68

02 E 10447	Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung	<b>IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack &amp; Partner, Freiberg</b>	📖 70
02 E 10457	Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag	<b>TU Bergakademie Freiberg</b>	📖 72
02 E 10467	Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT	<b>Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec), Garching</b>	📖 74
02 E 10518	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 76
02 E 10528	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 78
02 E 10538	Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 80
02 E 10548	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 82
02 E 10558	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>	📖 84
02 E 10568	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>	📖 86
02 E 10578	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>	📖 88
02 E 10588	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>	📖 90
02 E 10608	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 92
02 E 10618	Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 94
02 E 10628	Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case	<b>Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Freiburg</b>	📖 96

<b>02 E 10639</b>	Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 98
<b>02 E 10649</b>	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 100
<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>	📖 102
<b>02 E 10730</b>	Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 118
<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>	📖 120



### 1.3 Kernmaterialüberwachung



**02 W 6259** Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden **Forschungszentrum Jülich GmbH**  164





#### 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>  | 📖 128 |
| <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>  | 📖 130 |
| <b>02 C 1486</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung  | <b>Technische Universität Clausthal</b>   | 📖 132 |
| <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>  | 📖 134 |
| <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>                | 📖 136 |
| <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>  | 📖 138 |
| <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>   | 📖 140 |
| <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> | 📖 142 |

- 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**  144
- 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**  146

## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 E-Vorhaben**

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9894</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor - Hauptprojekt		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2004 bis 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.574.783,00 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:

Nach dem ersten Gasaustritt beim Technikumsversuch 2 war aufgrund des relativ geringen Gasflusses und des noch deutlichen Wasseraustrags aus dem Dichtelement die Bestimmung der Gasfließrate gestört. Seit März 2010 ist ein kontinuierlicher Gasfluss feststellbar, der mit Massensensorsensoren gemessen werden kann. Insgesamt ist ein stetiger Anstieg der Gasfließrate festzustellen. Unter Berücksichtigung der zuletzt ermittelten Gasfließrate errechnet sich die Permeabilität zu ca.  $3E-17 \text{ m}^2$  und entspricht damit ziemlich genau dem Erwartungswert. Da noch keine konstante Gasfließrate vorliegt, handelt es sich bei dem obigen Wert um eine Abschätzung. Während der bisherigen Gasinjektion wurden 7.1 l Wasser aus dem Dichtelement verdrängt. Die Quelldrücke unterhalb des Packer liegen bei 0.32 bzw. 0.37 MPa und sind somit leicht angestiegen.

Bei den In-situ-Untersuchungen an den Bohrungen BSB1, BSB2, BSB13 und BSB15 konnten bzgl. der Druckverläufe keine signifikanten Änderungen beobachtet werden.

Bei der Überprüfung der Austrittsseite des Dichtelements der Bohrung BSB2 auf mögliche Verstopfungen der Kapillarleitungen wurde eine geringe Flüssigkeitsmenge festgestellt. Aufgrund dieser Beobachtung wurde nach einer Wartezeit von ca. 4 Monaten erneut eine Probe der Flüssigkeit aus der Filterfritte entnommen und chemisch analysiert. Ein Vergleich mit der Zusammensetzung der injizierten Pearson-Lösung ergab, dass die entnommene Probe deutlich an  $\text{Ca}^{2+}$  zugenommen und an  $\text{Na}^+$  abgenommen hat. Da es sich bei der Tonkomponente des verwendeten SB-Materials um Calciumbentonit (Calcigel) handelt, kann davon ausgegangen werden, dass die injizierte Lösung durch das SB-Material der Dichtung gedrungen ist und dass ein Austausch der Calciumionen aus der Bentonitkomponente durch die Natriumionen der Lösung stattgefunden hat. Zur Bestätigung dieser Beobachtung soll Ende August 2010 erneut eine Beprobung und eine chemische Analyse erfolgen. Um danach schneller zu messbaren Wasserflüssen an der Ausgangsseite zu kommen, ist es vorgesehen, die Kapillarleitungen aufzufüllen, um so einen vom Gasvolumen weitestgehend ungestörten Wasserfluss zu ermöglichen.

Da sich die Versuche als deutlich langwieriger erwiesen haben als erwartet und die Technikumsuntersuchungen und In-situ-Messungen, besonders bei der Bohrung BSB2, vielversprechende Ergebnisse erwarten lassen, wurde eine Verlängerung des Vorhabens bis Ende 2011 vereinbart.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des Technikumsversuchs mit Bestimmung der verbleibenden Gaspermeabilität; Ausbau des Dichtmaterials für Nachuntersuchungen
- Weiterführung der Aufsättigung der In-situ-Versuche und Ermittlung der Wasserpermeabilität sowie der Gaseintrittsdrücke mit verbleibender Gaspermeabilität, speziell bei BSB2
- Nachuntersuchung der erreichten Sättigung

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Rothfuchs, T., Miehe, R. (2010): Eignungsuntersuchung von Bentonit/Sand-Gemischen als Verschlussmaterial im Tonendlager. - Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen. PTKA-WTE, 9. Projektstatusgespräch, Karlsruhe 15.-16. Juni 2010 (im Druck).

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 2008 erfolgreich abgeschlossen. Wassergehaltsbestimmungen an Proben aus dem Prototype Repository können erst nach Aufwältigung der Sektion II erfolgen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung der In-situ-Messungen

AP2: Wassergehaltsbestimmungen an Proben aus dem Versuchsfeld (ab 2011)

### 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 31.10.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 der Diffusionsuntersuchungen zur Quantifizierung des Anteils der Fickschen Diffusion und der Knudsendiffusion bei diffusivem Stofftransport mittels Experimenten an einer Wicke-Kallenbach-Apparatur.
- Fortführung 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.
- Beendigung des Versuchs mit einer Probe aus Tournemire, die seit ihrer Erbohrung vor ca. 3 Jahren unter einem Druck von 20 bar gelagert wurde. Ein Flüssigkeitsdurchbruch erfolgte erst bei einem Probeneintrittsdruck von 35 bar. Eine Dichtheit durch Erhöhung des Überlagerungsdruckes war nicht wieder zu erreichen. Der Ausbau der Probe zeigte, dass die Durchlässigkeit durch einen einzigen Längsriss bestimmt wurde, wobei die Quellfähigkeit des Tones nicht ausreichte diesen wieder zu verschließen. Der rissfreie Tonstein ist praktisch undurchlässig.
- Durchströmung von 3 Proben mit Zementwasser eines pH-Werts von ca. 13. Bisher ist kein signifikanter Unterschied zur Durchströmung mit Formationswasser zu erkennen. Die pH-Wert Messungen am Probenaustritt zeigten bisher nur einen leichten Anstieg von 7 auf max. 9.
- Versuchsbeginn mit einer Probe aus Mont Terri, die aus einer Tiefe von 6,5 m erbohrt wurde und die seit ihrer Erbohrung vor ca. 3,5 Jahren unter einem Druck von 30 bar gelagert wurde. Bei einem Überlagerungsdruck 2 MPa und Probeneintrittsdrücken von 4 bis 6,5 bar ist die Probe praktisch undurchlässig.
- Detailauswertung der Versuche und Beginn mit der Erstellung des Abschlussberichts.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Beendigung der noch laufenden Untersuchungen zum Gasdurchbruch nach Probenaufsättigung und Wiederbeaufschlagung mit Gas.
- Beendigung der stationären und instationären Permeabilitätsversuche sowie der Diffusionsversuche.
- Beendigung der Durchströmversuche mit alkalischem Permeat.
- Fortführung der Detailauswertung und abschließende Auswertung und Bewertung der Ergebnisse.
- Fertigstellung des Abschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10045</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2005 bis 30.09.2010		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 828.660,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Zhang	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zur Vorbereitung der Errichtung eines Endlagers für radioaktive Abfälle in einer Tonsteinformation hat die französische Endlagerorganisation ANDRA im Sommer 2000 mit der Errichtung eines Untertagelabors in der Callovo-Oxfordian Tonsteinformation am Standort Meuse/Haute Marne im Pariser Becken begonnen. In diesem Untertagelabor wird seit Ende 2004 ein Forschungsprogramm durchgeführt, um Kenntnisse über die Tonsteinformation zu gewinnen und ihre Eignung als Wirtsgestein für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle nachzuweisen. Eine vorläufige Standortbewertung muss dem französischen Parlament bereits im Jahr 2006 vorgelegt werden.

Im Rahmen eines Kooperationsvertrages zwischen ANDRA/CEA und BMWi besteht die Möglichkeit, sich an diesem Forschungsprogramm zu beteiligen und eigenes Know-how zur Endlagerung gefährlicher Abfallstoffe in geologischen Tonformationen aufzubauen. Das Ziel der Beteiligung besteht in der Vertiefung des Verständnisses gekoppelter THM-Prozesse im konsolidierten Tonstein und der Verifizierung entsprechender konstitutiver Modelle. Hierzu werden numerische Simulationen von In-situ-Experimenten und Laboruntersuchungen zur Bereitstellung der in den Modellen verwendeten Materialparameter durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: *Modellierung*: Zum besseren Verständnis der gekoppelten THM-Prozesse sowie zur Verifizierung der aktuell eingesetzten konstitutiven Modelle sind numerische Simulationen der Experimente REP und TER vorgesehen.

AP2: *Laboruntersuchungen*: Sie dienen der Charakterisierung des Tongesteins und der Ermittlung der in den konstitutiven Modellen verwendeten Materialparameter, mit deren Hilfe die *in situ* durchgeführten Experimente und Messungen verifiziert bzw. interpretiert werden. Folgende Untersuchungen sind vorgesehen: Ein- und dreiaxiale Kriechversuche, Quelldruckbestimmungen, Schädigungs- und Verheilungsverhalten, Fluidausbreitung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### *Laboruntersuchungen:*

Die langzeitigen Kriechversuche an 5 Tonproben wurden bei unterschiedlichen Belastungen von 1 bis 13 MPa über 3,3 Jahre und anschließend nach Entlastung auf 10 und 7 MPa über 1 Jahr weitergeführt. Unter jeder Belastungsstufe wurden deutliche zeitabhängige Deformationen beobachtet. Die anderen Laborversuche zur Quellung, Schädigung, Rekompaktion und Simulation der ALZ-Entwicklung in gelochten Großtonkernen sind abgeschlossen. Damit ist das Laborprogramm erfolgreich beendet. Die Ergebnisse werden in zwei Zwischenberichten und einem Abschlussbericht des Projekts im nächsten Halbjahr zusammengestellt.

#### *Modellrechnungen:*

Benchmark-Modellierung: Im Rahmen des TIMODAZ-Projektes wurde die Benchmark-Modellierung zur Simulation der Laborversuche an den gelochten Großtonkernen zur Untersuchung der ALZ-Entwicklung/-Verheilung und der thermischen Auswirkungen durchgeführt. Die Modellergebnisse wurden mit den Labordaten verglichen. Daraus sind einige Defizite der Modellrechnungen festgestellt worden, wie z. B. die durch Schädigung und Rekompaktion induzierten Permeabilitätsänderungen können mit den verwendeten Stoffmodellen nicht in angemessener Form wiedergegeben werden. So besteht dringender Bedarf zur Verbesserung bzw. Weiterentwicklung adäquater Stoffmodelle zur Beschreibung von Schädigung und Verheilung von Tonstein.

Bislang sind die geplanten Laboruntersuchungen und Modellrechnungen erfolgreich durchgeführt worden. Die Hauptergebnisse wurden beim International Clay Meetings in Nantes im März 2010, ANDRA-Seminar in Bure im Mai 2010 und TIMODAZ-Projekttreffen in Baden im June 2010 präsentiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Erstellung der Zwischenberichte zum Beitrag zu den TIMODAZ-WP3.1 (Labortests), WP3.3 (ALZ-Simulationstests) und WP5.2 (Benchmark-Modellierung)
- Erstellung des Abschlussberichtes

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang C.-L., Wieczorek, K., Xie M.-L.: Swelling Experiments on Mudrocks, Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 2010, 2 (1): 41–47

Zhang, C.-L.: Experimental Evidence for Self-Sealing of Fractures in Claystone. The 4th International Meeting on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Nantes, 2010.

Zhang, C.-L.: Deformation, Swelling and Self-Sealing of the Callovo-Oxfordian Claystone. ANDRA-Seminar at the MHM-URL, 18-19 May 2010.

Zhang, C.-L.: Experimental Study of the THM Behaviour of the COX Argillite, TIMODAZ-Deliverable5, 2010

Zhang, C.-L.: Laboratory EDZ-Simulation Tests on Large Hollow Cylinders of the COX Argillite, TIMODAZ- Deliverable7, 2010

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10055</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL		
<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 31.03.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 31.03.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 779.960,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Wolf	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Die gemeinsame Bearbeitung durch BGR, GRS und DBE Technology soll eine ausgewogene und vollständige Betrachtung aller Instrumentarien gewährleisten. Sofern erforderlich, sollen zu Einzelfragen weitere Forschungseinrichtungen hinzugezogen werden.

In der zweiten Phase des Projekts wird der vorliegende Entwurf eines FEP-Katalogs von externen Reviewern begutachtet. Auf Basis der Begutachtung wird der FEP-Katalog überarbeitet. Die in der ersten Phase vorgeschlagene Vorgehensweise für die Szenarientwicklung soll überarbeitet und abgestimmt werden. In weiteren Arbeitspaketen werden Detailfragen bearbeitet, die in der ersten Phase nicht angesprochen wurden, deren Bearbeitung sich aber als wichtig herausgestellt hat.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das hier berichtete Untersuchungsprogramm bezieht sich auf die 2. Phase des ISIBEL-Projekts, die von Januar 2008 bis März 2010 läuft und neue Arbeitspakete umfasst.

AP1: Überarbeitung des FEP-Katalogs

AP2: Szenarientwicklung

AP3: *Definition und Bewertung des Isolationszustands „Sicherer Einschluss“*

AP4: *Behandlung von Unsicherheiten*

AP5: *Vorgehensweise bei einem Safety-Case-Konzept für ein HAW-Endlager im Salinar*

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

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

Gespräche: Arbeitstreffen am 07.01., 25.01., 26.01., 03.02. bis 05.02., 18.02., 23.02. und 10.03.2010

AP1: Ein projektinternes Seminar zur Erstellung der neuen Version des FEP-Kataloges fand vom 03.-05. Februar in Hasselfelde im Harz statt. Danach erfolgte die abschließende Überarbeitung der FEP-Datenbank und des Abschlussberichtes zu AP1. Der vorläufige Abschlussbericht wurde an den Projektträger geschickt.

AP2: Abschließende Diskussion und Fertigstellung des Berichtes zu AP2. Der vorläufige Abschlussbericht wurde an den Projektträger geschickt.

AP3: Abschließende Diskussion und Fertigstellung des Berichtes zu AP3. Der vorläufige Abschlussbericht wurde an den Projektträger geschickt.

AP4: Abschließende Diskussion und Fertigstellung des Berichtes zu AP4. Der vorläufige Abschlussbericht wurde an den Projektträger geschickt.

AP5: Der Abschlussbericht wurde noch nicht fertig gestellt (siehe Begründung unter 8.).

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: Die Arbeiten zu AP1 sind abgeschlossen.

AP2: Die Arbeiten zu AP2 sind abgeschlossen.

AP3: Die Arbeiten zu AP3 sind abgeschlossen.

AP4: Die Arbeiten zu AP4 sind abgeschlossen.

AP5: Fertigstellung des Berichts zu AP5 (siehe Begründung unter 8.).

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

Die vorläufigen Abschlussberichte zu AP1, AP2, AP3 und AP4 wurden fertig gestellt und an den Projektträger geschickt.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10065</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW – Kurztitel: ISIBEL		
<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 31.03.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 31.03.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.012.476,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Krone	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Aufbauend auf dem erreichten Stand von Wissenschaft und Technik liegt das wesentliche Ziel des Vorhabens in der Vollständigkeit des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW.

Die Phase II des FuE-Vorhabens ISIBEL knüpft unmittelbar an die Ergebnisse der Phase I des FuE-Vorhabens ISIBEL an und ist darauf gerichtet, wesentliche dort identifizierte Defizite bezüglich der Umsetzung des Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Salz zu beseitigen. Damit können wesentliche noch fehlende, methodische und wissenschaftlich-technische Grundlagen zur Verfügung gestellt werden, die für die Aufstellung eines Safety Case eingesetzt werden können.

Die zur Erreichung dieses Zieles notwendigen Schritte bzw. Teilziele, werden im Arbeitsprogramm systematisch abgebildet. Ziel des AP1 ist die Überarbeitung des im Rahmen der Phase I von ISIBEL entwickelten Entwurfes des FEP-Kataloges im Hinblick auf seine Transparenz und Nachvollziehbarkeit durch Einbindung eines externen Expertenreviews.

Dieser FEP-Katalog bildet die Grundlage für eine erstmals durchzuführende vollständige Szenarientwicklung im AP2, um die zukünftigen Entwicklungen eines HAW-Endlagers im Salinar im Nachweiszeitraum von 1 Mio. Jahren zu beschreiben.

Ein wesentliches Element des zugehörigen Sicherheitskonzeptes ist der Isolationszustand des sicheren Einschlusses, der Gegenstand der Arbeiten im AP3 ist, mit dem Ziel, hierzu eine fundierte Definition und geeignete quantifizierbare Indikatoren abzuleiten.

Ziel des AP4 ist es, für das im FuE-Vorhaben ISIBEL entwickelte Nachweiskonzept eine Analyse zu erwartender Ungewissheiten durchzuführen, Vorschläge für deren Behandlung zu erarbeiten bzw. zu überprüfen, inwieweit das Instrumentarium dafür zur Verfügung steht oder noch entwickelt werden muss. Im abschließenden AP5 soll aufbauend auf den Ergebnissen des FuE-Vorhabens ISIBEL und der vorangegangenen Arbeitspakete sowie unter Berücksichtigung internationaler Erfahrungen ein Vorschlag für die Struktur und die Inhalte eines Safety Case für ein HAW-Endlager im Salzgestein erarbeitet werden.

Obwohl die Arbeiten an Hand von möglichst konkreten geologischen und technischen Daten durchgeführt werden sollen, hat dieses FuE-Vorhaben die Intention, generell für ein technisch realisierbares Endlagerkonzept ein schlüssiges, nachvollziehbares und möglichst lückenloses Sicherheitsnachweiskonzept und somit die methodischen Grundlagen für einen Safety Case zu schaffen. Es ist weder Ziel des Vorhabens, Endlager auszulegen und hierzu den Sicherheitsnachweis im Hinblick auf eine Genehmigungsreife oder eine Standorteignungsaussage zu führen noch einen Safety Case zu erarbeiten. Es ist ebenso nicht vorgesehen, Einzelnachweise zu führen.

Das Vorhaben wird arbeitsteilig mit der BGR Hannover und der GRS Braunschweig abgewickelt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Überarbeitung des FEP-Katalogs - DBE Technology GmbH
- AP2: Szenarienentwicklung - BGR
- AP3: Definition und Bewertung des Isolationszustandes "Sicherer Einschluss" - GRS
- AP4: Behandlung von Unsicherheiten - GRS
- AP5: Vorgehensweise bei einem Safety-Case-Konzept für ein HAW-Endlager im Salinar - GRS

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wird zu den AP's berichtet, für die DBE TECHNOLOGY GmbH verantwortlich ist.

AP1: Überarbeitung des FEP-Katalog.

AP1.1: Erstellung und Pflege einer Datenbank.

Aus der Abschlussdiskussion zum FEP-Katalog auf einem Workshop in Hasselfelde (3.-5.2.10) ergaben sich einerseits inhaltliche Änderungen der Datensätze der Datenbank und andererseits Vorschläge zur Optimierung der Eingabemasken, der Datenbankfunktionen und des Ausdrucks der Datenbank. Diese Vorschläge wurden in die Datenbank übernommen und die überarbeitete Version zur Erstellung der Endversion des FEP-Katalogs genutzt. Die fortentwickelte Datenbank kann somit eine Grundlage für zukünftige Langzeitsicherheitsanalysen für Endlager im Salz bilden.

AP1.2: Review und Revision des FEP-Katalog.

Der FEP-Katalog wurde unter Berücksichtigung der Anmerkungen, Fragen und Kommentare des Review-Teams überarbeitet. Weitere Hinweise zu Überarbeitungen des FEP-Katalogs ergaben sich aus Diskussionen zu den FEP-Beschreibungen im Zuge der Entwicklung des Referenzszenarios. Vom 03. bis 05. Februar wurden alle Überarbeitungen des FEP-Katalogs auf einem Workshop in Hasselfelde diskutiert. Aufgrund der Ergebnisse dieses Workshops fand eine abschließende Überarbeitung des FEP-Katalogs statt. Der Umgang mit den Anmerkungen des Review-Teams sowie die weiteren Änderungen im FEP-Katalog wurden in einem Revisionsbericht dokumentiert.

Der fertig gestellte FEP-Katalog und der Revisionsbericht wurden dem Projektträger zur Prüfung vorgelegt.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

Der FEP-Katalog wird eine Grundlage für die vorläufige Sicherheitsanalyse Gorleben bilden. Noch offene Fragestellungen des Projektes ISIBEL werden im Projekt KOMTESSA untersucht.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Auf der KTG-Tagung 2010 im Mai in Berlin wurden in den folgenden beiden Vorträgen die Ergebnisse des Projektes ISIBEL vorgestellt:

- J. Krone, D. Buhmann, J. Hammer, S. Keller, A. Lommerzheim, J. Mönig, S. Mrugalla, J. R. Weber & J. Wolf: Weiterentwicklung des Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Salzgestein
- Lommerzheim, D. Buhmann, S. Keller, J. Krone, J. Mönig, S. Mrugalla, J. R. Weber & J. Wolf: Erstellung eines FEP-Katalogs für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente im Salinar am Beispiel des Salzstocks Gorleben

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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:

In folgenden Systemen wurden Messungen durchgeführt: Fe(II)-Na-Cl-H<sub>2</sub>O, Fe(II)-K-Cl-H<sub>2</sub>O, Fe(II)-Mg-Cl-H<sub>2</sub>O, Fe(II)-Ca-Cl-H<sub>2</sub>O.

Literaturstudie:

Keine Aktivitäten im Berichtszeitraum.

Löslichkeitsversuche:

Für das quaternäre System Fe(II)-K-Cl-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O wurden die Löslichkeitsversuche mit 0,5 mol/kg, 0,75 mol/kg und 1,0 mol/kg Fe(II)SO<sub>4</sub> fortgesetzt (Gleichgewichtsphasen jeweils Sylvin und Arcanit).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Dampfdruckmessungen:

Durchführung weiterer Maßnahmen zur Verhinderung der Oxidation der Lösungen.

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

Literaturstudie:

Weitere Auswertung der Literaturrecherche 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 Löslichkeit des Systems Fe(II)-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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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

AP5:

Am 20.05.2010 fand in Wettingen das Abschluss-Meeting zum MB-Versuch (mine-by-test im URL Mt. Terri) statt. Neben einer detaillierten Analyse der Messdaten wurden durch die beteiligten Institutionen die jeweiligen Ergebnisse der numerischen Rückrechnungen für die Projektphase der auswertenden bzw. anpassenden Modellierung vorgestellt. Die in-situ beobachteten Effekte deuten auf eine starke H-M-Kopplung hin:

(i) Ein messbarer Porendruckaufbau entsteht bereits ab einem Ortsbrustabstand von ca. dem 4-fachen Durchmesser der Strecke (DS). (ii) Messbare Gebirgsdeformationen (Stauchungen) entstehen bereits ab einem Ortsbrustabstand von ca.  $2,5 \times DS$  bis ca.  $0,5 \times DS$ . (iii) Für Abstände zur Ortsbrust kleiner ca.  $0,5 \times DS$  entsteht eine deutlich messbare Dilatation sowie ein rapider Porendruckabfall.

Im Rahmen der Rückrechnung wurden ausgewählte, das Deformationsverhalten sowie den Grad der H-M-Kopplung maßgeblich beeinflussende felsmechanische und hydro-mechanische Parameter variiert. Unter Verwendung von Parametersätzen mit abgeminderten (drainierten) Steifigkeiten und reduzierten Festigkeiten sowie einer geringen Kompressibilität des Porenfluides war es möglich, das Standortverhalten sehr gut zu erfassen. Dies geschah unter Beibehaltung der in der Prognosephase gewählten Modellansätze, Anfangs- und Randbedingungen sowie der simulierten Auffahrsequenz.

AP6:

Im Berichtszeitraum wurden die seitens ANDRA sowohl aus den Erhitzerbohrungen, als auch aus den umliegenden Beobachtungsbohrungen des TED-Versuches gelieferten Gesteinsproben im Labor untersucht. Gemessen wurden vorrangig die Wärme- und Temperaturleitfähigkeit, darüber hinaus aber auch die spezifische Wärmekapazität, der thermische Ausdehnungskoeffizient, der Karbonatgehalt und der Mineralbestand. Die Ergebnisse zeigen eine deutliche Anisotropie in der Wärmeleitfähigkeit. Der Mittelwert parallel zur Schichtung beträgt  $1,96 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$  und senkrecht dazu beträgt er  $1,28 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ . Der Anisotropiefaktor liegt also bei 1,52. Eine signifikante Abhängigkeit von der Temperatur zeigte sich nicht, wohl aber, erwartungsgemäß, vom Wassergehalt der Proben. Die Laborergebnisse wurden in einem „Technical Report“ dokumentiert, der den Projektpartnern zur Verfügung gestellt wurde.

AP7/AP8:

Nach Einbau einer Programmroutine zur Simulation des Quelldruckes von Bentonit in das Programm Flac3D wurde mit einer optimierten Parameteridentifikation für den TBT-Versuch in Äspö begonnen, im Rahmen derer alle variablen Parameter nach speziellen Algorithmen verändert werden, bis eine möglichst gute Anpassung an vorhandene Messwerte erzielt ist.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP5: Als ausstehende Arbeit ist der Abschlussbericht zu erstellen. Er soll in Form eines NAGRA Technical Note (TN) erscheinen und die Ergebnisse der Modellierungsphasen sowie einen Abschnitt „lessons learned“ enthalten.

AP6: Durchführung einer Prognoseberechnung für den TED-Erhitzerversuch in Bure.

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M. & Billaux, D. (2010): Fractal model for permeability calculation from porosity and pore radius information and application to excavation damaged zones surrounding waste emplacement boreholes in opalinus clay, *Int. Jour. of Rock Mech. and Min. Sci.* 47, pp 583-589, Elsevier.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10116</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Barriereintegrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs in Tonformationen (BET)			
<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 31.03.2010		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 31.03.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 709.575,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Miehe	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Vorhaben BET soll der grundsätzliche Mechanismus der Gasausbreitung im einschlusswirksamen Gebirgsbereich eines ungestörten konsolidierten Tonsteins geklärt und die infolge höherer Gasdrücke zu erwartenden signifikanten Änderungen der hydraulischen Eigenschaften (Gaseintrittsdruck, effektive Permeabilität) quantifiziert werden. Im Hinblick auf die Ableitung relevanter Prozessmodelle soll der Frage nachgegangen werden, ob der Gaseintritt ins Gebirge vorrangig dilatanzgesteuert, d. h. durch Aufweitung des vorhandenen Porensystems mit einhergehender Erhöhung der Permeabilität oder durch die Bildung neuer diskreter Risse infolge des Überschreitens der minimalen Hauptspannung (Frac) stattfindet. Für die Belange der Langzeitsicherheit des Endlagers soll darüber hinaus geklärt werden, ob und mit welchem zeitlichen Verlauf es zu einer Rückbildung bzw. Verheilung der gebildeten Fließwege kommt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: In-situ-Untersuchungen: In Bohrungen wird eine gasdruckinduzierte Schädigung des Gebirges mit Bestimmung der Gasinfiltrationsrate nach Gaseintritt durch Gasdruckaufbau erzeugt. Anschließend erfolgen Untersuchungen zum Verheilungsverhalten des geschädigten Gebirges durch zeitlich gestaffelte Wiederholung der Gas-Fracdruckmessungen.
- AP2: Laboruntersuchungen: Erzeugung einer gasdruckinduzierten Schädigung bei unterschiedlichen mechanischen Belastungen und Gasinjektionsraten sowie Untersuchungen, wie sich Wegsamkeiten bilden und verhalten (dilatanzbedingte Aufweitung von Fließwegen und vorhandener Risse oder Bildung neuer Risse). Untersuchung des Verheilungsverhaltens der geschädigten Proben unter den in Mt. Terri herrschenden In-situ-Bedingungen bezüglich der Gebirgsspannung, der Zeit sowie des Einflusses von Tonwasser und Überprüfung der Übertragbarkeit der an kleinen Proben ermittelten Laborergebnisse auf Proben größeren Maßstabs.
- AP3: Abschließende Bewertung der In-situ- und Laborergebnisse und Bereitstellung eines Schädigungsmodells.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die In-situ-Messungen wurden Ende 2009 abgeschlossen.

AP2: Zur Überprüfung des in einem vorhergehenden Versuchs an kleinen Proben beobachteten Temperaturverhaltens wurde ein weiterer Versuch bei konstant gehaltenen Einspannbedingungen und konstantem Injektionsdruck vorgenommen. Mit Einsetzen des Wasseraustrags bei Temperaturerhöhung ab ca. 50 °C steigt auch hier die Gaspermeabilität an. Das grundsätzliche Verhalten ist mit dem der ersten Probe unter Temperatureinfluss vergleichbar.

Für die Untersuchungen an einer intakten großen Probe ergab sich anfänglich bei 0,04 MPa Injektionsdruck eine initiale Gaspermeabilität von  $4.3 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ , die mit zunehmendem Injektionsdruck bis auf  $2 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$  bei ca. 3 MPa anstieg. Eine Wiederholungsmessung ergab etwas niedrigere Gaspermeabilitäten als bei der ersten Messung. Eine Injektion mit Pearsonwasser führte auch über 57 Tage trotz Wasseraufnahme der Probe zu keinen Wasseraustritt. Ein erneuter Gasinjektionstest ergab einen Gaseintrittsdruck von ca. 3.8 MPa (Gaspermeabilität ca.  $1.3 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ ). Eine Reduzierung des Gasinjektionsdrucks führte wiederum zu einer Abnahme der Gaspermeabilität auf ca.  $6 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$ . Nach dem Ausbau der Probe war im oberen Drittel der Probe eine Abscherung zu beobachten. Der dabei anstehende Riss war offenbar durch das injizierte Wasser verheilt.

AP3: Durchführung von numerischen Untersuchungen zur Abbildung ausgewählter Messzyklen (Kombination aus Fluid- und Gasinjektionstests) mit dem vorhandenen Simulationsinstrumentarium (elastischer Stoffmodellansatz mit hydro-mechanischer Kopplung mit Berücksichtigung von Streckenauffahrungsprozessen und Standzeiten vor / nach Bohrlocherstellung und Sondeneinbau). Gegenüberstellung der Ergebnisse der numerischen Simulation mit ausgewählten Messbefunden. Erarbeitung von Defiziten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichts.

### 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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

- Die in der Literatur bekannten Komplexbildungskonstanten für  $\text{UO}_2\text{HS(II)}$  und  $\text{UO}_2(\text{OH})\text{HS(I)}$  wurden mittels ATR FT-IR-Spektroskopie verifiziert. Weiterhin wurde ein ternärer U(VI)-Carbonato-Humat-Komplex ( $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_2\text{HS(II)}^{4-}$ ) mittels cryo-TRLFS und ATR FT-IR-Spektroskopie nachgewiesen ( $\log K = 2,93 \pm 0,20$ )
- Sorption von U(VI) an Opalinuston in Abwesenheit und Gegenwart von HS in Opalinustonporenwasser unter anaeroben Bedingungen. Die erhaltenen Sorptionsdaten stimmen mit den unter aeroben Bedingungen erhaltenen Ergebnissen überein.  $\text{Ca}_2\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3(\text{aq})$  und  $\text{CaHS(II)}$  dominieren die Speziation sowohl unter aeroben als auch unter anaeroben Bedingungen. Eine Reduktion von U(VI) zu U(IV) konnte nicht nachgewiesen werden.
- Spektroskopischer Nachweis des  $\text{Ca}_2\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3(\text{aq})$  in Abwesenheit und Gegenwart von HS in Opalinustonporenwasser und in Sorptionsfiltraten mittels TRLFS.
- Beendigung der U(VI)-Diffusionsexperimente in Opalinuston ( $\rho = 1,85 \text{ g/cm}^3$ ) in Abwesenheit und Gegenwart von HS unter anaeroben Bedingungen. Proben wurden durch abrasive peeling aufgearbeitet. Für die HS-Throughdiffusion in Gegenwart von U(VI) wurden folgende Werte bestimmt:  $D_e = 3,39 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $\alpha = 0,015$ .
- Konditionierung neuer repräsentativer Opalinustonbohrkerne ( $\rho \sim 2,4 \text{ g/cm}^3$ ) für weitere Diffusionsversuche unter anaeroben Bedingungen bei Raumtemperatur und bei  $60 \text{ }^\circ\text{C}$ .
- Beginn der Untersuchung der U(VI)-Komplexierung durch Milchsäure bei pH 3 zwischen  $7$  und  $65 \text{ }^\circ\text{C}$ . Die Komplexstabilität steigt mit zunehmender Temperatur.
- Untersuchung der Temperaturabhängigkeit der U(VI)-HS-Komplexierung bei pH 3.8 zwischen  $20$  und  $60 \text{ }^\circ\text{C}$  mittels TRLFS: Kein signifikanter Einfluss der Temperatur auf die U(VI)-Humat-Komplexierung bis  $40 \text{ }^\circ\text{C}$  feststellbar. Ab  $60 \text{ }^\circ\text{C}$  sinken Komplexstabilität und Beladungskapazität → Weniger U(VI)-Bindungsplätze der HS stehen bei steigender Temperatur zur Verfügung.
- Am(III)-Komplexierung durch Modellliganden: Die für Phthalsäure ( $\log \beta_{110} = 3,72 \pm 0,12$ ) und Anthranilsäure ( $\log \beta_{110} = 3,82 \pm 0,21$ ) ( $I = 0,1 \text{ M}$ ; pH 4 und 6) sowie Picolinsäure ( $\log \beta_{110} = 3,99 \pm 0,21$ ) ( $I = 0,1 \text{ M}$ ; pH 3,7 und 6) bestimmten Komplexbildungskonstanten stimmen gut mit Literaturdaten entsprechender Eu(III)- bzw. Cm(III)-Komplexe überein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung des Einflusses der Temperatur auf die U(VI)-Komplexierung durch weitere organische Modellliganden.
- Untersuchung des Einflusses der Temperatur auf die U(VI)-Sorption an Opalinuston in Abwesenheit und Gegenwart von HS bzw. organischen Modellliganden (u. a. Citronensäure, Milchsäure) im Porenwassermedium.
- Comsolmodellierung der bisher erhaltenen Diffusions- und abrasive peeling-Daten in Zusammenarbeit mit dem PSI.
- Untersuchung der U(VI)-Diffusion in Opalinustonbohrkernproben ( $\rho \sim 2,4 \text{ g/cm}^3$ ) in Abwesenheit und Gegenwart von HS bei Raumtemperatur und  $60 \text{ }^\circ\text{C}$  unter anaeroben Bedingungen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Schmeide, K., Bernhard, G.: Sorption of Np(V) and Np(IV) onto kaolinite: Effects of pH, ionic strength, carbonate and humic acid. *Appl. Geochem.* 25, 1238-1247 (2010).

Sachs, S., Reich, T., Bernhard, G.: Study of the role of sulfur functionalities in humic acids for uranium(VI) complexation. *Radiochim. Acta*, DOI 10.1524/ract.2010.1746 (2010).

Stedtner, R., Müller, K., Schmeide, K., Sachs, S., Bernhard, G.: Binary and ternary uranium(VI) humate complexes studied by ATR FT-IR spectroscopy as function of carbonate content and pH value. *Environ. Sci. Technol.* (2010), submitted.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55099 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 Sorptionspezies 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

Während der Strahlzeit vom 28.03.-01.04.2010 an der MicroXAS-Beamline der Swiss Light Source wurde die Verteilung von Np bei der Wechselwirkung mit Opalinuston (OPA) ortsabhängig untersucht. Dazu waren vier Dünnschliffe (20-30 µm) von OPA mit einer Np(V)-Lösung kontaktiert worden. Weiterhin wurde ein Bohrkern untersucht, in den Np(V) über einen längeren Zeitraum diffundiert war. Die mit Mikroröntgenfluoreszenz (µ-XRF) gemessenen Verteilungsbilder zeigten keine deutliche Korrelation zwischen Np und anderen Elementen wie z. B. Fe, Ca oder Sr. Jedoch konnten auf allen Proben lokale Anreicherungen von Np festgestellt werden, die anschließend mit µ-XANES untersucht wurden. Dabei zeigten die Np L<sub>3</sub>-Kante XANES-Spektren deutliche Unterschiede zwischen den Dünnschliffproben und der Bohrkernprobe. Im Fall der Diffusi-



onsprobe lag das Np überwiegend als Np(IV) vor, während bei den anderen Proben Np(V) dominierte.

Im März 2010 begann die Charakterisierung der neuen, vom KIT/INE bereitgestellten Bohrkerne durch Diffusionsexperimente mit HTO ( $c_{\text{HTO}} = 1,2 \times 10^{-9}$  mol/L) an Luft. Als stationäre Phase wurde OPA (Mont Terri, BLT 14, aus der Tiefe 2,12-2,52) und als mobile Phase synthetisches Porenwasser (pH 7,6) verwendet. Die Ergebnisse der Diffusionsversuche mit HTO ergaben folgende Parameter:  $D_e = (2,0 \pm 0,1) \times 10^{-11}$  m<sup>2</sup>/s,  $\alpha = 0,20 \pm 0,01$  (Bohrkern 1);  $D_e = (1,7 \pm 0,1) \times 10^{-11}$  m<sup>2</sup>/s,  $\alpha = 0,14 \pm 0,01$  (Bohrkern 2). Die für diese beiden Bohrkerne erhaltenen Porositäten sind repräsentativ für OPA aus Mont Terri. Nach der Charakterisierung der Bohrkerne wurden im Juni 2010 zwei Diffusionsexperimente mit Np(V) unter aeroben Bedingungen bei Raumtemperatur in An- und Abwesenheit von Huminsäure vom Typ M42 (10 mg/L) begonnen. Die Dauer der Diffusionsexperimente mit <sup>237</sup>Np wird ca. 50 Tagen betragen. Zur Vorbereitung von Diffusionsexperimenten mit Np(V) bzw. Pu(VI) bei 60 °C unter aeroben Bedingungen wurde mit der Vorkonditionierung von vier weiteren Bohrkerne (BLT 14) mit Porenwasser begonnen.

Zur Vorbereitung auf EXAFS-Messungen an der ESRF zur Sorption von Pu an OPA wurden die Sorptionsisothermen von Pu(III), Pu(IV) und Pu(VI) bei pH 7,6 in Porenwasser unter Variation der OPA-Konzentration (1-20 g/L) bei konstanter <sup>239</sup>Pu-Konzentration ( $c_{\text{Pu(III)}} = 0,11$  μM,  $c_{\text{Pu(IV)}} = 0,88$  μM,  $c_{\text{Pu(VI)}} = 0,098$  μM) an Luft (außer Pu(III), Ar-Atmosphäre) durchgeführt. Folgende  $K_d$ -Werte wurden erhalten: Pu(III) 154 m<sup>3</sup>/kg, Pu(IV) 96 m<sup>3</sup>/kg und Pu(VI) 11 m<sup>3</sup>/kg.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Diffusionsversuche mit <sup>237</sup>Np(V) bzw. <sup>239</sup>Pu(VI) bei 60 °C unter aeroben Bedingungen.
- EXAFS-Messungen zur Speziation von Pu bei der Sorption an OPA als Funktion des Pu-Oxidationszustandes und des Hintergrundelektrolyten (Porenwasser bzw. 0,1 M NaClO<sub>4</sub> bei pH 7,6) in An- und Abwesenheit von atmosphärischem CO<sub>2</sub>. Die Messzeit soll im Juli 2010 stattfinden.
- μ-XANES- und μ-XRF-Messungen zur orts aufgelösten Speziation und Bestimmung der Verteilung von Pu in OPA. Die Messzeit wurde von der SLS bewilligt und soll im Oktober 2010 stattfinden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

T. Wu, S. Amayri, J. Drebert, L.R. Van Loon, T. Reich, Determination of diffusion parameters by a computer code based on Mathematica 6.0, Proceedings of 18<sup>th</sup> Inter. Conf. on Nucl. Engin. (ICONE18), May 17.-21.05.2010, Xi'an, China.

S. Amayri, D.R. Fröhlich, J. Drebert, T. Reich, Sorption behaviour and speciation of neptunium(V) on Opalinus clay, Poster auf der 16<sup>th</sup> Radiochemical Conference, 18.-23.04.2010 Mariánské Lázně, Czech Republic.

T. Reich, S. Amayri, S. Wendt, B. Baeyens, R. Dähn, M.H. Bradbury, A.C. Scheinost, Speciation and surface complexation modelling of Np(V) sorption on montmorillonite. Vortrag auf der 16<sup>th</sup> Radiochemical Conference, 18.-23.04.2010 Mariánské Lázně, Czech Republic.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. - Forschungsstelle Leipzig - Interdisziplinäre Isotopenforschung, Permoserstraße 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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

Abweichend von den Grundannahmen gleichgewichtsthermodynamischer Speziationsrechnungen wurde in vorangegangenen Untersuchungen eine zeitliche Zunahme im Konkurrenzeffekt von Al(III) bezüglich der Huminstoffkomplexbildung anderer Metalle festgestellt. Um eine Erklärung für dieses Verhalten zu finden, wurden weitere fluoreszenzspektroskopische Studien an Al-Huminstoffkomplexen verschiedenen Alters unternommen (Kooperation mit Universität Potsdam). Zwar konnte gezeigt werden, dass durch die Komplexbildung mit Al(III) erhebliche strukturelle Veränderungen in der Mikroumgebung des Sondenmetalls Eu(III) induziert werden; diese entsprachen jedoch nicht dem zeitlichen Trend im Konkurrenzeffekt. Aus Spektrenanalysen ging hervor, dass ein solcher Trend bei der relativ hohen Konzentration des Sondenmetalls offenbar nicht auftritt.

Unter Verwendung eines verbesserten Markierungsverfahrens wurden die Traceraustausch-Experimente zur Dynamik des Adsorptionsgleichgewichts einer Fulvinsäure (Moorwasser-Isolat) an Kaolinit wiederholt. Die Austauschgeschwindigkeit an der gesättigten Oberfläche stellte sich als ähnlich langsam heraus, wie es bereits für Aldrich-Huminsäure beobachtet wurde. Die getroffenen Schlussfolgerungen sind somit verallgemeinerungsfähig: Für die Annahme eines ständigen lokalen Gleichgewichts bei der Modellierung huminstoff-gebundener Transportprozesse ist die Adsorptionsgeschwindigkeit (in Relation zur Strömungsgeschwindigkeit) nicht das maßgebende Kriterium.

Für längerfristige Diffusionsexperimente unter PET-Beobachtung bei unterschiedlichen Temperaturen wurden zylindrische Opalinuston-Bohrkernproben in Kunstharz eingegossen und mit einer zentralen Bohrung für die Strahlungsquelle versehen (geplante Tracer:  $^{124}\text{I}^-$  und  $^{58}\text{Co}$ -Hexacyano-Komplex in synthetischem Porenwasser). Erste Experimente mit  $^{18}\text{F}^-$  in Porenwasser zeigten eine gute Abbildungsqualität bei dieser Konfiguration. Es traten allerdings Flüssigkeitsverluste auf, die zunächst ausgeglichen werden mussten.

Zur Abschätzung des Einflusses der Compton-Streustrahlung, die sich im Bild ähnlich wie eine Tracerdiffusion darstellt, und zu ihrer besseren Korrektur wurden Monte-Carlo-Simulationen des  $\beta^+$ -Zerfalls im Opalinuston gestartet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Konzentrationsabhängige Untersuchungen zum Einfluss von Propionat und Lactat auf die Adsorption von [ $^{160}\text{Tb}$ ]Tb(III) an Opalinuston
- pH-Wert-abhängige Untersuchungen zum Einfluss von Propionat und Lactat auf die Adsorption von [ $^{160}\text{Tb}$ ]Tb(III) an Montmorillonit, Illit und Opalinuston
- Ergänzende Messungen zur Adsorptions- und Desorptionskinetik von Fulvinsäure an Kaolinit (Korrelation mit Austauschkinetik)
- PET-Untersuchung der Diffusion von  $^{124}\text{I}^-$  und anschließend von  $^{58}\text{Co}$ -Hexacyano-Komplex in Opalinuston-Bohrkernen (Messzeit ca. 3 Wochen)
- Ableitung räumlich verteilter, ggf. anisotroper Diffusionskoeffizienten aus den Messungen
- Rekonstruktion von Monte-Carlo-simulierten PET-Messungen mit und ohne Streueffekte

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kulenkampff, J., Enzmann, F., Gründig, M., Mittmann, H., Wolf, M.:  
Spatiotemporal observation of transport in fractured rocks. Geophysical Research Abstracts, Vol. 12, EGU2010-1937

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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

Im AP2 werden computerchemische Untersuchungen zur Komplexierung von Aktinoiden durch Carboxyl- und alternative Funktionalitäten von Huminstoffen anhand von Modellen durchgeführt sowie Solvatationsmodelle entwickelt und angewandt.

### 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 begonnen (AP1.1). Hinsichtlich der Gittervektoren parallel zu den Schichten stimmt die Festkörperstruktur des neutralen Pyrophyllits weitgehend überein mit den berechneten Strukturen der montmorillonitischen und beidelittischen Modellmi-

nerale  $\text{Na}_x\text{Al}_{4-x}\text{Mg}_x(\text{OH})_4[\text{Si}_8\text{O}_{20}]$  und  $\text{Na}_x\text{Al}_4(\text{OH})_4[\text{Si}_{8-x}\text{Al}_x\text{O}_{20}]$  für  $x = 0.25, 0.5$  und  $0.75$ . Damit liefern die schichtparallelen Gittervektoren des Pyrophyllits eine einheitliche Basis für Vergleiche von Modellen basaler (001)-Oberflächen. Bei deren Modellierung wurden verschiedene Positionen der  $\text{Na}^+$ -Gegenionen verglichen. Ohne Berücksichtigung der Solvataion erwies sich die Adsorption von  $\text{Na}^+$  in den Ringstrukturen zwischen den  $\text{SiO}_4$ -Tetraedern der Oberfläche neben einem Substitutionsdefekt als vorteilhaft verglichen mit der Koordination auf einer Tetraederfläche über dem negativen Oberflächendefekt. Die Solvatisierung der Oberfläche führt zu außersphärischen  $\text{Na}^+$ -Adsorbatkomplexen und bestätigt damit Kraftfeldsimulationen; denn  $\text{Na}^+$  weist eine hohe Solvationsenergie auf, während der negative Oberflächendefekt über drei Sauerstoffatome delokalisiert ist und damit keine starke Koordinationsstelle bietet. Erste Modellierungen von adsorbiertem Uranyl (AP1.2) auf der basalen Oberfläche eines beidellitischen Modellminerals ( $x = 0.5$ ) deuten darauf hin, dass trotz der negativen Oberflächenladung außersphärische Komplexe geringfügig stabiler sind als bidentate innersphärische. Weitere Berechnungen zur Adsorption von Uranyl, insbesondere unter Berücksichtigung von Solvataion, werden derzeit durchgeführt. Die Untersuchungen zur Adsorption von Neptunyl(V) auf der oktaedrischen (001)-Oberfläche von Kaolinit wurden fortgeführt (AP1.2). Neben bereits gefundenen monodentaten vierfach koordinierten Adsorptionskomplexen konnten nun auch bidentat koordinierte Komplexe identifiziert werden. Auf einfach deprotonierten Adsorptionsplätzen ergaben sich nur geringe Unterschiede (etwa 30 kJ/mol) zwischen 5- bzw. 4-fach koordinierten Neptunylkomplexen. Auch für neutrale Adsorptionsplätze wurden nur geringe Energieunterschiede zwischen inner- und außersphärischen Komplexen berechnet. Die laufenden Arbeiten werden derzeit um Solvataionseffekte sowie genauere Vergleiche 5- und 4-fach koordinierter Komplexe erweitert.

Zur Vorbereitung der Modellierung von Am(III)-Komplexen in Lösung (AP2.3) wurden Basissätze erstellt und getestet und atomare Eigenschaften durch Vergleich mit der Literatur verifiziert. Derzeit werden molekulare Eigenschaften anhand der bekannten Komplexe  $\text{AmF}_3$  und  $\text{AmCl}_3$  untersucht.

Die Implementierung einer neuen Methode zur Berechnung des elektrostatischen Feldes der Solvensumgebung in polarisierbaren Kontinuums-Solvataionsmodellen brachte erhebliche Fortschritte bei der Optimierung hochgeladener Komplexe in Lösung. Denn Kräfte werden wesentlich genauer bestimmt. So gelang die Optimierung des solvatisierten U(IV)-Ions mit expliziter Berücksichtigung der ersten Solvatschale ohne Symmetriebeschränkungen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- B. Martorell, A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Density Functional Model Study of Uranyl Adsorption on the Solvated (001) Surface of Kaolinite *J. Phys. Chem. C* DOI: 10.1021/jp101300w.
- F. Schlosser, L. V. Moskaleva, A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Comparative density functional study of the complexes  $[\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3]^{4-}$  and  $[(\text{UO}_2)_3(\text{CO}_3)_6]^{6-}$  in aqueous solution *Dalton Trans.* 39 (2010) 5705.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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, Konkurrenzionen oder organische Komplexliganden) 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 wurden Speziationsuntersuchungen von Uran mit Huminsäure (HA) durchgeführt. Dabei konnte eine Trennung in drei unterschiedliche Uran-Spezies erreicht werden. Peak 1 entspricht im Prinzip dem Peak 1 der Eu-Speziation dem freien Uranyl-Ion, welches durch Acetat aus dem Puffer komplexiert wurde und als einfach positiv geladener Acetat-Komplex migriert. Peak 2 setzte sich aus einer weiteren Uranyl-Acetat-Spezies und dem Uranyl, welches aus dem Uranyl-Humat-Komplex diffundiert, zusammen. Als Peak 3 kann Uranyl-Humat identifiziert werden. Zudem wurden die Speziationen von Eu und HA in Porenwasser (PW) fortgeführt. Dabei wurden unterschiedliche Verhältnisse von PW und  $\text{NaClO}_4$  angesetzt, um eine Veränderung der Komplexierung durch erhöhte PW-Kationen-Konzentrationen zu verfolgen. Dabei verdrängen die PW-Kationen (z. B.  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ) die Eu-Ionen nicht nur aus dem Humat-Komplex, sondern in hoher Konzentration aus dem durch den Puffer gebildeten  $\text{EuAc}^{2+}$ -Komplex. Aus diesem Grund migriert ein Peak 0 vor dem Peak 1 als freies  $\text{Eu}_{(\text{aq})}^{3+}$ -Ion. Durch die große Menge an PW-Anionen werden die Humat-Komplexe neutralisiert. Peak 2 und Peak 3 migrieren zusammen in einem Peak zeitgleich mit dem EOF in Richtung Kathode.

Wie geplant, wurden zudem die Sorptionsuntersuchungen von Uran in einer Glovebox durchgeführt. Hierbei konnten kaum Unterschiede zu den Ergebnissen unter Standard-Atmosphäre festgestellt werden. Dies könnte durch das im Ton vorhandene Calcit verursacht sein, welches Carbonat freisetzt.

Erste Temperatur-Versuche zeigen, dass sich der untersuchte, trockene Opalinuston bei Einwirkung von Temperaturen bis 60 °C strukturell nicht verändert. Im Batch-Versuch mit Eu, Gd und Tb konnte jedoch eine erhöhte Sorptionsfähigkeit bei 60 °C nachgewiesen werden.

Die Versuche mit den miniaturisierten Tonsäulen wurden weiter fortgesetzt. Für die Trennung von Iodid als Inertmarker (10  $\mu\text{M}$ ) und Lactat (1 mM) als natürliche Tonorganik konnte bei einem Opalinuston/Seesand-Gemisch (60/40) Flussgeschwindigkeiten von bis zu 5  $\mu\text{l min}^{-1}$  realisiert werden, wobei unterschiedliche Durchbruchzeiten von Iodid (13,24 $\pm$ 0,05 min) und Lactat (13,50 $\pm$ 0,02 min) bei relativ geringem Druckaufbau (bis maximal ca. 10 bar) erhalten werden konnten.

Weiterhin wurden Untersuchungen zum Einfluss von Europium auf die Durchbruchzeit mobiler Tonorganika (Lactat) durchgeführt. Bei Anwesenheit von unterschiedlichen Konzentrationen an Europium (zwischen 0 und 200  $\mu\text{M}$  Eu) können zum Teil deutlich längere Durchbruchzeiten des Lactats in Abhängigkeit der Eu-Konzentration (zwischen 13,52 und 15,44 min,  $R^2 = 0,753$ ) bestimmt werden. Zusätzlich korreliert die Abnahme der detektierten Lactat-Peakfläche (Iodid-Signal normiert) mit der Menge an zugesetztem Metall ( $R^2 = 0,808$ ). Dies könnte durch Komplexierungs- bzw. Ausfällungseffekte verursacht werden, was durch post-mortem-Analysen der kompaktierten Opalinuston-Säulen untersucht werden kann.

Bei den anschließenden Versuchen zur orts aufgelösten Element-Analytik der Opalinuston-Säulen (post mortem Analysen) konnte ein zum Teil deutlicher Einfluss der NOM (Natural Organic Matter) am Beispiel von Lactat nachgewiesen werden. Insbesondere die Injektion einer schon Lactat enthaltenen Eu-Lösung (2  $\mu\text{l}$  Injektionen von 0-200  $\mu\text{M}$  Eu und 1 mM Lactat) führte zu einer verstärkten Mobilisierung (Migration) des Europium im Opalinuston durch die komplette Tonsäule bis hin zum Eluat, während bei Abwesenheit von Lactat das Europium direkt am Säulenansatz sorbiert wird.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Sorptionsuntersuchungen von Eu, Gd und Tb an Opalinuston unter Vorkonditionierung des Opalinustons bei 60 °C in Porenwasser und  $\text{NaClO}_4$ .
- Einfluss von Lactat auf die Sorption bzw. Desorption von Europium an kompaktiertem Opalinuston (im Miniatur-Säulenversuch) bei verschiedenen Temperaturen.
- Fortführung der Versuche zur räumlichen Verteilung und zum Ausbreitungsverhalten der Schwermetalle und Tonorganika durch post mortem Analysen der Tonsäulen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kautenburger, R. & H.P. Beck (2010): Influence of geochemical parameters on the sorption and desorption behaviour of europium and gadolinium onto kaolinite. *Journal of Environmental Monitoring* 12, 1295-1301.

Kautenburger, R., Möser, C. & H.P. Beck (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. In: *Advances in Natural Organic Matter and Humic Substances Research 2008-2010* (Eds: J.A. González-Pérez, F.J. González-Vila & G. Almendros). *Proceedings IHSS 15* (Vol. 1), 251-254.

Möser, C., Kautenburger, R. & H.P. Beck (2010): CE-ICP-MS as Speciation Technique to Analyze the Complexation Behavior of Europium, Gadolinium and Terbium with Humic Acid. In: *Advances in Natural Organic Matter and Humic Substances Research 2008-2010* (Eds: J.A. González-Pérez, F.J. González-Vila & G. Almendros). *Proceedings IHSS-15* (Vol. 3), 139-142.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 Radionukliden mit niedermolekularen organischen Liganden wurden mit Cm(III) und Propionat als Ligand begonnen. Die Komplexierung wurde in einem Temperaturbereich von  $T = 20$  bis  $90\text{ °C}$  mittels zeitaufgelöster Laserfluoreszenzspektroskopie (TRLFS) untersucht. Mit zunehmender Temperatur und/oder steigender Ligandenkonzentration wurde eine bathochrome Verschiebung der Fluoreszenzbande festgestellt. Dies weist darauf hin, dass sich bei höheren Temperaturen das vorliegende chemische Gleichgewicht zwischen dem Cm(III)-Aquoion und den Cm(III)-Propionatkomplexen in wässriger Lösung zugunsten der komplexierten Spezies  $[\text{Cm}(\text{Prop})_n]^{3-n}$  ( $n = 1, 2$ ) verschiebt. Bei höheren Temperaturen dominiert der  $[\text{Cm}(\text{Prop})_2]^+$ -Komplex im Vergleich zur Raumtemperatur, bei der er nur in geringen Mengen gebildet wird. Die stufenweise Stabilitätskonstante wurde mit Hilfe des temperaturabhängigen  $\text{pKs}(T)$ -Wertes von Propionat sowie der totalen Liganden- und Protonenkonzentration berechnet. Der  $\log K^{\circ 1}$  für  $(\text{CmProp}_2^+)$  zeigt im Temperaturbereich von  $T = 20 - 90\text{ °C}$  einen Anstieg um ca. 0.2



Größenordnungen (von  $3.34 \pm 0.01$  auf  $3.53 \pm 0.01$ ), während  $\log K^{\circ 2}$  für (CmProp2+) um ca. 1 Größenordnung (von  $1.88 \pm 0.01$  auf  $2.93 \pm 0.01$ ) ansteigt.

Ein weiteres Arbeitspaket ist die Messung des pH-Wertes bei erhöhten Temperaturen. Der pH-Wert ist eine der Schlüsselgrößen von wässrigen Systemen und seine präzise Messung ist von entscheidender Bedeutung für die quantitative Beschreibung von Komplexbildungsreaktionen. Die hier angewandte Methode basiert auf der spektroskopischen Detektion des temperatur- und pH-abhängigen Gleichgewichtes der protonierten und deprotonierten Formen von verschiedenen Indikatorfarbstoffen (Acridin, Bromphenol Blau und Bromthymol Blau). Die Experimente wurden ebenfalls in einer Hochtemperaturzelle durchgeführt, welche mittels zweier Lichtleiter an ein UV/Vis-Spektrometer gekoppelt wurde. Die Ergebnisse zeigen eine gute Anwendbarkeit der Methode im Temperaturbereich bis ca. 100 °C. So wurde der Indikatorfarbstoff Bromphenol Blau im Temperaturbereich von 20 bis 90 °C verwendet, um den pH(T)-Wert von fluoridhaltigen Proben zu messen. Daraus wurde anschließend die freie Protonenkonzentration ( $[H^+]_{eq}$ ) in Lösung ermittelt. Ein Vergleich der experimentell erhaltenen mit theoretisch berechneten  $[H^+]_{eq}$ -Werten zeigt eine gute Übereinstimmung im untersuchten Temperaturbereich. Somit kann die Temperaturabhängigkeit des pH-Wertes im Falle des Cm(III)-Fluorid-Systems sehr gut mittels theoretischer Rechnungen beschrieben werden.

Um die Sorption von den redox-sensitiven Radionukliden Np, Pu und Tc an Tongestein zu verstehen, wurden Batch-Sorptionsuntersuchungen an natürlichen OPA- und COx-Tonproben begonnen. In einer ersten Versuchsreihe soll die langfristige Sorptions- bzw. sorptive Reduktionskinetik untersucht werden. Hierzu wurden Tonproben unter 1 % CO<sub>2</sub>/Argonatmosphäre und mit verschiedenen V/M-Verhältnissen (1:200, 1:50, 1:20, 1:10) in synthetischem Porenwasser angesetzt. Nach 2-3 Wochen Ton/Porenwasser-Kontaktzeit stellte sich ein pH-Wert von 7.6 (OPA) und 7.2 (COx) ein, der über den bisherigen Versuchszeitraum konstant blieb. Nach dieser Vor-Equilibrierung wurden die Metallionen Np(V), Pu(V/VI) und Tc(VII) mit zwei Endkonzentrationen ( $1 \times 10^{-8}$  M und  $3 \times 10^{-7}$  M) hinzu gegeben. Der Eh-Wert verringerte sich von ca. +300 mV nach Zugabe der Radionuklidlösung auf +50 mV nach 2 Monaten. Die Redoxspeziation der Radionuklide wurde mittels Flüssig-flüssig-Extraktion und PMBP bzw. TTA als Extraktionsmittel in zeitlichen Abständen untersucht. Nach einem Monat Reaktionszeit ist in den  $10^{-8}$  M gespikten Versuchen durch Sorption die Pu, Np, Tc Konzentration in der wässrigen Phase unterhalb der analytischen Nachweisgrenze, so dass eine Speziation der Radionuklide in der wässrigen Phase nicht möglich war. Anhand des starken Sorptionsverhaltens kann indirekt geschlossen werden, dass alle drei Radionuklide reduziert wurden. Die Ergebnisse mit  $3 \times 10^{-7}$  M Metallkonzentration zeigen nach 4 Wochen Kontaktzeit, dass 95 % des Pu an OPA und COx sorbiert wird und Pu in der wässrigen Phase als Pu(V) vorliegt. Im Fall des Np wurden 85 % an OPA und 60 % an COx sorbiert und Np(V) wird in der wässrigen Phase gefunden. Technetium zeigte die geringste Sorption: 38 % an OPA und 29 % an COx. Hierbei liegt in der wässrigen Phase hauptsächlich Tc(VII) vor, unter der Annahme, dass Tc(V) und (VI) nicht stabil sind.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Actiniden-Komplexierungsverhalten mit extrahierten OPA-Kerogen, synthetischen Ton-Organika-Assoziaten und „kleinen“ organischen Molekülen werden untersucht.
- Fortführung der Experimente zur Cm(III)-Komplexierung mit Propionat und Lactat.
- 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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“.

### 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):

Komplexe mit verschiedenen niedermolekularen organischen Liganden wurden mittels Transienten-Absorptionsspektroskopie (TTA) und zeitaufgelöster Lumineszenzspektroskopie (TRLFS) hinsichtlich ihrer spektroskopischen Eigenschaften charakterisiert. Ein Fokus der Untersuchungen stellten Liganden-spezifische Deaktivierungsprozesse der Lumineszenz dar (Lumineszenzlöschung). Als Leitmotiv wurden niedermolekulare aromatische Karbonsäuren untersucht, die in Orthostellung zur Carboxylgruppe eine weitere funktionelle Gruppierung (-XR) enthielten. Die Gruppe -XR wurde dabei so gewählt, dass es potentiell zu Chelat-Komplexierung kommen konnte. Es wurden Moleküle mit -XR = OH, NH<sub>2</sub>, SH untersucht. Generell wurde mit diesem Typ von Ligand eine Löschung der Europium-Lumineszenz beobachtet. Die experimentell bestimmten Lumineszenzabklingzeiten waren relativ zum Eu(III)-Aquoion weiter verkürzt, somit existiert in derartigen Komplexen ein sehr effektiver strahlungsloser Deaktivierungskanal. Für die entsprechenden Komplexe wurden aus Messungen im Temperaturbereich 4 K < T < 298 K u. a. die Aktivierungsenergien  $E_A$  der strahlungslosen Deaktivierung be-

stimmt. Aus den hochaufgelösten Lumineszenzspektren wurden außerdem die Lage bzw. die Anzahl der beobachtbaren  ${}^5D_0$ - ${}^7F_0$ -Übergänge sowie das Asymmetrie-Verhältnis  $r$  bestimmt. Letzteres wird aus dem Intensitätsverhältnis der Lumineszenzübergänge  ${}^5D_0$ - ${}^7F_1$  bzw.  ${}^5D_0$ - ${}^7F_2$  bestimmt. Beide Parameter sind gute Indikatoren für das Vorliegen unterschiedlicher Komplexspezies bzw. für Veränderungen in der Komplexzusammensetzung. Im Bereich der aliphatischen niedermolekularen Modellliganden wurde ein Formiat-Referenzkristall hergestellt und mittels RKSA und TRLIFS umfassend charakterisiert.

Photoinduzierte Redox-Reaktionen in Ln(III)-Salicylat-Komplexen wurden in TTA-Experimenten weitergehend untersucht. Dazu wurde zunächst der experimentelle Aufbau optimiert. Zur Aufnahme von kompletten TTA-Spektren wurde eine entsprechende CCD-Kamera integriert und charakterisiert. Damit ist es nun möglich, simultan zeitliche und spektrale Informationen aus einem Messzyklus zu erhalten. In den Untersuchungen der Salicylat-Komplexe wurden in den TTA-Messungen verschiedene Spezies (Triplet-Zustand des Salicylats, das Salicylat-Radikation sowie solvatisierte Elektronen) beobachtet. Durch Zugabe von Metallionen wie z. B. Eu(III) werden solvatisierte Elektronen aber auch der Triplet-Zustand effektiv gelöscht. Tb(III) (oder andere Metallionen, wie z. B. Ca(II)) zeigen keine vergleichbaren Effekte.

(AP2-A):

Es wurde begonnen, die Komplexierung von Lanthanoid-Ionen durch Referenzpolymere und Huminstoffe (Fulvin- bzw. Huminsäure) verschiedener Ursprungsorte temperatur- und pH-Wert-abhängig zu untersuchen. Gegenstand dieser Untersuchungen sind u. a. die konformativen Änderungen in den makromolekularen Liganden – z. B. bedingt durch pH-Wert-Effekte auf Grund veränderter intramolekularer Wechselwirkungen. Konformative Veränderungen wurden dabei über Variationen im Interlanthanid-Energietransfer (Ln-ET) verfolgt. Als Donor wurden Eu(III) bzw. Tb(III) und als Akzeptor verschiedene Ln(III) (= Nd(III), Ho(III), Sm(III), Dy(III)) eingesetzt. Aus den ersten Messungen der Ln-ET-Effizienz unter Variation der Metallbeladung (Donor-Konzentration konstant, Akzeptor-Konzentration steigend) an Polyacrylsäure als Modellpolymer wurde gezeigt, dass mit zunehmender Komplexierung erwartungsgemäß die Ladungsneutralisierung im Polymer zunimmt und so die intramolekulare Abstoßung sinkt. Darüber hinaus zeigen die ersten Messungen auch, dass der pH-Wert dabei ein zentraler Faktor ist. Bei einem bestimmten pH-Wert gleichen sich Abstoßungskräfte bedingt durch Coulomb-Wechselwirkungen und Ladungsneutralisation durch Metallkomplexierung aus.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

(AP1-A):

Es werden weitere niedermolekulare Modellliganden für die aus den Tonmineralen mobilisierte Organika mittels zeitaufgelöster Lumineszenzspektroskopie (TRLFS) und Transienten-Absorptionsspektroskopie (TTA) untersucht. Als Lumineszenzsonden bzw. natürliche Analoga der Actinoide werden weiterhin Ln(III) (= Eu(III), Tb(III)) eingesetzt – ergänzt um d-Blockelemente, die speziell für die TTA-Untersuchungen von Ladungstransferreaktionen in Komplexen als Referenzmetallionen (gut untersuchte Redoxchemie der Komplexe) eingesetzt werden. Neben der Transientenabsorption, die spezifisch die Liganden und deren elektronische Wechselwirkungen detektiert, werden TRLFS-Untersuchungen fortgesetzt. Besonders aus den hochaufgelösten Lumineszenzspektren bei sehr tiefen Temperaturen können Informationen zu fundamentalen Eigenschaften von Komplexen zwischen Metallionen (hier: Lanthanoiden) und niedermolekularen Liganden gewonnen werden, wie z. B. die liganden-spezifische Löschung. Die Untersuchungen werden auch auf einen Temperaturbereich bis ca. 333 K ausgedehnt.

(AP2-A):

Europium- und Terbiumkomplexe mit Referenz-Huminstoffen (z. B. Gohy FA, Aldrich-HA) werden bei erhöhten Temperaturen ( $T$  bis 333 K) und erhöhten pH-Werten mittels TRLFS untersucht. Fragen zu Alterungseffekten und zu Effekten weiterer Metallionen (z. B. Konkurrenz durch Al(III)) auf die Komplexierung der Ln(III) werden in Kooperation mit dem IIF bearbeitet. Ergänzt werden entsprechende temperatur- und pH-Wert-abhängige TRLFS- und TTA-Messungen mit unter verschiedenen Bedingungen aus Tonmineralen gewonnenen Extrakten. Die Extrakte und Tonorganika (z. B. Kerogen) werden von Verbundpartnern (INE bzw. IAARC) zur Verfügung gestellt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Folgende Manuskripte sind in Vorbereitung:

Bettina Marmodée, Freek Ariese, Cees Gooijer, Michael U. Kumke: Spectroscopic investigation of  $\text{Eu}(\text{H}_2\text{O})_8$  and  $\text{Eu}(\text{H}_2\text{O})_9$ , in Vorbereitung (2010)

Stefanie Kuke, Michael U. Kumke: Thermal deactivation of Eu(III) in complexes with small organic ligands, in Vorbereitung (2010)

Diplomarbeit von Frau Karolina Jahn

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10276</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-		
<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 31.03.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 31.03.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 778.575,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Rübél	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

WESAM stellt im Wesentlichen das nationale Ko-Vorhaben für die Arbeiten der GRS-Braunschweig im Rahmen des integrierten Projektes (IP) PAMINA dar, das im 6. Rahmenprogramm der Europäischen Union von Oktober 2006 bis September 2009 durchgeführt wird. Das übergeordnete Ziel des IP PAMINA und damit auch von WESAM besteht in der Verbesserung und Harmonisierung von Methoden und Rechenprogrammen für die integrierte Langzeitsicherheitsanalyse für unterschiedliche Konzepte zur Entsorgung langlebiger radioaktiver Abfälle und bestrahlter Brennelemente in tiefen geologischen Formationen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Struktur von WESAM entspricht jener des Projektes PAMINA und beinhaltet vier Arbeitspakete:

- Im ersten Arbeitspaket wird ein umfassender Überblick über den internationalen Stand der Methoden und Ansätze bei der Langzeitsicherheitsanalyse und beim Safety Case erarbeitet. Dabei werden auch die Defizite methodischer Natur, bei den eingesetzten Werkzeugen und der Qualität der benötigten Daten identifiziert.
- Im zweiten Arbeitspaket erfolgt eine Weiterentwicklung von Methoden für probabilistische Modellrechnungen, wobei vor allem die Methoden zur Bestimmung von Verteilungsfunktionen und neue mathematische Methoden zur Sensitivitätsanalyse untersucht werden.
- Im dritten Arbeitspaket werden die Bedeutung von Sicherheitsfunktionen bei der Ableitung von Szenarien und vor allem die Nutzung von Sicherheits- und Funktionsindikatoren für Endlager in Salz- und Tonformationen betrachtet.
- Im vierten Arbeitspaket wird die Bedeutung von komplexen Modellansätzen in integrierten Sicherheitsanalysen untersucht. Dies geschieht mit Hilfe vergleichender Rechnungen verschiedener Organisationen und Rechenprogramme. Dabei sollen Einzeleffekte in einem Endlager im Salz betrachtet sowie der Einfluss der Komplexität der Fernfeldmodelle betrachtet werden.
- In einigen Punkten geht die Bearbeitungstiefe in WESAM über die von PAMINA hinaus. Dies betrifft die Arbeiten zu den Unsicherheiten, die Sicherheitsindikatoren und die Modellierung mit Hilfe komplexer Modellansätze.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Abschlussbericht wurde fertig gestellt und liegt dem Projektträger vor.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Rübel, A.; Becker, D.-A.; Fein, E.; Ionescu, A.; Noseck, U.; Lauke, T.; Mönig, J.; Schneider, A.; Spießl, S.; Wolf, J. (2010): Development of Performance Assessment Methodologies. GRS-259, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig. ISBN: 978-3-939355-34-2

D.-A. Becker, O. Destin, H. Nordman, R. Bolado, L. Duro, J.L. Cormenzana, M.A. Cuñado, A. Vetešník, R. Avila, K. Stenberg (2009): Treatment of Parameter Uncertainty in PA, PAMINA Deliverable 2.2.A.1 (<http://www.ip-pamina.eu/downloads/pamina2.2.a.1.pdf>)

D.-A. Becker, S. Spießl, K.-J. Röhlig, E. Plischke, Bolado-Lavin, A. Badea, J. L. Cormenzana, T. J. Schröder, J. Hart, Avila, P. A. Ekström, R. Broed (2009): Evaluation of Approaches to Sensitivity Analysis, PAMINA Deliverable 2.1.D.1, (<http://www.ip-pamina.eu/downloads/pamina2.1.d.1.pdf>)

S.M. Spiessl, D.-A. Becker, A. Rübel (2010): EFAST Analysis Applied to a PA Model for a Generic HLW Repository in Clay. Sixth International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output, Procedia - Social and Behavioral Sciences. In Veröffentlichung

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Regina-Pacis-Weg 3, 53113 Bonn		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10296</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Visualisierung und Datenanalyse		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 82.938,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Rumpf	

## 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 Projekte 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 effizient 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 aufzubereiten 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 (Dr. E. Fein), der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Freiburg (Prof. Kröner) 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 bearbeitet:

AP9: Visualisierung und Datenanalyse (Arbeitsgruppe Rumpf)

AP10: Visualisierung und Datenanalyse (Arbeitsgruppe Rumpf)

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

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

Die Visualisierungsplattform GRAPE wurde im Kontext von neuen und erweiterten Datenformaten für Segmente und Klüfte weiterentwickelt. Das Projekt wurde auch in diesem Berichtszeitraum in enger Zusammenarbeit von Frau Dipl. Math. Nadine Olischläger mit der Arbeitsgruppe Kröner in Freiburg bearbeitet.

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

Zum Statustreffen im April 2010 wurde das Visualisierungswerkzeug für Kluftoberflächen in GRAPE auf zeitabhängige 2- und 3-dimensionale erweitert. In einem Postprocessing-Schritt werden nun die zeitabhängigen Kluftgeometrien eingelesen, rekonstruiert und in dem passenden Datenformat, welches in GRAPE nun auf zeitabhängige Daten erweitert wurde, gespeichert. Klüfte werden weiterhin als niederdimensionale Subdomains behandelt, wodurch alle Funktionen zur Verfügung stehen, die auf Subdomains möglich sind, wie zum Beispiel die anisotrope Skalierung der Kluft und anschließender Visualisierung der Daten in der Kluft. Für die Arbeitsgruppe Wittum wurden dann zu echten 2- und 3-dimensionalen komplizierten Kluftdatensätzen Videos gedreht, die die Funktionalität des GRAPE Toole unterstreichen. Die Arbeiten an den Kluftgeometrien sind damit abgeschlossen. Im Rahmen der freien Oberflächen, wurden Visualisierungstools entwickelt und implementiert.

Neben der eigentlichen Visualisierung der Kluftgeometrien wurde an verschiedenen Integrationsmethoden in GRAPE weiterentwickelt. Die Arbeiten der Bonner Arbeitsgruppe sind damit abgeschlossen. In enger Absprache werden auf Grund der kostenneutralen Verlängerung des Projektes wird die Arbeitsgruppe Kröner noch bis September 2010 an der Weiterentwicklung der Integrationsmethoden höherer Ordnung arbeiten.

Eine beratende Unterstützung wird hier auch nach Ablauf des Projekts durch die Bonner Arbeitsgruppe sichergestellt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise weitergeführt.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fahnenbergplatz, 79098 Freiburg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10306</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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) in enger Zusammenarbeit mit Frau Dipl. Math. Nadine Olischläger (AG Rumpf).

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

Im diesem Arbeitsabschnitt wurden in erster Linie verschiedene Schwierigkeiten in der Handhabung von GRAPE behoben und Fehler, die in der bisherigen Version von GRAPE aufgetreten sind behoben. Dazu fand am 17.-18.05. ein Arbeitstreffen bei der GRS in Braunschweig statt, bei dem die vorzunehmenden Änderungen und Erweiterungen besprochen wurden.

Des Weiteren wurden die Kluftzeichnungsrountinen für den dreidimensionalen Fall weiterentwickelt und die Arbeiten an Bilanzierungswerkzeugen für Ansatzfunktionen höherer Ordnung weitergeführt. Bei der Erweiterung von GRAPE in Hinblick auf numerische Verfahren höherer Ordnung stellt vor allem das Einlesen numerischer Daten in den Formaten von  $d^3f$  und  $r^3t$  eine große Schwierigkeit dar, da die Datenstrukturen in GRAPE an linearen, knotenbasierten Daten orientiert sind.

### 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 Wirtsfornationen 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 für Dispersion und ein heterogenes Boden er  
Das vorige Stabilitätskriterium wurde nun bezüglich der Rayleigh-Zahl umformuliert. Damit wurde dann die Stabilität des Elderproblems untersucht. Der Stabilitätsindikator ist positiv für stabile, rein diffusive Systeme (1 Finger in den numerischen Simulationen) und wechselt das Vorzeichen, wenn Konvektion beginnt (ab 2 Fingern in den numerischen Simulationen). Das entspricht Rayleigh-Zahlen bis etwa 300. Für noch größere Rayleigh-Zahlen nimmt die Stabilität des Systems ab und noch ein dritter Finger erscheint in den numerischen Simulationen.
- Die Heterogenitätseffekte wurden auch in dem Stabilitätskriterium eingebaut. Das Kriterium wurde wieder auf das Elderproblem getestet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

Zunächst ist geplant:

- Das Paper The effect of dispersion on the stability of density-driven flows in homogeneous porous media by J. L. Musuuza, S. Attinger, and F.A. Radu wird für Advances in Water Resources vorbereitet.
- Das Paper Stability of density-driven flows in heterogeneous media by J. L. Musuuza, S. Attinger, and F.A. Radu wird für Transport in porous media vorbereitet.
- Als nächster Schritt werden dann die Temperatureffekte im Stabilitätskriterium berücksichtigt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Ein Vortrag wurde im Colloquium UFZ in Leipzig gehalten.

Ein Vortrag wurde beim 7-EduR-Statustreffen im April gehalten.

Ein Vortrag wurde bei der EGU-Konferenz in Wien, Mai 2010, gehalten.

Zwei Papers werden demnächst eingereicht.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 endgültigen Fixierung der Modell-Gleichungen für die thermohaline Strömung, worunter wir die von Dichte- und Temperaturschwankungen getriebene Strömung in einem Grundwasserleiter verstehen, haben wir uns im Berichtszeitraum der Validierung unseres Codes für den 3D-Fall und der Untersuchung seiner Leistungsfähigkeit auf aktuellen Parallelrechnern gewidmet. Die Resultate der Simulation des Paket-Problems stimmen im zu erwartenden Ausmaß mit den Ergebnissen des bereits früher betrachteten 2D-Falls überein, zeigen jedoch eine interessante dreidimensionale Struktur. Die hohe Instabilität des Problems hat sich ebenfalls wieder gezeigt. Da 3D-Rechnungen naturgemäß sehr viel Rechenzeit und Speicher benötigen, bietet sich der Einsatz eines Parallelrechners an. Wir haben zum einen eine Rechnung auf einem institutseigenen kleinen Cluster mit 88 Elementen auf 64 Prozessorkernen und zum anderen eine Rechnung am HLRS in Stuttgart mit 89 Elementen auf 2048 Prozessorkernen durchgeführt. Die Rechenzeit konnte dabei trotz achtfacher Last von 50 auf 18 Stunden verkürzt werden. Das entspricht einer sehr akzeptablen parallelen Effizienz und zeigt, dass unser Code auch auf großen Rechnern sinnvoll genutzt werden kann.

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

Ein Programm für die numerische Berechnung der freien Grundwasseroberfläche wurde im Softwaresystem Mathematica für den zweidimensionalen Fall implementiert. Das System Mathematica erlaubt eine detaillierte (numerische und graphische) Beobachtung des Verhaltens des gesamten Verfahrens und vereinfacht damit die Implementierung des Verfahrens in  $d^3f$ . Obendrein kann man später einen Vergleich der numerischen Ergebnisse zwischen Mathematica und  $d^3f$  durchführen und die Richtigkeit der Implementierung bestätigen. Nach der Implementierung des Verfahrens in Mathematica hat es sich bestätigt, dass für ein gutes Verhalten des Verfahrens zwei Levelset-Funktionen notwendig sind - eine, die die Oberfläche beschreibt und eine andere, die die Normale zur Oberfläche definiert. Vorteil dieser Technik ist es, dass keine Reinitialisierung der Levelset-Funktion notwendig ist, was die Stabilität und Genauigkeit des gesamten Verfahrens sehr erhöht. Eine sehr wichtige Verbesserung wurde vorgenommen, die die sogenannte CFL-Beschränkung auf den Zeitschritt für die Knoten nah zur Grundwasseroberfläche vermindert. Als nächstes hat die Implementierung in Mathematica bestätigt, dass eine numerische Extrapolation der Geschwindigkeit, die die Bewegung der Grundwasseroberfläche beschreibt, auch für den Fall wenn die Oberfläche nur implizit gegeben ist, möglich ist. Unserer Meinung nach ist so ein Verfahren originell und noch nicht aus der Literatur bekannt. Eine vorläufige Implementierung des Verfahrens in UG wurde ebenfalls realisiert. Die Berechnung der Levelset-Funktionen in dieser Testversion ist schon erfolgt, die Implementierung der Extrapolation ist noch nicht beendet. Wenn die Testversion funktionsfähig ist, wird die Implementierung in das System  $d^3f$  und  $r^3t$  übertragen.

### 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*. (Accepted).

Grillo, A., Lampe, M., Wittum, G., (2010): Three-dimensional simulation of the thermohaline-driven buoyancy of a brine parcel. (Submitted)

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 19. und 20. April 2010 fand in Leipzig das 7. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten. Es wurde ein Zeitplan zur Übergabe der weiteren zwei- bzw. dreidimensionalen Versionen der Programme  $d^3f$  und  $r^3t$ , mit denen dann auch Wärmetransport und freie Oberflächen modelliert werden können, an die GRS vereinbart. Auch die Arbeit am Abschlussbericht wurde besprochen.

Der erste einfache zweidimensionale Testfall zur Matrixdiffusion in einem Kluft-Matrix-System wurde von der GRS gerechnet und ausgewertet. Die Ergebnisse stimmen weitgehend mit der analytischen Lösung überein. Kleinere Abweichungen sind noch zu diskutieren. Zur Kluftproblematik soll zudem ein aufwändigerer 3d-Testfall gerechnet werden. Die Aufbereitung der Daten wurde fortgesetzt und die Rechnung weiter vorbereitet.

Die neuen Funktionen im Grafikprogramm GRAPE wurden umfangreich getestet. Hierzu fand am 16. und 17.5. in Braunschweig ein Treffen mit den Entwicklern statt, wo die Beseitigung der lokalisierten Fehler und Unzulänglichkeiten in der Bedienung besprochen wurde. Leider ist es bisher nicht möglich alle Features zu testen, weil die Entwicklung von  $d^3f$  und  $r^3t$  noch nicht so weit fortgeschritten ist, dass ausreichend Testdaten zur Verfügung gestellt werden können.

Innerhalb eines Unterauftrages an das Steinbeis-Zentrum Ölbronn wurde der Gittergenerator ARTE an die Erfordernisse der Kluftmodellierung angepasst. Am 8. Juni fand zu diesem Thema ein Treffen in Frankfurt statt. Es sind noch Nacharbeiten notwendig.

Weitere Arbeitsgespräche wurden durchgeführt zu den Themen Einlesen von Modelldaten und Benutzeroberfläche. Hierzu soll jeweils ein Unterauftrag vergeben werden.

Die Zusammenstellung von Stoffkenngrößen für die thermohaline Strömung als Funktion von Druck, Temperatur und Salinität wurde fertiggestellt. Sie soll als eigenständiger GRS-Bericht veröffentlicht werden. Sie diene als Basis für die Festlegung der Eingabedaten und Abhängigkeiten für die Modellierung des Wärmetransportes.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

- Fertigstellung der Detailplanung für die Benutzeroberflächen, Beginn der Erstellung im Rahmen eines Unterauftrages
- Implementierung von Schnittstellen für die geometrischen Modelldaten
- 3D-Testreihen mit Klüften
- Testrechnungen mit Wärmetransport und freien Oberflächen
- nächstes Statusgespräch am 08./09. November 2010.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Str., 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10357</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern		
<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 31.03.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 31.03.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 798.105,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Curtius	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Aquatische Phasen, die in den Wirtsgesteinsformationen möglicher Endlager vorliegen, bedingen die Korrosion von Forschungsreaktor-Brennelementen (FR-BE). Die durch die Korrosion gebildeten sekundären Phasen binden die mobilisierten Radionuklide und verhindern bzw. verzögern dadurch ihre Freisetzung. Um verlässliche Aussagen im Hinblick auf eine langfristige sichere Endlagerung der FR-BE geben zu können, soll das Projekt dazu beitragen:

- a) das Korrosionsverhalten verschiedener FR-BE- Typen in unterschiedlichen aquatischen Phasen zu beschreiben,
- b) die kristallinen Bestandteile der entstandenen sekundären Phasen zu identifizieren und
- c) die Wechselwirkungen der Radionuklide mit den kristallinen Bestandteilen auf molekularer Ebene detailliert zu beschreiben.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Auslaugversuche mit **bestrahlten** FR-BE unterschiedlicher Zusammensetzung in unterschiedlichen Formationswässern möglicher Endlager.

AP2: Auslaugversuche mit **unbestrahlten** FR-BE in unterschiedlichen Formationswässern und Identifizierung der kristallinen, sekundären Phasenbestandteile.

AP3: Sorptions- und Inkorporationsuntersuchungen mit endlagerrelevanten Radionukliden an den identifizierten, kristallinen Phasenbestandteilen.



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

AP1: Zusammenfassung der Ergebnisse und Erstellen des Abschlussberichtes.

AP2: Zusammenfassung der Ergebnisse und Erstellen des Abschlussberichtes.

AP3: Zusammenfassung der Ergebnisse und Erstellen des Abschlussberichtes.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Projektende.

### **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 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.415.200,00 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 und 3 gearbeitet.

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

- CHET (Fernfeld-Modul)
- Datenbasis-Modul für Elementdaten

Das Programmkonzept für die CHET-Familie wurde optimiert und erweitert, was u. a. größere Flexibilität beim Einsatz von CHET erlauben wird. Im Einzelnen:

- Das explizite Differenzschema bei der Zeitdiskretisierung wurde durch ein implizites Schema ersetzt, was wesentlich höhere Stabilität des Rechenalgorithmus und flexiblere Wahl der Zeitschrittlänge erlaubt. Die Möglichkeit, größere Zeitschrittlängen zu verwenden, soll erheblich zur Verkürzung der Rechenzeit beitragen. Die Performancetests sind jedoch erst nach dem Fertigstellen des Programms möglich.
- Diese Optimierung führte auch zu einer wesentlichen Vereinfachung des Programmcodes, was die zukünftige Wartung und Weiterentwicklung der Software entscheidend erleichtert.
- Das backward-Differenzschema des Advektionsterms, das für den advektions-dominierten Transport ausgelegt ist, wurde durch die lineare Kombination aus Backward-Schema und Zentrale-Differenzschema (bildet den diffusions-dominierten Transport ab) ersetzt. Durch einen Steuerparameter kann das Differenzschema für einen Abschnitt des Transportweges dynamisch entsprechend dem dort vorherrschenden Transportmechanismus automatisch gewählt werden.
- Zwei zusätzliche Randbedingungen wurden eingeführt: Dirichlet und no-flow-boundary (Spezialfall der Neumann-Randbedingung für einen undurchlässigen Rand). Es besteht auch die Möglichkeit, von null verschiedene Nuklidkonzentrationen als Anfangs- und Einstromrand-Bedingungen einzugeben.
- Es besteht die Möglichkeit, das unterschiedliche Sorptionsverhalten der Nuklide (element-spezifisch) in einer Simulation zu berücksichtigen.
- Mehrere Schnittstellen mit dem Nahfeld (LOPOS) wurden ermöglicht.

Bei der Ausarbeitung der Software-Architektur wurde auf die Wiederverwendbarkeit der einzelnen Programmteile großer Wert gelegt.

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

Die Umsetzung der CHET-Familie (Fernfeld) befindet sich in einer fortgeschrittenen Phase. Die Einlese- und Rechenroutinen sind im Wesentlichen bereits funktionsfähig. Die Berechnung des radioaktiven Zerfalls und der Sorption sind realisiert. Die Ausgaberroutinen sind rudimentär vorhanden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Anpassung der in Fortran vorliegenden Module an die neue Daten-Schnittstelle und das neue Datenaustauschformat soll abgeschlossen werden.

Die Routinen zur Simulation und Steuerung der statistischen Rechenläufe sollen fertig gestellt werden.

Die Realisierung des überarbeiteten Konzepts für die CHET-Familie (CHETLIN, CHETNIS) in C++ soll zu Ende geführt 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010
<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 der Bohrlochverformung:*

Erstellung eines repräsentativen 2D-Modells der im Bereich der DR Niche installierten Dilatometer-sonde mit Berücksichtigung von Streckenauffahrungsprozessen und Standzeiten vor / nach Bohrlocherstellung und Probeneinbau. Durchführung von numerischen Untersuchungen mit einem elastischen Stoffmodell unter Ansatz einer hydro-mechanischen Kopplung. Gegenüberstellung und Präsentation der Ergebnisse der numerischen Simulation mit den ermittelten Messbefunden in Nantes 2010 (siehe Veröffentlichungen).

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

Übertragung der bereits im Rahmen von vorlaufenden numerischen Untersuchungen (BEZ-G) verwendeten 3D-Berechnungsmodells auf die Streckengeometrieanforderungen des MB Experiments. Durchführung von numerischen Untersuchungen mit sukzessiver Simulation des Streckenvortriebs mit einem anisotropen elastischen Stoffmodell unter Ansatz einer hydro-mechanischen Kopplung. Gegenüberstellung und Präsentation der Ergebnisse der numerischen Simulation mit den Messbefunden bei der NAGRA im Mai 2010. Erarbeitung von Defiziten zur Modelloptimierung.

#### *Laboruntersuchungen:*

- Der zweite Quellversuch wurde mit einer aufgeheizten Tonprobe gestartet, um das Quellvermögen von Tonstein nach der Aufheizung bei einer hohen Temperatur von 100 °C zu bestimmen. Bei Begrenzung der Axialverformung und ohne Radialbeanspruchung wurden ein maximaler Axialquelldruck von 4,5 MPa und eine maximale Radialverformung von über 0,5 % bei Luftbefeuchtung unter 100 % Luftfeuchtigkeit gemessen.
- Die zwei triaxiale und sechs einaxiale Kriechversuche sind bei unterschiedlichen Belastungen bislang über ein Jahr fortgeführt worden. Deutliche Kriechverformungen wurden beobachtet. Ein neuer Triaxialkriechversuch wurde im Mai gestartet, um Einfluss von Temperatur zu ermitteln.
- Bei den Wasserpermeabilitätsmessungen an 5 stark geschädigten Tonproben wurde der Wasserinjektionsdruck auf 0,1 MPa bei Temperatur von 20 °C und Manteldrücken von 2 bzw. 3,5 MPa gesenkt, um die Gültigkeit des Darcy-Gesetzes für die realistischen Wasserdruckgradienten in konsolidiertem Tonstein nachzuprüfen.
- Ein Verheilungsversuch an einer stark geschädigten Tonprobe wurde durchgeführt. Dabei wurden deutliche Riss-schließung und die entsprechende Reduzierung der Gaspermeabilität bei mechanischer Belastung gemessen.
- Neben der Kompaktionsversuche am Tonrückstand im normalen Oedometer wurde eine Großversatzprobe von 280 mm Durchmesser und 640 mm Höhe bis zu 6 MPa in einer großen Triaxialprüfanlage kompaktiert. Dabei wurde eine Abnahme der Porosität von 36 % auf 24 % gemessen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Erstellung eines Zwischenberichts über das Mine-By-Experiment (?) und die Modellierung (TN)
- Weiterführung des Bohrlochttests zur Langzeitverformungen im Mont-Terri-URL
- Weiterführende numerische Untersuchungen mit den erarbeiteten Modellansätzen
- Weiterführung der Kriechversuche, Quellversuche und Permeabilitätsmessungen
- Weiterführung der Kompaktions-/ Permeabilitätsversuche am Tonrückstand als Versatzmaterial

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorträge beim International Meeting on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement (Nantes, März 2010):

Czaikowski, O.; Wiczonek, K.: Identification of potential driving mechanisms for HM coupled time-dependent deformation of argillaceous rocks.

Zhang, C.-L.: Experimental Evidence for Self-Sealing of Fractures in Claystone.

Beim ANDRA-Seminar (Bure Mai 2010): Zhang, C.-L.: Deformation, Swelling and Self-Sealing of the Callovo-Oxfordian Claystone.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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  $\text{NaClO}_4$ , Temperaturen von  $20^\circ\text{C} > T > 80^\circ\text{C}$ , 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,  $20^\circ\text{C} > T > 80^\circ\text{C}$ ,  $3 > \text{pH} > 10$ ) und unter endlagerrelevanten Bedingungen (Porenwasser)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Das Komplexsystem von Eu(III) mit Pyromellitsäure (1, 2, 4, 5-Benzen-tetracarboxylsäure, BTC) wurde strukturell untersucht: experimentell mit ATR FT-IR und rechnerisch mit DFT (density functional theory). Dabei wurden mit DFT die FT-IR-Spektren für verschiedene mögliche Strukturen berechnet und mit den experimentell ermittelten Spektren verglichen. Es zeigte sich, dass der Eu-BTC 1:1-Komplex sowohl in Lösung als Monomer als auch im Polymer gleiche Bindungsformen zeigt. Es bindet jeweils 1 Carboxylatgruppe monodentat unter Verdrängung von 2 Wassermolekülen aus der Eu-Hydrathülle, im Gleichgewicht mit einer Chelatringbildung von 2 Carboxylatgruppen eines BTC-Moleküls, die jeweils monodentat an das Eu binden. Im Polymer bleibt die monodentate Bindungsstruktur alternierend als Einzel- oder Chelatbindung erhalten. Jeweils 1-2 Carboxylatgruppen eines Eu-BTC-Komplexmoleküls binden an ein weiteres Eu-BTC-Komplexmolekül, so dass sich polymere Ketten- oder auch Netzstrukturen bilden.
- Es wurden temperaturabhängige Sorptionsexperimente von Eu(III) an Opalinuston im Porenwassermedium bei pH 7,6 in Anwesenheit kleiner organischer Liganden (Citronen- und Weinsäure) durchgeführt. Mit steigender Ligandkonzentration nimmt die Eu-Sorption deutlich ab. Die Abnahme der Eu-Sorption verläuft umso stärker, je höher die Konzentration der sich bildenden negativ geladenen Eu-Citrat bzw. Eu-Tartrat-Komplexe ist. Eine Sorption dieser Komplexe am Opalinuston erfolgt nicht. Bei jeder Ligandkonzentration nimmt die Sorption von Eu(III) am Opalinuston mit steigender Temperatur jedoch zu. Die höheren Temperaturen führen damit zu einer verstärkten Eu(III)-Immobilisierung am Ton, trotz des gegenläufigen Prozesses einer Eu(III)-Mobilisierung infolge der Komplexbildung.
- Im Berichtszeitraum wurde an Veröffentlichungen gearbeitet (siehe unten).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der temperaturabhängigen Batch-Sorptionsexperimente (mit Am(III) und Eu(III), pH = 7,6, Porenwasser, Anwesenheit eines organischen Liganden (AP3))
- Fortführung der mikrotitrationskalorimetrischen Untersuchungen an ausgewählten Eu(III)-Komplexsystemen (u. a. mit Weinsäure, Lactat)
- Die Komplexbildung von Eu(III) und Am(III) mit Lactat wird temperaturabhängig mittels TRLFS untersucht

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Astrid Barkleit, Gerhard Geipel, Margret Acker, Steffen Taut, Gert Bernhard: "First fluorescence spectroscopic investigation of Am(III) complexation with an organic carboxylic ligand, pyromellitic acid", *Spectrochimica Acta Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, eingereicht

M. Müller, M. Acker, S. Taut, G. Bernhard: „Complex formation of trivalent americium with salicylic acid at very low concentrations“, *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, in press

Astrid Barkleit, Satoru Tsushima, Olesya Savchuk, Jenny Philipp, Margret Acker, Steffen Taut, Karim Fahmy: "Eu<sup>3+</sup>-Mediated Polymerization of Benzenetetracarboxylic Acid Studied by Spectroscopy, Temperature-Dependent Calorimetry, and Density Functional Theory", in Vorbereitung, Einreichung in *Inorganic Chemistry* geplant

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010
<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; Durchführung mehrerer Kalibermessungen und Bohrlochobservationen auch am Standort Mont Terri zum Faziesvergleich in Absprache mit Nagra.
- AP4: Aufarbeitung von detaillierteren Versuchsdaten aus der Literatur für eine korrekte Vergleichbarkeit dieser Daten mit eigenen Versuchsrandbedingungen und Versuchsergebnissen (Materialkennwerte, Bruchgrenzen) im Hinblick auf die Ableitung eigener Materialparameter für die Lokation Tournemire.
- AP5: Durchführung von ergänzenden Kurzzeitversuchen sowie von Langzeitversuchen (Abschluss der laufenden und Start von weiteren Langzeitversuchen, TCc und UCc) aus dem bestehenden laborativen Versuchsprogramm an Bohrkernmaterial der Lokation Tournemire mit variierender Schichtungsflächenorientierung (0°, 45°, 90°) und unter verschiedenen Randbedingungen zwischengelagert (Aluminiumfolie, Druckbehälter); eine Messung oder gar Regelung des Porenwasserdrucks während der Versuchsdurchführung an Material der Lokation Tournemire erwies sich aufgrund dessen sehr geringer Permeabilität und somit zu langer Resättigungszeiträume als nicht praktikabel (nach 2½ Jahren ist noch kein Wasseraustritt als Zeichen der Resättigung erfolgt); dennoch Fortführung der Prüfkörper-Resättigung in Zwischenlagerungsbehältern.
- AP7: Erstellung erster Berechnungsmodelle für die vermessenen Bohrlöcher (Tournemire).
- AP8: Durchführung erster Berechnungen zum Tragverhalten der Bohrlöcher im Querstollen 1996 der Lokation Tournemire.
- AP10: Präsentation der Ergebnisse im internationalen Rahmen (Nantes, 29.03.2010, Poster).
- AP11: Weiterführung der Arbeiten zum Abschlussbericht.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP3: Durchführung von Wiederholungsmessungen in den im Laufe dieses Vorhabens bereits vermessenen Bohrlöchern am Standort Tournemire in Absprache mit IRSN.
- AP5: Durchführung der verbleibenden Versuche aus o. g. laborativem Versuchsprogramm.
- AP6: Ableitung von zeitabhängigen und zeitunabhängigen (siehe AP4) Materialkennwerten.
- AP7: Erstellung eines Berechnungsmodells für die vermessenen, diagonal ins Gebirge gestoßen Bohrlöcher der Lokation Tournemire.
- AP8: Durchführung von Berechnungsvariationen mit den in AP6 neu abzuleitenden Materialparametern an Referenzmodellen aus AP7.
- AP9: Gegenüberstellung der Ergebnisse aus den weiteren Variationen aus AP8 mit Arbeiten aus AP1 (Mine-by-Test) und Messungen aus AP3 (Bohrlochdeformationen); Optimierung des Kriechbruchkriteriums und Untersuchung des Langzeittragverhaltens.
- AP11: Fortführung der Dokumentation der Forschungsarbeiten, Generalisierung der Befunde, Weiterführung der Arbeiten zum Abschlussbericht.

### **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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 experimentellen Arbeiten betreffend, wurde nach Fertigstellung der Experimente zur Bestimmung des Quelldrucks und der hydraulischen Konduktivität an Calcigel mit den entsprechenden Versuchen an Kunigel und MX80 begonnen. Diese Versuche wurden mit destilliertem Wasser beaufschlagt. Jeder der Versuche dauert über einen Zeitraum von 3 bis 4 Monaten, in Abhängigkeit der Trockendichte.

#### *Theoretische Arbeiten*

Es wurden 3 verschiedene bestehende Modelle zur Ermittlung der hydraulischen Konduktivität untersucht. Die Theorie der diffusen Doppelschicht (DDL – Theorie) wurde angewendet, um das Quellverhalten von ausgewählten Bentoniten zu erklären. Die bestehenden Modelle zur Ermittlung der hydraulischen Konduktivität wurden auf der Grundlage eines Teils der experimentellen Ergebnisse weiterentwickelt. Der verbleibende Teil der experimentellen Ergebnisse sowie Daten aus der Literatur wurden daran herangezogen, um die weiterentwickelten Modelle zu verifizieren.

#### *Numerisch Arbeiten*

Die experimentell gewonnenen Quelldruckergebnisse wurden mit Hilfe der CodeBright Software simuliert. 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 o. g. Quelldruckversuche mit den anschließenden Versuchen zur Bestimmung der hydraulischen Konduktivität werden gemäß Versuchsprogramm fortgesetzt. Nach der Beendigung der Versuche mit destilliertem Wasser, werden die Versuche mit hoch konzentrierter Lösung als Fluid durchgeführt. Die gewonnenen experimentellen Ergebnisse zur hydraulischen Leitfähigkeit werden fortlaufend ausgewertet und mit den theoretisch bestimmten hydraulischen Leitfähigkeiten verglichen. Die theoretischen Ansätze zur Bestimmung der hydraulischen Leitfähigkeit können, soweit erforderlich, fortlaufend modifiziert werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Es wurden drei Veröffentlichungen bei der „International Conference on Geotechnical Engineering“ in Pakistan eingereicht und akzeptiert. Diese wird am 5. – 6. November 2010 gehalten:

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.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Depo- nietechnik Wilsnack & Partner, Lessingstr. 46, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10447</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2007 bis 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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:

- Programmtestung

Hardware Oberflächenpacker:

- Bau zweiter Oberflächenpacker mit Prüf- und Kontrollraum

Hardware verlorener Drucksensor:

- Konzipierung, Konstruktion und Ausschreibung von einsatzfähigen kabellosen Sensoren unter den Bedingungen eines Bauwerkes aus kohäsivem Material im Steinsalz – Edelstahlgehäuse, Justierung Elektronik, Antennengehäuse
- Dimensionierung Akkuleistung
- Anpassung Elektronik – u. a. Abmessungen Leiterplatte, Positionierung Anschlüsse, Signalübertragung für gleichzeitigen, parallelen Betrieb mehrerer Sensoren – für den Messeinsatz im Versuchsbauwerk

Tests:

- Ermittlung der Volumina in Prüf- und Kontrollraum für den neuen Oberflächenpacker
- erfolgreicher Dichtheitstest für den neuen Oberflächenpacker,
- Testung der Oberflächenpacker für die Ermittlung der Permeabilität unterschiedlicher Materialien: verschiedene Sandsteine, Beton,

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Fortsetzung des Projektes entsprechend Arbeitsprogramm (Abschnitt 2) mit den Arbeitspaketen 6-9. Schwerpunkte der weiteren Arbeiten sind die Konzipierung, der Bau und die Testung der kabellosen Sensoren für den Einsatz im Verschlussbauwerk. Parallel dazu erfolgt die Berichtslegung für den ersten Teil des Vorhabens.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Berichtszeitraum wurden keine abgeschlossenen Berichte erarbeitet.

Der Stand des Vorhabens wurde anlässlich des 9. Projektstatusgespräches zu BMBF/BMWi-geförderten FuE-Vorhaben auf dem Gebiet der Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen unter dem Vortragstitel „Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung“ am 16.06.2010 in Karlsruhe vorgestellt.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> TU Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10457</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2007 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 652.391,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Konietzky	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Durch die Beschreibung des strukturellen Aufbaus von Baustoffen sollen modelltechnisch fundierte Rückschlüsse zu den Eigenschaften heterogen strukturierter Baustoffe abgeleitet werden. Exemplarisch werden die für Verschlussbauwerke relevanten Materialien MgO-Beton und Asphalt betrachtet.

Die Beschreibung des Strukturmodells erfolgt durch die Bestimmung der Eigenschaften der Einzelkomponenten, der Kontakteigenschaften sowie der räumlichen Struktur. Das Gesamtverhalten des Systems wird durch Triaxialversuche mit Schädigungsdetektierung, Druck- und Zugversuche sowie Kriechversuche und Bruchzähigkeitsversuche festgestellt. Daraus werden entsprechende Stoffgesetze entwickelt, die mit den Strukturmodellen in Rechenprogramme einfließen.

Die Ergebnisse ermöglichen die Beschreibung des Verformungs- und Bruchverhaltens von Beton (MgO-Beton) und von Asphalt. Dadurch ist eine wissenschaftlich fundierte Optimierung der Baustoffrezepturen und die Entwicklung maßgeschneiderter Baustoffe für langzeitstabile Verschlussbauwerke möglich. Für die Prognose des Langzeitverhaltens von Verschlussbauwerken werden neue Werkzeuge geschaffen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Beschreibung eines Strukturmodells für Asphalt
- AP2: Beschreibung eines Strukturmodells für Beton
- AP3: Umsetzung der Strukturmodelle in das Rechenprogramm (UDEEC, PFC)
- AP4: Beschreibung und Steuerung des Langzeitverhaltes von Asphalt
- AP5: Beschreibung und Steuerung des Langzeitverhaltes von Beton
- AP6: Sensitivitätsuntersuchungen und Optimierungsrechnungen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP3: Für das heterogene Material MgO-Beton wurde ein Kalibrierungskonzept entwickelt und in Beispielkalibrierungen umgesetzt. Wesentlicher Bestandteil ist neben einem Kalibrierungsalgorithmus für die homogenen Komponenten ein elastisches Zwei-

Komponenten-Gemischmodell, welches die elastischen Eigenschaften von Bindemittel, Zuschlag und Beton in Verbindung bringt. Über einen Anisotropie-Parameter kann das Modell geometrisch an die Verteilung der Zuschlagscluster in der Probe angepasst werden. Mit diesem Modell kann das Problem bewältigt werden, dass Laborwerte der elastischen Parameter nur für die erste Komponente Bindemittel und das Gemisch Beton zur Verfügung stehen, nicht aber für den Zuschlag als zweite Komponente. Die Festigkeit des Zuschlags wird über die Simulation von Einzelkorn-Druckversuchen und deren Anpassung an entsprechende Laborversuche kalibriert. Die einzelnen Kalibrierungsschritte sind in Programmroutinen umgesetzt, so dass eine automatische Ausführung möglich wäre.

Die mit dem Simulationsprogramm erzielbaren Resultate wurden mit einer großen Zahl von grafischen Darstellungen des Materialverhaltens dokumentiert. Neben Verhaltensvergleichen von Komponenten und Gemisch bei unterschiedlichen Versuchen sind insbesondere Einsichten in die Mikrorissentwicklung bei Belastung möglich, getrennt nach verschiedenen Typen von Materialkontakten im Modell.

Auf Grundlage des entwickelten und implementierten nutzerdefinierten Kontaktmodells für Asphalt wurden die Simulationen der Bitumen-Kriechversuche mit neuen Ansätzen fortgesetzt, ohne eine Lösung für die gravierenden Stabilitätsprobleme des Servomechanismus zur Druckeinstellung zu finden. Eine Umgehung des Servomechanismus ist für die weitere Arbeit angedacht.

- AP4: Die Laborversuche zur Erweiterung der Datenbasis von Asphalt wurden fortgeführt. Da es sich bei Asphaltmastix um ein für Verschlussbauwerke sehr interessantes Material handelt, wurde eine ausführliche Charakterisierung der Eigenschaften dieses Werkstoffes vorgenommen, die für künftige weitere Modellierungen des Materials eine solide Grundlage bildet.
- AP6: Mit dem Sensitivitäts- und Optimierungstool optiSLang von der dynardo GmbH und angekoppeltem Simulationsprogramm wurden weitere Sensitivitätsanalysen für MgO-Bindemittel und -Beton durchgeführt mit einer deutlich erhöhten Anzahl von Designs (von 24 bzw. 40 auf 160). Die bereits bei kleineren Versuchsanzahlen sichtbaren Parameterzusammenhänge manifestierten sich deutlicher ohne wesentliche neue Informationen. Als Test der Optimierungsfähigkeiten des Tools wurde eine Optimierungsaufgabe mit zwei verschiedenen Algorithmen gelöst, die eine alternative Lösung der homogenen Kalibrierungsaufgabe darstellt. Die Funktionsfähigkeit des Optimierungskonzeptes wurde damit dokumentiert. Der früher entwickelte Kalibrierungsalgorithmus ist allerdings um ein Mehrfaches schneller.

Das Schreiben des umfangreichen Abschlussberichtes erforderte einen großen Zeitanteil.

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

Das Projekt wurde abgeschlossen.

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

Zwei Veröffentlichungen 2010/2011 geplant.

<b>Auftragnehmer:</b> Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec) GmbH, Forschungs- gelände, 85748 Garching b. München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10467</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2007 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 446.850,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Alkan	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit den vorgeschlagenen Arbeiten soll die gekoppelte Modellierung von hydraulischen, mechanischen, thermischen und chemischen Prozessen für die Beschreibung des reaktiven Stofftransports bei der Endlagerung in Salz- und Tonformationen vorangebracht werden. Für die numerische Umsetzung dieser Modellierung soll der Code TOUGHREACT verwendet werden, da positive Erfahrungen für derartige Anwendungen vorliegen. Der Code soll zu diesem Zweck angepasst, weiter entwickelt und qualifiziert werden. Die Ergebnisse sollen einen Vergleich der beiden Endlagerwirtsgesteine ermöglichen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Erweiterung der thermodynamischen Datenbasis

Die thermodynamische Datenbasis des Codes TOUGHREACT wird, basierend auf der bekannten chemischen EQ3/6 Datenbank, erweitert, qualitätsgesichert und komplettiert. Hier-von betroffen sind insbesondere die Gleichgewichts- und Kinetikkonstanten sowie die Pitzer-Koeffizienten der primären und sekundären Komponenten aller Phasen.

AP2: Numerische Implementation

Für eine korrekte Umsetzung des Codes TOUGHREACT in die gezielten Arbeitspunkte wer-den numerische Weiterentwicklungen und Implementationen geplant. Für diesen Arbeits-punkt werden folgende Arbeiten durchgeführt:

Das vorliegende Pitzer Aktivitätsmodell für die thermodynamische Modellierung hochsalina-  
rer gesättigter Lösungen wird aktiviert, getestet und validiert.

Die mechanische Konvergenz und Quellung des Bentonits werden an das existierende Modell gekoppelt.

Das ECO2 Zustandsgleichungsmodell des TOUGHREACT wird für eine verbesserte Model-  
lierung der CO<sub>2</sub>- und CH<sub>4</sub>-haltigen Laugensysteme weiterentwickelt, getestet und validiert.

Die in TOUGHREACT implementierten Porositäts- und Permeabilitätsbeziehungen und Klufthbreite-Permeabilitätsmodelle sowie Zweiphasenfluss-Parameter, wie relative Permeabili-tät und Kapillardruck, werden auf ihre Funktionalität getestet.



**AP3: Validierung mit Labordaten**

Die Validierung der oben beschriebenen Modifikationen in TOUGHREACT wird anhand experimenteller Daten durchgeführt, die eventuellen Abweichungen werden analysiert und überarbeitet.

**AP4: Anwendung**

Ziel dieses Projektteils ist die Demonstration der Anwendbarkeit der modifizierten TOUGHREACT-Version für realitätsnahe Sicherheitsanalysen von Endlagersystemen anhand eines repräsentativen Modells. Dieses Projektteil wird für Salzgestein und Tonformationen getrennt durchgeführt.

**AP5: Dokumentation**

Die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden schriftlich dokumentiert.

**3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Folgende Arbeiten wurden nach Arbeitsplan durchgeführt:

Die Projektarbeiten wurden mit der Arbeitspaket AP5-Anwendung durchgeführt. Ziel dieses Projektteils ist die Demonstration der Anwendbarkeit der modifizierten TOUGHREACT-Version für Sicherheitsanalysen von Endlagersystemen. Konzepte und numerische Modelle wurden von realitätsnahen Endlagersystemen sowohl für Salzgestein als auch für die Tonformationen erstellt und mit Rechnungen weiter entwickelt. Die Ergebnisse wurden im Rahmen der Sicherheitskonzepte analysiert und diskutiert.

**4. Geplante Weiterarbeiten**

Die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden schriftlich dokumentiert. Der Abschlussbericht wird vorbereitet.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<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 30.09.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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:

- Durchführung eines weiteren Arbeitsgesprächs mit FZD in Braunschweig.
- Die relevanten Elemente, Minerale und Sedimente wurden ausgewählt und die Ermittlung der Datensituation abgeschlossen. Die relevanten Einflussgrößen für die Sorption wurden ausgewählt und zusammengestellt.
- Der Durchführung und Auswertung der Sorptionsexperimente für Muskovit ist fast abgeschlossen, für Orthoklas werden derzeit die Experimente mit Cs durchgeführt.
- Die Bandbreiten der Radionuklidkonzentrationen und die Zusammensetzung der relevanten Grundwassertypen zur Berechnung der „Kd-Wolke“ wurden anhand früherer  $r^3t$ -Rechnungen und Literaturdaten definiert.

#### AP2:

- Ein Treffen mit Kollegen des Steinbeis-Institutes zur Diskussion der Weiterentwicklung von  $r^3t$  hat stattgefunden. Ein konzeptionelles Modell zur Berücksichtigung der Einflussgrößen in  $r^3t$  wurde erstellt und an das Steinbeis-Institut weitergeleitet. Die Codeanpassung von  $r^3t$  wurde begonnen und Testfälle zur Überprüfung des neuen Codes zusammengestellt.
- Der Säulenversuch zum U(VI)-Transport in einer quarzgefüllten Säule wurde weitestgehend abgeschlossen und die Ergebnisse in Projektgesprächen mit dem Institut für Geoökologie der TU Braunschweig diskutiert.

#### AP3:

- Anwendungsfälle für Strömungs- und Transportrechnungen wurden definiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1:

- Abschluss der Sorptionsexperimente und ihrer Auswertung mit den Systemen Sr/Cs-Orthoklas und Th-Orthoklas/Muskovit. Durchführung der Titrationsexperimente für Orthoklas und Muskovit. Ableitung von Parametern für die Oberflächenkomplexmodellierung für alle untersuchten Systeme.
- Berechnung der smart- $K_d$ -Werte und Überprüfung des Bottom-Up Ansatzes durch ein Sorptionsexperiment von Eu am Sediment (20 % Ka, 40 % Or, 40 % Mu).

#### AP2:

- Implementierung des Konzepts zur Berücksichtigung aller geochemischen Prozesse in  $r^3t$  und geeigneter Einbau des  $K_d$ -Abrufs durch das Steinbeis-Institut.
- Weiterführende Auswertung der Säulenversuche und der eindimensionalen Rechnungen mit Phreeqc und Durchführung entsprechender Rechnungen mit  $r^3t$  zur Überprüfung des modifizierten Codes.

#### AP3:

- Durchführung weiterer Transportrechnungen mit dem bisherigen  $r^3t$ -Code sowie von Strömungs- und Transportrechnungen mit dem modifizierten Code.

### 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 30.09.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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:

- Festlegung wichtiger hydrogeologischer Sedimenteinheiten (oGWL, GWGL, uGWL) und Abschätzung der prozentualen Gewichtsanteile der relevanten Mineralphasen
- Überprüfung und Aktualisierung der thermodynamischen Daten:
  - Relevanz der Minerallöslichkeiten bei Temperaturänderung auf 15 °C überprüft, keine Berücksichtigung in Formeln aus Konzeptpapier notwendig
  - Daten, Referenz und generelle Relevanz wässriger Al- und Si-Komplexe ( $\text{Fe-SiO}(\text{OH})_3^{2+}$ ,  $\text{AmSiO}(\text{OH})_3^{2+}$ ,  $\text{EuSiO}(\text{OH})_3^{2+}$ ) ermittelt
- Zusammenstellung der SCM-Parameter (pK1/pK2, logK, spez. Oberfläche) für die ausgewählten Mineral/Sorbens-Paare, Mittelwertbildung und erste Testrechnungen mit PHREEQC zur Kd-Berechnung mit standortspezifischer Sedimenteinheit oGWL

#### AP2:

- Aktualisierung des konzeptionellen Modells für die Variation der Einflussgrößen, deren wechselseitiger Abhängigkeit und den Stofftransport weiterer Komponenten / Elemente in  $r^3t$  → Erstellung und Überprüfung wichtiger Berechnungsformeln (Protonenkonzentration, DIC, Konzentrationen an Al und Ca), Minerallöslichkeiten, Aktivitätskoeffizienten als Funktion der Ionenstärke (auf Basis SIT-Modell)

#### AP4:

- Dokumentation der Auswahl standortspezifischer und thermodynamischer Einflussgrößen sowie der Sedimentauswahl
- Vorstellung einer gemeinsamen Servernutzung (z. B. [www.mydrive.ch](http://www.mydrive.ch))

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1:

- Komplettierung der SCM-Parameter einschließlich deren Bandbreiten, Übertragung in die dezidierte ESTRAL-Datenbank im PHREEQC-Format
- Beginn der Erzeugung der Kd-Matrizen mittels der Software UCODE und PHREEQC

#### AP2:

- Überprüfung des Modells zur Variation der chemischen Stoffgrößen im  $r^3t$ -Code
- Konzept zur Bearbeitung/Speicherung mehrdimensionaler, nicht-äquidistanter Tabellen

#### AP4:

- Einrichtung eines gemeinsamen Fileservers
- Dokumentation der Auswahl der SCM-Parameter

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Vortrag auf Jahrestagung der Kerntechnik in Berlin (04.-06.05.2010)

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 von einander 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  $\text{Fe}^{2+}$  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-Korrosions-geschwindigkeit 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 zu diesen beiden Arbeitspaketen keine neuen Versuche durchgeführt. Für die genauere Berechnung der Permeabilitäten aus den bereits vorliegenden Versuchen wurden Viskositätskoeffizienten der gesättigten NaCl-Lösung für 60 °C und 90 °C bestimmt. Die unterschiedlichen Ansätze zur Bestimmung von Porositäten mittels Wasserextraktion über Lösungen mit unterschiedlicher Gleichgewichtsfeuchte und über DSC- sowie DTA-Messungen haben nicht zu den erwarteten Ergebnissen geführt. Bei der Wasserextraktion mittels Trocknung mit Salzlösungen unterschiedlicher Gleichgewichtsfeuchten

(NaCl-Lösung=70 %,  $\text{NH}_4\text{NO}_3$ =65 %,  $\text{CaCl}_2$ =31 % und  $\text{LiCl}$ =12 %) wurden freisetzbare Wassermengen bestimmt. Die Untersuchungen, daraus Porositäten abzuleiten, sind noch nicht abgeschlossen. Die DSC-Versuche zur Porositätsbestimmung an der TU-Braunschweig waren wegen der hohen Salzgehalte der Bentonitporenlösungen nicht auswertbar.

AP2:

Mehrere Versuche zur Bestimmung der Diffusionskonstanten der Schwermetalle Pb, Zn und Cd wurden durchgeführt und ausgewertet. Die Auswertung der Messungen hat ergeben, dass die Randbedingungen der Versuche verändert werden müssen. Auch die Analytik mußte umgestellt werden, um niedrigere Gehalte der Schwermetalle in den Teilproben der Diffusionsversuche noch erfassen zu können. Zurzeit läuft ein Versuch mit der Rohdichte  $1,6 \text{ g/cm}^3$  mit Cd allein. Cd wurde in eine 90 % gesättigte NaCl als  $\text{CdCl}_2$  in die Durchströmungslösung zugegeben. In einem weiteren z. Z. ebenfalls noch laufenden Versuch mit der Bentonit-Rohdichte von 1,4 wird versucht, wie ursprünglich geplant, die Diffusionskoeffizienten der Schwermetalle Pb, Zn und Cd gleichzeitig zu bestimmen. Die drei Schwermetalle wurden jeweils als Chloride mit der Konzentration von 10-5 mol/l einer 50 % NaCl-Lösung zugegeben. Diese Versuche sind wesentlich zeitintensiver als zunächst erwartet. Die im Projektantrag angekündigten Ergebnisse können in der regulären Projektlaufzeit bis Dezember 2010 nicht in vollem Umfang erreicht werden. Dem Projektträger wird im August 2010 eine vollständige Übersicht über die angestrebten und die erreichten Ergebnisse ebenso vorgelegt, wie eine Zeitplanung für die noch zu erreichenden Ergebnisse. Schon jetzt zeichnet sich ab, dass eine Laufzeitverlängerung erforderlich werden wird.

AP4:

Die in diesem AP durchzuführenden Laborversuche laufen planmässig. Versuche wurden mit den Bentoniten MX-80 und Friedlandton begonnen. Zurzeit laufen vier Durchströmungsversuche mit MX-80 und Friedlandton, jeweils mit einer gesättigten NaCl-Lösung mit und ohne  $\text{FeCl}_2$ . Zwei Versuche laufen bei  $25^\circ$  und zwei bei  $90^\circ \text{C}$ . Die Versuche mit Friedlandton laufen schneller als die mit MX-80, weil der Friedlandton nicht so stark quillt wie MX80. Diese Versuche werden im zweiten Halbjahr 2010 planmässig abgeschlossen werden. Teilergebnisse der mineralogischen Ergebnisse liegen vor. Da ein Teil der Versuche noch bis Ende des Jahres laufen muss, wird sich die anschließende mineralogische Untersuchung und damit die Auswertung auch bis ins Jahr 2011 erstrecken.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

Die Arbeiten zur Ermittlung der Viskositätskoeffizienten einer gesättigten IP21-Lösung bei  $60^\circ \text{C}$  und  $90^\circ \text{C}$  werden zum Abschluss gebracht.

AP2:

Die Versuche zur Bestimmung der Diffusionskoeffizienten werden fortgesetzt.

AP3:

Die Durchströmungsversuche zur Ermittlung der Montmorillonitumwandlung im offenen System sollen mit Versuchen bei  $25^\circ \text{C}$  und  $90^\circ \text{C}$  mit NaCl-Lösung ohne  $\text{FeCl}_2$  fortgesetzt werden. Aus den anschließenden mineralogischen Untersuchungen der Tone mit und ohne Kontakt zu  $\text{FeCl}_2$  wird erwartet, den Einfluss des  $\text{Fe}^{2+}$  ermitteln zu können. Die gleichen Versuche werden als Batchversuche (Simulation des geschlossenen Systems) wiederholt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Ein Zwischenbericht der Universität Greifswald zu den Ergebnissen der bisherigen mineralogischen Untersuchungen an unterschiedlichen Bentoniten, die in den GRS-Versuchen mit Salzlösungen im offenen und geschlossenen System reagiert haben, liegt 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010
<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: Beantwortung eines Fragebogens der NEA zum Thema Verwendung von zusätzlichen Indikatoren in Langzeitsicherheitsanalysen. Betreuung der Consultant-Arbeit zur Auswertung des Fragebogens und Erstellung eines aktualisierten Issue Papers. Teilnahme am 4. Arbeitstreffen in Paris.



- Teilnahme an der jährlichen Sitzung des RWMC.
- Prüfung des Abschlussberichts und Teilnahme am Workshop zur Oberflächenkomplexmodellierung im Rahmen des NEA-Sorptionsprojekts III.
- Teilnahme an der Sitzung des Arbeitskreises Szenarienentwicklung.
- Teilnahme am "US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation" in Jackson, Mississippi (USA) vom 25.05. – 28.05.2010 mit einem Vortrag zum Thema Backfill Compaction and EDZ recovery.

#### TA2:

- -VIRTUS: Vorbereitung und Beauftragung eines Vorprojekts an das Fraunhofer-Institut (IFF) in Magdeburg; Entwicklung von Demonstratoren.
- Geländeuntersuchungen und Probenahme im Bereich des Tagebaus zur Überprüfung der weiträumigen Ausdehnung der Braunkohlehorizonte und Urananreicherung. Auswertung aller aktuellen Labor und Feld-Daten. Identifizierung des Orts für die nächste Bohrung.
- Modellrechnungen zur nicht-isothermen Aufsättigung des Buffers im Canister Retrieval Test unter Berücksichtigung der Zwischenschichtwasserdiffusion. Überarbeitung des Kapitels „Isothermen“ im Statusbericht zum aktuellen Entwicklungsstand und zur Qualifizierung des Rechencodes VIPER. Abschluss der Vorversuche für die Aufsättigungsexperimente und erste Versuche über kurze Zeiträume. Teilnahme am Workshop der Task Force EBS.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung der IGSC.
- MeSA-Arbeitsgruppe: Review der abschließenden Versionen der Issue Paper für den NEA-Statusbericht und Planung der Weiterarbeiten zum Thema Indikatoren bei der IGSC.
- Workshop zum Thema Verfüllen und Verschließen eines Endlagers im Salz zur Erstellung des aktuellen Wissensstands und Identifikation des noch bestehenden Forschungsbedarfs.
- Weiterführung der Arbeiten zu aktualisierten Radionuklidinventaren für HAW-Kokillen.
- Durchführung der Modellrechnungen für Endlager in Tonformationen zur Überprüfung der Sinnfälligkeit der von GRS Köln vorgeschlagenen neuen Indikatoren.
- Abnahme der Demonstratoren des Vorprojekts. Abstimmung und Festlegung des Inhalts für das Hauptprojekt VIRTUS.

#### TA2:

- Diskussion der Modellrechnungen für alle zu betrachtenden Biosphärensysteme repräsentativ für veränderte klimatische Bedingungen und Diskussion der Ergebnisse.
- Bohrung am Standort Ruprechtov zur Untersuchung der Auswirkungen des Sauerstoffeintrags und Probenahme und Untersuchung zur Störungszonen im Kaolin.
- Fortsetzung 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).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 20. April 2010 fand in Leipzig das 2. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten. Für einen Testfall (Äspö) liegt inzwischen umfangreiches Datenmaterial vor, die Auswertung wurde fortgesetzt.

Mit dem Ziel, neben den explizit bekannten auch mit stochastischen Verfahren erzeugte Klüfte modellieren zu können, wurde der Kluftgenerator FRAC3D (Uni Stuttgart) installiert. Mit der Umsetzung des Äspö-Testfalles wurde auf dieser Basis begonnen.

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 könnte. Eine Vorstellung dieses Testfalles soll durch die AG Kolditz beim nächsten Statusgespräch erfolgen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

Die Testfälle werden weiter ausgearbeitet und ein gemeinsamer Testfall festgelegt.

Das nächste Statusgespräch wird am 9. November 2010 im Anschluss an das 8. Projektgespräch zum Projekt E-Dur 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 unstetigen Galerkin-Verfahren bzw. Finite-Volumen-Verfahren erfolgen. Für die so entstehenden Systeme sollen schnelle Lösungsverfahren auf der Basis von Mehrgittermethoden entwickelt werden. Entscheidend ist ferner die effiziente Umsetzung der Methoden auf massiv parallelen Rechnern. Basis der Implementierung werden die Software-Werkzeuge  $d^3f$  und  $r^3t$  sein.

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

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP3: Entwicklung eines numerischen Lösers für das mesoskalige Referenzmodell

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

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

Die numerischen Probleme, die bei der Modellierung von geklüfteten Medien auftreten, sind in erster Linie dadurch gegeben, dass auf der einen Seite bei einer volldimensionalen Modellierung der Kluft eine sehr hohe Auflösung erforderlich ist und auf der anderen Seite bei einer niederdimensionalen Modellierung Effekte innerhalb der Kluft vernachlässigt werden. Deswegen haben wir uns für einen dimensions-adaptiven Ansatz entschieden, der auch für den 2D-Fall bereits in UG und  $d^3f$  zur Verfügung gestellt wurde.

Mit dem volldimensionalen Modell haben wir anhand einiger einfacher Beispiele festgestellt, dass insbesondere in dickeren Klüften Dichte-Unterschiede sichtbar werden, die Fließgeschwindigkeit innerhalb der Kluft nicht nur in eine Richtung gerichtet sein muss und Wirbel gebildet werden können, was von dem niederdimensionalen Modell nicht erfasst wird. Für sehr dünne Klüfte haben wir jedoch in allen Testfällen sehr gute Übereinstimmungen zwischen den beiden Modellen gesehen. Desweiteren wurden unsere Modell-Gleichungen so erweitert, dass nicht nur Dichte-getriebene Strömung, sondern auch Temperatur- und Dichte-getriebene Strömungen beschrieben und simuliert werden können.

Dazu wurde unserem Gleichungssystem die Erhaltungsgleichung für die Energiebilanz der Mischung hinzugefügt. Dieses neue Gleichungssystem wurde in  $d^3f$  integriert und schon auf einfachen Kluftgeometrien getestet. Eine weiterführende Arbeit wird es sein, diese Gleichungen zu mitteln, um ein niederdimensionales Modell zu erhalten und damit auch die bereits erwähnten Techniken anwenden zu können.

Damit unsere Rechnungen auch auf komplizierteren Geometrien ausgeführt werden können, ist ein geeigneter Gittergenerator nötig. Der bereits existierende Gittergenerator ARTE, der niederdimensionale Klüfte in volldimensionale Klüfte erweitern kann, wurde im Rahmen einer Kooperation auf die speziellen Bedürfnisse der für den Dimensionsübergang benötigten Geometrien angepasst. Diese Anpassung ist zwar noch nicht für alle Fälle abgeschlossen, schon im aktuellen Zustand können wir aber nun neue, interessante Geometrien untersuchen.

### 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. Preprint.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10578</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP3 - Kurztitel A-DuR -		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 Klüftsystemen 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. Wittum), dem UFZ Leipzig (Prof. Kolditz) und der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit durchgeführt.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete von der Gruppe Attinger (Universität Jena) bearbeitet:

- 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

Im Berichtszeitraum wurden die Berechnungen zur Bestimmung der Dispersionskoeffizienten in Medien ohne Skalenseparation fortgeführt. Dabei wurden die Arbeiten von DENTZ ET AL. (2000<sup>[2]</sup> und 2000<sup>[3]</sup>) angewandt und erweitert. Bei der Untersuchung des zeitlichen Verhaltens einer Schadstofffahne ist die Unterscheidung zwischen zwei konzeptionell verschiedenen Größen notwendig: die (abstrakte) Dispersion  $D^{\text{ens}}(t)$ , die mathematisch einfacher zu bestimmen ist, aber die realen Werte überschätzt, und die effektive Dispersion  $D^{\text{eff}}(t)$ , die auch experimentell beobachtbar ist. Die Herausforderung bestand darin, die effektive Dispersion  $D^{\text{eff}}(t)$  für Medien oh-

ne Skalenseparation zu bestimmen. Der Integrallänge kommt dabei eine große Bedeutung zu und sie wird für den Exponenten  $b = 0,5$  explizit durch folgendes Potenzgesetz beschrieben:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^2}{L^2} dx = 2x^{b-1} \Big|_0^{\infty}$$

Der Exponent  $b$  ist verantwortlich für die Endlichkeit der Integrallänge und bestimmt damit die Längenskala, auf der eine Korrelation zwischen den Heterogenitäten eines Mediums besteht:

- **$b > 1$ :** Die Integrallänge ist **endlich** – Medien mit einer solchen Korrelation zwischen den Heterogenitäten wurden von DENTZ ET AL. (2000<sup>[2]</sup> und 2000<sup>[3]</sup>) untersucht. Die zeitliche Entwicklung der Dispersion ist ergodisch, d. h. für Betrachtungen mit unendlicher Dauer streben die abstrakte Dispersion ( $D^{\text{ens}}(t)$ ) und die effektive Dispersion ( $D^{\text{eff}}(t)$ ) gegen denselben asymptotischen Grenzwert.
- **$b < 1$ :** Die Integrallänge ist **unendlich** – solche Medien weisen keine Skalenseparation auf (z. B. fraktale Medien). Die zeitliche Entwicklung der Dispersion ist in diesem Fall nicht ergodisch und unsere Berechnungen zeigten, dass der Unterschied zwischen den beiden Dispersionsgrößen,  $D^{\text{ens}}(t)$  und  $D^{\text{eff}}(t)$ , für alle Zeitskalen bestehen bleibt. Die beiden Größen beschreiben zwei fundamental verschiedene Eigenschaften und die Fluktuationen der Partikel einer Schadstofffahne, die sich auf unterschiedlichen Strömungspfaden durch das Medium bewegen, werden nie irrelevant.

Weiterhin wurden zwei verschiedene Projekte verfolgt und mit unterschiedlichem Erfolg voran geführt. Zunächst wurde eine Literaturrecherche vorgenommen mit dem Zweck zu klären in wie weit relevante Parameter in der Simulation von Schadstofftransport skalenabhängig sind. Dabei zeigte sich, dass experimentell ermittelte Werte der Matrixdiffusion diesen Effekt zeigen, ohne dass weitgehend Klarheit über die Ursachen besteht (siehe Zhou et al. (2007)<sup>[5]</sup>, Liu et al. (2004)<sup>[6]</sup>). Es wurde ein Computermodell eines Matrix-Kluft-Systems mittels UG implementiert, welches eine Reihe verbreiteter Benchmarks nachbildet. Sobald mittels der Arbeiten von Katharina Ross eine effektive Beschreibung des Transports innerhalb der Matrix abgeleitet ist, werden diese Ergebnisse in das Modell integriert. Mittels dieser Beschreibung sollten obige Benchmarks die Skalenabhängigkeit der klassischen Matrixdiffusion reproduzieren und damit einen Ansatz zur Erklärung dieses Phänomens.

Das zweite Projekt beschäftigt sich mit der Frage der äquidimensionalen Modellierung von Klüften beim Schadstofftransport. Gemäß der Arbeit von Wu et al. (2010)<sup>[7]</sup> sind als Kriterium kluftskalige Gradienten geeignet. Im Gegensatz zu obiger Referenz soll als Ursache jedoch nicht eine konvektionsdominierter sondern diffusionslimitierter Transport untersucht werden. In Analogie zu Wu et al. konnte dabei ein Kriterium für die Ausbildung von kluftskaligen Gradienten abgeleitet werden. Bei der Ableitung einer effektiven Beschreibung in Analogie zu Hesse et al. (2009)<sup>[8]</sup> zeigten sich jedoch größere Schwierigkeiten.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Komplettierung der Untersuchungen zu kluftskaligen Gradienten und Anfertigung einer Veröffentlichung.
- Anwendung der von Katharina Ross entwickelten effektiven Beschreibung für die Gesteinsmatrix zur Interpretation der skalenabhängigen Matrixdiffusion.
- Zusammenarbeit mit Alfio Grillo zur Entwicklung eines Kriteriums für äquidimensionale Modellierung von Klüften bei dichtegetriebenen Strömungen.
- Unsere bisherigen Ergebnisse gelten für große PécLET-Zahlen, in der Matrix sind die Geschwindigkeiten allerdings klein. Deshalb sollen die Berechnungen nun für kleine PécLET-Zahlen erfolgen.
- Die Matrix muss als ein heterogenes kontinuierliches Medium dargestellt werden, wahrscheinlich mit einer feinen Auflösung in der Nähe der Kluft und einer größeren Auflösung im Fernfeld. Deshalb soll die Upscaling-Methode *Coarse Graining*<sup>[1]</sup> auf heterogene geklüftete Medien ohne Skalenseparation erweitert und es sollen einzelne eingebettete Klüfte berücksichtigt werden.
- Vergleich der Ergebnisse mit der Arbeit von A. FIORI (2001)<sup>[4]</sup>.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Ein Vortrag beim A-DuR Projektreffen in Leipzig am 10. April,  
 je einen Vortrag in den Arbeitsgruppen Jena und Leipzig,  
 ein Vortrag bei der EGU Wien am 4. 5. 2010 in der Session 7.7 „Stochastic groundwater hydrology“,  
 ein Vortrag beim Doktorandentreffen der Hydrogeologen am 29. 05. 2010 in Kiel.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10588</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP4 - Kurztitel A-DuR -		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 („uncertainty assessment“). Ursachen für Unsicherheiten können unterschiedlicher Natur sein: keine genaue Kenntnis der strukturgeologischen Bedingungen (Kluffsysteme, Heterogenitäten) aufgrund geringer Erkundungsdaten, Parametrisierungs- und Skalenprobleme. Für die Unsicherheitsanalyse soll das im Bereich „Contaminant Hydrology“ erfolgreich entwickelte und eingesetzte Konzept des „Virtuellen Aquifers“ (BMBF KORA Vorhaben, [www.virtual-aquifer.de](http://www.virtual-aquifer.de)) für die Thematik der Kluffgesteine erweitert werden. Im AP8 sollen daher neben numerischen Lösern auch sog. Random-Walk/Particle-Tracking (RW/PT) Verfahren weiterentwickelt und angewendet werden. RW/PT repräsentieren das Vorwärtsproblem zwar mit geringerer Genauigkeit sind dafür robust und rechenzeit-effizient (Park et al. 2008). In Kombination mit dem Einsatz von Höchstleistungsrechnern kann sowohl die Genauigkeit von RW/PT-Verfahren verbessert werden als auch eine große Anzahl von Vorwärtsrechnungen (Monte-Carlo Analyse) im relevanten Parameterraum ausgeführt werden. Für die Bewertung der Genauigkeit und der Zuverlässigkeit numerischer Modelle ist die Entwicklung von systematischen Benchmark-Tests im AP9 von großer Wichtigkeit (Kolditz and Shao 2009). Dabei ist folgende Systematik von Testaspekten vorgesehen.

- Kluff-Matrix Systeme: Kluff-Matrix Interaktion, Kluffsysteme (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

Folgende Arbeiten wurden in der Berichtsperiode durchgeführt:

AP8: Unsicherheitsanalyse

- Die Particle-Tracking (PT) Methodenentwicklung zur Unsicherheitsanalyse wurde fortgeführt. Dabei wurden Vergleiche zwischen Partikel- und numerischen Methoden für reale Einzelklüfte unter Berücksichtigung mechanischer Beanspruchung durchgeführt.
- Zur Absicherung der PT Simulationen wurden ferner Codevergleiche angestellt (OpenGeoSys (OGS) und H2OLab (University of Rennes))

AP9: Testbeispiele

- Die Komplexität der Testbeispiele wurde weiter erhöht, indem die mechanische Kopplung bei Strömungs- und Transportvorgängen in Einzelklüfte hinzugenommen wurde und entsprechende Testbeispiele entwickelt.
- Für die hydromechanisch gekoppelte Simulation von Klüften wurde eine Erweiterung der finiten Elemente Methode (XFEM) in OGS vorgenommen (Watanabe 2010).
- Für die Modellierung von Kluftnetzwerken wurde ein Vernetzungstool entwickelt, das hierarchische Gitterverfeinerungen ermöglicht. Dies ist insbesondere für die Genauigkeit von Transportberechnungen in Kluftsystemen erforderlich.

Zu den Ergebnissen in dieser Berichtsperiode wurde der laufende Fortschrittsbericht aktualisiert (Taron et al. 2010a). Ergebnisse der Teilprojekte wurden auf der ARMA 2010 (American Rock Mechanics Association) vorgestellt (Taron et al. 2010b,c).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Projektphase stehen folgende Arbeiten im Vordergrund:

- Systematische Weiterentwicklung und Dokumentation von Testbeispielen für Kluftsysteme: Schwerpunkt ist die Erweiterung auf Mehrphasenströmungsprozesse zunächst in Einzelklüften. Schrittweise sollen dann Stofftransport und mechanische Rückkopplung auf Zweiphasenströmungen aufgesetzt werden.
- Kluftnetzwerkmodelle: Partikel-Methoden zunächst für vereinfachte 2D Kluftsysteme (Schnitte durch Kluftnetzwerke), Erweiterung der XFEM für Kluftnetzwerke.
- Visualisierungsmethoden für die Darstellung der komplexen Prozesse in klüftig-porösen Medien werden weiterentwickelt (OGS 3D). Für die Prozess- und Unsicherheitsanalyse werden Möglichkeiten der stereoskopischen 3D Visualisierung ausgenutzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kolditz O and Shao H (eds.) (2010): OpenGeoSys – Developer Benchmark Book 5.0.04, Internet Report, available through [www.opengeosys.net](http://www.opengeosys.net), Helmholtz Centre for Environmental Research, AESA TU Dresden.

Taron J, Park C-H, Watanabe N, Kolditz O (2010a): A-DuR Project Progress Report. Technical Report, UFZ, Environmental Informatics.

Taron J, Elsworth D, Kolditz O (2010b): Pressure solution models for quartz materials: Micromechanical development and potential impact in fractured reservoirs. ARMA Paper 10-422, 44th US Rock Mechanics Symposium and 5th U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, Salt Lake City, UT June 27–30, 2010.

Taron J, Elsworth D, Kolditz O (2010c): Mechanisms for permeability evolution in fracture networks: hydrothermal effects in enhanced geothermal systems. ARMA Paper 10-423, 44th US Rock Mechanics Symposium and 5th U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, Salt Lake City, UT June 27–30, 2010.

Watanabe N (2010): Semi extended FEM (XFEM) approach for modeling coupled HM processes in rock joints, Kieler Scientific Computing Seminar, 16.06.2010, Kiel.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 Hintergrundsalze
- 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 Hintergrundsalsen (Nitrats und Perchlorats 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. Für  $25\text{ °C}$  wurden die Messungen abgeschlossen und erste Messungen mit  $\text{NaCl}$ -haltiger Salzlösung bei  $15\text{ °C}$  durchgeführt. Die eingesetzten Salzkonzentrationen der Lösungen variierte dabei im Verlauf der Versuche von  $c\ 5,6\text{-}0,4\text{ [mol/kg]}$  für  $\text{MgCl}_2$  bzw.  $c\ 5,6\text{-}1,0\text{ [mol/kg]}$  für  $\text{CaCl}_2$  und  $5,40\text{-}0,55\text{ [mol/kg]}$   $\text{NaCl}$ . 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 jeweilige Salzkonzentration berechnet werden. Die neu gewonnenen Daten, insbesondere die Löslichkeitsversuche bei  $15\text{ °C}$ , verbessern die bereits bestehende Datenbasis von  $\text{H}_2\text{S}$ -Löslichkeiten und den daraus abzuleitenden thermodynamischen Parametern.

Bezüglich der Hintergrundsalze ist die Datenlage bei höheren Temperaturen höchst uneinheitlich und erfordert zusätzliche Messungen. Eine Messapparatur wurde aufgebaut und erste Testmessungen begonnen.

### 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:  $\text{NaCl}$ ,  $\text{KCl}$ ,  $\text{MgCl}_2$ ,  $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{MgSO}_4$  und  $\text{K}_2\text{SO}_4$  bei  $15\text{ °C}$  und  $40\text{ °C}$  durchgeführt werden.
- Parallel zur Durchführung dieses Arbeitspaketes wird mit der Konstruktion einer Messapparatur begonnen, die die Bestimmung von Hydrogensulfid-Aktivitäten in ozeanischen Salzlösungen ermöglicht. Spezielle Messgefäße aus Glas, in denen der pH-Wert der Lösung kontinuierlich bestimmt werden kann, werden dafür angeschafft.
- Beginn der Messungen des Dampfdrucks über relevanten Hintergrundsallösungen.
- 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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)
- Abschluss U(VI)-Sorptionsexperiment 1 am Opalinus-Ton
- Isolierung Gesamt-DNA aus a) 50 g unbehandelten Opalinus Ton (Probe MT-2) und b) 20 g in R2A Medium stimulierten Opalinus Ton (Probe MT-2-R2A, für zwei Wochen unter anaerobe Bedingungen); 16S rRNA Gene wurden mittels PCR unter Verwendung der Primer 16S<sub>7F</sub> und 16S<sub>1513R</sub> von der Gesamt-DNA amplifiziert und jeweils eine Klonbibliothek (TOPO TA cloning kit (Invitrogen)) erstellt. Analyse der konstruierten Klonbibliotheken durch Restriktions-Fragment-Length-Polymorphism (RFLP)
- Die aus der mit R2A Medium stimulierten Probe isolierten Bakterien (*Sporomusa* spp. und *Paenibacillus* spp.) wurden in flüssigem R2A Medium unter anaeroben Bedingungen kultiviert, um zu einem späteren Zeitpunkt deren Wechselwirkungen mit U(VI) und Cm(III) zu untersuchen

- Untersuchungen zur Kultivierung vom Äspö-Bakterium *P. fluorescens*; Reinheitskontrolle mittels *in situ* PCR und RFLP
- TEM-EDX Voruntersuchungen U(VI) + *P. fluorescens*: Zellen wurden mit oder ohne Uran-Kontakt in Glutaraldehyd (2 Vol- %) fixiert
- Vorbereitung Biofilmreaktoren zur Generierung von *P. fluorescens*-Biofilmen (steril und aerob).

Ergebnisse AP1 & AP2: starke Maskierung der natürlichen mikrobiellen Diversität in der mit R2A behandelten Probe. Die unbehandelte Probe MT-2 wurde von Vertretern von *Firmicutes* (*Clostridiales*) (29 %), *Betaproteobacteria* (*Acidovorax sp.*)(23 %), und *Bacteroidetes* (18 %) dominiert. In der Probe MT-2-R2A wurden jedoch nur Vertreter von *Firmicutes* (nahe Verwandte des Genus *Sporomusa* und *Paenibacillus*) nachgewiesen.

Ergebnisse AP3 & AP4: Anaerobe Sorption von U(VI) an Opalinuston: starke Zunahme des sorbierten U(VI) zwischen pH 3.0 bis 4.5 mit einem Maximum der Beladung zwischen pH 5.0 und 6.5. Aufgrund der gegensätzlichen Ladung beider sorbierender U(VI)-Spezies scheint die Sorption ladungsunabhängig. Abnahme der U(VI)-Sorption bis pH 8 (Grund Bildung des ungeladenen  $\text{Ca}_2\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3$ -Komplexes) dann erneuter Anstieg bis pH 10. Geringe U-Bioverfügbarkeit im pH-Bereich des Sorptionsmaximums. Kultivierung des Äspö-Bakteriums *P. fluorescens*: Wachstum (Wachstumskurve, OD-BTM-Korrelation) in verschiedenen Medien (NB, Standardsuccinat-Minimalmedium SSM); Optimum der Biofilmbildung von *P. fluorescens* im SSM unter maximaler Reduzierung von P- u. C-Quelle (5,6E-03M Phosphat, 17 mM Succinat); Limitierung des Wachstums durch Phosphat. Mittels TEM waren ca. 2 µm lange Bakterienzellen zu erkennen, die einen deutlich dunkler reflektierenden dünnen Rand im TEM Hellfeldmodus, bzw. einen hellen Rand aufgrund der Kontrastumkehr zeigten. Dieser Elementkontrast deutete bereits auf das Vorhandensein von Elementen höherer Ordnungszahl in der Zellwandung hin. Durch EDX-Profile konnte eindeutig Uran im Energiespektrum bestimmt werden. Somit konnte der Nachweis erbracht werden, dass Uran unter den gegebenen Bedingungen an der Zellmembran von *P. fluorescens* sorbiert.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Planung weiterer punktueller anaerober U(VI)-Sorptionsexperimente am Opalinus-Ton (Ziele: mehr Ton pro pH-Wert zur DNA-Isolierung, Änderung der mikrobiellen Gemeinschaften nach U-Kontakt)
- Fortsetzung der Untersuchungen der mikrobiellen Diversität im Opalinus-Ton (Auswertung der erhaltenen Klonbibliotheken, Amplifizierung spezifischer Gene wie NarG, RubisCO, amoA, dsrB und Erstellung von Klonbibliotheken), Porenwasser und der mit R2A stimulierten Opalinus Ton Probe (Gesamt DNA Extraktion aus den Filtern)
- Aufgrund der niedrigen Konzentration der isolierten Gesamt DNA von der unbehandelte Opalinus Ton Probe wird eine Amplifizierung mit der *phi 29* Polymerase durchgeführt
- 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
- Beginn der Untersuchungen der Wechselwirkung geeigneter Ton-Isolate mit Ac (erste Tests mit U + Cm)
- Start der Versuche zur Generierung eines Biofilms des Äspö-Bakteriums *P. fluorescens*
- U(VI) und Cm(III)-Speziation in *P. fluorescens*-Wachstumsmedien und Medienbestandteilen (Auswahl des geeigneten Mediums für Ac-WW-Versuche mit metabolisch aktiven Zellen)
- Start der Versuche zur Ac-WW mit planktonischen Zellen von *P. fluorescens* (Beginn: metabolisch inaktive Zellen mit Uran und Curium)
- Vervollständigung der Datenbank Wechselwirkung von Mikroorganismen mit Actiniden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> Öko-Institut e.V. - Institut für angewandte Ökologie, Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10628</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2008 bis 30.04.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.04.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 199.347,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Sailer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist die Aufstellung konkreter Anforderungen zur Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte in einem Safety Case für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle in Deutschland. Dazu wird eine methodisch abgesicherte Liste sozialwissenschaftlicher Aspekte, die im Safety Case behandelt werden sollten, erstellt und die Anforderungen zu deren Integration in einen Safety Case für ein Endlager abgeleitet.

Das Vorhaben trägt dazu bei, für die Endlagersicherheit relevante sozialwissenschaftliche Aspekte zu identifizieren, zu bewerten sowie Bedarf und Möglichkeiten ihrer Integration in die technisch-naturwissenschaftlich orientierten Sicherheitsbetrachtungen zu prüfen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Identifikation sozialwissenschaftlicher Aspekte für den Safety Case  
Unter Berücksichtigung nationaler und internationaler Erfahrungen werden potenziell relevante sozialwissenschaftliche Aspekte identifiziert und hinsichtlich ihrer Relevanz für die Sicherheit eines Endlagers bewertet.
- AP2: Klassifizierte Liste sozialwissenschaftlicher Aspekte für den Safety Case  
Die in AP1 identifizierten sozialwissenschaftlichen Aspekte werden hinsichtlich ihrer Wirkmechanismen und ihrer grundlegenden Merkmale eingeordnet und in einer vollständigen klassifizierten Liste relevanter sozialwissenschaftlicher Aspekte zusammengestellt.
- AP3: Anforderungen an einen „Integrierten Safety Case“ hinsichtlich der Behandlung der sozialwissenschaftlichen Aspekte  
Es werden Anforderungen zusammengestellt, die im Hinblick auf die Behandlung der sozialwissenschaftlichen Aspekte an einen Safety Case für ein Endlager in Deutschland zu stellen sind, insbesondere bezüglich Aufbau, Fortschreibung und iterativer Weiterentwicklung.
- AP4: Methodischer Ansatz zur Entwicklung und Gestaltung eines „Integrierten Safety Case“

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

Die Bearbeitung der Arbeitspakete AP3 und AP4 wurde weitergeführt.

Einen Schwerpunkt stellte die Entwicklung einer systematischen Zusammenstellung sozialwissenschaftlicher Aspekte mit Relevanz für den Safety Case sowie eines Modells zu deren Beschreibung dar. Wesentliche Beiträge lieferten dabei die zuvor durchgeführten Analysen zu sicherheitsrelevanten Handlungsfeldern der Endlagerung, endlagerspezifischen Faktoren mit Relevanz für das Managementsystem sowie zu übergeordneten Anforderungen an betriebliche Managementsysteme.

Des Weiteren wurde unter Berücksichtigung der identifizierten sozialwissenschaftlichen Aspekte ein methodischer Ansatz zur Gestaltung des Safety Case entworfen. Dazu wurde unter Bezug auf bestehende Anforderungen ein Vorschlag zur Definition des Umfangs und zur Dokumentation des Safety Case abgeleitet. Außerdem wurden Vorschläge für die detaillierte Behandlung und den Betrachtungsumfang sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case sowie für die schrittweise Entwicklung des Safety Case erarbeitet.

Die vorläufigen Ergebnisse zu den Arbeitspaketen AP3 und AP4 wurden - ergänzt durch die bestehenden Ergebnisse zu den Arbeitspaketen AP1 und AP2 - in einem 2. Zwischenbericht dokumentiert.

Auf der Grundlage der Inhalte dieses Berichts wurde im März 2010 der zweite Fachworkshop durchgeführt, in dem die vorliegenden Ergebnisse präsentiert und diskutiert wurden. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus dem Fachworkshop wird der Abschlussbericht zu dem Forschungsvorhaben erstellt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Der Abschlussbericht wird in Übereinstimmung mit dem Auftraggeber und dem Projektträger fertig gestellt.
- Projekt befindet sich im Abschluss.

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

Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case. 2. Zwischenbericht; Darmstadt, 24.02.2010

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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

Am 11. und 12. Juni 2010 fand ein projektinterner Workshop in Bure, Frankreich statt. Der Workshop wurde vom Projektkoordinator Andra ausgerichtet. Im Rahmen dieses Workshops wurden die aktuellen Arbeiten in den Arbeitspaketen 1 bis 4 diskutiert sowie der Ablauf der weiteren Arbeiten inhaltlich und zeitlich festgelegt.

AP3:

Von allen Projektpartnern wurde erfragt, welche Anforderungen in den beteiligten Ländern bzw. Endlagerkonzepten bezüglich des Einsatzes von geotechnischen und geophysikalischen Mess-Systemen aus technischer Sicht, insbesondere im Hinblick auf Einsatzbedingungen, bestehen. Ziel ist es, ein allgemeingültiges Anforderungsprofil an Überwachungssysteme zu erstellen. Zu diesem Zweck wurde ein Formular mit entsprechenden Fragestellungen entwickelt, das von allen Partnern zu bearbeiten war. Die Ergebnisse der Anforderungsanalyse wurden in einem internen Projektbericht dokumentiert. Dieser wird nach Freigabe aller Partner an die Europäische Kommission vertragsgemäß übersandt.

Vom 07. – 09. Juni fand ein offener Workshop zum Thema „Überwachungssysteme - Stand von Wissenschaft und Technik“ in Troyes, Frankreich statt. Auf diesem Workshop wurde eine Reihe interessanter und vielversprechender Konzepte und Methoden vorgestellt, die für eine Verwendung zur Endlagerüberwachung geeignet erscheinen. Das immer noch größte Problem für eine Langzeitüberwachung besteht in der Langzeit-Beständigkeit bzw. Verlässlichkeit von Sensorsystemen sowie deren dauerhafte Stromversorgung. Auch die technische Robustheit von Sensoren in schwierigen Umgebungsbedingungen ist ein Problem. Die Fortschritte in der kabellosen Informationsübertragung sind weltweit zwar enorm, konzentrieren sich aber auf die Übertragung im Luftraum. Einer untertägigen Übertragung durch massives Gestein sind auf Grund der starken Dämpfungseigenschaften der Gesteine noch deutlich Grenzen gesetzt. Aus geophysikalischer Sicht sind die mikro-seismische Überwachung, die Codawellen-Interferometrie, tomographische Methoden sowie satelitenbasierte interferometrische Verfahren zur Oberflächenüberwachung besonders vielversprechend. Die Ergebnisse des Workshops werden in einem Proceedings-Band veröffentlicht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Inhaltliche Vorbereitung zwei weiterer Workshops, einem projektinternen bei DBE Technology zur inhaltlichen Diskussion der Arbeiten in den einzelnen Arbeitspaketen und einen offenen Workshop zur Einbeziehung von „Stakeholdern“ und deren Ansichten und Anforderungen hinsichtlich einer langzeitlichen Endlagerüberwachung.
- AP2: Durchführung von drei 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010
<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 Risschließung 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 Abbildung eines kristallinen Gefüges im Salinar mittels sogenannter Polyederstrukturen (Voronoidiagramm) wurde im Rahmen von ersten hydraulischen und mechanischen Modellierungen, unter Verwendung des dreidimensionalen Diskontinuumcodes 3DEC, durchgeführt. Im Rahmen der hydraulischen Modellierungen wurde dabei ein Ansatz entwickelt, um die Permeabilität einer Polyederstruktur und somit späteren Rissstruktur zu berechnen. Dagegen umfasst ein Vorhabensziel der aktuell laufenden mechanischen Modellierungen die Simulation von Laborversuchen, um zum einen die Möglichkeiten und Grenzen der Polyederstruktur bewerten zu können und zum anderen relevante Mikroparameter für weiterführende numerische Modellierungen zu erheben. Die Verwendung der Modellierungssoftware Itasca 3DEC und die Abbildung des salinaren Gefüges im Mikrobereich in Form von Polyederstrukturen wird als der erfolgversprechendste Ansatz gesehen (auch von BA Freiberg). Da großräumige Modelle (z. B. eine Strecke) aus detaillierten, kleinräumigen Information (d. h. aus Polyederstrukturen) aufgrund der Rechnerkapazität nicht möglich erscheinen, sind für die einzelnen Skalenbereiche unterschiedliche Modellierungsstrategien zu entwickeln und das Handling von Polyedermodellen mit 3DEC ist noch zu verbessern.

AP2:

Die geplanten Probenahmen und geochemischen Untersuchungen im Rahmen des Laborexperimentes zur chemischen Langzeitstabilität der Salz-Wasserglas-Systeme wurden durchgeführt. Natürliche Steinsalzproben wurden mit Natronwasserglas verklebt und zur Aushärtung unter kontrollierten Bedingungen (Temperatur, Zeit) abgestellt. Weiterhin wurden Proben hergestellt zur lichtmikroskopischen Identifizierung der im vorliegenden Untersuchungsspektrum auftretenden MOC-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 weitergeführt. Ein Durchführungs- und Untersuchungsprogramm wurde entworfen und Abstimmungen mit Fachfirmen dazu vorgenommen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Weiterführende mechanische Modellierungen und Anpassung der modelltechnischen Mikroparameter
- Untersuchungen zum besseren Handling von Polyedermodellen
- Weiterentwicklung der Modellierungsstrategie für unterschiedliche Skalenbereiche
- Implementierung

AP2:

- Betreuung der Versuche zur chemischen Langzeitstabilität
- Dünnschliffpräparation einzelner Proben
- Visualisierung von Wasserglasinjektionen in Steinsalz auf polierten Oberflächen

AP3:

- In-situ-Injektionen sowie Permeabilitätsmessungen und Messwertauswertung

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10659</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2009 bis 31.03.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 5. bis - 6. Mai 2010 die 2. WP 3-Jahressitzung in Pitesti (RO) statt, wobei die bisherigen Zwischenergebnisse für das Arbeitspaket WP 3.3 „Interface Laboratory Experiments“ vorgestellt und diskutiert wurden.

- AP1: Die vom IfG durchgeführte Literaturstudie zum aktuellen Kenntnisstand zum Gastransport in Verschlussbauwerken entlang von Trennflächen innerhalb von Verschlussbauwerken aus Bentonit- bzw. Zement-basierten Baustoffen steht seit Mitte Januar 2010 auf der FORGE-Homepage als State-of-the-Art-Report zur Verfügung (FORGE D3.1-R). Unabhängig davon wurde auf der Arbeitssitzung in Pitesti angeregt, die Studie aufgrund ihrer Relevanz noch einem Review-Prozess (durch M. Villar, CIEMAT) zu unterziehen und danach entsprechend zu überarbeiten.
- AP2: Als Zuarbeit für einen gemeinsamen Zwischenbericht (FORGE D3.3-R “Experimental Systems and Planned Activities”) wurde eine detaillierte Versuchsbeschreibung der durchzuführenden Untersuchungen sowie der eingesetzten Versuchseinrichtungen erstellt.
- 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. Ein Sättigungszustand wurde bisher nicht erreicht.
- AP5: Zur Bestimmung der Kontaktflächenscherfestigkeit zwischen Bentonit-Formsteinen sowie zwischen Bentonit und der natürlich rauen Gebirgsoberfläche (Granit) wurden bisher fünf Scherversuche an Bentonit-Proben mit ihrem initialen Feuchtigkeitsgehalt durchgeführt. Nach den bisher vorliegenden Ergebnissen bildet sich für beide Probenkonstellationen unter trockenen Bedingungen keine Kohäsion aus, wobei der vorläufige Reibungswinkel von  $21^\circ$  bestätigt wurde.

### 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), Vorbereitung der Messapparatur für die Fluidinjektion in die Kontaktfuge während des Scherversuchs.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

IfG (2009). State of the art report on gas transport through interfaces. FORGE D3.1-R (WP 3.3) – draft version (15. Dezember 2009).

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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:

Auswertung neuer Daten aus Sorptionsexperimenten zur Aktualisierung der Sorptionskoeffizienten und -raten für Plutonium und Americium.

Durchführung und Auswertung von  $d^3f$ - und  $r^3t$ -Rechnungen mit größerem Modellgebiet, um den Massenverlust über die offenen Modellränder bei kleinen Ausflussgeschwindigkeiten zu verhindern. Konzipierung der Modellrechnungen für das neue CFM Homolog-Experiment.

AP3:

Durchführung einer Videokonferenz mit dem FZK-INE zur Diskussion des Stands der Arbeiten, der Ergebnisse aus dem aktuellen Tracer- und Homolog-Experiment und der geplanten Vorgehensweise bei der Modellierung des Experiments.

Erstellung eines Konferenzbeitrags mit den bisherigen Ergebnissen der  $d^3f$ - und  $r^3t$ -Modellrechnungen zum kolloidgetragenen Schadstofftransport für das International Groundwater Symposium der IAHR im September 2010 in Valencia.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

Durchführung der  $d^3f$ - und  $r^3t$ -Rechnungen für das in der ersten Jahreshälfte durchgeführte neue CFM Homolog-Experiment. Auf dieser Basis Durchführung von Vorhersagerechnungen zum nächsten Dipol-Experiment (geplant für Herbst 2010) an einem längeren Dipol zur Realisierung längerer Transportzeiten. Vergleich der Vorhersagerechnungen mit den Ergebnissen des Experiments.

Durchführung von Simulationsrechnungen zu Migrationsexperimenten an Äspö-Bohrkernen unter Einstellung von Grimsel-Grundwasser Bedingungen.

Konzipierung der Modellrechnungen für den Mock-Up Test und das integrierte CFM Experiment, insbesondere Entwicklung eines Quellterms für die Kolloid- und Radionuklidmobilisierung aus dem Bentonitkörper.

AP3:

Durchführung eines zweiten Arbeitsgesprächs mit dem FZK-INE zur Diskussion der Ergebnisse und Vorbereitung von Beiträgen für das CFM Modeller Group Meeting.

Teilnahme an einem Treffen der CFM Modellers Group mit Präsentation der Ergebnisse neuer Modellrechnungen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10679</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2009 bis 30.04.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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. Es wurde ein geeigneter Postdoc Kandidat (Laurent Truche, Univ. Toulouse, Frankreich) zum 1. Februar 2010 eingestellt. Für die zweite Doktorandenstel-



le konnte bisher leider noch kein geeigneter Kandidat/-in gefunden werden, es wurde daher ein Postdoc zu den Arbeiten am Transmissionselektronen- Mikroskop (TEM) eingestellt.

Die Versuche zur Langzeitsorption- Reversibilitätskinetik ( $\sim 1a$  Kontaktzeit) von Am, Pu, Th, Np, Tc und U sind hinsichtlich der Desorptionsrate  $k_3$  ausgewertet und mit den vorhandenen Daten aus den binären Systemen verglichen worden. Diese Daten wurden als Eingangsparameter der  $r^3t$ /TRAPIC Modellierung an GRS übermittelt. Das geochemische Hintergrundmonitoring Programm der MI- Scherzone wurde gestartet. Erste anoxische in Gasdruckzylindern abgefüllte Proben sind bezüglich Eh, pH, Anionen, Kationen, gelöster organischer Kohlenstoff (DOC) und Kolloidkonzentration sowie  $\mu$ -größenverteilung am INE analysiert worden. Dieses Messprogramm dient der Quantifizierung der natürlichen Schwankungsbreite der Kolloidkonzentration innerhalb eines hydrogeologischen Jahres um Unsicherheiten bei der Quantifizierung des Kolloidaustrags im „integralen CFM Experiment“ zu minimieren.

Durch den Einbau des neuen Donut- Packersystems konnte ein deutlich verringerter Gradient (1 %) und eine verbesserte Kontrolle der hydraulischen Bedingungen erzielt werden. Ein „Homologen“- Experiment mit den Elementen Eu, Th, Hf, U unter Anwesenheit von Bentonitkolloiden ist im Februar 2010 unter deutlich reduzierter Fließgeschwindigkeit von  $\sim 5 \times 10^{-5}$  m/sec durchgeführt worden (Run CFM 10-01). Dabei wurde ein Wiedererhalt des konservativen Tracers von  $\sim 84$  % und ein Kolloid- Wiedererhalt von 47-64 % (LIBD und s-Kurven Analyse) ermittelt. Der Wiedererhalt der eingesetzten Elemente konnte mit  $32 \pm 10$  % Th(IV),  $30 \pm 5$  % Hf(IV),  $14 \pm 3$  % Eu(III) und  $7 \pm 5$  % Tb(III) quantifiziert werden. Die bisher durchgeführten Kolloid/Homolog- Tracer-tests zeigen einen kolloidassoziierten Radionuklidtransport auch bei hohen Verweilzeiten, aber auch einen Verringerung der Wiedererhalte mit der Aufenthaltszeit in der Scherzone. Weiterhin konnte durch die Reduktion des hydraulischen Gradienten zum ersten Mal in einem in- situ Experiment der Einfluss von entfernten Randbedingungen (Stauseespiegelschwankungen und vor allem Gezeitenkräften) beobachtet werden.

Die für den Bohrkern #8 (Äspö) existierenden detaillierten  $\mu$ CT- Daten ( $80 \mu\text{m}^3$  Voxelgröße) sind in ein hydraulisches 3D Modell implementiert und im Vergleich zu unterschiedlichen 2D Ansätzen zum Einfluss der Fließkanalgeometrie auf das Transportverhalten eines konservativen Tracers realisiert worden.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1:

Ergänzende Migrationsstudien mit permanenter Injektion sind geplant um *in situ*  $k_3$ -Desorptionsraten zu bestimmen und diese mit den oben erwähnten Batch- Experimenten zu vergleichen.

AP1.2:

Im Juli 2010 wird ein konservativer Tracertest mit Uranin und KBr unter einer Extraktionsfließgeschwindigkeit von 10mL/min stattfinden, der zur Planung eines weiteren Homologtest unter höheren Scherzonen- Verweilzeiten (ca. 50 h) benutzt wird und in der 36. KW 2010 durchgeführt wird. Ende 2010 ist dann noch ein Radionuklid- Migrationsexperiment geplant. Die Analyse dieser Proben mittels ICP-MS, LIBD und S-Kurven LIBD und AsymFIFFF (Kolloidkonzentration und  $\mu$ -größenverteilung) obliegt dem INE.

AP2.5:

Am Beispiel eines Dipolexperiments (Run 08-02) sollen die Rechencodes ADINA-F und  $r^3t$  ( $d^3f$ ) von GRS Braunschweig unter identen Randbedingungen verglichen werden. Weiterhin werden Modellrechnungen zum *In-situ-Experiment* (Homologen Test) Run 10-01 durchgeführt und die Kopplung von ADINA-F mit CHREPROO (UPC, Barcelona, Spanien) weitergeführt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

*Peer-reviewed eingereicht oder in Vorbereitung:*

Schäfer, T., Huber, F., Seher, H., Missana, T., Alonso, U., Kumke, M., Eidner, S., Claret, F., Enzmann, F. (2009, in review) Nanoparticles and their influence on radionuclide mobility in deep geological formations. Appl. Geochemistry.

Seher H., Hauser W., Geckeis H., Fanghänel T. and Schäfer T. (2010, in prep.) Bentonite nanoparticle stability and effect of fulvic acids: experiments and modelling. Applied Clay Science.

Huber F., Kunze, P., Geckeis, H. and Schäfer T. (2010, submitted) Sorption reversibility studies on the interaction of radionuclides with FEBEX bentonite colloids/nanoparticles under Grimsel groundwater conditions in the presence of fracture filling material. Radiochimica Acta.

Filby, A., Plaschke, M., 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 388.302,00 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**

Da sich der Vertragsabschluss mit der EU-Kommission weiter verzögerte, hat das PEBS-Konsortium beschlossen, das Projekt mit 01.03.2010 zu starten. Die Kommission hat bestätigt, dass nach Vertragsabschluss die Projektkosten ab diesem Datum bezuschusst werden. Das Kick-off-Meeting fand am 13. und 14.04.2010 in Hannover statt.

Bei der Planung des Erhitzerversuchs in Mont Terri zeigte sich, dass die bisher ins Auge gefasste manuelle Einbringung und Verdichtung des Sand-Bentonit-Puffers aus logistischen Gründen nicht möglich sein wird. Das im SB-Test verwendete Sand-Bentonit-Material ist jedoch für eine maschinelle Einbringung (z. B. Verblasen) nicht geeignet, weil keine hinreichende Verdichtung erreicht wird und wegen der unterschiedlichen Korngrößen der Komponenten eine Entmischung zu befürchten ist. Verschiedene Alternativen wurden getestet, als in jeder Beziehung optimales Material wurde eine Sand-Bentonit-Mischung aus 35 % gekörntem MX-80 und 65 % Quarzsand identifiziert, wobei Sand und Bentonit das gleiche Kornspektrum (0.5 mm – 1.8 mm) haben. In einem bei der Schweizer Firma Gericke durchgeführten Einbringtest wurde festgestellt, dass eine sehr gleichmäßige Dichte ( $1384 \text{ kg/m}^3$ ) erreicht wird, während es zu keiner Entmischung kommt, auch die Staubentwicklung beim Verblasen ist vernachlässigbar. Laboruntersuchungen zu den wärmetechnischen Daten des Materials wurden begonnen.

Zur Planung des Aufbaus und der Instrumentierung des Erhitzerversuchs wurde im Mai 2010 ein Treffen in Wettingen abgehalten, wobei die nächsten Aktionen und der Zeitplan bis Aufheizbeginn festgelegt wurden.

Bei einem Treffen in Madrid im Juni 2010 wurden die Randbedingungen für die Auslegungsrechnungen festgelegt, außerdem wurde vereinbart, dass CIEMAT einen Infiltrationstest mit dem Sand-Bentonit-Material für den Erhitzerversuch durchführen wird.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

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

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

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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 die dreiwertigen Actiniden Am(III) und Cm(III) wurden mittels Testrechnungen (s. Absatz 3) überprüft und notfalls korrigiert. Das war eine zwingende Voraussetzung, bevor die Daten für die Öffentlichkeit über die webbasierte Datenabfrageoberfläche zugänglich sind. Es stellte sich bei den Testrechnungen heraus, dass einige Datenlücken in den Pitzer-Parametern noch komplettiert werden mussten, um die Rechnungen ausführen zu können. Einige Rechencodes verlangen trotz der faktischen Irrelevanz der Parameter einen Datenwert als Eingabeparameter.

Dokumentation:

Der sehr umfangreiche Abschlussbericht zur ersten THEREDA-Phase wurde erstellt und überarbeitet. Hierbei wurden nur Daten dokumentiert, die neu gegenüber der NEA-TDB waren. Das waren die thermodynamischen Daten für Curium, Neodym, Samarium und Protactinium, die in der NEA-TDB nicht vorhanden sind. Es wurden weiterhin alle vorhandenen Pitzer-Parameter in dem Abschlussbericht berücksichtigt, da sie ebenfalls nicht in der NEA-TDB vorhanden sind. Außerdem wurde ein ausgedehntes Kapitel zu den Richtlinien der Datenauswahl erstellt.

Parallel zu den Testrechnungen, die in Absatz 3 beschrieben werden, wurden die Ergebnisse in einem technischen THEREDA-Bericht zusammengestellt und verglichen. Der Bericht wird zurzeit überarbeitet.

Um die in THEREDA eingetragenen Daten einzuschätzen, wurden Testrechnungen mit dem Rechencode Geochemists Workbench (GWB) durchgeführt und mit Testrechnungen der GRS (benutzter Rechencode ChemApp) und TU Bergakademie Freiberg (Rechencode ChemSatch) verglichen. Die Testrechnungen wurden für die dreiwertigen Elemente Americium, Curium und Neodym im Elektrolytssystem 0.1 m und 5.6 m NaCl, 0.1 m und 3.86 m MgCl<sub>2</sub> sowie 0.1 m und 3.86 m CaCl<sub>2</sub> durchgeführt. Durch die Testrechnungen konnten fehlerhafte Daten und auch Fehler in der Dateneingabe identifiziert werden. Damit bilden die Testrechnungen ein für die Datenqualität unverzichtbares Prozedere und werden auch in Zukunft nach der Erfassung weiterer Elemente durchgeführt werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die verzögerten Arbeiten zur Eingabe der thermodynamische Daten für Neptunium und Technetium werden begonnen und unter Berücksichtigung der THEREDA-Kriterien in die Datenbasis eingebaut, so dass Mitte 2011 ein Abfrage der Daten für Np(V) und Tc(VII) aus der TDB über die webbasierte Datenabfrageoberfläche erfolgen kann.

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

Keine.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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.

## 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: Es wurden gemeinsam mit den anderen Thereda-Partnern Testrechnungen an vom DB-Generator erstellten Datenfiles durchgeführt.

AP5: Es wurde eine Gibbs-Funktion für Wasserdampf eingearbeitet, so dass jetzt auch der Wasserdampfdruck konsistent mit berechnet werden kann.

Es wurde mit der Implementierung der CO<sub>2</sub>-Zustandsfunktion für den Druckbereich bis 300 bar und Temperaturen zwischen 0 °C und 120 °C begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

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

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

Vortrag zum "Intern. Symposium on Solubility Phenomena" in Leoben (26.7. - 30.7.2010):

D. Sukhanov, W. Voigt: "The Thermodynamic Database THEREDA for Modelling of Solubilities in the Oceanic Salt Systems - Extension to Alkaline and Alkaline Earth Hydroxides"

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.127.340,00 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: Im ersten Quartal 2010 fanden GRS-interne Planungen für eine Vorgehensweise bei der Ableitung von Alternativszenarien und deren Umsetzung für die Konsequenzanalyse statt. Diese Arbeiten wurden im zweiten Quartal 2010 unterbrochen (siehe 8.).
- AP2: Zu diesem AP wurden im Berichtszeitraum keine Arbeiten durchgeführt (siehe 8.).
- AP3: Zu diesem AP wurden im Berichtszeitraum keine Arbeiten durchgeführt (siehe 8.).
- AP4: Im Arbeitsschritt zur Verbesserung der quantitativen Beschreibung der Gasproduktion wurde eine Literaturrecherche zu den existierenden Experimenten und Modellen zur Laugenmigration in Salzstöcken auf Grund von Temperaturgradienten begonnen. Im Arbeitsschritt zur Relevanz des Gaspfades für ein Endlager für hochaktive Abfälle im Salz wurden die Inventare und der Quellterm potenziell gasförmiger Radionuklide aus der Literatur zusammengestellt. Die Ableitung möglicher Freisetzungsszenarien wurde begonnen.
- AP5: Im ersten Quartal 2010 fanden GRS-interne Planungen für eine Vorgehensweise bei der Ableitung von Alternativszenarien und deren Umsetzung für die Konsequenzanalyse statt. Diese Arbeiten wurden im zweiten Quartal 2010 unterbrochen (siehe 8.).
- AP6: Die Literaturrecherche zu Natürlichen Analoga wurde abgeschlossen. Die identifizierten Natürlichen Analoga wurden in einem Bericht zusammengefasst und hinsichtlich ihrer Bedeutung für das Sicherheits- und Nachweiskonzept bewertet. Wichtige Aspekte des Sicherheits- und Nachweiskonzeptes, für die Natürliche Analoga von Bedeutung sein könnten, wurden identifiziert.
- AP7: Teilnahme an der KTG-Tagung 2010 im Mai in Berlin. Insgesamt war ISIBEL durch drei Vorträge vertreten, die GRS steuerte einen Vortrag zur technischen Sitzung „Entsorgung, Lagerung“ bei. Des Weiteren wurde das Projekt im Mai auf dem „Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation“ in Jackson (USA) vorgestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Zu diesem AP sind im Jahr 2010 keine weiteren Arbeiten geplant (siehe 8.).
- AP2: Zu diesem AP sind im Jahr 2010 keine Arbeiten geplant (siehe 8.).
- AP3: Zu diesem AP sind im Jahr 2010 keine Arbeiten geplant (siehe 8.).
- AP4: Die bei der Literaturrecherche zur Verbesserung der quantitativen Beschreibung der Gasproduktion gefundenen Experimente und Modelle sollen auf ihre Relevanz für die Situation in einem Endlager für hochaktive Abfälle im Salz hin untersucht werden. Aus den als relevant identifizierten Modellen wird die potenziell in eine Einlagerungstrecke zutretende Wassermenge aus dem Salzgestein abgeschätzt. Die Szenarien für die Freisetzung gasförmiger Radionuklide aus einem Endlager im Salz werden weiterentwickelt und die möglichen radiologischen Konsequenzen abgeschätzt
- AP5: Zu diesem AP sind im Jahr 2010 keine weiteren Arbeiten geplant (siehe 8.).
- AP6: Fertigstellung des vorläufigen Berichtes zu AP6. Anschließend erfolgt eine Diskussion des Berichtes mit BGR und DBETEC. An Hand der Diskussionen wird der Bericht überarbeitet.
- AP7: Die Ergebnisse aus ISIBEL werden auf der EUROSAFE 2010 im November in Köln vorgestellt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10729</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 ISIBEL-Ergebnisse

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für die Arbeitspakete 2 und 7.

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

Schwerpunkt der Tätigkeiten bildete die Abstimmung der Aufgabenstellung und 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. Weiterhin wurde mit der Einordnung barrierewirksamer FEPs und ihrer Zuordnung zu den ingenieurtechnischen Einwirkungen und Einwirkungskombinationen begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten zum Langzeitsicherheitsnachweis für Verschlussbauwerke werden fortgeführt.

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

Auf der KTG-Tagung 2010 im Mai in Berlin wurden in den folgenden beiden Vorträgen die Ergebnisse des Projektes ISIBEL vorgestellt:

J. Krone, D. Buhmann, J. Hammer, S. Keller, A. Lommerzheim, J. Mönig, S. Mrugalla, J. R. Weber & J. Wolf: Weiterentwicklung des Sicherheitsnachweiskonzeptes für ein HAW-Endlager im Salzgestein

A. Lommerzheim, D. Buhmann, S. Keller, J. Krone, J. Mönig, S. Mrugalla, J. R. Weber & J. Wolf: Erstellung eines FEP-Katalogs für ein Endlager für hochradioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente im Salinar am Beispiel des Salzstocks Gorleben

<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> 01.05.2010 bis 30.06.2010	
<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 Berichterstellung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Modellberechnungen haben gezeigt, dass selbst im Bereich des Verschlusses von Einlagerungsbohrlöchern geringe Permeabilitäten erst in Zeiträumen in der Größenordnung von Dekaden zu erwarten sind, die sich einer direkten Beobachtung entziehen. In den Einlagerungs- und Zugangsstrecken sowie im Infrastrukturbereich sind die Kompaktionsraten wegen der dort herrschenden erheblich geringeren Temperaturen noch niedriger. Für aussagefähige quantifizierte Prognosen ist es daher erforderlich, die sicherheitstechnisch relevanten Szenarien zu ermitteln, bei denen die Kompaktion des Salzgrusversatzes eine maßgebliche Rolle für die Behinderung des Zutrittes von Lösungen zu den Abfällen aber auch der Freisetzung von kontaminierten Lösungen spielt.

Als mögliches Zutrittsszenarium wird ein Zutritt über den Schacht angesehen. Im Berichtszeitraum wurde damit begonnen, die zutreffenden zeitabhängigen Randbedingungen (Zutrittsbeginn, Temperatur-, Spannungs- und Feuchteänderung) für die in AP3 vorgesehenen Modellberechnungen zu bestimmen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

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

AP2:

Konzepterstellung zur Durchführung von Versuchen zur Bestimmung einer möglichen richtungsabhängigen Permeabilität. Die Versuche sollen angepasst sein an Endlager-Randbedingungen, d. h. Endlager-Spannungsbedingungen sowie realitätsnaher Temperaturrandbedingungen sollen berücksichtigt werden. Insbesondere wird die Möglichkeit der Durchführung einer Reihe von triaxialen Extensionsversuchen geprüft, um mögliche sicherheitstechnische Vor- oder Nachteile zu ermitteln.

Die genauen technischen Optionen zur Durchführung dieser Versuche sollen erarbeitet und beschrieben werden.

Für die mikrostrukturellen Untersuchungen werden die Anforderungen an das Probenmaterial aufgestellt sowie die Versuchsdurchführung geplant.

AP3:

Die bei DBETEC verwendeten Stoffgesetze zum Versatzverhalten sollen auf ihren Gültigkeitsbereich hinsichtlich Spannung/Kompaktionsgeschwindigkeit, Temperatur, Feuchteinfluss und Porosität überprüft werden. Auf dieser Grundlage wird die Zulässigkeit von Extrapolationen in labortechnisch bislang nicht erfasste Bereiche auf physikalische Plausibilität hin untersucht, insbesondere in Bezug auf geringe Porosität und Permeabilität.

### 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 Berichterstellung

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

Mit der Konzeption der Versuchszellen für AP2 wurde begonnen. Wegen der rückwirkenden Bewilligung konnte ein Kick-off Meeting der Projektpartner erst für Juli realisiert werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Durchführung eines ersten Treffens der Projektpartner.
- Einrichtung von Arbeitsgruppen zu den Themen:  
Szenariendiskussion (AP1), Diskussion der Laborprogramme (AP2) und Stoffgesetze (AP3).
- Beschaffung der Versuchsapparaturen und Beginn der Laborarbeiten.
- Auswertung erster Ergebnisse der Szenariendiskussion im Hinblick auf die THM-Modellierung.
- Beginn der Zusammenstellung von Ähnlichkeitsgesetzen und Überprüfung der Relevanz für die Zweiphasenflussparameter von kompaktierendem Salzgrus.

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

Keine.





## **2.2 C-Vorhaben**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> GTS Grube Teutschenthal Sicherungs GmbH & Co. KG, Straße der Einheit 9, 06179 Teutschenthal		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1204</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit); Teil 2: Erprobung von Funktionselementen in situ		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2004 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 6.950.390,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Finder	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben schließt an das Vorhaben 02C0942 an. Es dient der Vervollständigung und großmaßstäblichen Verifizierung des dort erarbeiteten Grundkonzeptes und der dazugehörigen Bemessungsgrundlagen für die Errichtung von Streckendämmen in leichtlöslichen Salzgesteinen, insbesondere im Carnallit.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Planung eines Versuchsbauwerkes und seiner einzelnen Funktionskomponenten
- AP2: Auswahl der Einbaustandorte für die einzelnen zu untersuchenden Funktionselemente des komplexen Absperrbauwerkes
- AP3: Entwicklung eines interdisziplinären Messkonzeptes zum Nachweis der geplanten Eigenschaften der Dammbaumaterialien und des Umgebungsgesteins sowie ihres Verhaltens im Zeitverlauf; Funktionssicherung des Bauwerkes
- AP4: Untersuchungen zur Abdichtung der Kontaktzone und des unmittelbar daran anschließenden Gebirgsbereiches in der Einbauzone
- AP5: Labor- und In-situ-Untersuchungen zu den im Konzept (AP1) aufgeführten Verschlusselementen und Materialien
- AP6: Modellrechnungen für das Komplettbauwerk (Dammelemente, Fuge, ALZ, unverritztes Gebirge)
- AP7: Errichtung von Funktionselementen (Module)
- AP8: Konzipierung, Errichtung und Test geeigneter „Vorbau“-Elemente
- AP9: Messtechnische Kontrolle und Überwachung mit Vergleich der Messwerte mit den Berechnungsergebnissen zum geomechanischen und hydraulischen Verhalten
- AP10: Verarbeitung der Ergebnisse zu Prüfkriterien und Testanforderungen für Absperrbauwerke der untersuchten Kategorie
- AP11: Berichtsfassung und Dokumentation

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

AP1: Abgeschlossen.

AP2: Abgeschlossen.

AP3: Abgeschlossen.

AP4: Abgeschlossen.

AP5: Abgeschlossen.

AP6: Abgeschlossen.

AP7: Abgeschlossen.

AP8: Abgeschlossen.

AP9: Abgeschlossen.

AP10: Abgeschlossen.

AP11: in Bearbeitung.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Beim GV1 und GV 2 wird die Konsolidierungsphase messtechnisch verfolgt und in Abhängigkeit von dieser Phase und der angestrebten erfolgreichen Abdichtung der Kontaktzone Dammbaukörper/Wirtsgestein wird eine Druckbeaufschlagung , auch nach Ablauf des Projektzeitraumes , durch die GTS durchgeführt.

Alle Projektmitglieder sind derzeit mit der Erstellung des Abschlussberichtes beschäftigt um den Termin der Abgabe einzuhalten.

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

Es wurden mehrere schriftliche Publikationen und Vorträge erarbeitet und präsentiert.

Von besonderer Bedeutung ist eine Publikation über geochemische Fragestellungen zur Langzeitsicherheit von MgO-Beton. In dieser Publikation wurden Forschungsdefizite und Lösungsansätze aufgezeigt.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1335</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Qualifizierung von Strömungsbarrieren in Salzformationen, Phase 1 bis Phase 4	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2005 bis 28.02.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 28.02.2010
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.430.864,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Herbert

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bisherige Entwicklungen von geotechnischen Barrieren für ein Endlager oder eine Untertagedeponie in Salzformationen zeigten nur zum Teil Erfolg versprechende Resultate. Langzeitstabile Barrieren, die auf arteigenes Material des Wirtsgesteins Salz zurückgreifen, wurden bisher nicht systematisch entwickelt oder getestet. Insbesondere bei Vorhandensein von leichtlöslichen Mineralen im Wirtsgestein, wie Carnallit oder Tachhydrit, stehen derzeit keine adäquaten Konzepte zur Verfügung.

Mit den chemisch und mineralogisch verwandten Materialien Selbstverheilender Versatz (SVV) und AISKRISTALL wurden in den vergangenen Jahren zwei Erfolg versprechende Werkstoffe entwickelt, die bereits im Labor oder im Technikum ihre jeweilige Einsatzfähigkeit als Barrierematerial zeigten. Das Zusammenwirken beider Werkstoffe und die Zuordnung von im wesentlichen Dicht- und Tragfunktion ist bisher jedoch nicht untersucht worden. Dies soll Gegenstand des vorliegenden Projektes sein. Dabei wird das generelle Ziel verfolgt, die Materialien soweit zu qualifizieren, dass sie denselben Entwicklungsstand haben wie bisher untersuchte Barrierematerialien (z. B. Salzbeton oder Bentonit).

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Entwicklung eines technischen Nachweiskonzeptes und Planung von Experimenten im Labor, im Technikum und in situ
- AP2: Vorversuche im Labor und Technikum sowie Nachweis der technischen Realisierbarkeit
- AP3: Durchführung und Auswertung von Verifikationsexperimenten
- AP4: Dokumentation der Ergebnisse und Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am 28.02.2010 war offizielles Ende des Vorhabens. Einem Antrag der GRS auf Fortsetzung der Beobachtung des In-situ-Bohrlochverschlusses in Teutschenthal im Rahmen dieses Vorhabens wurde abgelehnt.

Im Berichtszeitraum wurde die Entwicklung des SVV-Bohrlochverschlusses im Tachhydrit in Teutschenthal registriert und interpretiert. Die Ergebnisse sind weiter unten in kurzer Form dargestellt:

Die Temperaturen an allen Messstellen innerhalb des SVV-Bohrlochverschlusses sind wenige Wochen nach Flutung des SVV auf Gebirgstemperaturen zurückgegangen. Das heißt, dass die Hauptreaktion Salzlösung-MgSO<sub>4</sub> schnell abgelaufen ist. Die Nachreaktion dürfte inzwischen auch weitestgehend abgeklungen sein.

Die Messwerte der Glötzeldruckzellen im SVV-Bohrlochverschluss zeigen, dass an unterschiedlichen Stellen des SVV-Dichtstopfens unterschiedliche Drücke anstehen:

- 34 bar am Fühler E, am Kontakt mit dem starren Betonwiderlager, am entgegengesetzten Ende des Lösungseinströmortes,
- 6 bar am Fühler A, im Bohrloch tiefsten, wo die Lauge eingeleitet wurde. Hier kann der sich im Bauwerk aufbauende Druck über die Schottersäule der Flutungskammer abgetragen werden. Das erklärt bei sonst gleichen Randbedingungen die niedrigeren Druckwerte.
- 9 - 10 bar an den Fühlern B, C und D an unterschiedlichen Stellen im inneren des SVV-Bohrlochverschlusses.

Die sich im Bohrlochverschluss einstellenden Drücke sind bedingt durch diese Prozesse:

- Hydratationsreaktion und Volumenvergrößerung des ursprünglich wasserfreien  $MgSO_4$ .
- Die aus der ursprünglich eingeleiteten Salzlösung ausfallenden Salze. Weil das Wasser der Lösung in der Hydratation verbraucht wird, kommt es zu einer Übersättigung und zum Ausfallen von Salzen.
- Die Gebirgskonvergenz des plastischen Tachydrit-Carnallit-Gesteins.
- Unterschiedliche Nachgiebigkeit der unmittelbaren Umgebung der Fühler.

Die unterschiedlichen Drücke legen nahe, dass der SVV nach der Reaktion mit der Lauge keine ganz gleichmäßige Porenverteilung und Permeabilität aufweist. Die Drücke sind jedoch groß genug, um zu einer kontinuierlichen Reduzierung des Porenraums und der Permeabilität im SVV selbst zu führen und darüber hinaus einen positiven Einfluss auf die Schließung von Wegsamkeiten in der Kontaktfuge und der Auflockerungszone im Salzgebirge auszuüben.

Ein Injektionstest, im Januar 2010, hat ergeben, dass vier Monate nach dem ersten Kontakt von SVV mit Salzlösung die integrale Permeabilität des Gesamtsystems Salzgebirge-Kontaktfuge-SVV-Verschuss-Betonwiderlager bei  $10^{-19} \text{ m}^2$  liegt. In den seither verstrichenen weiteren sechs Monaten, dürften die Porosität und die Permeabilität durch Nachhydratation, weitere Salzausfällung im Porenraum und durch die Konvergenz des Salzgebirges weiter reduziert worden sein.

Die bisherigen Ergebnisse mit SVV sind durchwegs positiv. Ursprünglich vorhandene Wegsamkeiten im aufgelockerten Gebirge konnten bei allen In-situ-Versuchen, d. h. im Steinsalz, im Carnallit und im Tachydrit durch SVV geschlossen werden. Mit SVV steht damit ein einfach handhabbares, arteigenes Dichtmaterial zur Verfügung, das sowohl sehr schnell abdichtet und seine Dichtwirkung selbsttätig dauerhaft verbessert. RDA-Messungen im Labor haben gezeigt, dass die sich schnell einstellenden metastabilen Hydrate relativ schnell, innerhalb von Monaten, abbauen und mittelfristig langzeitstabile Mineralparagenesen, Kieserit+Halit +Anhydrit +weitere stabile Salze, entstehen. SVV dichtet kurzfristig und sehr schnell, verbessert diese Dichtwirkung kontinuierlich und bildet schnell langzeitstabile Paragenesen aus.

Forschungsbedarf besteht noch, wenn einzelne Parameter, wie Drücke, Porosität und Permeabilität zuverlässig und reproduzierbar eingestellt werden sollen.

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

Weitere periodische Nachinjektionen zur Beobachtung der zeitlichen Entwicklung der Permeabilität des Gesamtsystems Salzgebirge-Auflockerungszone-SVV-Verschuss wären sinnvoll. Im Rahmen dieses Vorhabens können sie jedoch nicht mehr durchgeführt werden.

Der Abschlussbericht liegt im Entwurf vor und wird in Kürze dem Projektträger vorgelegt.

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

H.-J. Herbert (2010): Bericht über den In-situ-Versuch in Teutschenthal und Antrag auf Aufstockung und Laufzeitverlängerung – GRS-A Bericht, 17 S.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010
<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 in fertig gestellten Gesamtmessnetz (einschließlich GWE Stf 1, 2, 3, 4, neu zugänglicher Schächte)
- Weiterführung zur vertieften Auswertung der hydrochemischen und hydrodynamischen Daten in Zusammenarbeit mit TV2 (AP2,3,5,6), TV6 und TV10 unter Berücksichtigung der neuen Messstellen (GWE Stf 1, 2, 3, 4)
- Erarbeitung einer Modellierungsdatenbasis zur exakten Abbildung der Temperaturabhängigkeit der Sättigungsverhältnisse im Temperaturbereich 10-30 °C, hydrogeochemische Modellierungen zu Sättigungsverhältnissen, Reaktionen und Stoffumsätzen
- Fertigstellung des hydrogeologischen 3D-Modells (Geometrien, hydraulische Parameter, hydraulische und chemische Randbedingungen), Übergabe an das TV6, dort Überführung in ein FEFLOW®-Modell durch TV6
- begleitende Diskussion der in TV6 erzielten Modellergebnisse (Strömung, Transport) mit TV6 und TV2 (AP2, AP3)
- Vorbereitung und Präsentation der Ergebnisse auf dem 4. Workshop am 10. und 11.5.2010 in Kelbra
- Präsentation der Untersuchungen und Ergebnisse zum Thema Hydrodynamik und Hydrochemie unter Berücksichtigung der neuen Tiefenproben auf dem Fachgespräch „Fakten zum Senkungs- und Fließgeschehen im Bergschadengebiet von Staßfurt“ am 29.06.2010 in Staßfurt
- Mitarbeit an Publikationen

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Ergänzende Durchführung von In-situ-Strömungsmessungen im Deckgebirge
- Durchführung einer Stichtagsmessungen des hydrostatischen Druckes im Stockwerk Hauptanhydrit/Grubenbaue mittels neuer Messtechnik zur Charakterisierung der In-situ-Druckverhältnisse und zur Ableitung der Strömungsdynamik in den Grubenbauen
- Abschluss des hydrogeologischen 3D-Modell in Zusammenarbeit mit TV6, Mitwirkung an der Konzeption und Interpretation von Modellierungsszenarien des TV6, Mitwirkung an der Umsetzung des Konzeptes für den dichteabhängigen Transports und eines reaktiven 2-Komponenten-Transportes (mit TV6)
- Gesamtauswertung der hydrogeologischen Dynamik in Zusammenarbeit mit dem Forschungsverbund, Erarbeitung des Abschlussberichtes

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Stadler, S., Jahnke, C. & Bohn, A. (2010):

Grundwasser in abgesoffenen oder gefluteten Salzlagerstätten: Hydrochemische und isotopenhydrologische Charakterisierung der Grundwässer verschiedener Aquifereinheiten unter der von Senkungserscheinungen betroffenen Stadt Staßfurt. - In: Levin, C., Grathwohl, P., Kappler, A., Kaufmann-Knoke, R., Rügner, H. (eds.), Grundwasser für die Zukunft, Tagung der Fachsektion Hydrogeologie in der DGG (FH-DGG), Tübingen, 12. bis 16. Mai 2010, Kurzfassungen der Vorträge und Poster. Schriftenreihe der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften, Heft 67: 182.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 Grubenhohlräumen 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 Bohrkernokumentation. Koordination des Forschungsverbundvorhabens.



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

**AP Aerogeophysik:** Die Interpretation der aerogeophysikalischen Daten, insbesondere die spezifischen Widerstände aus der HEM-Inversion, wurde zusammen mit den Daten der (Hydro-) Geologie, Bodengeophysik und dem hochauflösendem Nivellement (LIDAR) hinsichtlich einer geologischen und hydrogeologischen Deutung fortgeführt. Die radiometrischen Daten wurden analysiert und lieferten wertvolle Hinweise zum oberflächennahen Wassergehalt.

**AP Bodengeophysik / Grundwasser Monitoring:** Während der Flachbohrkampagne im Februar 2010 wurden 16 Bohrungen abgeteuft und geologisch aufgenommen. Die Bohrungen lieferten wichtige Hinweise zur Quartärmächtigkeit in Bereichen, in denen die aeroelektromagnetischen Messungen Hinweise für Rinnenstrukturen zeigten. Ein geoelektrisches 2D-Profil wurde nahe der Salzstelle Hecklingen vermessen (Länge 400 m) sowie zwei weitere Profile (800 m und 600 m) im Bereich Rathmannsdorf. Ziel dieser Messungen war die Erkundung möglicher Störungszonen. Milieusonden zur kontinuierlichen Beobachtung der Grundwasserparameter wurden in die Bohrungen GWE 3 und GWE 4 eingebaut.

**AP Laserscanbefliegung:** Mit der Spezialsoftware LIS-Desktop konnten die Altbefliegungen von 1998 bis 2001 aufgearbeitet und in das Höhendifferenzmodell eingearbeitet werden.

**AP Seismologisches Monitoring:** Die Seismometerstationen (STF1 – STF6) wurden kontinuierlich betrieben und gewartet. In der Bohrung GWE-STF2 wurde ein Bohrlochgeophon in einer Tiefe von ca. 300 m installiert. Diese Station (GWE2) wird kontinuierlich betrieben.

**AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung:** Abschluss der Arbeiten an den 3D-Grubenmodellen (Modellierung der Grube Friedrichshall und Wasserabfuhrsstrecke Leopoldshall) und Modellierung der geologischen Grenzflächen Top Staßfurt-Steinsalz, Top Hauptanhydrit, Basis Quartär. Zudem erfolgten salzgeologische und mineralogisch-geochemische Untersuchungen an Kernen der Bohrung GWE STF 3. Im Rahmen der Modellierarbeiten für das Deckgebirge des Staßfurter Salzsattels wurden die seismischen Profile geologisch interpretiert und in die Modellflächen des geologischen 3D-Modells eingearbeitet.

**AP Server-Datenbank, Tiefbohrung und Koordination des Gesamtprojekts:** Die Datenbankpflege wurde fortgesetzt. Die Bohrungen GWE STF3 und 4 wurden geteuft und zu Messstellen ausgebaut. In den Bohrungen GWE STF1 und GWE STF2 wurden Grundwasserströmungsmessungen durchgeführt. Der Projektstatus wurde zusammen mit dem Beirat im April in Kelbra diskutiert. Der Projektstand zum 3. Workshop wurde in der EDDG (siehe Punkt 5) veröffentlicht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP Aerogeophysik:** Interpretation der Geophysikdaten hinsichtlich einer geologischen, hydro-geologischen und strukturellen Deutung für das gesamte Befliegungsgebiet.

**AP Bodengeophysik/Grundwassermonitoring:** Weitere Messungen zur Klärung von HEM-Indikationen, der Gipshut-Infiltration und Störungssignaturen sind neben einer weiteren geoelektrischen Bohrlochmessung und Multiparameterprofilierungen in den BGR-Messstellen geplant.

**AP Hohlschneckenbohrungen:** Keine geplant.

**AP Seismisches Monitoring:** Die kontinuierlichen seismischen Messungen und die Datenanalyse werden fortgesetzt. In der Bohrung GWE-STF1 wird das zweite Bohrlochgeophon installiert.

**AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung:** Endgültiger Abschluss der Erarbeitung des geologischen 3D-Modells, Anfertigung des Abschlussberichtes und Vorbereitung der Abschlussveranstaltung mit 3D-Präsentationen.

**AP Server-Datenbank, Tiefbohrung und Koordination des Gesamtprojekts:** Die Datenbankpflege wird fortgesetzt und die Vorbereitung für den öffentlichen Zugang wird vorbereitet. Die Bohrung G4 wird überarbeitet und die ausgefallenen Messungen sind geplant. Die Vorbereitungen der Abschlussveranstaltung vom 18.-20.11.2010 in Staßfurt werden fortgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Johannes Gerardi (Hrsg.) 2009: Forschungsverbundvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“- EDDG, Heft 242, ISBN 978-3-86944-12-5, 101 S., Hannover

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 ruptureller 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**

Im abgelaufenen Berichtszeitraum wurden im Rahmen der Arbeitspakete AP4, AP5 und AP6 zahlreiche numerische Simulationen für das Profil Strandbad durchgeführt. Es wurden die Hohlraumkonfigurationen sowie Schwächezonen in ihrer Lage und physikalischen Eigenschaften im Profil variiert. Die Variationen haben es schließlich ermöglicht, den Tagesbruch abzubilden. Darauf hinzuweisen ist, dass die erfolgreiche Nachrechnung des Tagesbruches nicht gleichbedeutend ist mit der Aussage, dass der Tagesbruch tatsächlich unter den gewählten Bedingungen bezüglich Hohlraumlage und Konfiguration entstanden ist. Es wurde von einem durch Auflösungsprozesse entstandenem Hohlraum im Bereich des Kaliflözes ausgegangen. Durch diese numerische Simulation des Tagesbruches lässt sich z. B. nicht festlegen, in welcher Tiefe sich der Hohlraum tatsächlich befindet, so dass durch die Nachrechnung keinesfalls die Möglichkeit eines wesentlich höher liegenden, durch Karstbildung entstandenen Hohlraumes, ausgeschlossen werden kann. Die Nachrechnung zeigt vielmehr grundsätzlich die Möglichkeit, durch numerische Simulationen das Tagesbruchgeschehen abzubilden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Eingabe der Laborversuchsergebnisse in die Datenbank
- Schlussbericht

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

EDGG.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 Recherchearbeiten.
- 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 dem Test einer zusätzlichen Auswerte- und Darstellungssoftware im November 2009 wurde die Bearbeitung der LIDAR Daten fortgeführt. Dazu wurde die Software LIS Desktop der Firma Laserdata eingesetzt (32bit). Hiermit konnten zunächst die vorhandenen ASCII Datenformate in ein LIS Desktop taugliches Format überführt sowie die Höhendarstellungen der Befliegungsjahre 2000, 2001, 2007 und 2009 erstellt werden (Shaded Relief, DHM). Nach Auswahl eines geeigneten Auswertebereiches, welcher zu allen genannten Befliegungszeitpunkten erfasst wurde, erfolgten erste Differenzenberechnungen mit einer Punktrasterweite von 1,5 m. Die derzeitigen Ergebnisse wurden auf dem Jour Fixe vom 29.06.2010 vorgestellt.

Zudem erfolgte weiterhin eine vergleichende Betrachtung der Laserscan-Auswertung mit vorhandenen Radarinterferometrischen Auswertungen sowie mit Nivellement-Daten (2000 – 2008, Geo-Metrik).

- AP5: Mit der Aufbereitung und Zusammenstellung der Erkundungsergebnisse der Bohrungen GWE STF 1 und GWE STF 2 wurde bereits begonnen und wird weiter fortgeführt. Die resultierenden Berichte (technische Berichte) werden in den Gesamtbericht des TV 4 integriert. Der technische Bericht zur GWE STF 1 liegt bereits vor.
- 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-UTEC sowie anderer Projektpartner (BGR) werden aktuell zusammengetragen sowie ein aktualisiertes Kartenwerk der Versatzsituation der Gruben am Staßfurter Sattel erstellt (K-UTEC).

Die Archivrecherchearbeiten zu den Themenschwerpunkten aus AP6, 7, 9, 11 und 12 wurden bis Anfang 2010 fortgeführt (Frau Dipl. Geophysikerin K. Abraham) und abgeschlossen. Die aktualisierten Ergebnisse zum Tagesbruchgeschehen wurden zum 3. Workshop in Kelbra bereits vorgestellt.

- AP7: Mitarbeit in der Arbeitsgruppe „Tagesbruch Strandbad“. Zudem Auswertung der Tiefenproben aus den Erkundungsbohrungen GWE STF 1 und GWE STF 2.

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

- AP2+3: Nach der Auswertung und Darstellung der Laserscan-Daten als Differenzen der Zeiträume 2000 bis 2009 (Differenzen: 2000 – 2001, 2000 – 2007, 2000 – 2009, 2001 – 2007, 2001 – 2009, 2007 – 2009) wird nachfolgend die Auswertung mittels verbesserter Software-Kapazität (Upgrade der Software von 32bit auf 64bit) fortgeführt und die Berechnungen mit Punktrasterweiten von 1,0 m und 0,5 m durchgeführt. Zusätzlich müssen die vorhandenen Befliegungsdatensätze erneut auf ihre Integrität geprüft werden. Verschiedene Ausgangsparameter der Messkampagnen sind zu prüfen, um eine Einordnung der dargestellten Ergebnisse vornehmen zu können.
- AP5: Fortführung der Aufbereitung & Zusammenstellung der Erkundungsergebnisse der Tiefbohrungen GWE STF 1 und 2 inklusive Berichterstellung.

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

K-UTEC 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

EDGG (Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften): Forschungsverbundvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks“, 2. Workshop in Kelbra 2009 – Statusseminar; 2009, Heft 242.

Poster:

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

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 Frühjahr 2010 erfolgten die abschließenden chemischen Grundwasseruntersuchungen ausgewählter Aufschlüsse. Die Datenaufnahmen zur Hydrodynamik des Untersuchungsgebietes erfolgen durch den TV5 weiterhin kontinuierlich durch Datenlogger in 8 ausgewählten Messstellen sowie über das dezentrale Messnetz der Stadt Staßfurt.

Der Hauptschwerpunkt der Arbeiten im Rahmen des AP2 lag auf der Fachbegleitung und Auswertungen der Ergebnisse ergänzenden geowissenschaftlichen Erkundungsbohrungen GWE STF 3 und 4. Die GWE STF 3 auf dem Gelände der Sodawerke zeigte eine auffällig hohe Mächtigkeit der Überdeckung des Gipshutes mit Lockergesteinsmaterial aus überwiegend sandig-schluffigen Wechselfolgen sowie kiesigen Ablagerungen. Der Gipshut wurde in einer Teufe von 59,5 m unter GOK erreicht. Ausbau und Tests erfolgten im 1. Quartal 2010. Die GWE STF 4 wurde im Dezember 2009 westlich des Strandbades geteuft. Nach anthropogenen Auffüllungen und einer Übergangszone aus vermutlichen Versturzmassen des Tagesbruchs wurde der Untere Buntsandstein ab 9 m uGOK anstehend angetroffen. Die Bohrung wurde bei 65 m beendet und nach Durchführung der geophysikalischen Untersuchungen zur Grundwassermessstelle ausgebaut.

Am 10./11.05.2010 wurde der 4. Workshop in Kelbra durchgeführt. Der Schwerpunkt lag auf der Vorstellung aktueller Arbeitsergebnisse und der Abstimmung der Vorgehensweise zur Erstellung einer koordinierten Abschlussdokumentation. Es erfolgte ein intensiver Informationsaustausch zwischen den Projektpartnern und dem wissenschaftlichen Beirat.

Am 15./16.06.2010 erfolgte das 9. Projektstatusgespräch zu Vorhaben auf dem Gebiet der Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen auf dem der Forschungsverbund durch einen Übersichtsvortrag vertreten war.

### **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**

Keine.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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

Es erfolgte die Präzisierung der Modellgeometrie auf der horizontalen Ebene, insbesondere in der vertikalen Aufteilung unter Berücksichtigung der geohydraulischen Schichtung, die Parametrisierung sowie die Strömungssimulationen zur Kalibrierung des hydrogeologischen 3D-Strömungsmodells. Nachfolgend sind relevante Arbeitsschritte sowie erzielte Ergebnisse zusammenfassend dargestellt.

*Präzisierung des 3D-Modells mit der aktuellen Modellgeometrie und deren Parametrisierung:*

Die Geometrie des hydrogeologischen 3D-Modells wurde im Frühjahr 2010 unter Abstimmung mit der BGR (TV2: Hammer-Gruppe) und der BTU Cottbus (TV1) endgültig abgeschlossen. Die hydrogeologischen Schichtgrenzen sowie die dazu gehörigen hydraulische Parameter des 3D Strömungsmodells wurden entsprechend dem Arbeitsstand vom April 2010 aktualisiert. Des Weiteren wurde das Modellnetz in der Horizontale verfeinert, um die Geometrie der Bergwerke zu berücksichtigen.



Auf dieser Basis erfolgte zunächst eine Nachkalibrierung des Strömungsmodells. Im 3D-Modell konnte das vorherrschende Strömungsregime im Untersuchungsgebiet im Vergleich zu den Stichtagsmessungen gut reproduziert werden. Es wurden Berechnungen von Rückwärts-Bahnlinien, die vom dezentralen Wasserhaltungsbrunnen Staßfurt gestartet wurden, und von Vorwärts-Bahnlinien, die von Rändern der Löderburger Seen begannen, ausgeführt. Darüber hinaus wurde zur Kontrolle der Plausibilität der Modellierungsergebnisse eine detaillierte Analyse der Wasserbilanz durchgeführt. Damit wurde die Nachkalibrierung erfolgreich abgeschlossen.

Das kalibrierte 3D-Strömungsmodell wurde zu einem 3D-Stofftransportmodell erweitert. Um vertikale Stofftransportvorgänge genau modellieren zu können, wurden die Modellschichten mittlerer und unterer Bundsandstein sowie Hauptanhydrit im Strömungsmodell durch zusätzliche Modellschichten aufgeteilt. Das erweiterte 3D-Stofftransportmodell hat somit 26 Schichten.

Die Parametrisierung des 3D-Stofftransportmodells erfolgte in Abstimmung mit der BTU Cottbus (TV1). Auf dieser Basis wurde die erste 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). Hierdurch konnten erste Kenntnis über die räumliche Verteilung der Konzentrationen im Untersuchungsgebiet in regionalem Maßstab gewonnen werden. In der Diskussion mit den geophysikalischen Sachbearbeitern (TV2) ergab sich eine qualitativ gute Übereinstimmung der Konzentrationsverteilung mit den Ergebnissen der Elektromagnetik.

#### *Vergleich rein konduktives Wärmetransportmodell zu gemessenen Logs:*

Es wurde ein stationäres, rein konduktives Modell basierend auf dem existierenden Strömungsmodell berechnet. Das heißt, dass nur Wärmeleitung berücksichtigt wird, der advective Transport von Wärme durch das strömende Grundwasser wird dabei vernachlässigt. Aus diesem Modellergebnis wurden vertikale Temperaturverläufe an den Positionen der vorliegenden 16 gemessenen Temperaturlogs abgeleitet. Der Vergleich des gemessenen mit dem modellierten Log gibt durch Anomalien in dem Temperaturfeld Hinweise auf Bereiche die starke Grundwasserströmung aufweisen. Die nahezu abgeschlossene Auswertung gibt wertvolle Hinweise auf besonders interessante Bereiche in den gemessenen Profilen.

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

- Durchführung dichtegekoppelter 3D-Stofftransportberechnungen
- Weiterführende Modellstudien und Szenarienberechnungen

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

Keine.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 weitestgehend abgeschlossen. Die Integration der Ergebnisse in die BGR Saltcorebase wird noch diskutiert und geprüft. Dies betrifft auch die Ergebnisse der AP2.1 und 2.2. Im AP1.4 sind erhebliche 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) erschienen und werden ausführlich im zu erstellenden Abschlussbericht dargestellt.

Im AP2.4 werden auf Basis der im AP2.3 entwickelten Datensätze Simulationen mit Lattice Boltzmann-Methoden durchgeführt. Diese liefern als Modellergebnis effektive Transportparameter der an den Bohrkernen gemessenen Mikrostrukturen. Gegenwärtig laufen 3D und 4D Fluidmigrations- und Tracertransportsimulationen. 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. Erste 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 Permeabilitätstensoren, die als präzisierte Eingangsparameter in makroskopische Modelle finden können (AP2.6). Auswertung der Daten und Publikation der Ergebnisse wird vorbereitet.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fertigstellung der Simulationen mit Schwerpunkt auf Variation der Anfangs- und Randbedingungen, um möglichst nahe an die experimentellen Ergebnisse in TV8 (PET) heran zu kommen. Eine Abstraktion und Parameterableitung für ein effektives Upscalen der Simulationsergebnisse ist der Schwerpunkt in der letzten Projektphase sowie die Erstellung des Abschlussberichtes und Publikation der Ergebnisse.

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

Keine.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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

AP4-6: Die gesamten Datensätze, insgesamt über 200 Tomogramme, werden zurzeit unter Berücksichtigung korrigierter und verbesserter Auswertemethoden überarbeitet und einheitlich dargestellt.

Als Verfahren zur Fehleranalyse werden nun Monte-Carlo Simulationen des  $\beta^+$ -Zerfalls im dichten Material durchgeführt. Hierdurch können die Grenzen der Quantifizierbarkeit und Artefakte durch Compton-Streuung erkannt werden. Bei Annahme von Anhydrit hat sich dabei bereits gezeigt, dass aufgrund des großen Probendurchmessers und der großen Materialdichte bis zu 75 % Streustrahlung auftritt, die je nach Streuwinkel Unschärfe oder Artefakte verursachen kann.

AP5: Für die Untersuchung unter den realistischeren Umgebungsbedingungen von lithostatischem (bis 12 MPa) und hydrostatischem Druck (bis 5 MPa) wurde eine Hochdruckapparatur zusammengestellt, die für Untersuchungen an anscheinend dichten Anhydrit-Proben zum Einsatz kommen soll. Es wird vermutet, dass die bisher häufig gefundene starke Lokalisierung der Transportpfade sich unter Druckbedingungen noch verstärkt.

AP6: Nachdem CT-Untersuchungen am geklüfteten Material vorgenommen wurden, konnten in TV7 die LBM-Rechnungen gestartet werden. Vorläufige Modellergebnisse zeigen wie die PET-Messungen stark lokalisierte Fließstrukturen.

AP7: Es wurden Funktionen mit dem Statistikpaket R für die Zusammenfassung der räumlich-zeitlichen Datensätze entwickelt. Hiermit ist eine punktweise Zeitreihenanalyse, z. B. als lokale Durchbruchkurven, und eine zusammenfassende räumliche geostatistische Analyse möglich. Weitere Quantifizierungsverfahren nutzen die Möglichkeiten der 3D-Bildanalyse mit Avizo Fire für zur Segmentierung des effektiven Porenraumes und die Beschreibung seiner Topologie.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Quantitative Überarbeitung der Datensätze
- Vergleich mit den Ergebnissen aus TV7
- Einsatz der Hochdruckapparatur für dichtes Material
- Erstellung von Veröffentlichungen und Abschlussbericht

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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

Am 01.04.2010 hat Frau Bernadette Heinze die Bearbeitung des TV9 in der Nachfolge des zum 28.02.2010 ausgeschiedenen Projektmitarbeiters aufgenommen. Auf diese Weise konnte ein nahezu kontinuierlicher Übergang in der Projektbearbeitung des TV9 gewährleistet werden. Durch die bewilligte kostenneutrale Mittelumwidmung können die bislang im Projektverlauf aufgelaufenen Zusatzarbeiten bis zum 31.12.2010 abgearbeitet werden.

Als Unterstützung für die in der Endphase befindliche weiterführende Erstellung des geologischen 3D-Modells durch das TV2 wurden die Profile „Soda 1“ und „Soda 2“ auf dem Areal der Solbohrungen des Sodawerkes Staßfurt einer mit der nun modifizierten geologischen Modellvorstellung abgestimmten Weiterbearbeitung unterzogen. Darüber hinaus wurde das Profil „Neustaßfurt“ sowie die nordöstliche Verlängerung des Profils „Mühlengraben“ mit dem Profil „Ludwigschacht“ und die Profile „Industriestraße Bohrung“ und „Am Strandbad“ in modifizierte Darstellungen überführt und interpretiert. Die Profile fügen sich überwiegend gut in die aktuellen Modellvorstellungen über die Grubenbauten, Bohrungsansprachen sowie den generellen Verlauf der geologischen Einheiten ein und unterstützen die strukturelle Interpretation zwischen den Bohrungen. Einige der aktuellen Profilbearbeitungen führten zu neuen bzw. weiterführenden Erkenntnissen im geologischen Modell, im Zuge derer Rinnenstrukturen fortgesetzt und Bohrungen uminterpretiert wurden. Allerdings bestehen auf der Nordostseite des Staßfurter Sattels noch offene Fragen hinsichtlich der Interpretation, insbesondere aufgrund der

dort vollständig fehlenden seismischen Referenzgeschwindigkeiten. Allgemein liefern die Profile auf der Südwestflanke des Sattels verlässlichere Tiefeninformationen, da dort mittels Geschwindigkeitsinformationen aus den qualitativ hochwertigen Bohrlochmessungen aus der Bohrung STF 2 referenziert werden konnte.

Der in 2009 im Bereich des Strandsolbades versuchsweise generierte 3D-seismische Datensatz wurde weiterbearbeitet und anhand strukturparallel extrapolierter Geschwindigkeiten aus der Bohrung STF2 in die Tiefe konvertiert. Die Verschneidung und Korrelation mit der Lage der vormaligen Grubenbauwerke zeigt, dass die Position der Sattelflanke in diesem Bereich deutlich weiter südlich als bisher angenommen liegen muss und in Höhe des heutigen Strandsolbades in Richtung Süden abbiegt. Im seismischen Bild zeichnen sich hier eine Reihe von massiven Störungsstrukturen ab. Diese können allerdings mangels hinreichend aktueller Bohrungsinformationen und die durch den Absaufungsprozess nach Grubenaufgabe bedingten Lösungsprozesse im Untergrund allein auf Basis der ehemaligen Grubenrisse nicht weiter interpretiert werden. Insgesamt gesehen lieferte das zunächst als Test durchgeführte Experiment aber wichtige strukturelle und methodische Informationen.

Aus organisatorischen Gründen konnten ab Juni 2010 keine weiteren seismischen Informationen mehr im geologischen 3D-Modell berücksichtigt werden. In der noch verbleibenden Laufzeit wurde die Bearbeitung der bis dahin noch ausstehenden Profile „Friedrichshall“ und „Plattenweg Rathmannsdorf“ auf der Nordostflanke des Sattels aufgenommen. Im letzteren fällt eine qualitativ herausragende Abbildung der nordöstlichen Sattelflanke und insbesondere auch des Basalanhydrits auf, was auf eine vergleichsweise geringe Energiestreuung in den darüberliegenden Schichten hindeutet und somit ein relativ ungestörtes Deckgebirge nahe legt. In diesem Profilbereich befinden sich nach den vorliegenden Informationen keine Grubenbauwerke.

Auf Anregung der Projektleitung wurde versucht, auch die im Rahmen des Vorgänger-Projekts generierten seismischen Profile „STF01“ und „STF02“ in das geologische Modell zu integrieren. Dazu wurden die digitalen Daten vom damaligen Verbundpartner Fa. GGD-Leipzig kostenpflichtig bezogen und für die Integration in die weiterführende geologische Interpretation aufbereitet. Insbesondere die Teufenkonversion wurde auf der Basis aktueller Daten modifiziert. Allerdings wiesen die Profile STF01&02 im detailliertem Abgleich bereits in der Zeitsektion eine nach dem vorliegenden Informationsstand nicht mehr rekonstruierbare Verschiebung bzw. Stauchung auf. Zudem war der genaue Verlauf der CMP-Positionen sowie die dadurch bedingte Streuung der abgetasteten Untergrundpunkte nicht mehr aus dem Datenmaterial ableitbar. So konnten diese Profile zwar für den generellen strukturellen Verlauf der Reflektoren herangezogen werden, nicht jedoch für deren Tiefenlage und detaillierte Interpretationen, was eine umfassende Neubearbeitung erforderlich machen würde.

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

Prozessing und Interpretation der noch nicht, bzw. bislang aufgrund der Projektprioritäten oder ihrer Lage außerhalb des Kerngebietes nur ansatzweise bearbeiteten seismischen Profile. Verschneidung aller Profile mit Informationen aus Bohrungen, den geologischen 3D-Modell und dem 3D-Grubenhohlraummodell. Weiterführende Auswertung von VSP- und Bohrlochmessungen. Aufnahme eines S-Wellen-Testprofils in einem Gebiet mit ungestörtem Deckgebirge (eventuell entlang des Profils „Plattenweg Rathmannsdorf“) und Vergleich der Datenqualität mit den bisher aufgenommenen S-Wellen-Profilen. Erzeugung eines Testprofils am Standort der Bohrung STF3 mit Tiefenreichweite bis zur Quartärbasis.

Erstellung der Aufsätze und Abbildungen für das Begleitheft der Abschlussveranstaltung vom 18.-20.11.2010 sowie des in diesem Rahmen zu haltenden öffentlichen Vortrags. Aufnahme der Arbeiten für den Abschlussbericht, Erstellung finaler Ausdrucke und Grafiken sowie Archivierung des Datenmaterials.

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

Polom, U., Leder, T., 2010. Bergbaufolgeschäden Staßfurt: Fachlicher Jahresbericht f. d. Zeitraum 1.1.-31.12.09, 23 S.

Leder, T., Polom, U., Krause, I., Dresbach, C., 2010. Seismische Erkundung des Staßfurter Sattels am Beispiel des Bergsenkungsgebietes im Bereich des Strandbades Staßfurt. Poster, 70. Jahrestagung der deutschen Geophysikalischen Gesellschaft, 15.-18.03.2010, Ruhr-Universität Bochum.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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-UTEK (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 Alterstruktur 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

Im LIAG wurden die Anfang August 2009 in Staßfurt entnommenen letzten Wasserproben auf stabile Isotope und  $^{14}\text{C}$  analysiert, um die Erkenntnisse zu Salzaufstieg und Versüßungszonen im quartären Lockergesteinsaquifer zu verbessern.

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) wurde fortgeführt und beendet, und zusätzlich wurden einzelne hydrochemischen Messungen vorgenommen. Die Auswertung und Modellierung der einzelnen Umwelttracerergebnisse zur Bewertung von Grundwasserverweilzeiten in den einzelnen Aquiferstockwerken sind weitestgehend beendet.

Frau Dr. N. Varunny hat die isotopenhydrologische Dateninterpretation fortgeführt und ist als Wissenschaftlerin nach Auslaufen der Fördermittel im Mai 2010 ausgeschieden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Für das 2. Halbjahr 2010 sind die Arbeiten zum Abschlussbericht und die Publikation der isotopenhydrologischen Ergebnisse in enger Zusammenarbeit mit der BTU Cottbus in nationalen und internationalen Fachzeitschriften sowie die Vorbereitung und Präsentation der Ergebnisse des TV10-Isotopenhydrologische Untersuchungen auf der Abschlusskonferenz vorgesehen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Stadler, S., Sültenfuß, J., Jahnke, C., Bohn, C. (in Vorbereitung): Groundwater dynamics in flooded salt mines: isotopic and chemical characterization of different aquifer units above and their impact on former salt mines in the subsidence-affected city of Stassfurt, Germany.

Stadler, S. et al. (in Vorbereitung): Abschlussbericht TV10 – Isotopenhydrologische Untersuchungen im Rahmen des Verbundprojektes: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirges.

Stadler, S., Bohn, A., Jahnke, C. (2010): Isotope hydrological fingerprints, hydrochemistry and groundwater dynamics in the potash and rock salt-mining town of Stassfurt, Germany. European Geosciences Union General Assembly 2010 Vienna, Austria, 02-07 May 2010.

Stadler, S., Jahnke, C., Bohn, A. (2010): Groundwater in drowned salt mines: isotopic and hydrochemical characterization of water from different aquifer units above the saline structure in the subsidence-affected city of Stassfurt, Germany - FH-DGG Tagung Tübingen 12.-16.05.2010.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 Stoffgesetzmöglichkeiten 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 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 das Finite-Differenzen-Programm FLAC-3D (Fa. Itasca).

Im Berichtszeitraum hat der Zuwendungsempfänger seine Kriechsimulationen mit dem FLAC-3D-Modell des gemeinsam allen Partnern vorgegebenen Ausschnitts der Grube Angersdorf abgeschlossen und die Ergebnisse ausgewertet. Die Simulationsergebnisse zum Zeitpunkt 50 Jahre nach der Auffahrung (Zustand „heute“) stimmen sehr gut mit den Ergebnissen der vom Partner IfG im Projekt durchgeführten In-situ-Messungen überein. Die weitergeführten Simulationen bis zum Berechnungsende lieferten Prognosen der künftigen Entwicklung.

Außerdem erstellte der Zuwendungsempfänger den detaillierten Vergleich der Berechnungsergebnisse aller Projektpartner. Dieser umfasste sowohl die zeitlichen Verläufe der Verschiebungen und der Hauptspannungskomponenten an ausgewählten Modellpunkten als auch die Verläufe der Verschiebungen, Volumendehnungen (Dilatanzen) und Hauptspannungskomponenten entlang ausgewählter Modellsuren und auf diversen Modellschnittflächen zu den Zeitpunkten 50 und 100 Jahre nach der Auffahrung der untertägigen Hohlräume.

Die Ergebnisse wurden auf dem 9. und 10. Projektworkshop präsentiert. Nach zwei weiteren Vorbereitungstreffen stellten die Partner das Projekt auf der Abschlussveranstaltung am 09. Juni in der TU Clausthal einem Fachpublikum vor. Am 15. Juni präsentierte der Zuwendungsempfänger das Vorhaben auf dem 9. Projektstatusgespräch des Projektträgers Karlsruhe im KIT. Außerdem berichtete er am 28. Juni auf dem 44. U.S. Rock Mechanics Symposium (ARMA 2010) in Salt Lake City/Utah/USA über die bisherigen beiden Verbundprojekte zum Stoffgesetzvergleich und verfasste die zugehörige gemeinsame Veröffentlichung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2010 wird der Zuwendungsempfänger den detaillierten Ergebnisbericht zu seinem Teilprojekt sowie das Kapitel über den Vergleich der Ergebnisse der Projektpartner für den Synthesebericht verfassen und den gemeinsamen Synthesebericht aus den Beiträgen der Partner erstellen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

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. & 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., 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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.

Das IfG hatte im ersten Halbjahr 2010 die In-situ-Messungen in der Grube Teutschenthal bzw. Angersdorf beendet, wobei die Pfeilerquerdehnungsmessungen bis Ende April 2010 weitergeführt wurden. Die bereits 2009 für den Messhorizont zwischen den Kammern VIII und IX ermittelte Pfeilerquerdehnungsrate von ca. 4 mm/a konnte dabei bestätigt werden.

Mit Frac-Messungen wurde die Verteilung der minimalen Hauptspannungskomponente in einer benachbarten horizontalen Messbohrung ermittelt. Dabei wurden im Pfeilerkern Maximalwerte von ca. 5,5 MPa bestimmt.

Aus den Druckabfallkurven der Dichtheitstest, die über einen begrenzten Zeitraum von einem Tag erfasst wurden, konnten obere Grenzwerte für Permeabilitäten und Porositäten abgeleitet werden. Dieser Grenzwert für die Permeabilitäten im Pfeilerkern liegen bei  $10^{-20} \text{ m}^2$ , die entsprechenden Porositäten bei 2 %.

Mit dem FLAC-3D-Modell des gemeinsam für die Benchmark-Modellrechnungen ausgewählten Ausschnitts der Grube Angersdorf und auf der Basis der abgeleiteten Stoffmodellparameter wurden mit beiden Stoffmodellen die Prognoserechnungen abgeschlossen, die an die beobachtete Senkungsentwicklung angepasst und mit den Ergebnissen der In-situ-Messungen für den Ist-Zustand verglichen wurden, wobei sich eine gute Übereinstimmung zeigt.

Das IfG hat im ersten Halbjahr 2010 die Erstellung des Entwurfs des IfG-Einzelberichtes abgeschlossen, der die In-situ-Messungen, die ergänzenden Laborversuche und die Modellierungsarbeiten sowohl mit dem Stoffmodell nach MINKLEY als auch mit dem erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach GÜNTHER/SALZER beschreibt.

Weiterhin hat das IfG an der Vorbereitung und Durchführung des öffentlichen Ergebnis-Workshops, der am 8. und 9. Juni in Clausthal stattfand, maßgeblich mitgewirkt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im zweiten Halbjahr 2010 wird das IfG die Erstellung des Einzelberichtes abschließen sowie an der Erarbeitung des gemeinsamen Abschlussberichtes maßgeblich mitwirken.

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

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

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 120.265,00 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

Der Vergleich der Berechnungsergebnisse zur Grube Angersdorf mit denen von Projektpartnern und die Gegenüberstellung von Messdaten zeigten, dass die Temperaturabhängigkeit des berücksichtigten Kriechgesetzes von Salztonschichten unterschiedlich zur Vorgabe war. Dadurch wurde das Verhalten dieser Schicht viel zu steif berechnet. Nachdem dieser Parameter korrigiert und die Modellrechnung wiederholt wurde, folgte eine neue Auswertung der Rechenergebnisse.

Weiterhin konzentrierte sich der Beitrag des INE auf die Darstellung und die Dokumentation der Rechenergebnisse von verschiedenen Arbeitspaketen AP3 - 6 des Projekts. Ein ausführlicher Abschlussbericht ist weitgehend fertig gestellt.

Im Berichtszeitraum wurde zusätzlich ein Beitrag zur öffentlichen Abschlussveranstaltung des Verbundprojekts II "Stoffgesetzvergleich" am 9. Juni 2010 in der TU Clausthal vorbereitet und präsentiert. Eine detaillierte Beschreibung dieses Vortrags über "Weiteren Forschungsbedarf und Ausblick" wird in Kapitel 6 des gemeinsamen Synthesereports dargestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Laufzeit dieses Vorhabens endet am 31.07.2010. Der Einzelbericht über die Modellrechnungen im Rahmen des Teilvorhabens 3 wird als KIT-Report erstellt. Die Ergebnisse der 3D-Modellrechnungen werden außer im Abschlussbericht auch auf dem 44<sup>th</sup> US Rock Mechanics Symposium (ARMA) in Salt Lake City präsentiert. Eine ausführliche Veröffentlichung der Benchmark-Ergebnisse ist in einer internationalen Fachzeitschrift geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

O. Schulze, U. Heemann, F. Zetsche, A. Hampel, R. Günther, W. Minkley, K. Salzer, A. Pudewills, R. Rokahr, D. Zapf, Z. Hou, R. Wolters & U. Düsterloh (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. – Proc. of the Mechanical Behavior of Salt -Understanding of the THMC Processes in Salt-, M. Wallner, K.-H. Lux, W. Minkley, & H.R. Hardy, Jr. (eds.), Taylor & Francis Group, London, pp 77-88, ISBN-0-415-44398-2

Pudewills, A. (2007): Modeling of hydro-mechanical behavior of rock salt in the near field of repository excavations, Proc. of the Mechanical Behavior of Salt -Understanding of the THMC Processes in Salt-, M. Wallner, K.-H. Lux, W. Minkley, & H.R. Hardy, Jr. (eds.), Taylor & Francis Group, London, pp 195-200, ISBN-0-415-44398-2

Pudewills, A. (2007): Numerical investigation of the long-term evolution of the excavation disturbed zone, Proc. Int. Conf. on Rad. Waste Disposal in Geological Formations, Braunschweig, 6.-9. Nov. 2007, (eds.) W. Brewitz and U. Kleemann, pp 164-171, GRS-S-49

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 weitere Berechnungen zur Anpassung an die Oberflächensetzungen durchgeführt. Auf dem 9. Workshop in Karlsruhe wurden zunächst Ergebnisse vorgestellt, welche mit einer eigenen Interpretation der In-Situ Messwerte der Oberflächenabsenkung erzielt wurden. Hierbei wurde die stationäre Kriechrate an die In-Situ Messwerte des gesamten Zeitraumes über den stationären Parameter  $\eta_M$  angepasst. Mit dieser Berechnung konnten gute Ergebnisse im Vergleich zu den In-Situ durchgeführten Pfeilerquerdehnungsmessungen und Fracmessungen erzielt werden. Im Vergleich zu den Projektpartnern wurden größere Kriechraten und somit Verschiebungen und ein geringerer Spannungszustand im Bereich der betrachteten untertägigen Hohlräume erzielt. Die Projektpartner einigten sich auf eine einheitliche Interpretation der In-Situ-Messdaten. Hierbei wurde nur der Zeitraum der ersten 50 Jahre gewählt. Durch erneute Variation des Parameters  $\eta_M$  konnte eine sehr gute Anpassung der Oberflächenenkung im Modell an die In-Situ Messungen erzielt werden. Die Ergebnisse wurden auf dem 10. Workshop in Mainz vorgestellt. Weiterhin wurden an zuvor festgelegten Punkten und Spuren mechanische Größen wie Verschiebung, Spannungen sowie Schädigung vorgestellt und mit den Ergebnissen der Projektpartner verglichen.

Im zweiten Quartal 2010 wurden die Ergebnisvorträge für die Abschlussveranstaltung ausgearbeitet. Auf den Workshops 11 und 12 wurden die Vorträge mit den Projektpartnern abgestimmt und auf der Abschlussveranstaltung um Juni 2010 in Clausthal vorgestellt. Der Zuwendungsempfänger präsentierte auf der Abschlussveranstaltung Vorträge zu den Themen „Anlass und Ziele des Verbundprojektes“ und „Vorstellung des Berechnungsmodells Angersdorf“.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bis zum Projektende wird der Zuwendungsempfänger den Einzelbericht abschließen und an den Projektträger übermitteln. Des Weiteren wird der Zuwendungsempfänger seine Beiträge für den Synthesebericht liefern.

### 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 Untertagedeponien 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 fortgeführt worden.
- AP6: Die Stoffgesetze, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen wurden verglichen sowie erste Empfehlungen auf den Workshops diskutiert.
- AP7: Der 9. Workshop wurde am 28./29. Januar 2010 in Karlsruhe durchgeführt. Neue Simulationsergebnisse wurden vorgestellt, verglichen und diskutiert.  
Der 10. Workshop fand am 14./15. April 2010 in Bodenheim/Rhein statt. Es erfolgte ein weiterer Ergebnisvergleich und es wurden Schlussfolgerungen aus den Verbundprojekten I und II erarbeitet.  
Der 11. Workshop wurde am 26./27. Mai 2010 in Karlsruhe durchgeführt. Die Präsentationentwürfe für die Abschlussveranstaltung sind vorgestellt, diskutiert und die Inhalte abgestimmt worden.  
Der 12. Workshop fand am 08. Juni 2010 in Clausthal statt. Auf diesem Workshop erfolgte die Endabstimmung der Präsentationen für die Abschlussveranstaltung am Folgetag.
- AP8: Der Ergebnisworkshop wurde vorbereitet und 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

- AP1: Der Start-Workshop ist abgeschlossen.
- AP2: Weitere Laboruntersuchungen sind nicht vorgesehen.
- AP3: Weitere vorbereitende Arbeiten sind nicht vorgesehen.
- AP4: Weitere Berechnungen sind nicht vorgesehen.
- AP5: Erstellung des Einzelberichts.
- AP6: Der Vergleich der Stoffmodelle, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen ist erfolgt. Empfehlungen im Rahmen des Abschlussberichts werden noch ausgearbeitet.
- AP7: Die Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner sind nicht vorgesehen.
- AP8: Der Ergebnis-Workshops wurde am 09. Juni 2010 an der TU Clausthal durchgeführt.
- AP9: Erstellung eines Abschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Hampel, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, A. Pudewills, K. Herchen, R. Wolters, K.-H. Lux, B. Leuger, D. Zapf, R. Rokahr: Benchmark calculations of the geomechanical behavior of rock salt with user-defined constitutive models in FLAC3D, ARMA, 44<sup>th</sup> US Rock Mechanics Symposium and 5<sup>th</sup> U.S.-Canada Rock Mechanics Symposium, held in Salt Lake City, UT June 27–30, 2010.

<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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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:
  - Erstellung eines Pflichtenheftes als Planungsgrundlage für eine web-basierte Bedienoberfläche für THEREDA
  - Erstellung eines Programms, das Daten im JSON-Format in eine Parameterdatei für das Programm CHEMAPP umwandelt
  - Fertigstellung des entsprechenden Programms für Geochemist's Workbench
- Datenerfassung:
  - Weitere Auswertung von Literatur: u. a. Identifizierung relevanter Festphasen von Calcium- und Magnesiumphosphaten für die Planung von Löslichkeitsversuchen
  - Weiterführung von isopiestic Versuchen, insbesondere für Systeme mit den Spezies  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$  und  $\text{HPO}_4^{2-}$
- Datenbewertung: -
- Qualitätsmanagement:
  - Testrechnungen für Cm, Nd, Am mit dem Programm CHEMAPP
- Dokumentation: -

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Datenbank: Korrekturen und Anpassung gemäß Beschlüssen des Verbunds (insbesondere im Vorfeld der Programmierarbeiten für die Bedienoberfläche), Planung für das Speichern von Sorptionsdaten
- Schnittstellen: Planungsgespräche mit einer Softwarefirma, Erstellung eines Angebotes an den Projektträger, ggf. Begleitung der Programmierarbeiten
- Thermodynamische Datenbasis für Phosphat:
  - Fortsetzung der Literaturlauswertung
  - Fortsetzung der isopiestic 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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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 erste experimentelle Vorgehensweise sowohl die ionischen Schadstoffe als auch Wasserstoff als Kombination in der Ausgangslösung einzusetzen, erwies sich als nicht geeignet, da eine Reaktion des Wasserstoffs mit den ionischen Schadstoffen ( $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$  und  $\text{Zn}^{2+}$ ) auftrat. Durch die Reduktion der Kontaminanten erfolgte eine Abnahme der Ausgangskonzentrationen sowohl der ionischen als auch der gasförmigen Bestandteile der Ausgangslösung. Über den Versuchszeitraum war kein Gas auf der Austrittsseite zu beobachten. Die Einbaudichte des MX80-Materials betrug  $1600 \text{ kg/m}^3$ . Vor Versuchsbeginn war der Probekörper mit der NaCl-Lösung aufgesättigt worden. Aufgrund experimenteller Schwierigkeiten und unerwartet langer Versuchsdauer konnten noch keine Diffusionskonstanten bestimmt werden.
- AP2: Die Diffusionsuntersuchung mit den Schadstoffen  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$  und  $\text{Cd}^{2+}$  in NaCl-Lösung wurden begonnen.  
Nach dem Untersuchungsergebnis für die Probe (D1-S06) mit einer Dichte von  $1200 \text{ kg/m}^3$  findet sich  $\text{Cd}^{2+}$  bereits nach der ersten Erprobung in der Lösung. Der Verlauf der Diffusionskurve ist nicht stabil. Ursache ist der starke Umlauf zwischen der Probe und der Behälterwand aufgrund der geringen Festigkeit der Probe. Deshalb wird auf weitere Untersuchungen mit einer Dichte von  $1200 \text{ kg/m}^3$  verzichtet. Untersuchungen mit höheren Dichten von  $1400 \text{ kg/m}^3$ ,  $1600 \text{ kg/m}^3$  mit der Verwendung einer 90 %-NaCl-gesättigten Lösung ergeben Diffusionskoeffizienten mit vergleichbaren Werten in der Literatur.
- AP3: Bisherige Untersuchungen zeigten, dass verschiedene chemische Komponenten unterschiedliche Diffusionskoeffizienten haben. Deshalb ist es wichtig, ein entsprechendes Modell, wie z. B. ein Multikomponentendiffusionsmodell, zu verwenden, um Ladungsbilanzen zu erhalten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: - Weiterführung Diffusionsmessungen von in Flüssigkeit gelösten  $\text{H}_2$  und  $\text{CH}_4$   
- Diffusionsmessungen von  $\text{CH}_4$  und  $\text{H}_2$  als Gasphase in teilgesättigten Probekörpern bei geringeren Dichten  
- 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

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 (submitted).





### **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 Safeduardstechniken und -methoden		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Kernmaterialüberwachung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2009 bis 30.04.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 670.250,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brücher	

### 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: Diskussion des Konzeptvorschlags mit BMWi und FZJ.
- Geologische Endlagerung: Planung eines Messprogramms.
- 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“, „Audit“ und der „Reflection Group“ sowie Leitung der und Mitarbeit in der Arbeitsgruppe „Implementation of Safeguards“ (ehemals „Integrated Safeguards“); Mitarbeit im Steering Committee und Editorial Committee; Vorbereitung und Leitung von Sitzungen sowie Vorträge auf der Jahrestagung im Mai 2010.
- Safeguardstechniken: Projektleitung bei der Entwicklung des IAEA Next Generation Surveillance System (NGSS), dazu Projektsitzungen und Telefonkonferenzen; Projektleitung bei der Entwicklung des Digital Multi-channel Analyzer (DMCA).
- Satellitenfernerkundung: Durchführung einer Studie zur Erkennung von Uranminen.
- AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis: Mitarbeit in den safeguardsbezogenen Gremien und Teilnahme an den Sitzungen.
- Standing Advisory Group on Safeguards Implementation (SAGSI): Beratende Begleitung des neuen SAGSI-Mitglieds.
- Zusatzprotokoll und Implementierung von Integrated Safeguards: Unterstützung und Beratung von Betreibern; Unterstützung des BMWi bei Anfragen von IAEO und Euratom; Erstellung der Deklaration für Deutschland nach dem Zusatzprotokoll für 2009; Erstellung von Vorlagen zur Einführung von Integrated Safeguards für spezielle Anlagen; Teilnahme an Informationstreffen und Besprechungen; Kommentierung von Entwürfen/Vorlagen Dritter.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Vortrag über die Anwendung spieltheoretischer und qualitativer Methoden im FZJ; Vorbereitung von zwei wissenschaftlichen Beiträgen zur spieltheoretischen sowie quantitativen Analyse.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzungen bei der DGAP zu den Themen Nuklearverhandlungen mit Iran und Nordkorea, völkerrechtliche Aspekte des Rechts auf Kernenergie und -technologie, Zukunft amerikanischer Kernwaffen in Europa (11.02.2010) und NVV Überprüfungskonferenz (17.06.2010).
- NVV Überprüfungskonferenz 2010: Teilnahme in der deutschen Delegation als technische Experten für Safeguards.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Safeguards-Web-Portal: Realisierung des Konzeptvorschlags.
- Geologische Endlagerung: Beginn und Durchführung eines Messprogramms im Erkundungsbergwerk Gorbelen.
- Datenfernübertragung: Beginn einer Realisierung für State-of-Health-Daten.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Gremien.
- Safeguardstechniken: Projektabschluss für NGSS, Weiterführung von DMCA.
- Satellitenfernerkundung: Weiterführung der Studie zur Erkennung von Uranminen.
- Mitarbeit in den nationalen Gremien AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis.
- SAGSI: Beratende Begleitung des neuen SAGSI-Mitglieds.
- Unterstützung des BMWi bei der Umsetzung des Zusatzprotokolls und der Einführung und Bewertung von Integrated Safeguards.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Ausarbeitung von zwei wissenschaftlichen Beiträgen zur spieltheoretischen sowie quantitativen Analyse für das IAEO-Symposium (November 2010).
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzungen bei der DGAP.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Rezniczek, A.: From ‘Integrated Safeguards’ to ‘Implementation of Safeguards’; ESARDA Bulletin, No. 44, June 2010, 60.



## **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> 01.01.2010 bis 30.06.2010	
<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, 02E10116, 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 <span style="float: right;">📖 50</span>   |
| <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 <span style="float: right;">📖 128</span>   |
| <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 <span style="float: right;">📖 130</span> |
| <b>DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine</b>  |  |
| 02 E 10065  | Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW - Kurztitel: ISIBEL <span style="float: right;">📖 24</span>  |
| 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- <span style="float: right;">📖 28</span>  |
| 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) <span style="float: right;">📖 98</span>                               |
| 02 E 10649  | Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) <span style="float: right;">📖 100</span>   |
| 02 E 10729  | Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA) <span style="float: right;">📖 116</span>   |
| 02 E 10730  | Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager <span style="float: right;">📖 118</span>   |




<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  138



<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  148



<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  32
- 02 E 10528 Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2  78
- 02 E 10618 Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden  94



<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  142
- 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  36

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




- 02 E 10357 Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern  58
- 02 W 6259 Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden  164

<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  52
- 02 E 10578 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit  $d^3f$  und  $r^3t$  - TP3 - Kurztitel: A-DuR  88

<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  | 📖 158 |
| <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) | 📖 160 |
| <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 10045</b> | Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure  | 📖 20  |
| <b>02 E 10055</b> | Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL  | 📖 22  |
| <b>02 E 10075</b> | Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90  | 📖 26  |
| <b>02 E 10116</b> | Barriereintegrität des einschlusswirksamen Deckgebirges in Tonformationen (BET)   | 📖 30  |
| <b>02 E 10276</b> | Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-  | 📖 46  |
| <b>02 E 10336</b> | Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d <sup>3</sup> f und r <sup>3</sup> t  | 📖 56  |
| <b>02 E 10367</b> | Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen   | 📖 60  |
| <b>02 E 10377</b> | Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen  | 📖 62  |
| <b>02 E 10518</b> | Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1   | 📖 76  |
| <b>02 E 10538</b> | Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit  | 📖 80  |
| <b>02 E 10548</b> | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern  | 📖 82  |
| <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                           | 📖 84  |
| <b>02 E 10608</b> | Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa  | 📖 92  |
| <b>02 E 10669</b> | Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 2  | 📖 104 |

- 02 E 10689 Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS  108
- 02 E 10719 Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)  114
- 02 E 10740 Restporosität und -permeabilität von kompaktierendem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager  120


**GTS Grube Teutschenthal Sicherungs GmbH & Co. KG, Straße der Einheit 9, 06179 Teutschenthal**

- 02 C 1204 Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit); Teil 2: Erprobung von Funktionselementen in situ  124


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


- 02 E 10588 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit  $d^3f$  und  $r^3t$  - TP4 - Kurztitel: A-DuR  90

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


- 02 E 10447 Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilität  70

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



- 02 C 1587 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2  150

- 02 E 10659 Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge  102

**IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur- Hydro- und Umwelttechnologie 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  136



**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): Deckgebirgseigenschaften über einem bergbaubedingt destabilisiertem Untergrund, abgeleitet aus seismischen Beobachtungen  144
- 02 C 1556 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen  146



**Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec) GmbH, Forschungsgelände,  
85748 Garching**

- 02 E 10467 Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT  74


**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  140
- 02 E 10166 Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein  34


**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  54
- 02 E 10568 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit  $d^3f$  und  $r^3t$  - TP2 - Kurztitel: A-DuR  86


**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  134


**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  154


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

- 02 E 10628 Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case  96


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

- KWA 9003 Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine  168





**Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Regina-Pacis-Weg 3,  
53113 Bonn**

- 02 E 10296 Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme  $d^3f$  und  $r^3t$  - Visualisierung und Datenanalyse  48



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

- 02 E 10437 Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen  68




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

- 02 C 1597 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3  152
- 02 E 10206 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere  42
- 02 E 10679 Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2  106
- 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  110


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

- 02 E 10457 Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag  72
- 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  112


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

- 02 C 1486 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung  132
- 02 C 1617 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5  156
- 02 E 10427 Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC  66


**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, Helmholtzstraße 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  64


**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  38

**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  40

**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  44