

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

**PTE Nr. 38**

Stand der vom BMBF und BMWi geförderten FuE-Arbeiten zur  
„Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formatio-  
nen“

Berichtszeitraum: 1. Juli - 31. Dezember 2009

Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie  
Wassertechnologie und Entsorgung  
PTKA-WTE

**März 2010**

## **PTE-Berichte**

Der vorliegende Bericht dient der aktuellen Unterrichtung der Forschungsstellen, die im Rahmen des Förderkonzeptes „Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“ FuE-Arbeiten durchführen sowie der zuständigen Behörden.

Die im Rahmen des Förderkonzeptes „Stilllegung/Rückbau kerntechnischer Anlagen“ durchgeführten FuE-Arbeiten werden ab 2001 in einer gesonderten Fortschrittsbericht-Reihe (S-Berichte) zusammengestellt.

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 Projektfortschrittsbericht 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.....	135
2.3	W-VORHABEN.....	193
2.4	BMWl-HAUSVORHABEN.....	197
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....</b>	<b>201</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>	📖 136
<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>	📖 140
<b>02 C 1395</b>	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1	<b>K-UTEC Salt Technologies, Sondershausen</b>	📖 144
<b>02 C 1405</b>	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 146
<b>02 C 1415</b>	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 148
<b>02 C 1426</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 150
<b>02 C 1436</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 152
<b>02 C 1446</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF	<b>TU Bergakademie Freiberg</b>	📖 154
<b>02 C 1456</b>	Bestimmung der Änderung des räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen nach Wechselwirkung mit Natural Organic Matter (NOM) in geologischen Formationen von Untertagedeponien	<b>Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig</b>	📖 156
<b>02 E 9854</b>	Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillienlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL, Phase 1)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 14

<b>02 E 10045</b>	Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 22
<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>	📖 28
<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>	📖 30
<b>02 E 10669</b>	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 120
<b>02 E 10679</b>	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT)</b>	📖 122
<b>02 E 10689</b>	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 124
<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)</b>	📖 126
<b>02 E 10709</b>	Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt TUBAF: Ozeanische Salze und Carbonate	<b>TU Bergakademie Freiberg</b>	📖 128
<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>	📖 130
<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>	📖 132
<b>KWA 9003</b>	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	<b>Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE)</b>	📖 198



## 1.2 Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse

<b>02 C 1244</b>	Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 138
<b>02 C 1355</b>	Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrierengebirge (Salinar)	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 142
<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>	📖 178
<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>	📖 180
<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>Forschungszentrum Karlsruhe GmbH</b>	📖 182
<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>	📖 184
<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>	📖 186
<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>	📖 188
<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>	📖 190

<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>	📖 16
<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>	📖 18
<b>02 E 10015</b>	Untersuchungen zum Gastransport in der Auflocke- rungszone in einem geologischen Endlager in Tonge- stein	<b>Technische Universi- tät Darmstadt</b>	📖 20
<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 An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 24
<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>	📖 26
<b>02 E 10116</b>	Barriereintegrität des einschlusswirksamen Gebirgs- bereichs in Tonformationen (BET)	<b>Gesellschaft für An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 32
<b>02 E 10126</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorha- ben FZ Karlsruhe	<b>Forschungszentrum Karlsruhe GmbH</b>	📖 34
<b>02 E 10136</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorha- ben FZD	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 36
<b>02 E 10146</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorha- ben GRS	<b>Gesellschaft für An- lagen- und Reaktor- sicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 38
<b>02 E 10156</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwir- kung von U und Am im Ton	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 40
<b>02 E 10166</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein	<b>Johannes Guten- berg-Universität Mainz</b>	📖 42
<b>02 E 10176</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actini- dentransports in potenziellen Wirtsgesteinsformatio- nen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementar- prozess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport	<b>Institut für Interdis- ziplinäre Isotopen- forschung e.V. an der Universität Leip- zig</b>	📖 44
<b>02 E 10186</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Hu- minstoffe und Sorption an Tonmineralien	<b>Technische Universi- tät München</b>	📖 46


<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>	📖 48
<b>02 E 10206</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere	<b>Forschungszentrum Karlsruhe GmbH</b>	📖 50
<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>	📖 52
<b>02 E 10236</b>	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 54
<b>02 E 10246</b>	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 56
<b>02 E 10256</b>	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	<b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>	📖 58
<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>	📖 60
<b>02 E 10296</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Visualisierung und Datenanalyse	<b>Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn</b>	📖 62
<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>	📖 64
<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>	📖 66
<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>	📖 68
<b>02 E 10336</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 70
<b>02 E 10357</b>	Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern	<b>Forschungszentrum Jülich GmbH</b>	📖 72

<b>02 E 10367</b>	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 74
<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>	📖 76
<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>	📖 78
<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>	📖 80
<b>02 E 10437</b>	Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen	<b>Ruhr-Universität Bochum</b>	📖 82
<b>02 E 10447</b>	Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung	<b>IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack &amp; Partner, Freiberg</b>	📖 84
<b>02 E 10457</b>	Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag	<b>TU Bergakademie Freiberg</b>	📖 86
<b>02 E 10467</b>	Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT	<b>Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec), Garching</b>	📖 88
<b>02 E 10518</b>	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 90
<b>02 E 10528</b>	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 92
<b>02 E 10538</b>	Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 94
<b>02 E 10548</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 96
<b>02 E 10558</b>	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP1 - Kurztitel: A-DuR	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 98
<b>02 E 10568</b>	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP2 - Kurztitel: A-DuR	<b>Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main</b>	📖 100

<b>02 E 10578</b>	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP3 - Kurztitel: A-DuR	<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>	📖 102
<b>02 E 10588</b>	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP4 - Kurztitel: A-DuR	<b>Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Leipzig</b>	📖 104
<b>02 E 10598</b>	Externer unabhängiger Review des im Vorhaben Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW (ISIBEL) erstellten FEP-Katalogs	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 106
<b>02 E 10608</b>	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 108
<b>02 E 10618</b>	Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 110
<b>02 E 10628</b>	Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case	<b>Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Freiburg</b>	📖 112
<b>02 E 10639</b>	Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 114
<b>02 E 10649</b>	Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 116
<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>	📖 118



### 1.3 Kernmaterialüberwachung



**02 W 6259** Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden **Forschungszentrum Jülich GmbH**  194





#### 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>   | 📖 158 |
| <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>                           | 📖 160 |
| <b>02 C 1486</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung  | <b>Technische Universität Clausthal</b>  | 📖 162 |
| <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>   | 📖 164 |
| <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> | 📖 166 |
| <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>   | 📖 168 |
| <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>  | 📖 170 |
| <b>02 C 1536</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen   | <b>Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig</b>            | 📖 172 |

- 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**  174
- 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**  176

## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 E-Vorhaben**

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9854</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2004 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 3.256.913,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Filbert	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens ist die Entwicklung und die Erprobung eines technisch machbaren Konzeptes zur Endlagerung gezogener Brennstäbe aus unzerschnittenen Brennelementen in vertikale Bohrlöcher. In der Phase 1 soll durch eine Machbarkeitsanalyse untersucht werden, unter welchen Randbedingungen der vollständige Zyklus der Einlagerung von mit unzerschnittenen Brennstäben beladenen Kokillen erfolgen kann. Untersucht werden sollen der Transport über Tage, die Schachtförderung, der Transport unter Tage und letztendlich die Einlagerung in einem vertikalen Bohrloch. Daraus sollen Anforderungen an die Komponenten zur Einlagerung erarbeitet, notwendige Untersuchungsschwerpunkte herausgestellt und ein technisches Konzept abgeleitet werden. Die Phase 1 schließt nach der Konzeptplanung mit einer Entwurfsplanung zum ausgewählten Konzept ab.

In der Phase 2 werden die Versuchskomponenten bis zur Ausführungsreife geplant, gefertigt und zusammen mit der vorhandenen Komponente Einlagerungslokomotive für den Demonstrationsversuch bereitgestellt. Im Einzelnen soll dabei die technische Machbarkeit nachgewiesen, die Sicherheit in der Betriebsphase durch hinreichend viele Demonstrationsversuche überprüft und Ableitungen für die Sicherheit in der Nachbetriebsphase getroffen werden. Darüber hinaus soll die Einlagerung eines weiteren Endlagergebindes - bestehend aus 3 HAW-Kokillen - getestet werden. Weiterhin soll geklärt werden, mit welcher Belastung aus dem Gebirge die eingelagerten Kokillen während der Betriebsphase in einem gefüllten Einlagerungsfeld maximal beaufschlagt werden. Ein Dokumentationsfilm über die Demonstrationsversuche wird erstellt. Im Rahmen einer Vorhabensergänzung erfolgt die Planung, Fertigung und der Test eines Lastabtragselementes zur mechanischen Trennung der Kokillen im Bohrloch sowie von Verfüllkomponenten zum Nachweis der Versetzbarkeit einer eingelagerten Kokille mit Salzgrus. Das Vorhaben wird durch die EU und die deutsche kerntechnische Industrie mitgefördert und ist im Rahmen des 6. EU-Rahmenprogramms (2002 – 2006) in das integrierte Projekt IP ESDRED (Engineering Studies and Demonstration of Repository Designs) eingebunden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

„Phase 1“ des Vorhabens:

AP1: Grundlagenermittlung

AP2: Konzeptplanung

AP3: Entwurfsplanung

„Phase 2“ des Vorhabens:

AP4: Ausführungsplanung

AP5: Fertigung der Komponenten

- AP6: Versuchsdurchführung
- AP7: Planung und Durchführung von Demonstrationsversuchen mit einer HAW-Kokille und 3 HAW-Kokillen in einem Overpack (Triple-pack)
- AP8: Untersuchungen zur thermomechanischen Belastung der BSK 3 im Einlagerungsbohrloch
- AP9: Dokumentation der Demonstrationsversuche durch Film-/Videoaufnahmen
- AP10: Erprobung des Versatzes einer BSK 3 bei der Bohrlochlagerung mit Salzgrus
- AP11: Versuchsauswertung und Abschlussbericht.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP5: Die Einlagerungsvorrichtung wurde endgültig abgenommen.
  
- AP8: Die Untersuchungen zur thermo-mechanischen Belastung der BSK 3 im Einlagerungsbohrloch wurden abgeschlossen. Die Berechnungsergebnisse zeigen, dass die maximale Behälterbelastung bei der Einlagerung in 300 m langen Bohrlöchern bis knapp 40 MPa ansteigen kann. Gegenüber dem lithostatischen Grundspannungszustand ist das eine thermisch bedingte Zusatzbelastung von ca. 15 MPa. Eine Vergrößerung des Bohrlochabstandes von 50 m auf 60 m führt zu einer Belastungsreduktion von ca. 2,5 MPa. In diesem Fall liegt die maximale Beanspruchung immer noch wesentlich über der bisherigen Annahme von 30 MPa isotropisch. Im Auslegungspunkt ist von einer Anisotropie in horizontaler Richtung auszugehen, die im Bereich von 1,1 bis 1,15 liegt. Mögliche Maßnahmen zur Verringerung der Behälterbeanspruchung sind eine weitere Vergrößerung des Bohrlochabstandes und/oder die Verkürzung der Bohrlochlänge.
  
- AP9: Die Bearbeitung der Film-/Videoaufnahmen wurde beendet. Der Dokumentationsfilm zu den Demonstrationsversuchen steht voraussichtlich ab Februar 2010 zur Verfügung.  
Die Komponenten Transferbehälter und Bohrlochschleuse wurden GNS für Nachuntersuchungen zur Verfügung gestellt. Es wurde festgestellt, dass kein abnormer Verschleiß aufgetreten ist. Batterie-Lokomotive und Plateauwagen wurden nach Peine transportiert und eingelagert.  
Die Einlagerungsvorrichtung wird Januar/Februar 2010 ins Zwischenlager nach Gorleben gebracht. Der von GNS finanzierte Stahlbau des Versuchsstandes in Landesbergen verbleibt mit Genehmigung des Vermieters in der Turbinenhalle.  
Zum Gesamtvorhaben kann als Ergebnis dokumentiert werden, dass das Einlagerungssystem für die BSK 3 und jede Komponente während der Versuche seine Zuverlässigkeit und Robustheit bewiesen hat. Externe Gutachter haben dies bestätigt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Bollingerfehr, W., Filbert, W., Graf, R. (2009): Entwicklungsstand der Endlagerung wärmeentwickelnder Abfälle in Deutschland am Beispiel der Optimierung der Direkten Endlagerung ausgedienter Brennelemente, Tagung Energie und Rohstoffe, 09.-11. September 2009, Goslar.
- Graf, R., Filbert, W., K.J. Brammer & Bollingerfehr, W. (2009) Disposal of Spent Fuel From German Nuclear Power Plants, The 12<sup>th</sup> International Conference on Environmental Remediation and Radioactive Waste Management, October 11-15, 2009, Liverpool Arena & Conference Centre, Liverpool 2009.

<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 31.03.2010		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 bis 6 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:

Nachdem beim Technikumsversuch 2 die Untersuchungen am 07.01.2009 mit der Gasinjektion, beginnend mit 0,25 MPa, zur Ermittlung des Gaseintrittsdrucks fortgesetzt wurden, und ein Gaseintritt am 20.01.2009 identifiziert werden konnte, erfolgte eine stufenweise Erhöhung des Gasdrucks auf bis zu 1,35 MPa. Am 27.11.2009, ca. 44 Wochen nach dem Gaseintritt, war ein Gasaustritt aus dem Dichtelement feststellbar. Die auftretenden Fließraten stiegen bisher bis auf maximal ca. 20 ml/h an. Da sich der Gasfluss bisher noch nicht stabilisiert hat, werden die Messungen bei dem Injektionsdruck von 1,35 MPa weitergeführt. Während der bisherigen Gasinjektionsdauer von 47 Wochen wurden 5,1 l Wasser aus dem Dichtelement verdrängt. Die Quelldrücke unterhalb des Packers liegen Ende 2009 bei 0,33 MPa.

Die Wasserinjektion zur Aufsättigung der Dichtungen in den 4 Bohrungen BSB1 (35/65 Ton-Sand, Dichtungslänge 1 m), BSB2 (35/65 Ton-Sand, Dichtungslänge 1 m), BSB13 (Nagra-Material, gebrochene Tonpellets, Dichtungslänge 0,5 m) und BSB15 (50/50 Ton-Sand, Dichtungslänge 0,5 m) dauern an. Die Injektionsdrücke liegen wie bisher bei ca. 0,37 MPa.

Die injizierten Wassermengen betragen bei der Bohrung BSB1 auf 56,1 L, bei der Bohrung BSB2 auf 111,2 L, bei der Bohrung BSB13 auf 23,1 L und bei der Bohrung BSB15 auf 89,5 L. Die im vorherigen Zwischenbericht angegebenen Fließraten sind konstant geblieben.

Für die Bohrung BSB1 kann bzgl. der Druckverläufe innerhalb der Dichtung keine Aussage getroffen werden, da wie bereits erwähnt, die entsprechenden Drucksensoren ausgefallen sind. Die unterhalb des Packers gemessenen Gesamtdrücke beliefen sich bei BSB2 auf 0,18 MPa sowie bei BSB15 auf 0,47 MPa und haben sich nahezu nicht verändert. Bei der mit reinem Ton gefüllten Bohrung BSB13 nimmt der Gesamtdruck wie bisher stetig zu und liegt nun bei  $> 3$  MPa. Hier kann keine detaillierte Aussage mehr getroffen werden, da die Grenze der zugehörigen Druckaufnahme erreicht ist. Eine lineare Interpolation weist z. Zt. auf Quelldrücke von 3,3 MPa hin.

Bei der Bohrung BSB2 wurde im Verlauf des Berichtszeitraums ein relativ geringer Druckabfall in der Druckkammer unterhalb des Dichtelements beobachtet, der auf eine verstopfte Zuleitung außerhalb des Bohrlochs zurückzuführen war. Nach Beseitigung der Verstopfung konnte wieder ein ungestörter Versuchsablauf hergestellt werden. Die geringe Höhe des Druckabfalls über die Zeit hat aber auch gezeigt, dass das System Dichtelement/Gebirge durch die Wasserinjektion abgedichtet, und offensichtlich sogar zu einer Verheilung des bohrlochwandnahen Gebirgsbereichs geführt hat.

### 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
- Nachuntersuchung der erreichten Sättigung in allen Versuchen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

De Bock, C., Bosgiraud, J.-M., Breen, B., Johnson, M., Rothfuchs, T., Weber, H., Van Marcke, P., Verstricht, J., 2009: ESDRED, Deliverable 6 Module 1, Final Report, European Commission, June 2009

Rothfuchs, T., Mieke, R., 2009: Ton/Sand-Gemische als Verschlussmaterial (Untersuchungen in Mt. Terri), PTKA-Fachgespräch Verschlussysteme, Freiberg, 20. und 21. Oktober 2009

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9944</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Goelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2004 bis 31.12.2011		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 fortgesetzt.

Im Herbst 2009 wurde die Messanlage beim Hersteller in Kiel grundüberholt und repariert und anschließend wieder vor Ort installiert.

Im Streckenversatz in Sektion I ist die Resistivitätsverteilung sehr homogen und hat sich auch im letzten Halbjahr nicht weiter erniedrigt. Bereits Mitte 2007 wurden überall im Messquerschnitt Werte unter  $2 \Omega\text{m}$  (entspricht einem Wassergehalt von über 25 %) erreicht. Nach den Kalibriermessungen im Labor entspricht eine Resistivität unter  $2 \Omega\text{m}$  Vollsättigung. Seit 2008 wurde allerdings eine leichte Resistivitätserhöhung im oberen Bereich des Versatzes festgestellt. Dabei sind von der Resistivitätserhöhung nur die obersten Elektroden direkt unter der Firste betroffen. Ein möglicher Grund für die Resistivitätserhöhung im obersten Streckenbereich ist die Tatsache, dass in der Sektion I permanent zutretendes Wasser abgepumpt wird, um den Wasserdruck in der versetzten Strecke gering zu halten. Vermutlich ist es unter der Firste zu einer leichten Entsättigung oder möglicherweise auch zu einer gewissen Setzung gekommen, die die Ankopplung der Elektroden verschlechtert.

Im Streckenversatz in Sektion II hat die Resistivität inzwischen überall Werte um  $2 \Omega\text{m}$  erreicht. Damit ist der Versatz hier vollgestättigt.

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. In zwei der Elektrodenbohrlöcher zeichnet sich seither eine leichte Widerstandserhöhung entlang der Messketten ab. Möglicherweise handelt es sich um Sättigungsschwankungen des Betons zur Ankopplung der Elektroden und des umgebenden Gebirges.

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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 Untersuchungen zur Bestimmung der zugänglichen Porosität über instationäre Permeabilitätsmessungen und Vergleich mit den Simulationsrechnungen. Anpassungen im experimentellen Aufbau führen zu einer besseren Übereinstimmung von theoretischer Vorhersage und Experiment.
- Weitere Optimierung eines erweiterten Simulationsmodells mit Hilfe der FEM-Software COMSOL zur besseren Anpassung an reale Eintrittsfunktionen bei Drucksprüngen, Berücksichtigung von Rissen und Anisotropien in Proben.
- Vermessen einer Probe aus Tournemire, die seit ihrer Erbohrung vor ca. 3 Jahren unter einem Druck von 20 bar gelagert wurde. Bezüglich der Gasdurchlässigkeit zeigten sich keine nennenswerten Unterschiede zu den Proben, die gasdicht ohne Überlagerungsdruck gelagert waren. Nach der Beaufschlagung mit Flüssigkeit ist bisher, trotz Probeneintrittsdrücken von bis zu 40 bar, kein Austrittsvolumenstrom detektierbar.
- Weiterführung des Aufsättigungsversuchs einer parallel zur Schichtung angeströmten bergfeuchten Probe bei einer Temperatur von  $T = 60 \text{ }^\circ\text{C}$ . Nachdem am Probenaustritt kein Gasvolumenstrom mehr detektierbar ist, wird der Überlagerungsdruck solange erhöht, bis von einer technischen Dichtheit der Probe ausgegangen werden kann.
- Herstellung einer Zementwasserlösung mit  $\text{pH} = 13$  zur Durchführung von Permeationsversuchen.
- Beginn der Durchströmung einer parallel zur Schichtung erbohrten und mit neutralem Formationswasser gesättigten Probe mit Zementwasser eines pH-Werts von ca. 13. Ca. 3.500 Stunden nach Beginn der Durchströmung mit Zementwasser ist bisher kein signifikanter Unterschied zur Durchströmung mit Formationswasser zu erkennen. Die pH-Wert Messungen am Probenaustritt zeigten bisher nur einen leichten Anstieg des pH-Wertes von 7 auf 8,5.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Durchlässigkeitsuntersuchungen bei höheren Temperaturen.
- Weiterführung der laufenden Untersuchungen zum Gasdurchbruch nach Probenaufsättigung und Wiederbeaufschlagung mit Gas.
- Fortführung der stationären und instationären Permeabilitätsversuche sowie der Simulationsrechnungen zur Bestimmung der Transportporosität.
- Fortführung der Durchströmversuche mit alkalischem Permeat.
- Fortführung der Detailauswertung und abschließende Auswertung und Bewertung der Ergebnisse.
- Erstellung des Endberichts.

### 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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 bis Ende Mai und anschließend nach Entlastung von 13 MPa auf 10 MPa weitergeführt. Unter jeder Belastungsstufe wurden deutliche zeitabhängige Deformationen beobachtet. Die anderen Laborversuche zur Quellung, Schädigung, Verheilung und Simulation der ALZ-Entwicklung in gelochten Großtonkernen sind abgeschlossen. Die Daten wurden den TIMODAZ-Projektpartnern für die vorgesehene Benchmark-Modellierung zur Verfügung gestellt.

#### *Modellrechnungen:*

- Ermittlung der Stoffparameter für COX-Tonstein: Die zu den THM-Stoffmodellen zugehörigen Parameter sind aufgrund der eigenen Laborversuche und der Daten aus der Fachliteratur ermittelt und durch Vergleich mit den Labordaten kalibriert worden.
- 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 ersten Ergebnisse zeigten einige Defizite der verwendeten Stoffmodelle. Es war z. B. nicht möglich, die in den Versuchen beobachteten Permeabilitätsänderungen durch Schädigung und Rekompaktion sowie Quellung mit den Modellen in angemessener Form zu beschreiben. So besteht dringender Bedarf zur Weiterentwicklung adäquater Stoffmodelle zur Beschreibung von Schädigung und Verheilung von Tonstein.
- Modellierung des In-situ-Aufheizexperiments: Von Sept. 2005 bis Sept. 2009 wurde der TER-Aufheiztest im Untertagelabor Bure zur Ermittlung der THM-Prozesse im Tonstein durchgeführt. Dabei wurden die Temperature, Porenwasserdrücke und Verformungen des Tonsteins im aufgeheizten Bereich vor, während und nach den Aufheizphasen gemessen. Die Daten wurden zuerst im Okt. 2009 der GRS für die Modellierung zur Verfügung gestellt. Somit konnte die Modellierungsarbeit begonnen werden. Die ersten Modellergebnisse zur Entwicklung von Temperatur und Porenwasserdruck im Testfeld sind mit den Messdaten gut vergleichbar.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Benchmark-Modellierung und des TER-Experiments
- Modellierung des REP-Experiments (Schachtabenkung im Bure-URL)
- Erstellung der Zwischenberichte zum Beitrag zu den TIMODAZ-WP3.1 (Labortests), WP3.3 (ALZ-Simulationstests), WP5.1 (Parameterbestimmung) und WP5.2 (Benchmark-Modellierung)
- Erstellung des Abschlussberichtes

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang, C. L. (2009): Self-Sealing of Fractures in Argillites under Repository Conditions, The International Conference & Workshop in the Framework of EC TIMODAZ & THERESA Projekts, 29.09.-01.10.2009, Luxembourg.

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 17.07., 11.08., 12.08., 26.08., 11.09., 14.10., 13.11., 08.12. und 16.12.2009

- AP1: Am 11.08. fand bei der BGR in Hannover das zweite und abschließende Arbeitstreffen mit dem externen Reviewteam statt. Der im Nachgang dieses Treffens erstellte Bericht des Reviewteams bildete die Grundlage für die Überarbeitung der FEP-Einträge in der Datenbank. Die durchgeführten Änderungen wurden im Entwurf des Abschlussberichtes zu diesem AP dokumentiert.
- AP2: Das zur Ableitung eines Referenzszenarios festgelegte Verfahren wurde durchgeführt und im Entwurf des Abschlussberichtes zu diesem AP dargestellt.
- AP3: Die Auswertungen der Modellrechnungen wurden abgeschlossen und der Bericht zu diesem AP fertiggestellt. Die erste Version des Berichtes wurde mit den Projektpartnern diskutiert. Die Ergebnisse aus AP3 wurden als Beitrag für die KTG-Tagung 2010 eingereicht.
- AP4: Es wurde ein Entwurf des Berichtes zu Ungewissheiten erstellt. Auf Grund der Diskussionen mit den Projektpartnern wurde dieser Bericht überarbeitet.
- AP5: Zu diesem AP wurden im Zweiten Halbjahr 2009 keine Arbeiten durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP1: Ein projektinternes Seminar zur neuen Version des FEP-Kataloges findet vom 03.-05. Februar statt. Danach erfolgt die abschließende Überarbeitung der FEP-Datenbank und des Abschlussberichtes zu AP1.
- AP2: Gemeinsame Diskussion des von der BGR erstellten Berichtes mit den Projektpartnern.
- AP3: Abschließende Diskussion des überarbeiteten Berichtes mit den Projektpartnern. Anschließend erfolgt die Fertigstellung des Berichtes zu AP3.
- AP4: Gemeinsame Diskussion des erstellten Berichtsentwurfes mit den Projektpartnern. Anschließend erfolgt die Fertigstellung des Berichtes zu AP4.
- AP5: Fertigstellung des Berichts zu AP5. Gemeinsame Diskussion des erstellten Berichtes mit den Projektpartnern.

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

Keine.

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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.

Phase I des FuE-Vorhabens ISIBEL:

Die zur Phase I gehörigen Arbeitspakete wurden abgeschlossen. Die entsprechenden Berichte wurden fertig gestellt und vom Projektträger freigegeben.

AP1: Überarbeitung des FEP-Katalog.

AP1.1: Erstellung und Pflege einer Datenbank.

Als Ergebnis des Reviews des FEP-Katalogs sowie einer Diskussion von Erfahrungen aus der Anwendung der Datenbank durch BGR, GRS und DBE TECHNOLOGY GmbH ergaben sich Vorschläge zur Optimierung der Eingabemasken, der Datenbankfunktionen und des Ausdrucks der Datenbank. Diese Vorschläge wurden in die Datenbank übernommen und die überarbeitete Version allen Teilnehmern zur Verfügung gestellt. Die Datensätze des FEP-Kataloges wurden unter Berücksichtigung der Anmerkungen des Review-Teams sowie der Ergebnisse von FEP-Diskussionen im Zusammenhang mit der Entwicklung des Referenzszenarios überarbeitet.

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

Der Abschlussbericht des Review-Teams zum ISIBEL-FEP-Katalog wurde am 12.10. vorgelegt. Die Stellungnahme des Review-Teams gliedert sich in allgemeine Anmerkungen zu Verständnis und Methodik des FEP-Kataloges sowie FEP-spezifische Fragen und Kommentare. Die Anmerkungen, Fragen und Kommentare des Review-Teams wurden innerhalb des ISIBEL-Teams diskutiert und dabei die Frage des Umgangs mit den verschiedenen Punkten festgelegt. Soweit Konsens mit den Anmerkungen des Review-Teams besteht, wurden die FEP-Beschreibungen überarbeitet und in den FEP-Katalog übernommen. Weitere Hinweise zu Überarbeitungen des FEP-Katalogs ergaben sich aus Diskussionen zu den FEP-Beschreibungen im Zuge der Entwicklung des Referenzszenarios. Der Umgang mit den Anmerkungen des Review-Teams sowie die Änderungen im FEP-Katalog werden in einem Revisionsbericht dokumentiert.

## **4. Geplante Weiterarbeiten**

Abschluss der Überarbeitung des FEP-Katalogs und der Datenbank. Abstimmung und Diskussion des Abschlussberichtes für den FEP-Katalog sowie des Revisionsberichtes mit den Projektpartnern.

## **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10075</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 31.03.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 698.417,00 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:*

Anhand von weiteren Vorversuchen mit dem System  $\text{MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$  bei  $90\text{ }^\circ\text{C}$  konnte festgestellt werden, dass für isopiestic Messungen in Systemen mit  $\text{Fe(II)SO}_4$  eine Äquilibrierung von etwa 21 Tagen bei  $90\text{ }^\circ\text{C}$  ausreichen sollten.

Nach Inbetriebnahme der neuen Glove-Box wurden neue  $\text{Fe(II)}$ -Stammlösungen hergestellt und mit isopiestic Messungen für die ternären Systeme mit  $\text{Fe(II)-Cl-H}_2\text{O}$  bei  $40\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $60\text{ }^\circ\text{C}$  und  $90\text{ }^\circ\text{C}$  begonnen. Nach anfänglichen Schwierigkeiten sind nun 10 Linien von 24 geplanten Linien für das System  $\text{Fe-Cl-H}_2\text{O}$  erstellt. Zumindest eine leichte Oxidation ist bei Versuchsende immer vorhanden, die jedoch das Experiment nicht zu beeinträchtigen scheint.

#### *Literaturstudie:*

Für  $\text{Fe(II)-Cl-H}_2\text{O}$  im System der ozeanischen Salze wurde die bereits bei der GRS vorhandene Literatur für die Auswertung besorgt und die fehlende, in Frage kommende Literatur (etwa 60 Artikel) beschafft.

#### *Löslichkeitsversuche:*

Im Berichtszeitraum wurden die Untersuchungen zur Löslichkeit des Monohydrats im System  $\text{Fe(II)-SO}_4\text{-H}_2\text{O}$  abgeschlossen.

Für die Temperaturen  $70\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $75\text{ }^\circ\text{C}$  und  $80\text{ }^\circ\text{C}$  wurde nach Gleichgewichtseinstellung eine dreimalige Beprobung durchgeführt.

Für das quaternäre System  $\text{Fe(II)-K-Cl-SO}_4\text{-H}_2\text{O}$  wurden neue Löslichkeitsversuche mit  $0,5\text{ mol/kg}$ ,  $0,75\text{ mol/kg}$  und  $1,0\text{ mol/kg}$   $\text{Fe(II)SO}_4$  angesetzt. Eine Gleichgewichtseinstellung bei  $90\text{ }^\circ\text{C}$  konnte noch nicht gefunden werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### *Dampfdruckmessungen:*

Durchführung weiterer Maßnahmen zur Verhinderung der Oxidation der Lösungen.

Weiterführung der isopiestic Messungen für ternäre Systeme mit  $\text{Fe(II)-Cl-H}_2\text{O}$  bei  $40\text{ }^\circ\text{C}$ ,  $60\text{ }^\circ\text{C}$  und  $90\text{ }^\circ\text{C}$ .

#### *Literaturstudie:*

Weitere Auswertung der Literaturrecherche bezüglich  $\text{Fe(II)-OH-H}_2\text{O}$  und für  $\text{Fe(II)-Cl-H}_2\text{O}$  im System der ozeanischen Salze.

#### *Löslichkeitsversuche:*

Untersuchung der Löslichkeit des Systems  $\text{Fe(II)-SO}_4\text{-H}_2\text{O}$ .

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10086</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2006 bis 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.589.904,00 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: Im Rahmen dieses AP beteiligt sich DBE TECHNOLOGY an dem von der NAGRA durchgeführten Versuch, dem sogenannten MB test (Mine-By Test) im URL Mt. Terri. Die Beteiligung an diesem Experiment beinhaltet eine detaillierte Prognoseberechnung bezüglich des Gesteinsverhaltens, die anschließende Interpretation der Versuchsergebnisse unter Durchführung einer Parameteridentifizierung mittels versuchsbegleitender numerischer Modellierung. Aus dem Vergleich von Messwerten und Prognosemodellierung lässt sich folgendes feststellen: (i) Der entstehende Porenwasserüberdruck durch die Auffahrung wird im Modell noch unterschätzt. (ii) An Messpunkten  $\geq 5\text{m}$  vor der Auffahrungsfront wurde ein plötzlicher Druckabfall des Porenwasserdruckes festgestellt, der in dieser rapiden Form vom Modell ebenfalls unterschätzt wird. (iii) Der Bereich der plastifizierten Zonen wird in seiner Ausdehnung vom Modell gut wieder gegeben. (iv) Die Verschiebungen und Konvergenzen im Nahfeld der Auffahrung werden leicht unterschätzt im Fernfeld aber kann eine gute Übereinstimmung festgestellt werden.
- AP6: Im Berichtszeitraum wurden seitens ANDRA Kernproben sowohl aus den Erhitzerbohrungen des TED-Versuches, als auch aus den umliegenden Beobachtungsbohrungen geliefert. Die Messungen zur Bestimmung von Wärme- und Temperaturleitfähigkeit, thermischer Ausdehnung, Karbonatgehalt und Mineralbestand wurden begonnen. Erste Ergebnisse deuten darauf hin, dass die Anisotropie in der Wärmeleitfähigkeit bei einem Faktor von etwa 1,5 liegen wird.
- AP7: Bisherige Simulationen im Zusammenhang mit dem TBT-Versuch in Äspö beinhalteten thermische sowie thermo-hydraulische Berechnungen. Um auch das mechanische Verhalten adäquat simulieren zu können, wurde eine Programmroutine zur Simulation des Quelldruckes von Bentonit in das Programm Flac3D implementiert. Der Funktionsnachweis der Routine konnte erbracht werden

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP5: Fortführung der analysierenden Modellierung des Mine-By Tests in Mont Terri zur Verbesserung der Parameter-Identifikation und damit zur Beschreibung des geomechanischen Verhaltens der Tonsteinformation.
- AP6: Modellentwicklung und Test sowie Durchführung einer Prognoseberechnung für den neuen TED-Erhitzerversuch in Bure in Abstimmung mit ANDRA.  
Weiterführung der Labormessungen an Kernmaterial aus den Bohrungen des TED-Versuches zur Bestimmung der thermo-physikalischen Gesteinsparameter.
- AP7: Modellberechnungen zur Charakterisierung des Einflusses des Quellens des Bentonits auf das mechanische Verhalten des Gesamtsystems unter Anpassung von Modell- und Messwerten

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Jobmann, M., Wilsnack, Th., Voigt, H.-D. (2009): Investigation of damage-induced permeability of opalinus clay, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, Elsevier, (in-press).

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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:

Im Dezember 2009 wurde nach 18-monatiger Verheilungsphase wiederum Gas in die Testintervalle der BET-Bohrungen injiziert. Der Gaseintrittsdruck lag bei den meisten Testintervallen (BET1, 2, 4 und 5) zwischen 2.0 MPa und 2.6 MPa. Dies entspricht den Werten bei den ersten Gasinjektionstests (November 2007 und Februar 2008) oder ist sogar höher. Eine Erniedrigung des Gaseintrittsdruckes wie bei den Wiederholungstests im Mai 2008 wurde nicht mehr beobachtet, d. h. die vom Gas geschaffenen Fließpfade sind innerhalb 18 Monaten wieder geschlossen worden. Zusätzlich zu den Gasinjektionstests in den BET-Bohrlöchern wurden entsprechende Versuche in den 24 m langen Bohrlöchern BMB-3 und BMB-4 durchgeführt, die von der HEB-Nische ins unverritzte Tongebirge gebohrt sind. Die hier gemessenen Gaseintrittsdrücke von ca. 2.5 MPa bestätigen die Ergebnisse aus den BET-Bohrungen.

AP2:

Zur Überprüfung des in einem vorhergehenden Versuchs an kleinen Proben beobachteten Temperaturverhaltens wurden die Untersuchungen an einer zweiten Probe wiederholt. Der Versuch befindet sich in der Auswertung.

Bei der Präparation der Großbohrkerne scherte bei einer Probe ein Probenstück ab. Eine Probe wurde mit zwei Metallstangen im Ringbereich der Tonprobe rekonstruiert. Die Durchströmung der Proben erfolgte in radialer Richtung. Der Gasinjektionsdruck wurde in Stufen erhöht. Bereits bei Injektionsdrücken von 0.5 bis 0.8 MPa traten relativ hohe Fließraten auf, die auf die Abscherung zurückzuführen sind. Zunächst konnte ein Ansteigen der Permeabilität mit dem Injektionsdruck von  $10^{-15} \text{ m}^2$  bis auf ca.  $10^{-14} \text{ m}^2$  bei 0.46 MPa beobachtet werden. Bei weiterer Drucksteigerung nahm die Permeabilität um 2/3 auf ca.  $3 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$  ab, was auf eine Quellung, hervorgerufen durch den angefeuchteten Stickstoff, zurückzuführen ist. Mit synthetischer Opalinustonlösung vorgenommene Messungen ergaben eine Ausgangswasserpermeabilität von  $6.2 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$  und ist deutlich niedriger als die Gaspermeabilität, was auf ein Schließen von Fließwegen durch Quellungen hindeutet. Eine Erhöhung des Injektionsdrucks auf 2.1 MPa führte zu einer Wasserpermeabilität von ca.  $3.3 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ . Im Anschluss an die Wasserpermeabilitätsmessungen wurde der Gasdurchbruchdruck, der bei 0.4 MPa lag, ermittelt und dann die Gaspermeabilität nach dem Gasdurchbruch zu  $2.6 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$  bestimmt. Untersuchungen an einer weiteren intakten Probe wurden vorgenommen und befinden sich in der Auswertung.

AP3:

Erstellung eines 2D-Berechnungsmodells für einen repräsentativen Querschnitt der SB-Nische mit der Möglichkeit zur Simulation der BET-Gasinjektionstests, Durchführung HM-gekoppelter Berechnungen mit Code\_Bright, Ergebnisdarstellung (Porenwasserdruckverteilung, teilgesättigte Gebirgsbereiche) mit Bezug zu In-situ-Beobachtungen bei Wasserinjektionstests.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Abschließende Auswertung und Bericht.

AP2: Beendigung der Laboruntersuchungen und Auswertung.

AP3: Abbildung BET-Gasinjektionstests mit vorhandenem Simulationsinstrumentarium, Erarbeitung von Defiziten, Erstellung des Abschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10126</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe		
<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 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 298.298,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marquardt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es wird eine einheitliche, umfassende und konsistente thermodynamische Referenzdatenbasis für ausgewählte Radionuklide für eine Temperatur von 25 °C 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 Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (FZD), der TU Bergakademie Freiberg und der Colenco Power Engineering.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektmanagement: Koordination zur Datenerhebung der Radionuklid-Datenbasis im Verbundvorhaben. Erstellung von Berichten und Vorbereitung von Workshops, Vorstellung von Ergebnissen auf Konferenzen.
- AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation: Erstellung von Qualitätsrichtlinien, Archivierung von Quellenangaben und Rechnungen zur Validierung von Daten. Ziel der Validierung von Daten ist es zu prüfen, inwieweit verifizierte Rechencodes wie EQ3/6 mit Hilfe der erstellten Parameterdateien in der Lage sind, die Gleichgewichte in komplexen Lösungssystemen vorauszusagen.
- AP3: Datenbasis für Radionuklide: Erfassung und Bearbeitung der thermodynamischen Daten für die Radionuklide Tc, Th, Np, Pu, Am und Cm für die Temperatur von 25 °C. Es werden Festphasen als auch in wässriger Phase gelöste Spezies erfasst. Einzugebende Daten sind Bildungs- und Reaktionsdaten relevanter Spezies (z. B.  $\log K^\circ$ ,  $\Delta_f G_m^\circ$ ,  $\Delta_r G_m^\circ$ ), die dazugehörigen Reaktionen, Wechselwirkungsparameter für das Pitzer- bzw. SIT-Modell, Qualitätsstufen, Quellenangaben und Kommentare.



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In den letzten drei Monaten des Projektes wurde hauptsächlich der umfangreiche Abschlussbericht des Projekts erstellt.

Dokumentation:

Da in der NEA-TDB nicht für alle Spezies eine für THEREDA geeignete Bildungsreaktion formuliert wurde, mussten eine Reihe von Änderungen vorgenommen werden. Alle Änderungen von Bildungsreaktionen zur Wahrung der Konsistenz der THEREDA-TDB und die neu kalkulierten Komplexbildungskonstanten für Am(III), Cm(III), und Np(V)-Spezies sind in einem internen Bericht festgehalten worden, der auch Bestandteil des Abschlussberichts ist.

Datenerfassung:

Für Am(III), Cm(III) wurden Ion-Ion-Wechselwirkungsparameter nach Pitzer und SIT in die TDB eingegeben, sodass ein weitgehend kompletter Datensatz für eine Modellierungen dieser beiden Elemente in der TDB enthalten ist.

Testrechnungen:

Um die verschiedenen gängigen Rechencodes zu überprüfen, wurden mit einer kleinen Auswahl an thermodynamischen Daten der THEREDA-TDB Rechnungen mit Geochemists Workbench (GWB) durchgeführt und mit Rechnungen der Projektpartnern, die mit GWB, EQ3/6, ChemSage und ChemApp modelliert haben, verglichen. Als Test-Systeme wurden gut bekannte Systeme verwendet: NaCl-H<sub>2</sub>O als binäres System, MgCl<sub>2</sub>-CaCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O als ternäres System mit symmetrischer Ladung und NdCl<sub>3</sub>-NaCl-H<sub>2</sub>O als ternäres System mit unsymmetrischer Ladung. Für die ersten beiden Systeme wurden im Rahmen der Rundungsfehler dieselben Ergebnisse für alle Rechnungen erhalten. Für das System 0.001 M NaCl und 3 M NdCl<sub>3</sub> wurden zum Teil sehr große Abweichungen (> 40 %) erhalten, die offensichtlich aus bisher unbekanntem Fehler resultieren. Die Rechnungen werden mit dem Ziel der Fehlersuche wiederholt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten laufen im Rahmen des neuen Projektes THEREDA-II weiter.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

ALTMAIER, M.; BRENDLER, V.; GESTER, S.; HAGEMANN, S.; HERBERT, H.-J.; MARQUARDT, C.M.; MOOG, H.C.; NECK, V.; RICHTER, A.; VOIGT, W.; WILHELM, S.; WILLMS, T.; WOLLMANN, G., THEREDA – eine thermodynamische Referenzdatenbasis zur Modellierung endlagerrelevanter aquatischer Systeme. GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2009, Frankfurt am Main, Deutschland, 30. August -02. September 2009.

ALTMAIER, M.; BRENDLER, V.; GESTER, S.; HAGEMANN, S.; HERBERT, H.-J.; MARQUARDT, C.M.; MOOG, H.C.; NECK, V.; RICHTER, SCHARGE, T.; A.; VOIGT, W.; WILHELM, S.; WOLLMANN, G., THEREDA – a joint German project towards a thermodynamic reference database. Migration '09, 12th International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, Kennewick, Washington, USA, September 20-25, 2009.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10136</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD		
<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 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 91.185,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brendler	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt THEREDA (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln und Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe) entwickelt eine umfassende thermodynamische Datenbasis zur geochemischen Modellierung der Schadstofffreisetzung aus Endlagerprojekten. 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.

Im weiteren Verlauf des Vorhabens werden Werkzeuge zur Verfügung gestellt, um automatisiert anwendungsspezifische Parameterdateien aus der Datenbank zu generieren. Die Parameterdateien werden über das Internet der interessierten Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt. Damit wird auch eine nützliche Informations-Rückkopplung an die Bereitsteller der Datenbank ermöglicht.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektmanagement  
(Berichtswesen, Treffen mit Projektpartnern, Intranet)
- AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation  
(Testrechnungen mit vom DB-Generator entwickelten Parameterdateien, Konsistenzprüfungen, Anwenderhandbuch)
- AP3: Datenbasis für die Radionuklide  
(FZD: Uran und Radium)

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

AP1: Projektmanagement

- Aktivitäten wurden dem BMBF-Teilprojekt zugeordnet, siehe dort

AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation

- Erarbeitung des Entwurfs des Abschlussberichtes
- Hauptverantwortliche Fertigstellung von Kapitel 3 (Richtlinien zur Datenauswahl) und 5 (Technische Grundlagen der Datenbank) des Handbuchs, Mitarbeit an weiteren Kapiteln

AP3: Datenbasis für die Radionuklide

- Weitere Dateneingabe zum Uran (Wechselwirkungsparameter)

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Projekt abgeschlossen.

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

M. Altmaier, V. Brendler, S. Gester, S. Hagemann, H.-J. Herbert, C. Marquardt, H. C. Moog, V. Neck, A. Richter, T. Scharge, W. Voigt, S. Wilhelm, T. Willms, G. Wollmann: „THEREDA - A thermodynamic reference database for nuclear waste disposal in Germany”. Talk at the 238<sup>th</sup> ACS National Meeting & Exhibition (Fall 2009), August 16-20, 2009, Washington DC, USA, Abstract ID#: 1284436.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10146</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.09.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 77.452,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Moog	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel dieses Teilvorhabens ist es eine einheitliche, konsistente und qualitätsgesicherte thermodynamische Referenzdatenbasis für die Matrixelemente Aluminium und Silizium zu schaffen, die zusammen mit den Referenzdatenbasen der anderen Teilprojekten eine umfassende thermodynamische Gesamtdatenbasis bildet. Diese soll zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozessen für die derzeit in Deutschland diskutierten Wirtformationen für ein Endlager radioaktiven Abfalls verbindlich verwendet werden.

Die Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) wird innerhalb dieses Teilprojektes die thermodynamischen Daten die Matrixelemente Aluminium und Silizium aus der Literatur zusammenstellen. Diese werden nach einheitlich vorher festgesetzten Kriterien bewertet und in einer Datenbank zusammenfasst.

Einen besonderen Schwerpunkt wird auf die Parameter, die zur Modellierung in salinaren Milieu benötigt werden, gelegt. Es handelt sich dabei um Ion-Ion-Wechselwirkungsparameter (Pitzer-Parameter). Für diese Pitzer-Parameter existiert bisher noch keine allgemein zugängliche, umfassende, abgesicherte und konsistente Datenbasis.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Entwicklung, Ergänzung und Dokumentation konsistenter thermodynamischer Datenbasen für Aluminium bei 25 °C
- Entwicklung, Ergänzung und Dokumentation konsistenter thermodynamischer Datenbasen für Silizium bei 25 °C
- Projektkoordination

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

Projektmanagement: Verfassen des Abschlussberichts.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Das Projekt wird im Rahmen des Projekts „WeDa-II“ fortgeführt.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10156</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 spektroskopischen Untersuchungen (TRLFS, fs-TRLFS) zur U(VI)-Huminsäure (HS)-Komplexierung mit schwefelhaltigen HS-Modellverbindungen wurden abgeschlossen. Mit beiden Methoden wurde eine Zunahme der Anzahl an U(VI)-Bindungsplätzen der HS mit zunehmendem HS-Schwefelgehalt (> 2 Gew.-%) bestimmt. Für umweltrelevante HS-Schwefelgehalte (0-2 Gew.-%; Stevenson, 1982) kann jedoch geschlossen werden, dass Schwefelfunktionalitäten verglichen zu Sauerstofffunktionalitäten, insbesondere Carboxylgruppen, eine untergeordnete Rolle bei der U(VI)-Komplexierung spielen.
- Der Einfluss von Schwefelfunktionalitäten in HS auf die Reduktion von Np(V) wurde unter Einsatz schwefelhaltiger HS-Modellverbindungen bei pH 5, 7 und 9 untersucht. Bei pH 5 wird eine Zunahme der Np(V)-Reduktion mit zunehmendem HS-Schwefelgehalt festgestellt.
- Untersuchung der U(VI)-Diffusion in Opalinuston in Abwesenheit und Gegenwart von HS unter anaeroben Bedingungen: Nach 13 d wurden HS-Moleküle <1 kD im low-Konzentrationsreservoir detektiert. Uran wurde auch nach 202 d Diffusion nicht im low-Konzentrationsreservoir nachgewiesen.
- Zetapotentialmessungen von aeroben Opalinustonproben zeigten im Bereich pH 0 bis 7.5 eine negative Gesamtladung des Tones an. Vergleichsmessungen mit Kaolinit ergaben einen isoelektrischen Punkt von ca. 0.25.
- Die U(VI)-Komplexierung durch Phenylphosphonsäure wurde mittels TRLFS untersucht und im gesamten betrachteten pH-Bereich (pH 1.5 bis 4.0) eine Komplexierung nachgewiesen. Ermittelte Stabilitätskonstanten:  $\log K_{11} = 3.61 \pm 0.14$  und  $\log K_{12} = 6.95 \pm 0.22$ .
- Weiterführung der Komplexierungsuntersuchungen von Am(III) durch den stickstoffhaltigen Liganden Anthranilsäure mittels UV-Vis und TRLFS (I = 0.1 M; pH 3.5, 6.0). Im Gegensatz zu U(VI) wird Am(III) durch Anthranilsäure bei pH 3.5 nicht oder nur äußerst schwach komplexiert. Bei pH 6 wird Am(III) durch Anthranilsäure komplexiert.
- Als Vergleich wurde die Komplexierung von Am(III) durch den sauerstoffhaltigen Liganden Phthalsäure untersucht (I = 0.1 M; pH 4.0, 6.0). Im Gegensatz zu Anthranilsäure konnte bei beiden untersuchten pH-Werten eine Am(III)-Komplexierung durch Phthalsäure festgestellt werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführende Untersuchungen zur Am(III)-Komplexierung mit stickstoff-, schwefel- und sauerstoffhaltigen Modellliganden.
- Untersuchungen zur Bildung ternärer U(VI)-Carbonato-Humat-Komplexe.
- Sorption von U(VI) an Opalinuston in Abwesenheit und Gegenwart von Huminsäure in Opalinustonporenwasser unter anaeroben Bedingungen.
- Abschluss der Diffusionsexperimente. Analyse der Opalinustonbohrkerne zur Bestimmung des Diffusionskoeffizienten  $D_e$  für U(VI) in Ab- und Anwesenheit von Huminsäure. Auswertung mittels COMSOL-Modellierung.
- Beginn der Untersuchungen zur Actinid-Ligand-Komplexierung bei erhöhten Temperaturen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Schmeide, K., Bernhard, G.: Redox stability of neptunium(V) and neptunium(IV) in the presence of humic substances of varying functionality. *Radiochim. Acta* 97, 603 (2009).

Raditzky, B., Schmeide, K., Sachs, S., Geipel, G., Bernhard, G.: Interaction of uranium(VI) with nitrogen containing model ligands studied by laser-induced fluorescence spectroscopy. *Polyhedron* 29, 620 (2010).

Vortrag: Sachs, S., Reich, T., Bernhard, G.: Study of the role of sulfur functionalities in humic acids for uranium(VI) complexation. Migration '09, Kennewick, USA, 20.-25.09.2009.

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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

Das Sorptionsverhalten von  $8 \times 10^{-6}$  M Np(V) an OPA in synthetischem Porenwasser (pH 7,6; I = 0,4 M) wurde bei 40, 60, 70 und 80 °C in Abhängigkeit der Tonmenge (2-20 g/l) untersucht. Der bei 40 °C erhaltenen  $K_d$ -Wert von 23 l/kg stimmt mit dem Wert bei Raumtemperatur gut überein ( $K_d = 25$  l/kg). Bei höheren Temperaturen steigt die Sorption deutlich an, und die  $K_d$ -Werte betragen 57 l/kg (60 °C), 195 l/kg (70 °C) und 604 l/kg (80 °C). Der Anstieg der Sorption von Np(V) mit zunehmender Temperatur deutet auf einen endothermen Prozess.

Der Einfluss verschiedener im Porenwasser enthaltener Ionen ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$ ) auf das Sorptionsverhalten von  $8 \times 10^{-6}$  M Np(V) an OPA wurden an Luft in Abhängigkeit von der Tonmenge (2-20 g/l) in Batch-Versuchen studiert. Die Experimente wurden bei Raumtemperatur bei dem



pH-Wert des Porenwassers von 7,6 in 0,1 und 0,4 M Lösungen von NaCl, CaCl<sub>2</sub> bzw. NaClO<sub>4</sub> durchgeführt. Während in CaCl<sub>2</sub>-Lösungen ähnliche Verteilungskoeffizienten wie in Porenwasser erhalten wurden, d. h. 45 l/kg (0,1 M) bzw. 34 l/kg (0,4 M), war die Sorption in den 1:1-Elektrolytlösungen deutlich größer. In 0,1(0,4) M NaCl-Lösung beträgt der K<sub>d</sub>-Wert 214(224) l/kg. In 0,1(0,4) M NaClO<sub>4</sub> ist der K<sub>d</sub>-Wert 133(231) l/kg. Diese Experimente zeigen, dass die jeweilige Elektrolytlösung einen signifikanten Einfluss auf die Sorption von Np(V) an OPA hat. In CaCl<sub>2</sub>-Lösung und Porenwasser wird deutlich weniger Np(V) an OPA sorbiert als in den natriumhaltigen Elektrolytlösungen. Zudem hat die Ionenstärke im NaClO<sub>4</sub>-Medium im Gegensatz zu der NaCl-Lösung einen deutlichen Einfluss auf die Neptuniumsorption.

Die Diskussion der Ergebnisse der im ersten Halbjahr 2009 durchgeführten Diffusionsversuche mit Dr. L. Van Loon (Paul Scherrer Institut, Schweiz) ergab, dass die für die beiden verwendeten OPA-Bohrkerne erhaltenen Porositäten von  $\epsilon = 0,39-0,49$  viel zu groß und nicht repräsentativ für OPA aus Mont Terri sind. Deshalb müssen das Diffusionsexperiment mit Np unter anaeroben Bedingungen und der aerobe Diffusionsversuch mit Np(V) in Gegenwart von 10 mg/l Huminsäure mit neuen, repräsentativen Bohrkerne in 2010 wiederholt werden.

Im November 2009 wurden an der Rossendorf Beamline an der ESRF XANES- und EXAFS-Messungen zur Sorption von Np(V) an OPA in An- und Abwesenheit von Huminsäure unter anaeroben und aeroben Bedingungen durchgeführt. Danach sieht es so aus, dass unter anaeroben Bedingungen Np(V) nicht zu Np(IV) reduziert wird.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Wiederholung der Diffusionsversuche zum Einfluss von Huminsäure auf die Diffusion von <sup>237</sup>Np(V) in OPA unter aeroben Bedingungen bei 25 °C
- Diffusionsversuche mit <sup>237</sup>Np(V) bei 60 °C unter aeroben Bedingungen in An- und Abwesenheit von Huminsäure
- Batchexperimente und EXAFS-Messungen zur Sorption von Pu an OPA. Der entsprechende Messzeitantrag wurde von der ESRF bewilligt.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

T. Wu, S. Amayri, J. Drebert, L.R. Van Loon, T. Reich, Neptunium(V) sorption and diffusion in Opalinus Clay, *Environ. Sci. Technol.* 43 (17), 6567-6571 (2009).

T. Wunderlich, Anwendung der CE-ICP-MS und RIMS sowie Entwicklung und Anwendung der CE-RIMS auf Umweltproben, Dissertation, Universität Mainz, 2009.

T. Reich, S. Amayri, J. Drebert, D. Fröhlich, T. Wu, EXAFS study of Np(V) sorption onto gibbsite ( $\gamma$ -Al(OH)<sub>3</sub>), Vortrag auf der 14<sup>th</sup> Int. Conf. on X-ray Absorption Fine Structure, 26.-31.07.2009, Camerino, Italien.

S. Amayri, D.R. Fröhlich, T. Wu, J. Drebert, L.R. Van Loon, T. Reich, Untersuchung der Sorption und Diffusion von Neptunium(V) in Opalinuston, Vortrag auf dem GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2009, 30.08-02.09.2009, Frankfurt a. Main.

S. Amayri, D.R. Fröhlich, T. Wu, J. Drebert, L.R. Van Loon, T. Reich, Sorption and diffusion behavior of neptunium(V) in Opalinus Clay, Poster auf der 12<sup>th</sup> Int. Conf. on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, 20.-25.09.2009, Kennewick, USA.

D.R. Fröhlich, S. Amayri, J. Drebert, T. Reich, Study of neptunium(V) sorption on Opalinus Clay under aerobic/anaerobic conditions, Poster auf der 12<sup>th</sup> Int. Conf. on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, 20.-25.09.2009, Kennewick, USA.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, 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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.146.371,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Lippold	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zielsetzung des ersten Teilvorhabens besteht in der Bereitstellung von Bewertungsgrundlagen zum Einfluss organischer Kolloide auf die Migration von Actiniden in Tongestein. Dazu wird die Ko-adsorption 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 des zweiten Teilvorhabens ist 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

- AP1.1: Untersuchung und Modellierung der Wechselwirkungen in ternären und binären Systemen aus radiotoxischen Schwermetallen, Huminstoffen und Tonen bzw. Tonmineralien in Abhängigkeit von pH-Wert und Elektrolytgehalt
- AP1.2: Stabilität gelöster und oberflächengebundener Humatkomplexe; Einfluss höherwertiger Metalle auf das Adsorptionsverhalten von Huminstoffen
- AP1.3: Zeitabhängigkeit des Konkurrenzeffektes von Al(III) bezüglich der Humatkomplexbildung radiotoxischer Schwermetalle
- AP1.4: Reversibilität der Adsorption von Huminstoffen; Adsorptionsverhalten von Metallhumaten an huminstoffgesättigten Oberflächen
- AP2.1: Lokaler Lösungstransport in homogenisierten Tonproben in Abhängigkeit von Dichte, Sättigung und geochemischen Parametern
- AP2.2: Lokaler Lösungstransport in Bohrkernen mit realer Struktur
- AP2.3: Lokaler Kolloidtransport analog zu AP2.1 und 2.2

- AP2.4: Autoradiographische Untersuchung von Adsorbatverteilungen in Relation zum Oberflächenpotential  
 AP2.5: Lokaler Kolloidtransport in Granitspalten  
 AP2.6: Matrixdiffusion in Granit

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Traceraustausch-Studien zur Untersuchung der Dynamik der Huminstoff-Adsorption wurden in ca. 250 weiteren Batch-Experimenten fortgesetzt. Für eine Huminsäure (Aldrich) und eine Fulvinsäure (Moorwasser-Isolat) wurden Adsorptionsisothermen an Kaolinit aufgenommen, wobei der radioaktiv markierte Tracer ( $^{14}\text{C}$ -HS bzw.  $^{14}\text{C}$ -FS) erst im Gleichgewichtszustand der Systeme in vernachlässigbarer Menge eingeführt und über unterschiedliche Zeiträume mit dem Adsorbat kontaktiert wurde (6, 48, 168, 672 Stunden). Für das Huminsäure-System konnte festgestellt werden, dass der Adsorptionsprozess reversibel ist, wobei die Dynamik des Gleichgewichts allerdings durch eine sehr langsame Kinetik charakterisiert ist. Der Traceraustausch im Sättigungszustand erforderte wesentlich mehr Zeit als die Einstellung des Adsorptionsgleichgewichts an der unbeladenen Oberfläche. Für das Fulvinsäure-System wurden Hinweise auf einen vergleichbaren zeitlichen Trend erhalten, jedoch sind die Daten aufgrund von Verfahrensproblemen bei der Tracerpräparation nicht quantitativ verwertbar. Die Annahme eines ständigen lokalen Gleichgewichts bei der Modellierung huminstoffgebundener Transportprozesse ist demnach problematisch, wenn lediglich die Adsorptionskinetik als maßgebend betrachtet wird.

Die Methodik für quantitative PET-Transportuntersuchungen an Gesteinen mit realer Struktur konnte mit Hilfe verbesserter Korrekturverfahren und neuer Visualisierungstechniken erheblich voran gebracht werden. Bisher war die Aussagekraft in Bildregionen mit geringer Tracerkonzentration, die in Hinblick auf Worst-Case-Abschätzungen entscheidend sind, stark eingeschränkt. Durch die Zurückdrängung von Bildrauschen und Artefakten ist nun die Definition geeigneter Prozessparameter anhand der gemessenen räumlich-zeitlichen Tracerverteilung möglich. Phantomuntersuchungen zeigten allerdings noch weitere Optimierungsmöglichkeiten auf.

Der diffusive Transport von Iodid in einem Opalinuston-Bohrkern wurde erfolgreich untersucht. Die merkliche Alteration (Rissbildung) des Materials bewirkte hier eine scheinbar große Transportgeschwindigkeit mit Lokalisierung auf mögliche Rissflächen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Traceraustausch-Studien mit anderem Huminstoffmaterial, Variation des Traceranteils
- TRLFS-Untersuchungen mittels Eu(III) an Al(III)-Huminstoff-Systemen nach unterschiedlichen Kontaktzeiten zur Aufklärung zeitabhängiger Veränderungen der Komplexstabilität (Kooperation mit UPPC)
- Herstellung von  $^{160}\text{Tb}$  durch Neutronenaktivierung (Kooperation mit UM-IKC)
- konzentrationsabhängige Untersuchungen zum Einfluss niedermolekularer Organika auf die Adsorption von Tb(III) an Tonmaterialien (Opalinuston, Montmorillonit)
- PET-Beobachtung von Diffusionsprozessen in Tonproben mit natürlicher Struktur bei unterschiedlichen Bedingungen mittels längerlebiger Tracer ( $^{58}\text{Ca}$ -Markierung) unter besonderer Berücksichtigung von Alterationseffekten
- Definition geeigneter Prozessgrößen (Heterogenität, Zeitabhängigkeit, Skalierung)
- weitere Verbesserung der Bildqualität durch modellmäßige Berücksichtigung direkter Störstrahlung („regionale Streueffekte“)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Lippold, H., Lippmann-Pipke, J.: Effect of humic matter on metal adsorption onto clay materials: Testing the linear additive model. *Journal of Contaminant Hydrology* **109** (2009) 40-48

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10186</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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: Komplexierung durch Huminstoffe

Im AP1 werden computerchemische Untersuchungen zur Komplexierung von Aktinoiden durch Carboxyl- und alternative Funktionalitäten von Huminstoffen anhand von Modellen durchgeführt sowie Solvatationsmodelle entwickelt und angewandt.

AP2: Sorption an Tonmineralien

Das AP2 umfasst quantenmechanische Berechnungen periodischer Modelle von Tonmineralien sowie computerchemische Untersuchungen zur Adsorption von Aktinoidenspezies auf Tonmineraloberflächen mit Hilfe dieser Modelle.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.4: Reaktionsmechanismen

AP1.6: Solvatisierungsmodelle

AP2.3: Sorption an Kaolinit

Die Rechnungen zum Mechanismus der Komplexierung von Neptunyl(V) mit Acetat als prototypischem Carboxylatliganden wurden fortgesetzt (AP1.4). Für Neptunyl-Monoacetat wurde wie für Uranyl(VI)-Monoacetat ein vernachlässigbarer Unterschied zwischen mono- und bidentater Koordination des Liganden gefunden. Interessanterweise ist für den monodentaten Komplex die Koordinationszahl 4 gegenüber 5 leicht bevorzugt. Der Reaktionspfad von einem außersphärischen Monoacetat über den

monodentaten zum bidentaten Komplex wurde mit verschiedenen Dichtefunktionalen verfolgt. Abschätzungen der Energien der Übergangszustände zeigen eine höhere Barriere, ~20 kJ/mol, für den Übergang zwischen dem außersphärischen und dem monodentaten Komplex und eine niedrigere, ~10 kJ/mol, zum bidentaten Komplex. Eine Optimierung der Übergangszustände ist vorgesehen.

Arbeiten zur Sorption von Uranyl auf Al-Oktaederflächen von Kaolinit zur Untersuchung verschiedener Adsorptionsplätze wurden fortgeführt und auf Neptunyl erweitert (AP2.3). Im Gegensatz zu Befunden an Gibbsite konnte die Existenz bidentater Adsorptionskomplexe auf deprotonierten kurzen und langen Brückenplätzen durch weitere Beispiele bestätigt werden. Die Suche nach stabilen Adsorptionskomplexen auf teilweise deprotonierten langen Brückenplätzen blieb erfolglos. Somit kann man davon ausgehen, dass lange Brückenplätze nur bei erhöhtem pH verfügbar sind. Weiterhin wurde die Adsorption von Neptunyl(V) auf der oktaedrischen (001)-Oberfläche von Kaolinit untersucht. Inner- und außersphärische Komplexe wurden modelliert. Im Gegensatz zu Uranyl(VI) ergaben sich vierfach koordinierte Neptunylkomplexe, in Übereinstimmung mit experimentellen Befunden des Projektpartners Mainz. Innersphärische Komplexe adsorbieren bevorzugt monodentat. Außersphärische Komplexe zeigen wie entsprechende Uranylspezies kurze Bindungen zu Wasserliganden mit direktem Kontakt zur Oberfläche. Auch hier ist damit von mehr als einer Schicht von Wassermolekülen zwischen der Mineraloberfläche und dem Neptunylion auszugehen, wenn außersphärische Komplexe eine dem solvatisierten Ion entsprechende Struktur zeigen.

In Zusammenarbeit mit dem Pacific Northwest National Laboratory, Richland, USA, wird die Software NWChem zur Modellierung von Lösungsmittelleffekten mittels einer atomaren Beschreibung der Wasserumgebung und einem moleküldynamischen Ansatz (Car-Parinello) am Beispiel Uranyl(VI) und einfacher Verbindungen in wässriger Lösung erprobt. Neben rein quantenmechanischen (QM) Simulationen wird insbesondere ein rechnerisch effizienter gekoppelter quantenmechanisch-molekülmechanischer Ansatz (QM/MM) erprobt. Simulationen von bis zu 30 ps Dauer für Uranyl(VI) in einem Modell mit 122 Wassermolekülen zeigen eine befriedigende Übereinstimmung zwischen QM- und QM/MM-Beschreibung. Für Uranyl-Monohydroxid wird die relative Stabilität der Koordinationszahlen 4 und 5 untersucht, was einen Vergleich mit früheren quantenmechanischen Optimierungen erlaubt, die eine leichte Bevorzugung der Koordinationszahl 4 vorhersagen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.4: Reaktionsmechanismen
- AP1.6: Solvatisierungsmodelle
- AP1.1, 1.2: Sorption an schichtgeladenen Tonmineralen

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- A. Kremleva: *Environmental Chemistry of Uranyl: A Relativistic Density Functional Study on Complexation with Humic Substances and Sorption on Kaolinite*, Dissertation, TU München, 2009.
- R. S. Ray, S. Krüger, N. Rösch: *Ternary Uranyl Hydroxo Complexes: A Computational Study of Structure, Energetics, and Stability Constants*, Inorg. Chim. Acta 363 (2009) 263.
- O. Zakhariyeva, A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: *Uranyl Complexation by Monodentate Nitrogen Donor Ligands. A Relativistic Density Functional Study*, Int. J. Quantum Chem. (2010) DOI: 10.1002/qua.22483.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität des Saarlandes, Campus der Universität des Saarlandes, 66123 Saarbrücken		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10196</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 Eu mit HA und Lactat durchgeführt. Das Hauptaugenmerk wurde auf den Einfluss der Konkurrenzkatzen im synthetischen Porenwasser (PW) gerichtet. Die hohe Kationenkonzentration führt zur Bildung neuer Eu-Humat-Spezies, welche bis dato noch nicht identifiziert werden konnten. Die Trennung der Eu-Lactat-Komplexe von freiem Eu zeigte bislang mittels CE-ICP-MS aufgrund der schwachen Komplexstabilität keinen Erfolg. Alternativ wird eine HPLC-ICP-MS Kopplung in Betracht gezogen.

Zur Komplettierung des Arbeitsplans wurden Batch-Versuche mit Uran (U(IV)) durchgeführt. Hierbei spielten vor allem Sorptions- bzw. Desorptionsuntersuchungen in 10mM NaClO<sub>4</sub> bzw. in PW eine wichtige Rolle. Wie bei den Experimenten mit den Lanthanoiden wurden bei den Sorptions-Versuchen pH-Werte von 5 bzw. 7,6 eingestellt. Die Uranyl-Konzentration variierte von 5 ppb bis 100 ppm. Im Vergleich zu den Untersuchungen mit Eu, Gd und Tb wurde bei pH 5 wesentlich mehr Uran sorbiert als bei pH 7,6. Dies liegt an der Bildung negativ geladenen Uranyl-Carbonato-Spezies ab einem pH-Wert > 6. Diese Komplexe sorbieren nicht am ebenfalls negativ geladenen Opalinuston und führen so zu einer erhöhten Messung an freien Uranyl-Kationen. Der Einfluss der Carbonat-Komplexe ist auch durch die Messung von pH-Reihen zu erkennen. Hierfür wurde eine Uran-Konzentration von 100 ppb gewählt. Ein Sorptionsmaximum wird bei pH 6 erreicht, während ein Sorptionsminimum im Bereich von pH 7 und 8 zu erkennen ist. Bei höheren pH-Werten nimmt die Sorption wieder zu, wahrscheinlich auf Grund diverser Ausfällungen als Hydroxide. Bei den Untersuchungen in PW konnte eine geringere Sorption im Vergleich zu den Experimenten mit 10 mM NaClO<sub>4</sub> festgestellt werden. Der Einfluss der Konkurrenzkatzen auf die Sorption von Uran ist jedoch wesentlich geringer als auf die Sorption von dreiwertigen Lanthanoiden. Daraus lässt sich schließen, dass die Sorption der größeren Uranyl-Kationen weniger durch Kationen-Austauschprozesse geprägt ist.

Die Optimierung der miniaturisierten Säulenversuche konnte weiter fortgesetzt werden. Für die Trennung von Iodid und Iodat-Spezies konnte bei einem Opalinuston/Seesand-Gemisch (60/40) Flussgeschwindigkeiten von bis zu 10 µl min<sup>-1</sup> bei einer Säulendimension von 20 mm x 3,5 mm (L x i.D.) realisiert werden, wobei vergleichsweise kurze Durchbruchzeiten des Inertmarkers Iodid (15,7 min) und des Iodats (28,3 min) bei geringem Druckaufbau (bis ca. 11 bar maximal) erhalten werden konnten.

Weitere Untersuchungen zum Einfluss von Metallen auf die Durchbruchzeiten mobiler Tonorganika (Lactat und Salicylat) wurden durchgeführt. Bei Anwesenheit von unterschiedlichen Konzentrationen an Europium können zum Teil deutlich längere Durchbruchzeiten der mobilen Organik beobachtet werden. Dies könnte durch Komplexierungs- bzw. Ausfällungseffekte verursacht werden, was durch post-mortem-Analysen der kompaktierten Opalinuston-Säulen untersucht werden kann.

Bei den ersten Versuchen zur ortsaufgelösten Element-Analytik der Opalinuston-Säulen konnte ein Einfluss der NOM (Natural Organic Matter) am Beispiel von Lactat nachgewiesen werden. Insbesondere die Injektion einer NOM enthaltenen Metalllösung (1 µl Injektion von 16,5 mM Eu und 165 mM Lactat) führte zu einer verstärkten Mobilisierung (Migration) des Europium im Opalinuston während bei Abwesenheit von Tonorganika das Europium direkt am Säulenanfang adsorbiert wurde.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Sorptionsuntersuchungen von Uran unter Ausschluss von Kohlendioxid (Argonatmosphäre). Untersuchungen zur Speziation von Europium mit HA und natürlicher Organik (z. B. Lactat) mittels CE-ICP-MS. Einfluss von Tonorganika 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 eine ortsaufgelöste Analytik der Tonsäulen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Möser Ch., Kautenburger R., Beck H.P. (2009) Research contributions for a potential radioactive waste disposal in deep geological clay formations. From Molecules to Materials, Dudweiler (Vortrag).

Kautenburger, R. (2009) Influence of metal concentration and the presence of competing cations on europium and gadolinium speciation with humic acid analyzed by CE-ICP-MS. TraceSpec2009, Mainz (Vortrag).

Kautenburger, R. (2009) Untersuchung des Einflusses geochemischer Parameter auf das Komplexierungsverhalten von Lanthanoiden und Huminsäure mittels CE-ICP-MS. GDCh-Jahrestagung der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie 2009, Trier (Vortrag).

Kautenburger R., Möser Ch., Thomas, M., Beck H.P. (2009) Lanthanide Migration in Natural Clay Formations - From Mineral Suspensions to Compact Clays. Verbund-Workshop, Mainz (Vortrag).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10206</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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, Universität des Saarlandes, IIF Leipzig sowie der TU München. Außerdem werden Zuarbeiten von der TU Graz, Inst. für Analytische Chemie und Radiochemie geleistet.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Charakterisierung relevanter Tongesteinsproben.
- AP2: Diffusionsuntersuchungen von Actiniden und Analoga. Als stationäre Phase werden Tongestein aus Mt. Terri (Opalinuston) untersucht. Als mobile Phase dient ein synthetisches Porenwasser.
- AP3: Speziation der Actiniden in der mobilen Phase.
- AP4: Speziation der Actiniden im Ton: bestimmt wird die räumliche Verteilung der Actiniden in der Tonmatrix nach Diffusionsversuchen mit begleiteten Grundlagenuntersuchungen zur Actiniden-Tonorganika / Humat-Komplexierung.
- AP5: Synthese des natürlichen Systems aus reinen Komponenten.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Um die Sorption von dreiwertigen Actiniden an Tongestein zu verstehen, wurden begleitende Sorptions-Untersuchungen von Cm(III) und Eu(III) an natürlichen und synthetischen Kaolinit (Bestandteil des OPA-Tones) sowie an TiO<sub>2</sub> (Wichtiger Nebenbestandteil von Tongestein) durchgeführt. Im Vergleich zu früheren Sorptions-Untersuchungen wurde der pH-Wert auf 13 erweitert, um die Verhältnisse, die bei einer Zementkorrosion auftreten, zu simulieren. Die Sorptionsuntersuchungen von Cm(III) wurden begleitend mittels zeitaufgelöster Fluoreszenzspektroskopie (TRLFS) untersucht. Zwischen natürlichen und synthetischen Kaolinit gibt es keinen Unterschied im Sorptionverhalten von Eu(III) bei niedriger Metallionen-Konzentration ( $6.6 \times 10^{-8}$  M) im pH-Bereich  $> 5$ . Bei höheren Eu(III)-Konzentrationen ( $6.6 \times 10^{-6}$  M) kommt es zu einer Verschiebung der „pH-Edge“ von einer pH-Einheit in den sauren Bereich, hervorgerufen durch Sättigung und Heterogenitäten der Bindungsstellen. Zwei Sorptionsmechanismen werden pro-



pagiert:

1) Sorption über Ionenaustausch an permanent negativen Bindungsstellen bei niedrigem pH und geringer Ionenstärke; 2) Sorption über Oberflächenkomplexierung an Si-OH-Gruppen, vorwiegend im mittleren und hohen pH-Bereich. Die permanente Ladung im Kaolinit wird durch einen Austausch des  $\text{Si}^{4+}$  durch  $\text{Al}^{3+}$  hervorgerufen. Bei pH-Werten  $< 5$  zeigt der natürliche Kaolinit (~25 %) eine höhere Sorption des Eu(III) als der synthetische (~ 0-5 %). Dies wird durch ein höheres gemessenes  $\xi$ -Potential und damit einer höheren Anzahl an negativen Bindungsstellen des natürlichen Kaolinit bestätigt. In den TRLFS-Spektren werden für Cm(III) neben dem  $\text{Cm}^{3+}$ -Ion, vier weitere Spezies identifiziert, für den natürlichen wie für den synthetischen Kaolinit (598.8, 602.6, 607.4 und 610.9 nm). Die Verteilung der vier Spezies in Abhängigkeit vom pH-Wert ist für beide Kaolinit-Typen sehr ähnlich. Drei dieser Spezies sind in ihren spektroskopischen Eigenschaften sehr ähnlich und zeigen 4.3-5  $\text{H}_2\text{O}/\text{OH}$ -Einheiten in der ersten Koordinationssphäre des Metallions. Die vierte Spezies kann mit einem Einbau des Metallions in das Kaolinitgitter durch Oberflächenausfällung erklärt werden, die nur bei pH-Werten größer als 9 stattfinden.

Weiterhin wurde die Sorption von Eu(III) und Lu(III) an  $\text{TiO}_2$  durchgeführt. Hierbei wurde die pH-, Ionenstärke- und Metallionenkonzentrations-Abhängigkeit untersucht sowie EXAFS und TRLFS angewandt. Die Sorptionsuntersuchungen zeigen keine Ionenstärkeabhängigkeit der Eu(III)- und Lu(III)-Sorption, was auf eine starke Bindung hindeutet. EXAFS zeigt eine Koordination von Eu(III) mit 8-9 Wassermolekülen und Oberflächenhydroxo-Gruppen. Zusätzlich deuten die Ergebnisse auf eine monodentate „Innersphere“-Oberflächenkomplexierung hin. Ergebnisse aus der Literatur mittels verschiedenen Röntgenmethoden finden allerdings für die Sorption von dreiwertigen Metallkationen an Rutil einen tetradentaten Oberflächenkomplex. Um die Metallionen-Sorption modellieren zu können wurde zuerst für das  $\text{TiO}_2$  ein Säure-Base-Modell aufgestellt, basierend auf den Ergebnissen aus potentiometrischer Titration und  $\xi$ -Potentialmessungen. Das Säure-Base-Verhalten des  $\text{TiO}_2$  konnte hierbei mit dem sogenannten MUSIC-Typ-Modell erfolgreich beschrieben werden. Allerdings konnte mittels Modellierung und den Ergebnissen der EXAFS, TRLFS die Natur des Innersphere-Oberflächenkomplexes (Monodentat oder Tetradentat) nicht geklärt werden.

Der Einfluss von Huminstoffen auf die Migration von Radionukliden wird mittlerweile seit mehr als 20 Jahren in nationalen und internationalen Projekten untersucht. Als Resultat muss man festhalten, dass zur Komplexierung von Radionukliden durch Huminstoffen vielfältige und teilweise widersprüchliche Ergebnisse erhalten wurden, die in diversen Schlüssen und Ansichten resultierten. Im INE ist man deshalb zu dem Schluss gekommen, dass man den derzeitigen Wissensstand bewerten und wichtige Fragen zur Huminstoffwechselwirkung stellen muss, um weitere Arbeiten zielgerichtet und effektiv weiter fortzuführen. Basierend auf dieser Absicht wurde ein sogenannter „Expert View“-Bericht angefertigt der demnächst veröffentlicht wird.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Actiniden-Komplexierungsverhalten von extrahierten OPA-Kerogen, synthetischen Ton-Organika-Assoziaten und „kleinen“ organischen Molekülen werden untersucht.
- Batch-Sorptionsversuchen von Np, Pu und Tc mit OPA- und Cox-Ton wurden gestartet.
- Fortführung der Grundlagenuntersuchungen zur Redoxchemie von Neptunium mit Hydrochinonen und Huminstoffen.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

SCHÄFER, T.; MICHEL, P.; CLARET, F. The application of STXM and  $\mu\text{FT-IR}$  to characterize sedimentary organic matter in the Opalinus clay. *Journal of Physics: Conference Series* 186 (2009) S. 012095.  
 SCHÄFER, T.; MICHEL, P.; CLARET, F.; BEETZ, T.; WIRICK, S.; JACOBSEN, C. Radiation sensitivity of natural organic matter: Clay mineral association effects in the Callovo-Oxfordian argillite. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 170(2009) S.49-56

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10216</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 413.157,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kumke	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Interlanthanoid-Energietransfer in binären und ternären Systemen

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

AP3: Anisotropie von Huminstoffen in binären und ternären Systemen

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Verschiedene niedermolekulare Modellliganden wurden lumineszenzspektroskopisch im Temperaturbereich  $80 \text{ K} < T < 293 \text{ K}$  in Komplexen mit Eu(III) untersucht. Die Temperaturabhängigkeit des Asymmetrieverhältnisses, der Energie des  ${}^5\text{D}_0$ - ${}^7\text{F}_0$ -Übergangs sowie der Lumineszenzabklingzeit wurden ausgewertet. Aus der Temperaturabhängigkeit der Lumineszenzabklingzeiten wurden für verschiedene Komplexe die Aktivierungsenergien bestimmt. Diese Arbeiten werden für weitere Liganden fortgesetzt, um eine größere Datenbasis zu bekommen.

AP2:

Die Sensibilisierung („Antenneneffekt“) der Liganden wurde mit Hilfe der Transientenabsorptionsspektroskopie untersucht. Der direkte Nachweis der Sensibilisierung kann so erbracht werden. Der Einfluss von Redoxreaktionen auf die Photophysik der Liganden wurde mittels verschiedener Metallionen als Referenz um Eu(III) untersucht.

**AP3:**

Die intrinsische Huminstofffluoreszenz von HS verschiedener Ursprungsorte sowie unterschiedlicher Fraktionen (Fulvin- und Huminsäuren) wurde mit Hilfe der zeitkorrelierten Einzelphotonenzählung (time-correlated single photon counting) bei verschiedenen Emissionswellenlängen in An- und Abwesenheit von Europium(III) untersucht. Dabei wurden neben Messungen bei einzelnen Detektionswellenlängen auch zeitaufgelöste Fluoreszenzspektren gemessen, um den Einfluss der Emissionswellenlänge auf die beobachtete Abklingkinetik möglichst spektral-aufgelöst zu registrieren. Die Fluoreszenzabklingkurven – gemessen unter „magic-angle“ Bedingungen – wurden global nach verschiedenen kinetischen Modellen ausgewertet. Eine mögliche Erklärung für die beobachtete komplexe Zeitabhängigkeit der HS-Emission ist die Beteiligung von Energie- und Elektronentransferprozessen.

**AP4:**

Die Komplexierungskinetik von Eu(III) durch Huminstoffe verschiedener Ursprungsorte wurde in stopped-flow Experimenten anhand der Löschung der intrinsischen Huminstofffluoreszenz untersucht und mittels geeigneter empirischer kinetischer Modelle beschrieben. Die experimentellen Arbeiten sind abgeschlossen, die Modellierungen dauern an. Entsprechende Experimente bei erhöhten Temperaturen (bis 60 °C) sind in Vorbereitung.

**AP5:**

Mit der Messung von zeitaufgelösten Lumineszenzspektren in Gegenwart verschiedener Metallionen (Ca, Mg, Cu) und HS wurde die Komplexierung bzw. Verdrängung von Eu(III) aus den Huminstoffkomplexen untersucht. In den Experimenten wurde die Eu-Lumineszenz indirekt über den Liganden angeregt. Die Sensibilisierung der Eu-Lumineszenz war sehr effektiv und garantierte, dass nur im Komplex gebundenes Europium detektiert wurde. Die Experimente wurden mit HS verschiedener Ursprungsorte durchgeführt. Die experimentellen Arbeiten sind abgeschlossen, die Auswertung der Messungen in Gegenwart von Magnesium stehen noch aus.

**4. Geplante Weiterarbeiten****AP1a:**

Es werden geeignete Modellliganden für die aus den Tonmineralen mobilisierte Organika mittels zeitaufgelöster Lumineszenzspektroskopie (TRLFS) und Transienten-Absorptionsspektroskopie (TTA) untersucht, wobei Ln(III) (= Eu(III), Tb(III)) als natürliche Analoga der Actinoide und als Lumineszenzsonden eingesetzt werden. Diese Arbeiten sind in direkten Zusammenhang (und Anschluss) mit den bereits ausgeführten Lumineszenzuntersuchungen an Modellsystemen zu sehen. Folgenden Modellliganden sollen zusätzlich untersucht werden: Laktat, Propionat, Phenyllessigsäure-Derivate, Phenylpropionsäure-Derivate. Weitere können dann nach Rücksprache mit den Verbundpartnern integriert werden.

Es wird die (mögliche) intrinsische Lumineszenz der Liganden bzw. deren Absorptionsspektren und die extrinsische Lumineszenz der Ln(III)-Sonden gemessen (stationär und zeitaufgelöst). Dabei werden die spektralen Parameter (Extinktion, Lumineszenzintensität, Asymmetrieverhältnis, Lumineszenzabklingzeit usw.) als Funktion der Temperatur registriert und die Aktivierung bzw. Deaktivierung (z. B. Charakterisierung über Aktivierungsenergien) von ligandspezifischen Prozessen qualitativ und quantitativ beschrieben. Besonderes Augenmerk wird dabei auf den Temperaturbereich bis 60 °C gelegt werden.

**AP2a:**

Entsprechende temperatur- und pH-Wert-abhängige TRLFS- und TTA-Messungen werden – analog zu AP1a – mit unter verschiedenen Bedingungen gewonnenen Extrakten aus Tonmineralen durchgeführt. Die Extrakte und Tonorganika (z. B. Kerogen) werden von Verbundpartnern (INE bzw. IAARC) zur Verfügung gestellt.

Des Weiteren wird in AP2a eine Referenz-Fulvinsäure (Gohy FA) und kommerziell erhältliche Huminstoffe mit Hinblick auf die spezifischen Wechselwirkungen mit Ln(III) bei erhöhten Temperaturen und pH-Werten 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.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

Stefanie Kuke, Bettina Marmodée, Sascha Eidner, Uwe Schilde, Michael U. Kumke: Intramolecular deactivation processes in complexes of salicylic acid and glycolic acid with Eu(III), *Spectrochim. Acta A: Mol. Biomol. Spectrosc.* (2010), doi:10.1016/j.saa.2009.12.080.

Bettina Marmodée, Freck Ariese, Cees Gooijer, Michael U. Kumke: Spectroscopic investigation of Eu(H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub> and Eu(H<sub>2</sub>O)<sub>9</sub>, in Vorbereitung (2010)

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

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10236</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2006 bis 31.12.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 209.500,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Wieczorek	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben werden Rechenmodelle mit thermisch, hydraulisch und mechanisch gekoppelten Stoffansätzen zur Beschreibung der Langzeitentwicklung der Auflockerungszone (Extension Disturbed Zone EDZ) um Hohlräume in Endlagern für radioaktive Abfälle im Salzgestein überprüft und auf Basis gezielter Laborversuche weiterentwickelt. Sofern in Auswertung der Laborversuche und Modellrechnungen notwendig, ist beabsichtigt, sicherheitlich relevante Eigenschaften und Prozesse in die PA-(Performance Assessment) Modelle zu übernehmen.

Das Vorhaben wird im Rahmen des Projektes THERESA von der Europäischen Union gefördert und vom Projektträger PTKA-WTE co-finanziert. Das oben genannte deutsche Verbundprojekt umfasst die Arbeiten der GRS, Bereich Endlagersicherheitsforschung in Braunschweig, der DBE Technology in Peine und des IfG Leipzig.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erstellung eines Fragen- bzw. Aufgabenkatalogs (Issue Evaluation Table – IET) für die zielorientierte Bewertung und Verbesserung der Leistungsfähigkeit der vorhandenen Codes bzw. Modelle (wird von GRS und DBE Technology bearbeitet)
- AP2: Datensammlung zur Modellierung der Entwicklung und Rückbildung der EDZ sowie von hydraulisch-mechanischen Wechselwirkungen
- AP3: Modellkalibrierung und Integration der konstitutiven Modelle in die Rechencodes
- AP4: Benchmark-Laborversuch und Rechnungen mit dem modifizierten Stoffgesetz
- AP5: Durchführung von PA-Rechnungen unter Berücksichtigung der EDZ-Entwicklung (wird von GRS bearbeitet)
- AP6: Berichtserstellung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Issue Evaluation Table wurde finalisiert und in Deliverable D2 des THERESA-Projekts veröffentlicht.
- AP4: Die Ergebnisse der Modellierungsteams von IfG, CIMNE, DBETEC, TU Clausthal, FZK-INE, NRG und BGR zur Simulation des Benchmark-Laborversuches wurden im Deliverable D8 zusammengestellt.
- AP5: Die für die PA-Codes nötigen Eingabedaten zur Permeabilitätsentwicklung in der EDZ wurden durch Prozesslevel-Rechnungen mit CODE\_BRIGHT unter Verwendung des bei der Si-

mulation des Benchmark-Laborversuches verwendeten Modells ermittelt. Dabei wurde für jeden Zeitpunkt aus der Permeabilitätsverteilung um eine verschlossene Strecke ein äquivalenter Permeabilitätswert bestimmt, der den gleichen Fluss parallel zum Streckenverschluss zur Folge hat, und zwar für die Fälle „Nachschnitt der Streckenkontur“, durch den der Hauptteil der EDZ entfernt wird, bzw. „kein Nachschnitt“. Die resultierenden zeitabhängigen äquivalenten Permeabilitäten wurden im Modul LOPOS des TSPA-Code EMOS implementiert. Anschließend wurde der Laugenfluss durch die EDZ für verschiedene Szenarien mit LOPOS berechnet. Erwartungsgemäß zeigte sich, dass die Bedeutung der EDZ als Fließpfad höher ist, wenn die Kontur nicht nachgeschnitten wird, wenn die Permeabilität des Streckenverschlusses niedrig ist und wenn der Laugenzutritt frühzeitig erfolgt. Bei einem Nachschnitt der Streckenkontur unterschreitet unter Zugrundelegung des verwendeten Modells die äquivalente EDZ-Permeabilität die des Damms ( $10^{-19} \text{ m}^2$ ) nach wenigen Jahrhunderten, ohne Nachschnitt können mehrere Tausend Jahre erforderlich sein.

AP6: Der Abschlussbericht zu den gesamten Arbeiten der Salzgruppe im THERESA-Projekt wurde als Deliverable D9 fertiggestellt und der EU-Kommission übermittelt.

Die im Rahmen der Modellkalibrierung und Benchmark-Simulation erzielten Ergebnisse von THERESA wurden auf einer von den Projektteams von TIMODAZ und THERESA ausgerichteten Konferenz in Luxemburg (29.09.-01.10.2009) präsentiert. Bei einem damit verbundenen Workshop wurden Stand und offene Fragen der Salzforschung diskutiert und nachfolgend in einer schriftlichen Zusammenfassung dem Conference Chairman zur Erstellung von Konferenz-Proceedings übermittelt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Nationaler Abschlussbericht.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., Grupa, J., Kamlot, P., Keesmann, S., Herchen, K., Heemann, U., Olivella, S., Pudewills, A. (2009): Theresa project, Deliverable D8: Model Application on Laboratory Benchmark Test, Coordinated by Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, Germany, 31 August 2009.

Wieczorek, K., T. Rothfuchs, B. Förster, U. Heemann, S. Olivella, Chr. Lerch, A. Pudewills, P. Kamlot, J. Grupa, K. Herchen (2009): THERESA Deliverable D9, Coupled Processes in Salt Host-Rock Repositories - Final Report of Work Package 3, Coordinated by Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 30 November 2009.

Wieczorek, K., T. Rothfuchs, C.-L. Zhang, Th. Spiers, U. Heemann, S. Olivella, Chr. Lerch, S. Keesmann, A. Pudewills, P. Kamlot, J. Grupa, K. Herchen, Chr. Spiers (2009): Data Compilation and Lab Testing for Calibration and Improvement of Numerical THM Models for Rock Salt Repositories in the Frame of THERESA, Conference on the Impact of Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical (THMC) Processes on the Safety of Underground Radioactive Waste Repositories, Luxembourg, September 29 – October 1, 2009, Veröffentlichung in Vorbereitung.

Rothfuchs, T., O. Schulze, K. Wieczorek, D. Buhmann, N. Müller-Hoeppe (2009): Summary of Salt Group Discussions, Conference on the Impact of Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical (THMC) Processes on the Safety of Underground Radioactive Waste Repositories, Luxembourg, September 29 – October 1, 2009, Veröffentlichung in Vorbereitung.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10246</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2006 bis 31.10.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.10.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 74.878,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Lerch	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben werden Rechenmodelle mit thermisch, hydraulisch und mechanisch gekoppelten Stoffansätzen zur Beschreibung der Langzeitentwicklung der Auflockerungszone (Extension Disturbed Zone EDZ) um Hohlräume in Endlagern für radioaktive Abfälle im Salzgestein überprüft und auf Basis gezielter Laborversuche weiterentwickelt. Sofern in Auswertung der Laborversuche und Modellrechnungen notwendig, ist beabsichtigt, sicherheitlich relevante Eigenschaften und Prozesse in die PA-(Performance Assessment) Modelle zu übernehmen.

Das Vorhaben wird im Rahmen des Projektes THERESA von der Europäischen Union gefördert und vom Projektträger PTKA-WTE co-finanziert. Das oben genannte deutsche Verbundprojekt umfasst die Arbeiten der GRS, Bereich Endlagersicherheitsforschung in Braunschweig, der DBE Technology in Peine und des IfG Leipzig.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erstellung eines Fragen- bzw. Aufgabenkatalogs (Issue Evaluation Table – IET) für die zielorientierte Bewertung und Verbesserung der Leistungsfähigkeit der vorhandenen Codes bzw. Modelle (wird von GRS und DBE Technology bearbeitet)
- AP2: Datensammlung zur Modellierung der Entwicklung und Rückbildung der EDZ sowie von hydraulisch-mechanischen Wechselwirkungen
- AP3: Modellkalibrierung und Integration der konstitutiven Modelle in die Rechencodes
- AP4: Benchmark-Laborversuch und Rechnungen mit dem modifizierten Stoffgesetz
- AP5: Durchführung von PA-Rechnungen unter Berücksichtigung der EDZ-Entwicklung (wird von GRS bearbeitet)
- AP6: Berichterstellung

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

Zu den Arbeitspaketen 2 bis 4 wurden im Berichtszeitraum planmäßig keine Arbeiten durchgeführt. Für die Abschlusskonferenz „Impact of Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical (THMC) Processes on the Safety of Underground Radioactive Waste Repositories“, Luxemburg, 29.09.2009 bis 01.10.2009, und dem unmittelbar anschließenden Projekttreffen am selben Ort wurden die entsprechenden Präsentationen erstellt.

AP1: Die Issue Evaluation Table ist in Form des D2 aktualisiert und dem Projektkoordinator fristgerecht zugesandt worden. Darüber hinaus wurde der zusammenfassende Bericht D4 des Projektkoordinators geprüft.

AP5: Von DBE Technology wurden die Modellannahmen zur Durchführung der PA-Berechnungen bereitgestellt. Darauf aufbauende Berechnungsergebnisse wurden geprüft.

AP6: Die Zuarbeiten zu dem Projektabschlussbericht D9 des Arbeitspaketes WP3 wurden geleistet und dem Projektkoordinator des WP3 fristgerecht zugesandt. Der Abschlussbericht für den Projektträger Karlsruhe ist erstellt worden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP6: Endgültige Fassung des Abschlussberichtes erstellen.

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

Gemeinschaftliche Veröffentlichungen im Rahmen der TIMODAZ/THERESA-Konferenz 2009:

- Evaluation and Improvement of Numerical THM Modelling Capabilities for Rock Salt Repositories (THERESA project)
- Data Compilation and Lab Testing for Calibration and Improvement of Numerical THM Models for Rock Salt Repositories in the Frame of THERESA

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstraße 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10256</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2006 bis 31.10.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.10.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 62.389,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kamlot	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In dem Vorhaben werden Rechenmodelle mit thermisch, hydraulisch und mechanisch gekoppelten Stoffansätzen zur Beschreibung der Langzeitentwicklung der Auflockerungszone (Extension Disturbed Zone EDZ) um Hohlräume in Endlagern für radioaktive Abfälle im Salzgestein überprüft und auf Basis gezielter Laborversuche weiterentwickelt. Sofern sich in Auswertung der Laborversuche und Modellrechnungen die Notwendigkeit ergibt, ist beabsichtigt, sicherheitlich relevante Eigenschaften und Prozesse in die PA-(Performance Assessment) Modelle zu übernehmen.

Das Vorhaben wird im Rahmen des Projektes THERESA von der Europäischen Union gefördert und vom Projektträger PTKA-WTE co-finanziert. Das oben genannte deutsche Verbundprojekt umfasst die Arbeiten der GRS, Bereich Endlagersicherheitsforschung in Braunschweig, der DBE Technology in Peine und des IfG Leipzig.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erstellung eines Fragen- bzw. Aufgabenkatalogs (Issue Evaluation Table IET) für die zielorientierte Bewertung und Verbesserung der Leistungsfähigkeit der vorhandenen Codes bzw. Modelle (wird von GRS und DBE Technology bearbeitet)
- AP2: Datensammlung zur Modellierung der Entwicklung und Rückbildung der EDZ sowie von hydraulisch-mechanischen Wechselwirkungen
- AP3: Modellkalibrierung und Integration der konstitutiven Modelle in die Rechencodes
- AP4: Benchmark-Laborversuch und Rechnungen mit dem modifizierten Stoffgesetz
- AP5: Durchführung von PA-Rechnungen unter Berücksichtigung der EDZ-Entwicklung (wird von GRS bearbeitet)
- AP6: Berichterstellung



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

Die Arbeiten im zweiten Halbjahr 2009 konzentrierten sich auf die Beendigung der thermo-mechanisch gekoppelten Modellrechnungen, auf die Vorbereitung einer Internationalen Tagung in Luxemburg und das anschließende letzte Plenartreffen der THERESA-Arbeitsgruppe sowie auf die Erstellung des EU-Abschlussberichtes.

Anlässlich des Task Force Meetings am 26. Juni bei der GRS in Braunschweig wurde in einer Präsentation gezeigt, dass mit einem angepassten Parametersatz für den Stoffansatz Günther-Salzer die Simulation eines Benchmark-Tests (BMT B) bei der GRS in Braunschweig an einem zylindrischen Prüfkörper sehr gute Übereinstimmungen der berechneten Deformationen und Permeabilitäten mit den Messwerten lieferte. Als Basis für die Permeabilitätsermittlung diente die berechnete plastische volumetrische Deformation. Die Temperaturexpansion der Probe wurde im thermisch-mechanisch gekoppelten Rechenmodus von FLAC bestimmt. Diese Rechnungen wurden im zweiten Halbjahr bis zur letzten Druckstufe des Benchmark-Tests von GRS weitergeführt.

Für das in Luxemburg ausgestellte Poster sowie die abschließende PPT-Präsentation der Arbeitsgruppe THERESA wurden weiterhin Modellrechnungen mit dem Stoffansatz Minkley zur Spannungs- und Deformationsverteilung um eine untertägige Strecke im Steinsalz durchgeführt, deren Ergebnisse sehr gut mit In-situ-Permeabilitätsmessungen übereinstimmten.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Gemäß dem Arbeitspaket 6 im Arbeitsplan wird bis zum 30.04.2010 der Abschlussbericht des Vorhabens MOLDAU an den Projektträger PTKA-WTE übergeben.

Im Rahmen des von der EU geförderten Vorhabens THERESA sind der „Final Management Report“ und der „Final Activity Report“ zu erstellen.

Weiterhin sind die Fragebögen „Science and Society“, „Workforce Statistics“ sowie „Socio-Economic“ auszufüllen.

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

Präsentation des Posterbeitrages „EDZ Relevant THM Processes in Salt – Numerical Tools and Back Analyses (THERESA Project)“ zur Konferenz „Impact of THMC-Processes on the Safety of Underground Repositories“ vom 29.09. bis 01.10.2009 in Luxemburg

Teilnahme am „THERESA Final Plenary Meeting“ vom 01.10. bis 02.10.2009 in Luxemburg, PPT-Präsentation der Arbeiten des IfG

Co-Author des Vortrages „Data Compilation and Lab Testing for Calibration and Improvement of Numerical THM Models for Rock Salt Repositories in the Frame of THERESA“, zur Konferenz „Impact of THMC-Processes on the Safety of Underground Repositories“

Co-Author Deliverable 8: „Model Application on Laboratory Benchmark Test“, Date of Preparation 31.08.2009

Co-Author Deliverable 9: „Coupled Processes in Salt Host-Rock Repositories, Final Report of Work Package 3“, Date of Preparation 30.11.2009

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 778.575,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Rübel	

### 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

Das internationale Projekt PAMINA, dessen nationales Kofinanzierungsprojekt WESAM darstellt, wurde zum 30. September 2009 mit der Durchführung des Abschlussworkshops erfolgreich beendet. Im Rahmen des Abschlussworkshops wurden Arbeiten der GRS Braunschweig in sechs Fachvorträgen durch GRS-Mitarbeiter vorgestellt. Die Vorträge des gesamten Workshops sind unter <http://www.ip-pamina.eu/events.index.html> zum Herunterladen bereitgestellt. Nach dem 30. September wurden im Projekt PAMINA keine inhaltlichen Arbeiten mehr durchgeführt, sondern lediglich die Dokumentation der durchgeführten Arbeiten beendet. Alle öffentlichen Berichte des Projektes PAMINA werden nach einem Review des Steering Committees auf der Internetseite <http://www.ip-pamina.eu/publications/reports/index.html> zum Herunterladen zur Verfügung gestellt.

Im Projekt WESAM werden nach der Beendigung des Projekts PAMINA nur noch Arbeiten durchgeführt, die über das in PAMINA vorgesehene Arbeitsprogramm hinausgehen. Dies betrifft vor allem die Anwendung von Sicherheitsindikatoren im Ton (siehe AP3).

Die Arbeitsergebnisse im Berichtszeitraum in den einzelnen Arbeitspaketen sind:

- AP1: Fertigstellung der Beiträge zum Bericht D1.1.3 zu den Themengebieten „Menschliche Einwirkungen“, „Biosphäre“ und „Kriterien für die Datenauswahl“ des dritten und letzten Blocks des Reviews sicherheitsanalytischer Methoden. Dieser Bericht ist noch nicht öffentlich zugänglich.  
Teilnahme am Treffen des Aktinidenverbands in Mainz.
- AP2: Die Dokumentation der Ergebnisse des gesamten Arbeitspaketes in den Deliverables D2.1.D.1 und D2.2.A.1 wurde abgeschlossen. Beide Berichte werden in Kürze auf der Internetseite des Projekts PAMINA zur Verfügung gestellt.
- AP3: Fertigstellung des Deliverable D3.4.2 (s. u.) „Safety Indicators and Performance Indicators“ mit den Ergebnissen aller Projektpartner im PAMINA Arbeitspaket 3.4.
- AP4: Fertigstellung der Modellierung des konvektiven Schadstofftransports in einer Strecke mit den Programmen REPOS und  $d^3f$  und Vergleich der Ergebnisse mit jenen, die von NRG berechnet wurden. Es zeigt sich, dass die Modellierung des konvektiven Schadstofftransports in REPOS die erwarteten Schadstoffströme nicht adäquat beschreibt und eine Weiterentwicklung von REPOS/LOPOS in diesem Bereich erforderlich ist. Die Ergebnisse aller drei Benchmarkrechnungen wurden im Deliverable D4.1.1 dokumentiert (s. u.).  
Die Arbeiten zur Kopplung von  $r^3t$ / PHREEQC wurden durch das Steinbeis Institut fortgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Fortsetzung der Arbeiten zur Berechnung der Sicherheitsindikatoren für das Endlagersystem im Tonstein.
- AP4: Fortsetzung der Arbeiten zur Kopplung von  $r^3t$  und PHREEQC.  
Erstellen des Abschlussberichts für WESAM.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Buhmann, D.; Grupa, J.; Hart, J.; Hirsekorn, R.-P.; Ionescu, A.; Lerch, C.; Rübel, A.; Schneider, A.; Schröder, T.J. (2009): Report on the benchmarks on rock salt. PAMINA Deliverable D4.1.1. (<http://www.ip-pamina.eu/downloads/pamina4.1.1.pdf>)
- Rübel, A. (2009): PA approaches based on different geometric complexity of modelling for the far field of a repository in salt. PAMINA Deliverable D4.2.1. (<http://www.ip-pamina.eu/downloads/pamina4.2.1.pdf>)
- Becker, D.-A.; Cormenzana, J.L.; Delos, A.; Duro, L.; Grupa, J.; Hart, J.; Landa, J.; Marivoet, J.; Orzechowski, J.; Schröder, T.-J.; Vokal, A.; Weber, J.; Weetjens, E.; Wolf, J. (2009): Safety Indicators and Performance Indicators. PAMINA Deliverable D3.4.2. (<http://www.ip-pamina.eu/downloads/pamina3.4.2.pdf>)

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 im 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 Oktober 2009 wurde das Visualisierungswerkzeug für Kluftoberflächen in GRAPE auf 3-dimensionale Elemente erweitert. Eine der zentralen Aufgaben bestand darin, dass die Kluftgeometrien nur implizit zur Verfügung stehen. In einem Postprocessing-Schritt werden nun die Kluftgeometrien der 3-dimensionalen Elemente rekonstruiert und in einem passenden Datenformat, welches in GRAPE implementiert wurde, gespeichert. Dabei werden die Klüfte als niederdimensionale Subdomains behandelt.

Neben der eigentlichen Visualisierung der Kluftgeometrien wurde an verschiedenen Integrationsmethoden in GRAPE weiterentwickelt. Zum einen ist es nun auch möglich über Elemente mit höherer Ordnung zu integrieren. Außerdem wurde die Massenintegrationsmethode bzw. Isolinien-Visualisierungsmethode so auf Subdomains erweitert, dass nun eine Funktionsdarstellung auf der Kluft möglich ist. Da die Bilanzierung nun auf der Kluft möglich ist, können nun neben der Kluftgeometrien an sich auch hier Daten in der 3-dimensionalen Kluft dargestellt werden. Somit ist die Implementation der Kluftzeichenroutinen abgeschlossen. Die Stelle von Frau Dipl. Math. läuft noch bis Ende Februar 2010, zu welchem Zeitpunkt auch alle Entwicklungsarbeiten in GRAPE abgeschlossen sein werden.

Auf Grund der kostenneutralen Verlängerung des Projektes wird die Arbeitsgruppe Kröner noch bis September 2010 an der Weiterentwicklung von zeitabhängigen Kluftdatensätzen arbeiten.

### **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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 (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 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:*

Die Kluftzeichnungsroutrinen wurden in diesem Abschnitt für die Verwendung mit zeitabhängigen und dreidimensionalen Daten angepasst und erweitert. Hierzu musste in die Einlese-Routinen für die entsprechenden Datensätze aus  $d^3f$  und  $r^3t$  eingegriffen werden um die benötigte Funktionalität bereit zu stellen.

Des Weiteren wurde die Arbeit an den Darstellungsmethoden für numerische Daten mit Ansatzfunktionen höherer Ordnung fortgeführt. Dazu wurden als erster Schritt Konzepte zur Schnittstelle zwischen numerischen Daten und Grape erarbeitet und mit der Arbeitsgruppe Wittum abgestimmt und begonnen, diese in Grape umzusetzen.

Außerdem wurden verschiedene Wartungsarbeiten an Grape vorgenommen um die Bedienung und Methoden an die Bedürfnisse der Benutzer innerhalb dieses Projektes anzupassen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise weitergeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10316</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 Frankfurt (Prof. Wittum) durchgeführt. Zusätzlich ist auch das Steinbeis-Forschungszentrum (Dr. Heisig) über einen Unterauftrag eingebunden. 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 erweitert. Es wurde insbesondere untersucht, unter welche Bedingungen Heterogenität das System stabilisiert. Formulas für die effektiven longitudinalen und transversalen Diffusionskoeffizienten wurden hergeleitet. Die theoretischen Ergebnisse wurden durch numerische Berechnungen unterstützt.
- Das 'thermohaline Elder' Problem wurde implementiert und die erste numerische Simulationen durchgeführt.

Ergebnisse:

- Für instabile Systeme wächst der longitudinale Makrodispersionskoeffizient wächst unbeschränkt, was plausibel ist, da diese Größe das Fingerwachstum beschreiben sollte. Diese Finger wachsen unbeschränkt im Falle instabiler Strömungen.
- Heterogenität stabilisiert wenn die Korrelationslänge der Heterogenitäten kleiner ist als die kritische Länge ('wavenumber') der Instabilitäten ist. In diesem Fall induzieren Heterogenitäten größere Mischung, die ihrerseits stabilisierend wirkt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

Zunächst ist geplant:

- Das Paper *Stability of density-driven flows in heterogeneous media* by J. L. Musuuza S. Attinger, and F.A. Radu soll bei *Advances in Water Resources* eingereicht werden.
- Als nächster Schritt werden dann die Temperatureffekte im Stabilitätskriterium berücksichtigt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Das Paper *Stability of density-driven flows in heterogeneous media* by J. L. Musuuza S. Attinger, and F.A. Radu wird bei *Advances in Water Resources* eingereicht.

Ein Poster *Stability studies for density-driven flows in heterogeneous media* wurde beim NUPUS Konferenz in Stuttgart, Oktober 2009 präsentiert.

Ein Poster *A stability criterion for heterogeneous density-driven flows* wurde bei der DBG Konferenz in Bonn, September 2009 präsentiert.

Ein Vortrag wurde beim EduR Statustreffen im Oktober gehalten, zwei weitere im Seminar/Colloquium in Jena, bzw. UFZ in Leipzig.

Ein Abstrakt *The stability of haline density-driven flows in saturated heterogeneous porous media* wurde bei EGU Konferenz in Wien, Mai 2010 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 30.09.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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  $d^3f$ .

Wir haben ein Modell bearbeitet, das thermohalin-getriebene Strömung und Thermodiffusion zusammenbringt [1]. Die Simulationen wurden mit Hilfe des Software-Pakets  $d^3f$  durchgeführt. Die folgenden Probleme wurden betrachtet: (i) ein Elder-Problem; (ii) die Entwicklung eines Salz-Pakets in einem homogenen Gebiet; (iii) ein Mischungsproblem und (iv) eine Soret-Zelle. Der Effekt der Thermodiffusion ist nur in den Fällen (iii) und (iv) sichtbar, weil diese Probleme diffusions-dominierte Situationen darstellen. Beim Mischungsproblem wächst der durch Diffusion entstehende Mischungsbereich wegen des Soret-Effekts minimal schneller. Bei der Soret-Zelle wird der Effekt der Thermodiffusion dadurch gezeigt, dass der angelegte Temperatur-Gradient einen Konzentrations-Gradienten erzeugt bis sich beide Gradienten gegenseitig aufheben. Bei der Simulation der dichtegetriebenen Strömung in geklüfteten porösen Medien werden die Klüfte als niedrig-dimensionale Objekte betrachtet. Die Klüfte interagieren mit dem umgebenden dreidimensionalen Medium durch den Massenaustausch von Flüssigkeit und Stoffen. Um diese Interaktionen zu modellieren, haben wir eine Methode formuliert, die jede Kluft mit einem äquivalenten niedrig-dimensionalen Medium assoziiert. Die Methode basiert auf dem "Mittlung-entlang-der-Vertikalen"-Verfahren. Die Simulationen wurden mit Hilfe des Software-Pakets  $d^3f$  durchgeführt. Es wurden durch Klüfte modifizierte Varianten der zweidimensionalen Probleme von Elder und Henry simuliert. Unsere Ergebnisse zeigen, dass die Methode konsistent ist, solange die Breite der Kluft sehr klein ist.

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

Weitere Fortschritte in der numerischen Modellierung der freien Grundwasseroberfläche sind geschehen. Die Oberfläche wird mit einer Levelset-Formulierung beschrieben. Außerhalb des physikalischen Gebiets wird ein sogenanntes Ghost-Fluid-Verfahren verwendet. Um die Eingabe der Datei für die Benutzer leichter zu machen, werden die notwendigen Eingaben in der Nähe der Oberfläche von innen nach außen mit einer Extrapolation in Normalrichtung zur Oberfläche erweitert. Konkret wird die Grundwasser-Geschwindigkeit unter und auf der freien Oberfläche auf das ganze feste Gebiet numerisch extrapoliert. Mit dieser extrapolierten Geschwindigkeit wird dann die Levelset-Gleichung numerisch gelöst, um die Bewegung der Grundwasseroberfläche zu beschreiben. Wegen der guten Eigenschaften dieser extrapolierten Geschwindigkeit kann man eine sogenannte Reinitialisierung der Levelset-Funktion nach dem Advektionsschritt vermeiden. Auch die Verfahren für die Berechnung sogenannter Distanz-Funktionen wurden verbessert. Die Distanz-Funktion ist notwendig, um die Normalrichtung zur Oberfläche auf dem ganzen Gebiet richtig zu definieren. Diese Richtung kann man aus dem Gradienten der Distanz-Funktion berechnen. Es ist wichtig anzumerken, dass die Distanz-Funktion nicht für die (implizite) Beschreibung der Position der Oberfläche verwendet wird, wie es früher der Fall war, weil diese Beschreibung von der Beschreibung mit der Levelset-Funktion abweicht. Deswegen wird die Position der Grundwasseroberfläche immer nur mit der Levelset-Funktion definiert.

### 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).

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10336</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d <sup>3</sup> f und r <sup>3</sup> t		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 31.03.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 Wirtsformationen Ton und Kristallin auszudehnen, ist eine Weiterentwicklung zur expliziten Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen Voraussetzung. Bei der Modellierung von Einflüssen durch Klimaveränderungen kann der Wärmetransport nicht mehr vernachlässigt werden. Deshalb wird die Modellierung der Dichteströmung auf den Einfluss des Wärmetransportes ausgedehnt. Hierzu wird das Skalenverhalten von thermohalinen Strömungen in heterogenen Medien untersucht. Um Modellierungen im oberflächennahen Bereich zu ermöglichen, wird auch die Berücksichtigung von phreatischen und Potentialströmungen ermöglicht. Selbstverständlich werden auch Prä- und Postprozessoren zur Dateneingabe und zur Ergebnisdarstellung den erweiterten Anforderungen angepasst.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Freiberg (Prof. Kröner), der Uni Bonn (Prof. Rumpf) und der Uni 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

Mehrere Testfälle mit Klüften, Wärmetransport und freier Oberfläche, die bei der GRS bearbeitet werden sollen, wurden festgelegt. Zwei einfache Testfälle zur Matrixdiffusion in einem Kluft-Matrix-System wurden so weit aufbereitet, dass die Beschreibung einschließlich Parametern und analytischen Lösungen vorliegt. Zur Kluftproblematik soll ein aufwändigerer 3d-Testfall gerechnet werden, hierfür wurde umfangreiches Datenmaterial beschafft. Mit der Aufbereitung dieser Daten wurde begonnen.

Ein Unterauftrag zur Anpassung des Gittergenerators ARTE an die Erfordernisse der Kluftmodellierung wurde an das Steinbeis-Zentrum Ölbronn vergeben.

Am 19. Oktober 2009 fand in Frankfurt das 6. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten.

Die Implementierung der Dichteströmung innerhalb von Klüften im Rechenprogramm  $d^3f$  wurde überarbeitet und erweitert. Insbesondere wurden für die Klüfte, die sich mit den Rändern des Gebietes schneiden, die gleichen Arten der Randbedingungen implementiert wie für die volldimensionalen Teilgebiete. Die Diskretisierung wurde optimiert.

Eine erste Programmversion von  $d^3f$ , mit der die Modellierung von Klüften möglich ist, wurde im November von der GRS übernommen und installiert. Erste Testrechnungen wurden durchgeführt. Dabei wurden auch einige der neuen Funktionen von GRAPE getestet.

In einem Arbeitsgespräch am 16.12. in Frankfurt wurden Format und Inhalt der Eingabedateien für die Spezifikation der Klüfte, für den Wärmetransport und für die Parameter des Lösers abgestimmt. Detailfragen zu den Parametern und Abhängigkeiten für Kluftmodelle und Wärmetransport wurden diskutiert.

Mit einer Zusammenstellung von Stoffkenngrößen für die thermohaline Strömung als Funktion von Druck, Temperatur und Salinität wurde begonnen.

Ein Vorgespräch zur Entwicklung der graphischen Benutzeroberfläche wurde geführt. Favorisiert wird die Erstellung einer Oberfläche auf VRL-Basis durch das Steinbeis-Zentrum im Rahmen eines Unterauftrages.

### 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
- Definition von Schnittstellen für die geometrischen Modelldaten
- Detailplanung/Beschreibung der weiteren Testfälle
- Testrechnungen zu Klüften und Wärmetransport
- Fertigstellung der Zusammenstellung von Stoffkenngrößen für die thermohaline Strömung als Funktion von Druck, Temperatur und Salinität
- nächstes Statusgespräch am 12. April 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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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: Die aus der Korrosion von bestrahlten FR-BE entstandenen sekundären Phasen wurden von der Lösung separiert und aliquotiert. Die Aliquote wurde in einer 8 M Salpetersäure vollständig gelöst und die darin enthaltenen Radionuklide identifiziert. Aufgrund dieser Ergebnisse konnten die molaren Löslichkeiten der Radionuklide bestimmt werden.
- AP2: Die sekundären Phasen, die nach vollständiger Korrosion von unbestrahlten FR-BE in der  $\text{MgCl}_2$ -reichen Salzlauge entstanden sind, wurden in Korngrößenfraktionen aufgeteilt und mittels REM-EDX und XRD untersucht. Für den  $\text{UAl}_x\text{-Al}$ -Typ konnten die kristallinen Bestandteile in den einzelnen Korngrößenfraktionen identifiziert werden.
- AP3: Sorptionsuntersuchungen mit unterschiedlichsten Radionuklidspezies an den synthetisierten Mischkristall-LDH-Verbindungen zeigten im Vergleich zur „reinen“ Mg-Al-LDH-Verbindung eindeutig höhere Rückhaltekapazitäten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Erstellen des Abschlussberichtes.
- AP2: Erstellen des Abschlussberichtes.
- AP3: Erstellen des Abschlussberichtes.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

H. Curtius, K. Ufer, K. Dardenne,  
*Preparation and characterization of Zr-IV-containing Mg-Al-Cl layered double hydroxide*,  
 Radiochim. Acta, **97**, 423-428, (2009)

B. Hansen, H. Curtius, R. Odoj.  
*Synthesis of a Mg-Cd-Al layered double hydroxide and sorption of selenium*, Clays and Clay Minerals, **57**, 330-337, (2009)

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 organi-



siert. 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 extern vergebenen Auftrag an die Fa. BREDEX wurden die Anbindung an die Oracle-DB und die Realisierung der Benutzerschnittstelle weitgehend abgeschlossen. Die Abnahmetests seitens GRS sind weitgehend abgeschlossen.

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

- LOPOS (Nahfeld-Modul) und einige Segment-Module (für ein Anwendungsbeispiel)
- Datenbasis-Module
- Statistik-Module.

Mit der Anpassung von LOPOS an die neue Schnittstelle (JSON-Format) wurde begonnen.

Die Scripts zur Steuerung des Rechenablaufs lokal und remote wurden realisiert.

Das Konzept für die Realisierung der statistischen Rechenläufe wurde ausgearbeitet. Das Modul zur automatischen Integration der im Tool Simlab generierten statistischen Daten in die EMOS-Eingabedatei wurde umgesetzt (C++).

Es wurde mit der Umstellung der CHET-Familie (Fernfeld) auf das neue Konzept begonnen.

Der erste Entwurf für das neue effiziente Ausgabe-/Austauschformat für die Rechenergebnisse wurde erstellt.

Moderne Technologien für die Softwareentwicklung wurden eingeführt (C++, Versionsmanagement, Eclipse-Entwicklungsumgebung, Logging,...).

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Module der CHET-Familie und der Biosphäre (in Fortran) sollen an die neue Schnittstelle und das neue Datenaustauschformat angepasst werden.

Für statistische Rechenläufe soll realisiert werden:

- Modul (in C++) zur Generierung der Eingabedatei für das Tool Simlab aus den in EMOS gemachten Angaben
- Steuerung des Ablaufs von statistischen Rechenläufen bei lokaler und remote Ausführungen.

Konzipierung der neuen Datenstrukturen und ihre Umsetzung in C++ für die CHET-Familie. Danach folgen die Module für die Biosphäre.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10377</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2007 bis 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009
<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 Untertagelabor 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

*Bohrlochverformungsmessung:* Die in einem 18 m tiefen horizontalen Bohrloch parallel zur Schichtung in der DR-Nische im Mont Terri URL eingebaute Dilatometersonde registriert kontinuierlich Daten zur zeitabhängigen Bohrlochverformung, Temperatur und Luftfeuchte. Der inaktive Wegaufnehmer konnte nicht regeneriert werden, die anderen beiden zeigen seit Juni 2009 eine kontinuierliche Abnahme des Bohrlochdurchmessers.

*Modellierung des Mine-By-Tests:* Um im Rahmen einer numerischen Simulation die hydro-mechanische Reaktion des Opalinustongesteins auf die Auffahrung und Ventilation der Strecken möglichst umfassend abbilden zu können, ist die Verwendung eines dreidimensionalen Berechnungsmodells unerlässlich. Dazu ist im Berichtszeitraum in einem ersten Schritt ein vereinfachtes dreidimensionales Berechnungsmodell für einen kreisförmigen Streckenquerschnitt erstellt worden mit dem der Streckenauffahrungsprozess sukzessiv simuliert werden kann. Die mit einem elastisch- hydro-mechanisch gekoppelten Stoffmodell ermittelten Ergebnisse der numerischen Simulation sind den Messbefunden für den totalen Porenwasserdruck der im Bereich der Ortsbrust der Gallery'04 installierten Bohrlöcher (BEZ-G) gegenübergestellt worden. Bei der angesprochenen dreidimensionalen numerischen Simulation mit sukzessiver Streckenauffahrung ergeben sich somit für einen Vergleich mit In-situ-Messbefunden als relevante Berechnungsergebnisse das Spannungs-/Verformungsverhalten der Gesteinsmatrix als Reaktion auf den Auffahrungsprozess sowie die aus der Deformation der Gesteinsmatrix resultierenden Porenwasserdruckänderungen. Hieraus entstehende Porenwasserdruckdifferenzen werden im Rahmen von transienten Strömungsprozessen abgebaut.

*Laboruntersuchungen:*

- Ein Quellversuch wurde an einer Tonprobe bei Begrenzung der Axialverformung und ohne Radialbeanspruchung zur Messungen des axialen Quelldrucks und der radialen Quellverformung durch Befeuchtung mit Wasserdampfung über 9 Monate fortgeführt. Ein maximaler Axialquelldruck von 10,5 MPa und eine maximale Radialverformung von über 6,5 % wurden bei 100 % Luftfeuchtigkeit gemessen.
- Zwei triaxiale und sechs einaxiale Kriechversuche wurden bei unterschiedlichen Belastungen gestartet und fortgeführt.
- Die Messungen der Wasserpermeabilität erfolgten durch Injektion von synthetischem Tonwasser in 5 stark geschädigten Tonproben bei Temperaturen von 20 bis 90 °C und Manteldrücken von 2 bis 3,5 MPa bislang über 1,5 Jahre. Die Erhöhung des Manteldrucks führte zur starken Reduzierung der Wasserpermeabilität von 10-17 m<sup>2</sup> auf 10-20 m<sup>2</sup>. Die Temperaturänderung bewirkte kaum keine Permeabilitätserhöhung.
- Fünf Kompaktionsversuche am Rückstand aus der Streckenauffahrung wurden im Oedometer bei unterschiedlichen Belastungsgeschwindigkeiten durchgeführt.

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

- Erstellung eines Zwischenberichts über das Mine-By-Experiment und die Modellierung
- Weiterführung des Bohrlochttests zur Langzeitverformungen im Mont-Terri-URL
- Modellerstellung für Vergleich mit Dilatometermessungen in einem Bohrloch
- Weiterführung der Kriechversuche, Quellversuche und Permeabilitätsmessungen
- Weiterführung der Kompaktionsversuche am Ton-Rückstand als Versatzmaterial

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

Zhang, C.-L., Wieczorek, G, Rothfuchs, T, Armand, G, Lebon, P (2009): Responses of the Opalinus Clay to Heating during the HE-D Experiment at Mont Terri, the international conference & workshop in the framework of EC TIMODAZ & THERESA projekts, 29.09 – 01.10.2009, Luxembourg

Czaikowski, O., Lux, K.-H. (2009): Laboratory and modelling research into geomechanical-geohydraulic interactions in claystone rock mass. EC-TIMODAZ-THERESA THMC conference, 29.09. – 01.10.2009, Luxembourg

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10417</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2007 bis 30.06.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 345.283,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Bernhard	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das Komplexsystem von Eu(III) mit Pyromellitsäure (1,2,4,5-Benzentetracarboxylsäure, BTC) wurde temperatur-, pH- und konzentrationsabhängig (25-60 °C, pH 5-7,  $c[\text{Eu}] = 10^{-5}$  bis  $10^{-3}$  M) mit TRLFS und ITC (Isothermal Titration Calorimetry) näher untersucht. Dabei zeigten TRLFS und ITC übereinstimmend, dass Eu unter bestimmten Bedingungen mit BTC polymerisiert. Die Polymerisation (bei pH 7 schon bei RT) ist noch stärker endotherm als die Komplexbildung ( $\Delta H = 47$  kJ/mol bei 60 °C; zum Vergleich: Komplexbildung bei 25 °C 18 kJ/mol) und verläuft langsamer.

Analoge temperaturabhängige Untersuchungen von Am(III) mit BTC mittels LWCC-UV-Vis bei pH 5,0 zeigen eine leichte Temperaturabhängigkeit der Stabilität des 1:1 Komplexes und des 1:2 Komplexes. Da die Schwankungen in den Stabilitätskonstanten zwischen gleichartigen Messungen zu groß sind, ist eine Errechnung der thermodynamischen Parameter  $\Delta H$  und  $\Delta S$  derzeit noch nicht möglich.

Erste TRLFS-Testmessungen zur Komplexbildung von Eu(III) mit Lactat und weiteren substituierten Benzoesäuren (als Vergleich zu BTC und Salicylsäure) wurden durchgeführt.

Die Bestimmung der thermodynamischen Daten der Komplexbildung von Eu(III) mit Salicylsäure mittels ITC war nicht möglich, da die Komplexbildung zu schwach ist.

Durchführung von temperaturabhängigen Batch-Experimenten (AP3) von Eu(III) an Opalinuston in Porenwassermedium und in 0,42 M  $\text{NaClO}_4$  bei pH = 7,6 ( $T = 15$  bis  $55$  °C,  $[\text{Eu}] = 1\text{-}5 \cdot 10^{-9}$  M). Unter den gegebenen Bedingungen verläuft die Sorption von Eu(III) am Opalinuston leicht endotherm mit  $\Delta H \sim 47 \pm 7$  kJ/mol im Porenwasser und  $\Delta H \sim 20 \pm 7$  kJ/mol in  $\text{NaClO}_4$ , die  $K_d$ -Werte werden mit steigender Temperatur größer (von 4,5 bis 5,4 im Porenwasser, von 5,4 bis 5,8 in  $\text{NaClO}_4$ ). Eine Auswertung der Sorptionsisothermen mit dem Freundlich-Modell ist möglich, jedoch wird der Anstieg mit steigender Temperatur größer (von  $\sim 1$  bei  $T = 15$  und  $25$  °C auf  $\sim 1,4$  bei  $T = 40$  °C und  $\sim 2$  bei  $T = 50$  °C).

### 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)
- Abschluss der Arbeiten zu thermodynamisch-UV-Vis-spektroskopischen Untersuchungen der Komplexsysteme Eu(III)/Am(III) mit Weinsäure, Pyromellitsäure, Citronensäure und Salicylsäure: Prüfung der Daten auf Reproduzierbarkeit (Publikation)
- temperaturabhängige TRLFS-Messungen von Am(III) mit den bereits mit Eu(III) untersuchten Liganden

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

#### Konferenzbeiträge

Astrid Barkleit, Margret Acker, Steffen Taut, Gert Bernhard: "Time resolved fluorescence spectroscopy of Eu(III) complexes with benzoic acid derivatives at elevated temperatures".

M. Müller, M. Acker, S. Taut, G. Bernhard: "UV-Vis Spectroscopy of Eu(III) and Am(III) Complexes with Small Organic Acids at Variable Temperatures", „MIGRATION 2009“, 20.-25.09.2009, Kennewick, Washington, USA.

"Americium-Citrat-Komplexierung“, M. Müller, M. Acker, S. Taut, G. Bernhard, GDCh-Fachgruppentagung Nuklearchemie, 30.08.-02.09.2009, Frankfurt a.Main, Deutschland

<b>Zuwendungsempfänger:</b> TU Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10427</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2010		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009
<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

AP2/3: Durchführung/Begleitung der zweiten Bohrkernbeschaffungskampagne sowie Durchführung von Wiederholungsmessungen und ersten Messungen in den Bohrlöchern der neuen Kernbohrungen am Standort Tournemire in Absprache mit IRSN.

AP5: Durchführung eines langzeitlichen Versuchs an Bohrkernmaterial der Lokation Tournemire mit situationsbedingter Adaption der Randbedingungen zur Identifizierung der lagerungsbedingten Ausprägung der hydraulischen Verhältnisse (Porenwasserdruck); Planung eines weiteren laborativen Versuchsprogrammes und Durchführung erster Kurzzeitversuche/Start erster Langzeitversuche aus diesem Programm an Bohrkernmaterial der Lokation Tournemire (u. a. UCc mit Befeuchtung; Bruch trotz verminderter Lastaufbringung, Last deutlich unterhalb rechnerisch ermittelter Bruchfestigkeit); Fortführung der Resättigung von Prüfkörpern in Zwischenlagerungsbehältern.

AP8: Durchführung weiterer Berechnungen am 3D-Modell des Querstollens 2003 zur Simulation des von IRSN bei dessen Auffahrung durchgeführten „Mine-by-Tests“.

AP9: Gegenüberstellung von Ergebnissen aus der 3D-Simulation aus AP8 mit Arbeiten aus AP1.

AP10: Präsentation der Ergebnisse im internationalen Rahmen (Luxemburg, 29.9.09, Poster).

AP11: Dokumentation weiterer Simulationen (Streckengeom., Zeitabhängigkeit, 3D-Modell).

### 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; Durchführung weiterer Versuche an Bohrkernmaterial der Lokation Tournemire zur Identifizierung der lagerungsbedingten Ausprägung der hydraulischen Verhältnisse (Porenwasserdruck, Wassergehalt); Porenwasserdruckmessung während der Versuche.

AP6: Ableitung von zeitabhängigen Materialkennwerten.

AP7: Erstellung eines zweidimensionalen, bzgl. der Schichtungsorientierung parametrisierbaren Modells für die vermessenen Bohrlöcher der Lokation Tournemire.

AP8: Weiterführende Herausarbeitung grundsätzlicher numerischer Erfahrungen im Tonsteingebirge durch Stoffmodell-/Parametervariation an Referenzmodellen aus AP7.

AP9: Nach Ableitung zeitabhängiger Materialkennwerte (AP6) Gegenüberstellung der Ergebnisse weiterer Variationen aus AP8 mit Arbeiten aus AP1 (Mine-By-Test) und Messungen aus AP3 (Bohrlochdeformationen); Optimierung des Kriechbruchkriteriums und Untersuchung des Langzeittragverhaltens.

AP10: Diskussion der Ergebnisse im internationalen Rahmen (Nantes, 29.03.2010).

AP11: Fortführung der Dokumentation der Forschungsarbeiten, Generalisierung der Befunde, Weiterführung der Arbeiten zum Abschlussbericht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

*Lux, K.-H.; Rutenberg, M. (2010): Numerical simulation of the time-dependent deformation behaviour of claystone rock mass with 2D and 3D models. Tagungsbericht der ANDRA-Konferenz vom 29.03.-01.04.2010. In Vorbereitung.*

<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 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 hoch verdichteten 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*

Bis zum Ende des o.g. Berichtszeitraumes konnten die geplanten Versuche für Calcigel Bentonit mit destilliertem Wasser als Porenfluid abgeschlossen werden. Die Dauer eines Versuches zur Bestimmung der Durchlässigkeit beträgt etwa 3 bis 4 Monate.

#### *Theoretische Arbeiten*

Die Quelldrücke werden in Abhängigkeit der Porenzahl auf Grundlage der DDL-Theorie berechnet. Dies berücksichtigt die physikochemischen Eigenschaften des jeweiligen Bentonits sowie die Eigenschaften (Ionenkonzentration) des Porenfluids. Aus dem Vergleich der experimentell und theoretisch bestimmten Quelldrücke werden Aussagen über die Anwendbarkeit der Theorie getroffen. Weiterhin wurden im Berichtszeitraum verschiedene Modelle, welche bisher in der Literatur für die Berechnung der hydraulischen



Leitfähigkeit vorgeschlagen wurden, untersucht. Diese sind das Kozeny-Carman-Modell (Kozeny, 1927), das Cluster-Modell (Olsen, 1962) und das Laminar-Flow-Modell (Mitchell, 1993).

#### *Kozeny Carman (KC) Model*

Ein entscheidender Parameter in diesem Modell ist die Porenzahl. Deshalb wurden die im Modell verwendeten Porenzahlen variiert und folgendermaßen ermittelt:

- (a) Die Porenzahl  $e_{eff}$  wird durch Rückrechnung aus experimentell bestimmten hydraulischen Leitfähigkeiten unter Verwendung der Kozeny-Carman Gleichung bestimmt.
- (b) Die Porenzahl wird unter Verwendung der DDL-Theorie aus den experimentell bestimmten Quelldrücken berechnet. Dabei wurden die physiko-chemischen Eigenschaften (Kationenaustauschkapazität, spezifische Oberfläche, gemittelte Wertigkeit der austauschbaren Kationen) des jeweiligen Tons verwendet.
- (c) Analog zu (b), jedoch wurde nicht die gemessene, sondern eine reduzierte spezifische Oberfläche in den Berechnungen der Porenzahl aus den Quelldrücken angesetzt.
- (d) Chapuis (2003) hat das Kozeny-Carman-Modell für Kaoline und Illite verwendet. Seine Methode wurde für expansive Tone weiterentwickelt. Dadurch wurde eine bessere Übereinstimmung zwischen den experimentellen und berechneten hydraulischen Leitfähigkeiten erreicht.

#### *Cluster Model*

Das Konzept dieses Modells beruht im Wesentlichen auf der Unterteilung der globalen Porenzahl der Probe in eine Porenzahl, welche (1) dem Porenraum zwischen den Clustern,  $e_{macro}$ , und (2) dem Porenraum innerhalb der Cluster,  $e_{micro}$ , entspricht.

- (a) Im Rahmen des Modells verwendet Achari (1999) das Konzept der „echten“ effektiven Spannungen, welche die interpartikulären abstoßenden und anziehenden Kräfte auf Grundlage der DDL-Theorie berücksichtigt. Die Anwendung dieser Methode ist auf Tone mit geringer Trockendichte und entsprechend geringem Quelldruck begrenzt. Für mittel- und hochverdichtete Bentonite wurde eine verbesserte Übereinstimmung zwischen experimentellen und berechneten hydraulischen Leitfähigkeiten durch Ansatz eines modifizierten Parameters  $N$  (Parameter zur Ermittlung der Anzahl der Partikel pro Cluster) erreicht.
- (b) Die Methode nach Olsen (1962) wurde dahingehend erweitert, dass die Porenzahl auf der Micro-Skala auf Grundlage der Diffusen-Doppelschicht-Theorie berechnet wurde.

#### *Laminares Fließgesetz*

Komine (2008) schlägt vor, den Partikelabstand vom experimentell bestimmten Quelldrückverhalten des Bentonits abzuleiten. Aus dem Partikelabstand kann entsprechend die Porenzahl und daraus unter Ansatz des laminaren Fließgesetzes die hydraulische Durchlässigkeit berechnet werden. Diese Methode wurde auf die gewählten Versuchsrandbedingungen angepasst; der Partikelabstand wird aus den experimentell gewonnenen Porenzahl-Quelldruckbeziehungen abgeleitet und die hydraulische Leitfähigkeit berechnet.

#### *Ableitung empirischer Gleichungen aus den experimentellen Daten*

Parallel zu der Untersuchung und Weiterentwicklung der oben beschriebenen Modelle, welche die physikochemischen Parameter der Tone und/oder deren Struktur berücksichtigen, wurde die experimentell ermittelte Beziehung zwischen Quelldruck und hydraulischer Leitfähigkeit sowie zwischen Porenzahl und hydraulischer Leitfähigkeit statistisch ausgewertet. Empirische Gleichungen wurden daraus abgeleitet.

## **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fortführung der Laborversuche gemäß vorgeschlagenem Versuchsprogramm. Die oben beschriebenen Modelle können dann auf der Grundlage einer breiteren experimentellen Datenbasis weiter untersucht werden.

## **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine.

<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 31.05.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 180.978,00 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

AP6: Berichtslegung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Softwareentwicklung:

- Programmtestung

Hardware Oberflächenpacker:

- Konzipierung eines zweiten Oberflächenpackers
- Recherche zu gasdichten Flachdichtungen für Abdichtung des Prüfraums
- Ermittlung der Gaspermeabilität von hoch flexiblem Dichtungsmaterial (GEOpad - formstabiles, elastisches Gel für die Ankopplung von Akustiksensoren an den Salinarstoß)
- Auswahl, Kauf und Test Oberflächenschleifer für die Vorbereitung des Messortes

Hardware verlorener Drucksensor:

- Bau einer Testhülse für In-situ-Test in Bohrlöchern (70 mm)
- Konzipierung einer zweiten in situ (Bohrloch) einsetzbaren Einheit für den Einsatz in kleinerem Bohrlochquerschnitt (<70 mm)
- Bau einer Sendeeinrichtung für Reichweitetest Über- und Untertage
- Konzipierung, Auswahl einer Richtantenne und Einbindung in die Empfangs- und Sendeeinrichtung

Tests:

- Durchführung von laborativen Gaspermeabilitätsmessungen an unterschiedlichen Materialien – Sandstein, Holz, Magnesiabinder für die Beurteilung der Oberflächenpackermessungen
- Der entwickelte Oberflächenpacker und der verlorene Drucksensor wurden in der Grube Merkers getestet. Die Ergebnisse können wie folgt zusammengefasst werden:

Oberflächenpacker:

- Vor einer Messung ist die lokale Glättung der Oberfläche erforderlich
- Die angewendete Schleiftechnik ermöglicht eine entsprechende Oberflächenvorbereitung mit einem minimalen Abrieb von 2 bis 3 mm
- Das Versuchskonzept des Oberflächenpackers hat sich für Überdruckregime und Vakuumregime bewährt
- Es konnten Versuche zur Ermittlung der stoßnahen Permeabilität von Steinsalz durchgeführt werden

Verlorener Sensor:

- Nach operativen Modifikationen der Versuchsausrüstung war eine erfolgreiche Testung der Datenübertragung und der Sensorsteuerung im trockenen Steinsalz möglich
- Über größere Distanzen wurden eine Datenübertragung und Sensorsteuerung realisiert

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Fortsetzung des Projektes entsprechend Arbeitsprogramm (Abschnitt 2) mit den Arbeitspaketen 4 - 6. Schwerpunkte der weiteren Arbeiten sind In-situ-Tests in weiteren Grubengebäuden mit unterschiedlichen Gebirgsbedingungen und Weiterentwicklung Oberflächenpacker.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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 31.03.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 (UDEC, 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:

Arbeiten zur automatischen Generierung der Probengeometrie außerhalb PFC3D/3DEC: Die bisherigen Ergebnisse und Algorithmen der Zuschlagsmodellierung für PFC3D wurden vom MgO-Beton auf Asphalt übertragen. Problematisch war, dass das CPA-Gerät bei der Auswertung des Asphalt-Zuschlagsstoffes seine Auflösungsgrenze erreichte. Die erhaltenen Verteilungen sind daher stärker fehlerbehaftet als beim Beton, aber noch vertretbar.

Für die Kalibrierung der Komponente Zuschlag wurden die im Labor durchgeführten Einzelkorn-Druckversuche an ellipsoidförmigen Kugelclustern simuliert und die Festigkeitsparameter des synthetischen Materials adäquat eingestellt.

Noch in Bearbeitung befindet sich das für das heterogene Material Beton entwickelte und zum Teil bereits umgesetzte Kalibrierungskonzept.

Für Asphalt wurde ein Kontaktmodell entwickelt, welches das Burgers-Modell für viskoelastisches Kriechverhalten mit einer spannungs- und zeitabhängigen Veränderung der Kohäsionskräfte vereinigt. Dieses Modell wurde in C++ als nutzerdefiniertes Kontaktmodell (UDM) programmiert und steht PFC3D als DLL zu Verfügung.

Die Materialeigenschaften von Asphalt und der Druck-Kriechversuch wurden in das Simulationsprogramm implementiert.

Einen unerwartet großen Zeitraum nahmen Bemühungen ein, Bitumen-Kriechversuche stabil zu simulieren. Für die hierbei auftretenden gravierenden Stabilitätsprobleme des Servomechanismus zur Druckeinstellung wurde trotz zahlreicher Modifikationen des Algorithmus bisher keine befriedigende Lösung gefunden. Trotz weiterer Ansatzpunkte steht nicht mehr ausreichend Zeit zur Verfügung.

AP4:

Die verschiedenen Kriechversuche von Asphalt und Bitumen mit Feinanteil (Mörtel) wurden nach dem linear-viskoelastischen Burgers-Materialmodell ausgewertet. Dabei zeigten sich starke Schwankung der bestimmten Parameter (z. B. Maxwell-Viskosität bei Mörtel 50-100 %). Als Ursache wird gesehen: beim Kriechen (langsame, geringe Deformation) dominiert das nichtlineare (strukturviskose und thixotrope) Verhalten des Bindemittels. Versuche zur Bestimmung der Druckfestigkeit (schnelle, große Deformation, hohe Spannungen) zeigen vergleichsweise geringere Schwankung von 10 %, wobei das lineare Verhalten des Mineralkorns dominiert. Die Schwankungen der Versuchsergebnisse waren beim Asphalt noch stärker ausgeprägt als beim Mörtel. Durch die sehr lange Dauer der Kriechversuche (3-6 Wochen) ist die Anzahl der Versuche außerdem sehr begrenzt.

Druckfestigkeitsversuche an Asphalt (13 Proben bei 4 verschiedenen Stauchungsraten) zeigten bei hohen Stauchungsraten spröderes und bei geringen duktileres Verhalten.

AP6:

Das Simulationsprogramm wurde mit dem Sensitivitäts- und Optimierungstool optiSLang (dynardo GmbH Weimar) über Ascii-Files gekoppelt. Damit wurden Sensitivitätsanalysen für die mittels Simulation berechneten Materialparameter in Abhängigkeit von den eingegebenen Modellparametern durchgeführt (für MgO-Bindemittel und -Beton). Es ergaben sich Hinweise zur Modellkalibrierung.

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

AP1: Abgeschlossen.

AP2: Abgeschlossen.

AP3: Asphalt: stabile Simulation der Kriechversuche, Kalibrierung von Bitumen und Asphalt, ggf. Modifizieren des nutzerdefinierten Stoffgesetzes, Beton: Abschluss der Kalibrierung.

AP4: Weiterführen der Kriechversuche zur Verbesserung der Datenlage, rheologische Untersuchungen zur Quantifizierung des Bindemittel-Verhaltens bezüglich der Lagerdauer.

AP5: Abgeschlossen.

AP6: Fortführung der Sensitivitätsanalysen Makro- bezüglich Mikroparameter.

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

Keine.

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 ECO2N Zustandsgleichungsmodell des TOUGHREACT wird weiter für eine bessere Modellierung der CO<sub>2</sub>- und CH<sub>4</sub>-haltigen Laugensysteme entwickelt, getestet und validiert.

Die in TOUGHREACT implementierten Porositäts- und Permeabilitätsbeziehungen und Kluftbreite-Permeabilitätsmodelle sowie Zweiphasenfluss-Parameter sowie relative Permea-bilität und Kapillardruck, werden auf ihre Funktionalität getestet.

**AP3: Validierung mit Labordaten**

Die Validierung der oben beschriebenen Modifikationen in TOUGHREACT wird anhand der experimentellen 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:

Der geplante Forschungsaufenthalt in Berkeley, LBNL, Kalifornien wurde mit der finanziellen Unterstützung der Alexander von Humboldt Stiftung in Rahmen eines Feodor Lynen Forschungsstipendiums realisiert. Zweck dieser Reise war weitere Validierungsarbeiten des ISTec-Pitzer Moduls und mögliche Weiterentwicklung des Codes im Rahmen des Projektes. Die bisherigen ISTec-TOUGHREACT Arbeiten wurden mit den Entwicklern von TOUGH diskutiert. Für die Vergleichs- und Validierungsarbeiten wurde von LBNL die letzte Version von TOUGHREACT einschließlich Pitzer Module als „executable“ Code zur Verfügung gestellt. Die Vergleichsrechnungen, die auf vereinfachten physikalischen Konzepten basieren, wurden durchgeführt, die Ergebnisse wurden analysiert um die Abweichungen zu definieren und ggf. zu korrigieren. Die Validierung der oben beschriebenen Modifikationen in TOUGHREACT wurde anhand experimenteller Daten weiter bearbeitet.

**4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Projektarbeiten werden mit Arbeitspaket AP4 -Anwendung- fortgeführt.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

Die Projektergebnisse wurden teilweise bei Internationalen Tagungen (Conference on Impact of Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes on the Safety of Underground Repositories TIMODAZ and THERESA, 29 September to 1 October 2009, Luxembourg) vorgestellt.

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 von Arbeitsgesprächen mit FZD in Braunschweig und Leipzig.
- Die Literatur- und Datenbankrecherche für die Festlegung der zu betrachtenden Sorbat-Systeme wurde weitgehend abgeschlossen.
- Die Vorversuche für die Sorptionsexperimente wurden erfolgreich durchgeführt, die pH-Einstellung und -stabilität sowie Veränderungen der Mineralphasen untersucht und die zu betrachtenden pH-Bereiche, V/M-Verhältnisse und Konzentrationsbereiche festgelegt. Die Sorptionsversuche zum System Eu-Orthoklas wurden durchgeführt und ausgewertet.

#### AP2:

- Weiterführung der 1D-Modellrechnungen mit PHREEQC für eine Meerwasserintrusion unter Berücksichtigung von Lösungs-/Fällungs-Gleichgewichten und Ionenaustauschreaktionen mit der aktualisierten Datenbank.
- Festlegung des Konzepts zur Berücksichtigung der relevanten geochemischen Prozesse in  $r^3t$  und erste Abstimmung mit dem/n beteiligten Entwickler/n des Steinbeis-Institutes.
- Konzipierung und Durchführung eines Pilot-Versuchs zum U(VI)-Transport in einer quarzgefüllten Säule unter zeitlich / räumlich variierenden chemischen Bedingungen zur Überprüfung des weiterentwickelten Rechenprogramms  $r^3t$ .

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1:

- Abschluss der Literatur- und Datenbankrecherche für das Element Zinn und endgültige Festlegung der zu betrachtenden Sorbat-Systeme
- Weiterführung der Sorptionsexperimente mit den Elementen Ca, Cs und Eu an den Mineralphasen Muskovit und Orthoklas.
- Definition der in den Modellrechnungen zu betrachtenden Sedimente (Anteile der Mineralphasen) und Grundwassertypen in den unterschiedlichen hydrogeologischen Einheiten des Modellgebiets.

#### AP2:

- Detailplanung und Implementierung des Konzepts zur Berücksichtigung aller geochemischen Prozesse in  $r^3t$  durch das Steinbeis-Institut.
- Durchführung der Versuche zum U(VI)-Transport in einer quarzgefüllten Säule, Ermittlung von Orts- und Durchbruchkurven und Modellierung mit Phreeqc.

#### AP3:

- Fertigstellung der Modelle für die Strömungsrechnungen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Posterpräsentation auf ICEM'09-Tagung in Liverpool (11.-15.10.2009)

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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:

- Fertigstellung der Mineral- und Elementauswahl mit Berücksichtigung mineralogisch ähnlicher Phasen und chemischer Analoga für die Sorbentien zur Verbreiterung der Datenbasis
- Aktualisierung der thermodynamischen Datenbasis für die Lösungs- und Feststoffchemie, im wesentlichen auf Nagra/PSI und ANDRA sowie umfassender Literaturrecherche für Goethit, Hämatit und K-Feldspat basierend
- Erweiterung der Datensätze in der Sorptionsdatenbank RES<sup>3</sup>T nach umfänglicher Literaturrecherche und Erfassung der SCM-Parameter für die ausgewählten Mineral/Sorbens-Paare.
- Zusammenstellung der Einflussgrößen, die die Sorption im Wesentlichen bestimmen
- Einarbeitung in UCODE zur Parametervariation und Koppelung mit PHREEQC zur automatisierten Erzeugung mehrdimensionaler Kd-Matrizen, Testrechnungen in PHREEQC zur Kd-Berechnung

AP2:

- Entwicklung eines konzeptionellen Modells für die Variation der Einflussgrößen, deren wechselseitiger Abhängigkeit und den Stofftransport weiterer Komponenten / Elemente in r<sup>3</sup>t

AP4:

- Dokumentation der Auswahl standortspezifischer und thermodynamischer Einflussgrößen

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Komplettierung der Einflussgrößen sowie der SCM-Parameter einschließlich deren Bandbreiten
- Aufbau einer dezidierten ESTRAL-Datenbank im PHREEQC-Format
- Weitere Einarbeitung in die Software UCODE und PHREEQC
- Beginn der Erzeugung der Kd-Matrizen

AP2:

- Konzeptionelles Modell zur Variation der chemischen Stoffgrößen im r<sup>3</sup>t-Code
- Konzept zur Bearbeitung/Speicherung mehrdimensionaler, nicht-äquidistanter Tabellen

AP4:

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

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Posterpräsentation auf ICEM'09-Tagung in Liverpool (11.-15.10.2009)

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10538</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen – Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2008 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 907.527,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Herbert	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Porositäts- und Permeabilitätsänderungen in hochkompaktierten Bentoniten durch Oxidation von  $\text{Fe}^{2+}$  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 °, 80 ° und 120 °C mit dem Ziel, die Änderung der Bentoniteigenschaften mit der realen Fe-Korrosionsgeschwindigkeit bei erhöhten Temperaturen zu korrelieren.
- AP4: Montmorillonitumwandlung mit und ohne Eisen im geschlossenen und offenen System bei Umgebungstemperatur zur Überprüfung der von Herbert et al. 2008 postulierten Abhängigkeiten von Ladung und Quelldruck.
- AP5: Modellierung des reaktiven Stofftransports und der hydro-thermo-mechanisch-chemischen Wechselwirkungen zwischen Eisen und Bentonit.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1 und AP3: Im Berichtszeitraum wurden Versuche durchgeführt, bei denen MX80 10 % elementares Eisen zugesetzt wurde, auf eine Rohdichte von  $1,6 \text{ g/cm}^3$  kompaktiert und anschließend mit Opalinustonporenwasser, NaCl- und IP21-Lösung geflutet wurden. Die Versuche wurden bei  $25^\circ$  und  $60^\circ \text{C}$  durchgeführt. Insgesamt wurden sechs Versuche durchgeführt bei jeder Temperatur je einen Versuch mit jeder der drei Lösungen. Gemessen wurden jeweils der erreichte Quelldruck und die Permeabilität. Es zeigt sich, dass die Quelldrucke in den Versuchen mit den beiden hochsalinaren Lösungen deutlich höher liegen (bei ca. 5 bar) als mit dem niedrigsalinaren Opalinustonporenwasser (3,4 bar). Dieses Ergebnis ist genau umgekehrt als bei den Versuchen ohne Eisen. Es ist aus unserer Sicht darauf zurückzuführen, dass die Korrosion des Eisens mit den Salzlösungen schneller abläuft und zu mehr großvolumigen Korrosionsprodukten führen. In den Versuchen bei  $60^\circ \text{C}$  ist der Quelldruck (mit ca. 7 bar) deutlich höher als bei  $25^\circ \text{C}$ . Permeabilitäten wurden erst bei  $25^\circ \text{C}$  gemessen. Bei den hochsalinaren Lösungen liegen sie trotz der höheren Quelldrücke mit 10-16 (für NaCl-Lösung) und 10-18 für IP21-Lösung) niedriger als bei Opalinustonwasser (10-20  $\text{m}^2$ ). Die Berechnung der Permeabilität für NaCl und IP-21 bei  $60^\circ \text{C}$  kann erst erfolgen, wenn der Faktor  $\mu$  (dynamische Viskosität) für diese Lösungen für höhere Temperaturen bestimmt worden ist. Hierzu gibt es bis jetzt keine Daten. Mit der Messung der Porositäten wurde begonnen. Ergebnisse stehen noch aus.

Bei den bis jetzt vorliegenden Versuchen zeigte sich, dass im geschlossenen System schon bei Raumtemperatur Reaktionsdrücke von bis zu 120 bar bei geschlossenen Ventilen in der Reaktionszelle entstehen können. Das elementare Eisen reagiert unter Wasserstoffbildung. Bei  $60^\circ \text{C}$  wurden Drücke bis 150 bar registriert.

Weiterhin wurden Vorversuche für die Messungen bei  $90^\circ \text{C}$  begonnen. Hierbei gibt es noch technische Probleme die behoben werden müssen.

AP2: Durch die langen Reaktionszeiten bei Diffusionsmessungen liegen noch keine verwertbaren Ergebnisse vor.

AP4: Nach Versuchsende wurden die ausgebauten Proben an die Universität Greifswald geschickt, wo die mineralogischen Untersuchungen vorgenommen werden. Diese Arbeiten sind noch im Gange.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführung der Arbeiten zu AP1 bis AP4. Ermittlung der dynamischen Viskosität von NaCl und IP-21 bei höheren Temperaturen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10548</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2008 bis 31.07.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.863.973,00 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:

- Abschließender Review aller Beiträge zu Phase I der IGSC-Initiative Methods for Safety Assessment (MeSA). Betreuung einer Consultant-Arbeit zur Auswertung von bisherigen NEA-Projekten im Hinblick auf das Thema „Indikatoren“ und Entwicklung eines neuen Fragebogens für MeSA Phase II. Teilnahme am 3. Arbeitstreffen in München.
- Teilnahme an der jährlichen Sitzung des IGSC.

- Prüfung und Korrektur weiterer Beiträge zum Leitfaden für die Erstellung von Oberflächenkomplexmodellen zum NEA-Sorptionsprojekt III.
- Teilnahme an der Sitzung des Arbeitskreises Szenarientwicklung.
- Durchführung der Modellrechnungen für Endlager in Salzformationen zur Überprüfung der Sinnfälligkeit der von GRS Köln vorgeschlagenen neuen Indikatoren.

TA2:

- Definition von Klimazuständen, für die Biosphärenmodelle erstellt werden sollen, und Diskussion möglicher relevanter Übergänge zusammen mit der GSF-Neuherberg. Durchführung erster Modellrechnungen der GSF.
- Durchführung erster Strömungsrechnungen zu Klimaübergängen „Meeresüberflutung - Gemäßigtes Klima“ und „Auftauen von Permafrost“.
- Grundwasserprobenahme an den neu errichteten GW-Messstellen in Ruprechtov. Durchführung des 2. Workshops zur Diskussion und Steuerung der Arbeiten aller beteiligten Institutionen.
- Erweiterung von Code VIPER um den Prozess der Zwischenschichtwasserdiffusion. Modellierung der Aufsättigung eines Bentonit-Sand-Buffers unter Berücksichtigung der Zwischenschichtwasserdiffusion. Entwurf des Statusberichts zum aktuellen Entwicklungsstand und zur Qualifizierung des Rechencodes VIPER. Vorversuche am Prototyp der Messzelle für die Aufsättigungsexperimente. Teilnahme am nächsten Workshop der Task Force EBS.

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

TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung der IGSC.
- MeSA-Arbeitsgruppe: Mitarbeit an den für Phase II identifizierten Arbeiten, bei der Auswertung des Fragebogens und bei der Erstellung der aktualisierten Dokumente. Teilnahme am nächsten Arbeitstreffen in Paris.
- Weiterführung der Arbeiten zur Ermittlung von aktualisierten Radionuklidinventaren für HAW-Kokillen auf Basis der vorhandenen Datensätze.
- Durchführung der Modellrechnungen für Endlager in Tonformationen zur Überprüfung der Sinnfälligkeit der von GRS Köln vorgeschlagenen neuen Indikatoren.

TA2:

- Durchführung der Modellrechnungen für alle zu betrachtenden Biosphärensysteme repräsentativ für veränderte klimatische Bedingungen und Diskussion der Ergebnisse auf dem nächsten Arbeitstreffen. Festlegung der zu betrachtenden Übergänge
- Weiterführung von Strömungs- und Transportrechnungen für einzelne Klimaübergänge.
- Bohrung am Standort Ruprechtov zur Untersuchung der Auswirkungen des Sauerstoffeintrags. Geländeuntersuchungen und Probenahme im Bereich des Tagebaus zur Untersuchung der hydraulischen Leitfähigkeit und Identifizierung von Störungszonen im Kaolin.
- Fertigstellung des Statusberichts. Modellrechnungen zur nicht-isothermen Aufsättigung unter Berücksichtigung der Zwischenschichtwasserdiffusion. Weiterführung der Aufsättigungsexperimente. Teilnahme an der Folgeveranstaltung für die Task Force on EBS.

#### **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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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**

Der Kooperationsvertrag zwischen den Universitäten Frankfurt und Jena, dem Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung Leipzig und der GRS ist inzwischen von allen Institutionen unterzeichnet und wurde verschickt.

Eine Homepage für das Projekt wurde eingerichtet unter [www.a-dur.org](http://www.a-dur.org). Sie enthält unter anderem eine Vorstellung des Forschungsprojekts, des Konzepts und der Ziele. Außerdem ist ein passwortgeschützter FTP-Server für den Datenaustausch zwischen den Projektteilnehmern integriert.

Am 20. Oktober 2009 fand in Frankfurt das 1. 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, mit der Auswertung wurde begonnen. Die Ergebnisse der NAGRA aus dem EFP-Projekt müssen noch aufbereitet werden. Für eine Einzelkluft existiert bereits ein Rockflow-Modell, das vorliegt und das als ein erster, einfacher Testfall adaptiert werden könnte.

### **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 13. April 2010 im Anschluss an das 7. Projektgespräch zu 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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 Löser für das mesoskalige Referenzmodell (AP3), die Implementierung eines adaptiven numerischen Mehrskalenslösers für das Gesamtsystem und die Implementierung in  $d^3f$  und  $r^3t$  (AP5) sowie Algorithmen und Softwarewerkzeuge zur inversen Modellierung und Schätzung der relevanten Parameter des Strömungsproblems (AP7) einzubringen. Gemeinsam mit den Projektpartnern werden Benchmarking-Tests sowie Vergleichsrechnungen (AP9) durchgeführt. Es sollen Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung für die gemischt parabolisch-hyperbolischen Probleme entwickelt und in die Simulationssoftware umgesetzt werden. Dies soll auf der Basis von un stetigen Galerkin-Verfahren bzw. Finite-Volumen-Verfahren erfolgen. Für die so entstehenden Systeme sollen schnelle Lösungsverfahren auf der Basis von Mehrgittermethoden entwickelt werden. Entscheidend ist ferner die effiziente Umsetzung der Methoden auf massiv parallelen Rechnern. Basis der Implementierung werden die Software-Werkzeuge  $d^3f$  und  $r^3t$  sein.

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

AP3: Entwicklung eines numerischen Löser 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  $r^3t$

Ein wichtiges Ziel des Projektes ist es, die entwickelten Algorithmen und Programme auf massiv parallelen Systemen einzusetzen. Um dies zu ermöglichen wurde im vergangenen halben Jahr verstärkt an den dafür nötigen Strukturen gearbeitet. Grundlegend für die Arbeit auf parallelen Prozessen ist es, Gitter auf die verschiedenen Prozesse eines parallelen Systems zu verteilen. Zur Partitionierung des Gitters bedienen wir uns dabei zum einen der rekursiven Bisektion oder nutzen alternativ den externen Lastverteiler Metis. Sowohl Flächen- als auch Volumengitter können damit behandelt werden. Um auf den verteilten Systemen zu arbeiten, war es nötig, ein grundlegendes Framework zur effizienten parallelen Kommunikation zwischen Knoten verteilter Graphen zu implementieren. Dieses sollte sowohl für die Kommunikation in verteilten Gittern, wie auch für die Implementierung von parallelen Lösern einsetzbar sein. Besonderes Augenmerk wurde dabei darauf gelegt, Kommunikation in den verschiedenen Ebenen einer Mehrgitterhierarchie ohne Geschwindigkeitseinbußen gegenüber einfachen Gittern zu ermöglichen - eine Notwendigkeit für effiziente und skalierbare parallele Mehrgittermethoden. Die serielle adaptive Verfeinerung mit hängenden Knoten auf Dreiecks- und Vierecksgittern wurde - basierend auf dem oben beschriebenen Framework - auf parallele Systeme erweitert.

Da die Darstellung der Klüfte mittels degenerierter Elemente zwar gute Leistung bringt, allerdings nicht in der Lage ist gewisse spezifische Phänomene, die innerhalb der Kluft auftreten, aufzulösen, wollen wir die Klüfte als 3-dimensionale Objekte behandeln. Um dabei entstehende Konvergenzprobleme auf gröberen Gittern zu vermeiden, führen wir einen Dimensionsübergang im Mehrgitterverfahren ein. Dieser wird so umgesetzt, dass die Kluft bereits äquidimensional im Grobgitter repräsentiert vorliegt und anhand des Seitenverhältnisses bei jedem Kluftelement festgestellt wird, ob es niederdimensional oder äquidimensional behandelt wird. Niederdimensional betrachtete Kluftelemente werden auf einer virtuellen niederdimensionalen Zwischenschicht diskretisiert und erfahren eine spezielle anisotrope Verfeinerung. Mit der Implementierung dieses adaptiven Übergangs in unserem Simulationswerkzeug UG wurde bereits begonnen. Die Verfeinerungsalgorithmen und die Diskretisierung für den 2-dimensionalen Fall sind eingebunden und auch in  $d^3f$  zur Verfügung gestellt.

Zudem wurde ein Modul implementiert, um Ergebnisse aus niederdimensionaler und äquidimensionaler Simulation zu vergleichen. Erste Vergleiche zeigen, dass für sehr dünne Klüfte die Ergebnisse sehr gut übereinstimmen. Für dickere Klüfte wird deutlich, dass das hier beschriebene Verfahren in der Kluft auftretende Phänomene gut darstellt, was der niederdimensionalen Modellierung bei vergleichbarem numerischem Aufwand überlegen ist.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10578</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP3 - Kurztitel A-DuR -		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 290.377,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Attinger	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Ziel des Verbundvorhabens ist die grundlegende Erweiterung der numerischen Modelle  $d^3f$  und  $r^3t$  auf heterogen-porösen und klüftig-porösen Medien (adaptives numerisches Mehrskalenmodell). 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 Mehrskalenadaptivität

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 erfolgte die Berechnung von effektiven Transportkoeffizienten für die Festgesteinsmatrix, die die dominanten Klüfte umgeben. Die Festgesteinsmatrix wurde mit stochastischen Eigenschaften modelliert. Wird die Festgesteinsmatrix durch ein heterogenes gaußsches Medium mit endlicher räumlicher Korrelationslänge beschrieben, kann die Korrelationsfunktion durch eine GAUß-Funktion beschrieben werden, bei gaußschen Medien mit unendlicher Korrelationslänge (fraktale Medien) muss diese Korrelationsfunktion geeignet ersetzt werden. An letzterem sind wir in dem Projekt interessiert, weil dieser Ansatz der fraktalen Natur geklüfteter Medien Rechnung trägt.

ZHAN & WHEATCRAFT (1996)<sup>[4]</sup> berechneten den Makrodispersionskoeffizienten in fraktalen Medien mithilfe von Korrelationsfunktionen, die durch ein Potenzgesetz mit nicht-ganzzahligen Exponenten beschrieben waren. Mit diesem Ansatz können Dispersionkoeffizienten numerisch bestimmt werden. Wir konnten jedoch die fraktale Korrelationsfunktion umschreiben und auf die analytischen Ergebnisse von DENTZ ET AL. (2000<sup>[1]</sup> und 2000<sup>[2]</sup>) erweitert zurückführen. Auf diese Weise konnte der Dispersionskoeffizient für fraktale heterogene poröse Medien mit folgenden weiteren Eigenschaften berechnet werden für:

- isotrope und anisotrope Medien
- punktförmige und räumlich ausgedehnte Injektionsquellen (im Vergleich zur Korrelationslänge der Heterogenitäten).

Bei der Analyse des zeitlichen Verhaltens ist es notwendig, zwischen zwei konzeptionell verschiedenen Größen zu unterscheiden, die den Stofftransport beschreiben:  $D^{\text{eff}}(t)$  beschreibt die physikalische (beobachtbare) Dispersion in einem gegebenen Ereignis, während die mathematisch einfachere Größe  $D^{\text{ens}}(t)$  die (abstrakte) Dispersion darstellt, bezüglich aller möglichen Ereignisse des Mediums.

Unsere Ergebnisse zeigen deutlich, dass die echte physikalische Mischung  $D^{\text{eff}}$  sich immer von der Größe  $D^{\text{ens}}$  unterscheidet, die eher die Konzentrationsvarianz beschreibt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Veröffentlichung der gefundenen Ergebnisse.

Erweiterung der Upscaling-Methode „*Coarse Graining*“ bezüglich des Transports für heterogene fraktale Medien mit eingebetteten einzelnen Klüften.

Insbesondere umfasst dies:

- Berechnung der Transversalkomponente des Dispersionskoeffizienten
- Vergleich der Ergebnisse mit der Arbeit von Rubin et al. (1999)[3].

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10588</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP4 - Kurztitel A-DuR -		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2008 bis 30.09.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 Kluftegesteine entwickelt, um Genauigkeit und Stabilität der numerischen Modelle zu prüfen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Jede Prozesssimulation in Kluftegesteinen 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 (Kluftsysteme, 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 Kluftegesteine 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.

- Kluft-Matrix Systeme: Kluft-Matrix Interaktion, Kluftsysteme (z. B. Grimsel-Scherzone), Kluft-Matrix-System,
- Kopplung von Prozessen (systematisch zunehmende Komplexität): Hydraulik, insbesondere für Kluftrauhigkeiten (stark heterogene Kluftöffnungs- und Permeabilitätsverteilungen, konservativer Transport, Transport mit Zerfallsprozesse, Transport mit Sorptionsprozessen, Matrix-Diffusion, Matrix-Diffusion mit Zerfalls- und Sorptionsprozessen in der Matrix.

- Methoden-Vergleiche: Verschiedene numerische Verfahren (FVM, FEM, MFEM, hybride Methoden), Numerische (PDE-basierte) und Partikel-Methoden.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Folgende Arbeiten wurden in der Berichtsperiode durchgeführt:

- Das Benchmarking Konzept für Transportprozesse in klüftig-porösen Medien wurde weiterentwickelt. Ein Testbeispiel für eine Einzelkluft wurde detailliert untersucht. Dabei wurden homogene und heterogene Systeme betrachtet. Das Benchmark wurde den Projektpartnern in digitaler Form zur Verfügung gestellt (Taron et al. 2010).
- Die Methodenentwicklung für das Particle-Tracking wurde fortgeführt. Dabei wurden Systeme mit unterschiedlichen Prozessskalen erfolgreich simuliert (Delfs et al. 2009).
- Bezüglich der Softwareentwicklung für die Prozessvisualisierung wurden erheblich Fortschritte erzielt. Die Benutzerschnittstelle von OpenGeoSys wurde von MFC auf Qt umgestellt. Damit wurde die Plattformunabhängigkeit der Visualisierungs-Software hergestellt.
- Die Trac/Wiki/SVN Projektplattform von OpenGeoSys wird ständig aktualisiert, um den aktuellen Bearbeitungsstand zugänglich zu machen.
- Zu den Ergebnissen in dieser Berichtsperiode wurde ein Fortschrittsbericht erstellt (Taron et al. 2010).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Projektphase stehen folgende Arbeiten im Vordergrund:

- Systematische Weiterführung der Bereitstellung und Dokumentation von Testbeispielen für die Hydraulik von Kluftnetzwerken und Kluft-Matrix-Systemen sowie den konservativen Stofftransport für den Methoden- und Code-Vergleich.
- Methoden für die Unsicherheitsanalyse werden weiterentwickelt (RW/PT in Kluftnetzwerken).
- Visualisierungsmethoden für die Darstellung der komplexen Prozesse in klüftig-porösen Medien werden bereit gestellt. Die Visualisierung erfolgt auf der Basis der plattformunabhängigen C++GUI open source Software Qt. Für die Prozess- und Unsicherheitsanalyse werden Möglichkeiten der stereoskopischen 3D Visualisierung ausgenutzt (Zehner et al. 2010).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Delfs J-O, Kalbus E, Park C-H, Kolditz O (2009): Ein physikalisch basiertes Modellkonzept zur Transportmodellierung in gekoppelten Hydrosystemen, *Grundwasser*, 14(3): 219-230.

Kolditz O and Shao H (eds.) (2010): *OpenGeoSys - BenchmarkBook*, V4.10.08, Internet Report, available through [www.opengeosys.net](http://www.opengeosys.net) Helmholtz Centre for Environmental Research (UFZ).

Park C-H, Beyer C, Bauer S, Kolditz O (2008): A study of preferential flow in heterogeneous media using random walk particle tracking. *Geosciences Journal*, vol. 12(3): 285-297.

Taron J, Park C-H, Kolditz O (2010): Mass transport in fractured media. A-DuR Project Progress Report.

Zehner B, Watanabe N and Kolditz O (2010): Visualization of gridded scalar data with uncertainty in geosciences. *Computers & Geosciences*, accepted.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10598</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Externer unabhängiger Review des im Vorhaben Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW (ISIBEL) erstellten FEP-Katalogs		
<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 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 52.847,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Röhlig	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des BMWi-FuE-Projektes ISIBEL wurde erstmals ein FEP-Katalog für die Endlagerung ausgedienter Brennelemente und anderer hochradioaktiver Abfälle (HAW) mit nennenswerter Wärmeentwicklung in einem Salzstock erstellt. Dieser Katalog ist das Ergebnis einer gemeinsamen Erarbeitung durch Experten von BGR, DBE TECHNOLOGY GmbH und GRS. Erfahrungsgemäß sind subjektive Prägungen in der Struktur des FEP-Katalogs, der Art der FEP-Beschreibungen und der FEP-Beschreibungen selbst nicht ausgeschlossen. Mit dem Ziel der Erhöhung der Transparenz und Nachvollziehbarkeit soll daher eine Gruppe von nicht am Projekt

ISIBEL beteiligten Experten einen nationalen Review des FEP-Katalogs durchführen. Der Review des FEP-Kataloges dient u. a. auch dazu, Erfahrungen hinsichtlich der Vorgehensweise bei künftigen Reviews zu sammeln.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Review des FEP Katalogs

AP2: Besprechungen und Konsultationen

AP3: Dokumentation



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

AP2: In einem Abschlusstreffen (im August) haben die Reviewer den Autoren des FEP-Katalogs ihre Ergebnisse mitgeteilt.

AP3: Die Bearbeitung des Fragenkatalogs ist abgeschlossen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Abschlussbericht befindet sich im Druck.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10608</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2008 bis 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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

Es wurde mit der Bestimmung der Löslichkeit von H<sub>2</sub>S in salinaren Lösungen begonnen. Das bereits in einem vorherigen Projekt (Moog, Hagemann 2005) entwickelte Messverfahren wurde verfeinert und die Messprozedur in einigen Punkten für die aktuell durchzuführenden Messreihen angepasst. Mit dem dokumentierten, leicht abgeänderten Messverfahren wurden H<sub>2</sub>S Löslichkeitsversuche bei 25 °C für MgCl<sub>2</sub>- und CaCl<sub>2</sub>-haltige Salzlösungen durchgeführt. Die eingesetzten Salzkonzentrationen der Lösungen wurde dabei im Verlauf der Versuche von c 5,6-0,4 [mol/kg] für MgCl<sub>2</sub> bzw. c 5,6-1,0 [mol/kg] für CaCl<sub>2</sub> variiert. 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 H<sub>2</sub>S und der Aktivitätskoeffizient für die jeweilige Salzkonzentration berechnet werden. Die neu gewonnenen Daten ergeben mit den bereits publizierten Daten für andere Salze eine breite Datenbasis für die Bestimmung der Löslichkeit von H<sub>2</sub>S und den daraus abzuleitenden thermodynamischen Parametern für 25 °C.

Zur Thermodynamik der Hintergrundsätze wurde eine Literaturrecherche für geeignete physikalisch-chemische Messungen im Temperaturbereich 25 bis 100 °C durchgeführt. Die Auswertung ist noch nicht abgeschlossen, doch wird bereits jetzt deutlich, dass erwartungsgemäß für 25 °C wahrscheinlich keine zusätzlichen Messungen mehr erforderlich sind und sich die Arbeiten auf höhere Temperaturen konzentrieren können.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Weiterführung der Messungen der Löslichkeit von H<sub>2</sub>S in salinaren Lösungen für andere Temperaturbereiche. Die Versuche sollen für salinare Lösungen der Salze: NaCl, KCl, MgCl<sub>2</sub>, CaCl<sub>2</sub>, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, MgSO<sub>4</sub> und K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> zunächst bei 15 °C und anschließend bei 40 °C durchgeführt werden.

Nach Abschluss dieser Arbeiten soll die Messapparatur dahingehend modifiziert werden, dass die Bestimmung von H<sub>2</sub>S-Löslichkeiten in ozeanischen Salzlösungen mit unterschiedlichen pH-Werten möglich ist. Spezielle Messgefäße aus Glas werden dafür beschafft und mit pH-Elektroden ausgestattet. Nach Abschluss der Auswertung der Literatur zu Hintergrundsätzen erfolgt der Beginn von isopiestic Messungen bei Temperaturen ab 40 °C.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10618</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2009 bis 31.08.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 zu Wechselwirkungen der Actinide mit Ton-relevanten Mikroorganismen und zur Biodiversität im Tongestein
- Physikochemische Charakterisierung des im April 2009 genommenen Mont Terri Opalinus-Tons (MT-2)
- Beginn der U(VI)-Sorptionsexperimente am aktuellen Opalinus-Ton unter anaeroben und sterilen Bedingungen: pH 3-10, Medien: 0.1M NaClO<sub>4</sub> und theoretisches Porenwasser; Ziele: U(VI)-Sorptionscharakteristik & Veränderung der mikrobiellen Diversität im Ton (Uran-resistente Bakterienpopulationen)

- Um Bakterien aus dem Opalinus-Ton zu isolieren, wurden zunächst 200 g Opalinus-Ton (13,6 – 14,5 m) mit 200 ml sterilem Wasser versetzt und 5 Tage unter anaeroben Bedingungen inkubiert. Danach wurde der Überstand filtriert und das Filtrat auf R2A Agarmedium (Aktivierung heterotropher Bakterien) ausplattiert. Die R2A Agarplatten wurden bei Raumtemperatur unter anaeroben Bedingungen bis zu 4 Monate inkubiert. Sichtbare Kolonien wurden auf neue Platten überimpft und mittels molekularbiologischer Methode wurden die 16S rRNA Gene der Bakterien amplifiziert, um sie zu identifizieren. Nach der 1. Filtration wurde der Tonprobe R2A Medium zugegeben, um das bakterielle Wachstum anzuregen (Lagerung Filter bei -20 °C zur späteren Gesamt-DNA-Isolierung).

Ergebnisse AP1 & AP2: Isolierte Bakterien mit obiger Methode sind den *Clostridia* (*Clostridium* spp. und *Sporomusa* spp.) und *Bacilli* (*Paenibacillus* spp.) zuzuordnen; Isolierung von Gesamt-DNA aus der Tonprobe, die 4 Woche mit R2A Medium inkubiert wurde, und Amplifizierung der bakteriellen 16S rRNA Gene. Im Opalinus-Ton (aerob, mit 0.1 M NaClO<sub>4</sub> -Lösung im pH Bereich 3-9 equilibriert), konnten mittels molekularbiologischer Methoden *Microbacterium* und *Brevibacillus* detektiert werden.

Ergebnisse AP3: Erste Version einer Datenbank zu Uran und Bakterien in Excel erstellt; Charakterisierung Opalinus-Ton: BET-Oberfläche 36.2 m<sup>2</sup>/g, Qualitative Zusammensetzung des Tons mittels XRD bestimmt (Hauptphasen: Illit, Pyrit, Quarz, Kaolinit, Calcit), chemische Analyse mittels Aufschluss und ICP-MS Analyse (Elemente > 2000 µg/g: Na, Mg, Al, Si, K, Ca, Mn; Uran-Gehalt: 2.8 µg/g)

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung Charakterisierung Opalinus-Ton (Zeta-Potentialmessungen, isoelektrischer Punkt)
- Fortsetzung der U(VI)-Sorptionsexperimente am aktuellen Opalinus-Ton: nach Vorequilibrierungsphase Zugabe des Urans (1x10<sup>-6</sup> M) und Auswertung der Versuche (Sorptionscharakteristik), mikrobiologische Untersuchungen des Opalinus-Tons nach Versuche
- Fortsetzung der Diversitätsuntersuchungen im Opalinus-Ton (Erstellung und Auswertung einer Klonbibliothek von der Gesamt-DNA aus der Probe, die 4 Wochen in R2A Medium inkubiert wurde), weitere Versuche zur Gesamt-DNA Extraktion aus Tonproben (z. B. mit unbehandeltem Opalinus-Ton)
- Isolierung weiterer Opalinus-Ton spezifischer Bakterien durch die Verwendung anderer geeigneter Medien zur Kultivierung
- Beginn der Untersuchungen der Wechselwirkung der bisher kultivierten Bakterien mit Uran, erste Tests mit Curium
- Konzeption und Start der Versuche zur Generierung eines Biofilms des Äspö-Bakteriums *Pseudomonas fluorescens* auf verschiedenen Substraten (Granit, Glas, Permanox), Start der Versuche mit planktonischen Zellen des Äspö-Bakteriums *P. fluorescens* (Wachstumscharakteristik, Beginn Uranwechselwirkung, Uran-Speziationsuntersuchungen mittels TRLFS)
- Erfassung aller relevanten Literatur zur Wechselwirkung von Mikroorganismen mit Actiniden zur laufenden Aktualisierung der Datenbank (Ausweitung auf Curium und Plutonium), Auswahl eines geeigneten Referenzstamms

#### 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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 AP1 und AP2 wurde nach dem ersten Fachworkshop, der im Februar 2009 stattfand, abgeschlossen. Die Ergebnisse dieser ersten Phase sind in einem Zwischenbericht dokumentiert.

Mit der Bearbeitung der Arbeitspakete AP3 und AP4 wurde begonnen. Neben dem oben beschriebenen Arbeitsprogramm wurden dabei auch Anregungen aus dem Fachworkshop berücksichtigt.

Die durchgeführten Arbeiten umfassten die Analyse von Fallbeispielen zur Anwendung des Safety Case in verschiedenen Endlagerprojekten sowie von bestehenden nationalen Regelwerken und internationalen Empfehlungen zur Anwendung des Safety Case im Hinblick auf Rolle, Betrachtungsumfang und Dokumentation des Safety Case.

Außerdem erfolgten vertiefte Betrachtungen zu Anforderungen an Managementsysteme im sozialwissenschaftlichen und anwendungsbezogenen Kontext, die einen Beitrag für die Systematisierung der sozialwissenschaftlichen Aspekte mit Relevanz für den Safety Case in der Endlagerung liefern.

Aus den bisherigen Ergebnissen wurden erste Ergebnisse für systematische Zusammenstellung sozialwissenschaftliche Aspekte mit Relevanz für den Safety Case entwickelt.

Weiter wurden organisatorische und inhaltliche Vorbereitungen zur Durchführung des zweiten Fachworkshops (im März 2010) zur Diskussion der Ergebnisse des Forschungsvorhabens durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die geplante Weiterarbeit sieht folgende Arbeitsschritte vor:

- Fortführung der Arbeiten zu AP3 und AP4
- Vorbereitung und Durchführung des zweiten Fachworkshops
- Erstellung des Endberichtes unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus dem Zwischenbericht und dem zweiten Workshop
- Abschluss des Projekts

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

Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case. Kurzbericht für den Workshop am 10.02.2009; Darmstadt, 28.01.2009

Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case. Interner Zwischenbericht zu den Arbeitspaketen AP 1 und AP 2. Darmstadt, 16.07.2009

Vortrag auf der Managing Radioactive Waste Conference, Göteborg, 15. – 17. Dezember 2009: „Non-technical issues in safety assessments for nuclear disposal facilities“, online unter: [http://www.cefos.gu.se/digitalAssets/1292/1292029\\_Kallenbach\\_\\_paper\\_.pdf](http://www.cefos.gu.se/digitalAssets/1292/1292029_Kallenbach__paper_.pdf)

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10639</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung zu Rahmenbedingungen und Aufbau eines Endlager-Monitoring für hochradioaktive Abfälle in verschiedenen Wirtsformationen und Phasen einer Endlagerentwicklung unter Berücksichtigung von Machbarkeit und Unsicherheiten (MonA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2009 bis 31.12.2012	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 18. und 19. November 2009 fand ein projektinterner Workshop in Madrid statt. Der Workshop wurde von Aitemin (Spanien) ausgerichtet. Im Rahmen dieses Workshops wurden die aktuellen Arbeiten im Arbeitspaket 1 diskutiert sowie der Beginn der Arbeitspakete 2 und 3 inhaltlich und zeitlich festgelegt.

AP1:

Auf Basis bisheriger Diskussionen wurde eine erste Synthese zum Rahmen und Aufbau eines generellen Monitoring Programms erarbeitet und in Form eines Ablaufdiagramms erstellt. Dieses Diagramm stellt einen ersten Ansatz zur Spezifizierung der Schritte dar, die zur Erstellung eines Monitoring Programms sinnvoll sind. Gemäß diesem Diagramm gilt es zunächst die wesentlichen Zielsetzungen und Gründe für Überwachungsmaßnahmen zu definieren bzw. festzulegen. Diese können sich beispielsweise ergeben aus gesetzlichen Anforderungen und Regelungen, aus Gründen des öffentlichen Interesses oder auf Grund von Stakeholder Anforderungen. Die generellen Ziele werden dann in spezifische Teilziele untergliedert wie zum Beispiel radiologische Überwachung, Stabilitätsüberwachung unterirdischer Hohlräume oder übertägige Umgebungsüberwachung etc.). Nach Festlegung der spezifischen Teilziele ist zu klären bzw. zu definieren, welche physikalischen, chemischen und/oder biologischen Prozesse zur Erreichung des jeweiligen Teilziels überwachungsrelevant sind. Danach ist zu definieren, welche Parameter bzw. Messgrößen notwendig sind, diese Prozesse adäquat zu beschreiben und somit überwacht werden müssen.

Gemäß dieser Vorgehensweise entsteht eine vorläufige Liste überwachungsrelevanter Parameter. Zur endgültigen Entscheidung, ob alle identifizierten Parameter tatsächlich überwacht werden können oder sollten, wird diese Liste einem „Parameter-Screening-Process“ unterzogen. Dieses „Parameter-Screening“ untersucht sowohl die technische Machbarkeit als auch mögliche nachteilige Konsequenzen einer Überwachung. Letztere könnten sich ergeben, falls z. B. der Einbau einer Sensorik in Abdichtungsbauwerken zur Herabsetzung deren Dichteitseigenschaft oder zur Erhöhung des Ausfallrisikos führt. Ein erster Entwurf für ein Ablaufdiagramm zum „Parameter-Screening“ wurde erarbeitet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

Inhaltliche Vorbereitung zwei weiterer Workshops, einem projektinternen zur inhaltlichen Diskussion der Arbeiten in den einzelnen Arbeitspaketen und einen offenen Workshop zum Stand der Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Überwachungstechnologie.

AP2:

Entwicklung von einzelnen Fallstudien zur Überwachung eines Endlagers in ausgewählten Wirtsgesteinen unter Berücksichtigung unterschiedlicher Endlagerkonzepte.

AP3:

Zusammenstellung von Umgebungsbedingungen und technischen Anforderungen für den Einsatz von Überwachungssystemen in den unterschiedlichen Wirtsgesteinen und Endlagerkonzepten.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10649</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA)	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2009 bis 30.09.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009
<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 Permeationsprozessen 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 Entwicklung einer Modellierungskonzeption zu den potentiellen Wegsamkeiten, insbesondere zu den Konnektivitäten, im Konturbereich von Bergwerksstrecken im Steinsalz wurde mit verschiedenen Hochschulinstitutionen erörtert und deren jeweiliger methodischer Ansatz diskutiert.

Die Arbeiten zur mathematischen Beschreibung der Wegsamkeiten bzw. Rissysteme im Rahmen numerischer Modelle, inklusive der Rissentstehung, wurden begonnen. In diesem Zusammenhang werden Computerprogramme eingesetzt, die in der Lage sind, diskontinuierliche Materialien numerisch abzubilden (UDEEC, 3DEC, PFC). Nach ersten Tests und Analysen erscheint der Ansatz, eine Auflockerungszone mittels sogenannter „Voronoi“-Elemente darzustellen erfolgversprechend zu sein, da hiermit auch ein verzweigtes Trennflächensystem im Nahbereich abgebildet werden kann.

AP2:

Die Rahmenbedingungen für das Untersuchungsprogramm zur chemischen Langzeitstabilität konnten durch Vorversuche abgestimmt werden. Die Laborexperimente wurden gestartet. Die Darstellung der Ausbreitung des Injektionsmittels im Wirtsgestein mittels eingefärbtem Wasserglas war nicht zielführend, da die Einfärbungen im  $\mu\text{m}$ -Bereich nicht erkennbar sind. Mit einer Literaturrecherche zur Übertragbarkeit auf natürliche geochemische Prozesse wurde begonnen.

AP3:

Die für den Berichtszeitraum geplanten untertägigen in-situ-Injektionsarbeiten in einem norddeutschen Salzbergwerk mussten aufgrund betrieblicher Einschränkungen in der Schachtförderanlage in das 1. Halbjahr 2010 verschoben werden. Die Planungen zur Durchführung der Injektionsmaßnahmen und insbesondere zur Installation eines Oberflächenpackers und anschließender Permeabilitätsmessungen wurden entsprechend angepasst.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Weiterentwicklung der Modellierungskonzeption zur Darstellung des Systems der Wegsamkeiten (SW) und zur Bestimmung der Permeabilitätsänderung durch Injektionen
- Implementierung

AP2:

- Literaturrecherche
- Betreuung der Versuche zur mechanischen Festigkeit, der Untersuchungen zur chemischen Langzeitstabilität und der spektroskopischen Untersuchungen
- Dünnschliffpräparation einzelner Proben
- Visualisierung von Wasserglasinjektionen in Steinsalz auf polierten Oberflächen

AP3:

- Detaillierte Planung und Durchführung der In-situ-Injektionen
- Permeabilitäts- und Injektionsmessungen sowie
- Messwertauswertung

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

V. Borstel, L.E.; Engelhardt, H.J.; Schmidt, K. (2009): Sorelphasen als Reaktionsprodukte von Natronwasserglas mit  $\text{MgCl}_2$ -reichen Salzlösungen bzw. Mineralen, Posterbeitrag, 87.Tagung der Deutschen Mineralogischen Gesellschaft (13. - 16. September 2009) Hallesches Jahrbuch für Geowissenschaften Band 31, Hrsg. Institut für Geowissenschaften der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Selbstverlag, ISSN 1432-3702

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10659</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2009 bis 31.03.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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

- AP1: Die Literaturstudie zum aktuellen Kenntnisstand zum Gastransport in Verschlussbauwerken auf Bentonit- bzw. Zement-basierten Baustoffen wurde fristgemäß zum Monat 10 des Vorhabens fertig gestellt und befindet sich im Review-Verfahren. Der Report gibt einen umfassenden Überblick über die Relevanz technisch bedingter Trennflächen bzgl. der Integrität und der Gastransporteigenschaften von Verschlussbauwerken unter Berücksichtigung aktueller Endlagerkonzepte in Kristallin- und Tonformationen (Bohrloch oder Streckenlagerung). Als Randbedingungen werden die Gastransporteigenschaften der Wirtsgesteine sowie möglicher Verschlussmaterialien auf Basis der vorliegenden Feld- und Laboruntersuchungen charakterisiert. Zusätzlich werden potentielle Rechentools für die Modellierung der Gasausbreitung entlang von Trennflächen diskutiert.
- AP2: Der Bau von drei neu konzipierten Messzellen zur radialen Durchströmung von Bentonit-Aggregaten mit Trennflächen ist abgeschlossen.
- AP3: Die neuen Zellen sind nach der Herstellung geeigneter Prüfkörper aus Bentonit-Formsteinen FS40 für den Beginn der Durchströmungsversuche vorbereitet. Aktuell werden die Messeinrichtungen kalibriert.  
Im Rahmen der Voruntersuchungen werden die verwendeten Formsteine bzgl. ihrer mechanisch-hydraulischen Eigenschaften charakterisiert. Es liegen Ergebnisse aus 5 triaxialen Festigkeitsuntersuchungen zwischen 1 und 20 MPa Manteldruck vor.  
Neben der Bestimmung der Gasdurchlässigkeit der Bentonit-Formsteinmatrix liegen erste Ergebnisse zur Trennflächen-Permeabilität gegenüber Gas vor. Während die mittlere Schichtflächenpermeabilität in der Größenordnung  $10^{-12} \text{ m}^2$  liegt, ist die Matrixpermeabilität  $<10^{-16} \text{ m}^2$ . Mit Erhöhung der Einspannung bis auf 10 MPa nimmt die Permeabilität um mehr als eine Größenordnung ab.
- AP5: Bestimmung der Kontaktflächenscherfestigkeit zwischen Bentonit-Formsteinen. Trockene Formsteine bilden keine Kohäsion aus, der Reibungswinkel beträgt  $21^\circ$ .

### 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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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:

Beginn der Auswertung neuer Daten aus Sorptionsexperimenten, die über noch längere Zeiträume als bisher gelaufen sind, zur Aktualisierung der Sorptionskoeffizienten und -raten für Plutonium, Americium und Neptunium.

Konzipierung weiterer Modellrechnungen mit  $d^3f/r^3t$  zur Überprüfung, ob die Durchbruchkurven der Radionuklide beschrieben werden können und zur Untersuchung der Zulässigkeit einer Extrapolation auf andere Extraktionsgeschwindigkeiten. Erstellung konzeptueller Modelle für neue Dipolexperimente, bei denen zur besseren Vergleichbarkeit der ideale Tracer zusammen mit den kolloidgetragenen Radionukliden im selben Experiment eingesetzt wird.

AP3:

Durchführung eines ersten Arbeitsgesprächs mit dem FZK-INE zur abschließenden Diskussion der Ergebnisse aus Kollorado I sowie zur Detailplanung der einzelnen Aufgaben und Abstimmung der weiteren Arbeiten am 23./24. Juli in Karlsruhe.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

Abschließende Auswertung neuer Daten aus Sorptionsexperimenten, die über noch längere Zeiträume als bisher gelaufen sind.

Überprüfung der Experimente zur Wechselwirkung von Kolloiden mit Mineraloberflächen und ggf. Aktualisierung der Parameter für die „Deep-Bed“ Filtration.

$D^3f$ -,  $r^3t$ -Rechnungen mit größerem Modellgebiet und angepassten hydrogeologischen Parametern, um Massenverlust über die offenen Modellränder bei kleinen Ausflussgeschwindigkeiten zu verhindern. Durchführung von Modellrechnungen für neues CFM Homolog-Experiment, sofern die Planung dafür abgeschlossen ist, insbesondere Auswertung von Versuchen mit langsameren Fließgeschwindigkeiten. Überprüfung des Einflusses der Hintergrundströmung bei kleinen Dipol-Ausstromraten.

AP3:

Durchführung eines zweiten Arbeitsgesprächs mit dem FZK-INE zur Diskussion der Ergebnisse.

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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 wird momentan gestartet. Es wurde ein geeigneter Postdoc Kandidat (Laurent Truche, Univ. Toulouse, Frankreich) im Dezember 2009 ausgewählt, der zum 1. Februar ein-



gestellt wird. Für die zweite Doktorandenstelle konnte bisher leider noch kein geeigneter Kandidat/-in gefunden werden.

Die Versuche zur Langzeit-Sorptionsreversibilitätskinetik von Am, Pu, Th, Np, Tc und U wurden unter gezielter Variation des Volumen/Masse-Verhältnisses durchgeführt. Die Ergebnisse werden momentan hinsichtlich der Desorptionsrate  $k_3$  als Eingangsparameter der Modellierung von GRS ausgewertet.

Migrationsexperimente an einem Bohrkern aus Äspö (Kern #8) unter Grimsel- Grundwasser Bedingungen wurden durchgeführt. Die Migrationsexperimente zeigen überraschenderweise einen sehr niedrigen Kolloid- Wiedererhalt. Die momentane Hypothese des Einflusses von divalenten Ca- Ionen auf den Kluftoberflächen- Austauschplätze bzw. eine Diffusion aus der Kluftmatrix muss in weiteren Experimenten aufgeklärt werden. Für diesen Kern existieren detaillierte  $\mu$ CT- Daten ( $80 \mu\text{m}^3$  Voxelgröße), die bereits in ein hydraulisches Modell implementiert wurden (ADINA-F) um zwischen den Mechanismen der Fließkanalheterogenität und Matrixdiffusion als Rückhalte Mechanismen für den Kolloid- und Radionuklidtransport zu differenzieren.

Das geochemische Hintergrundmonitoring Programm der MI- Scherzone wurde gestartet. Anoxische Proben in Gasdruckzylindern abgefüllt werden vom Felslabor an das INE geliefert und Gesamtanalysen bezüglich Anionen, Kationen, gelöster organischer Kohlenstoff (DOC) und Kolloidkonzentration sowie –größenverteilung am INE durchgeführt. Dieses Messprogramm dient der Quantifizierung der natürlichen Schwankungsbreite der Kolloidkonzentration innerhalb eines hydrogeologischen Jahres um die Unsicherheiten bei der Quantifizierung des Kolloid- Wiedererhaltes im „integralen CFM Experiment“ zu minimieren.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

##### AP1.1:

Ergänzende Migrationsstudien mit permanenter Injektion sind angedacht um in situ  $k_3$ -Desorptionsraten zu bestimmen und diese mit den oben erwähnten Batch- Experimenten zu vergleichen. Die Kolloid- Migrationsversuche im „Mock-up“ Test sind abgeschlossen und ein kompakterer, markierter Febex-Bentonitkörper soll in einem nächsten Schritt in die Kluft eingebaut werden um die Kolloidgeneration unter Fließgeschwindigkeiten vergleichbar dem integralen In-situ-Experiment in Grimsel Felslabor und die Markierung des kompaktierten Bentonits zu testen.

##### AP1.2:

Nach Einbau des modifizierten Megapacker-Systems ist im September 2009 erfolgt und die MI-Scherzone aufgesättigt worden. Im Dezember fand ein erster konservativer Tracertest mit Uranin und KBr statt, der zur Planung eines weiteren Homologtest unter höheren Scherzonen- Verweilzeiten (ca. 10h) benutzt wird und in der 4. KW 2010 durchgeführt wird. Die Analyse dieser Proben mittels ICP-MS, LIBD und S-Kurven LIBD und AsymFIFFF (Kolloidkonzentration und –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

Aus dem Vorhaben KOLLORADO sind einige Manuskripte zur Einreichung geplant/eingereicht, die nachfolgend aufgelistet sind:

Schäfer, T., Noseck, U., (2010) Colloid/ Nanoparticle formation and mobility in the context of deep geological nuclear waste disposal (Project KOLLORADO; Final report), *FZKA report 7515* (Ed. by M. Bouby, A. Filby, H. Geckeis, F. Geyer, R. Götz, W. Hauser, F. Huber, B. Kienzler, P. Kunze, M. Küntzel, J. Lützenkirchen, U. Noseck, M. Plaschke, A. Pudewills, T. Schäfer, H. Seher, C. Walther), pp. 210. Forschungszentrum Karlsruhe.

Seher H., Hauser W., Geckeis H., Fanghänel T. and Schäfer T. (2009, in prep.) Bentonite nanoparticle stability and effect of fulvic acids: experiments and modelling. *Applied Clay Science*.

Huber F. and Schäfer T. (2009, in prep.) Sorption and reversibility studies on the interaction of radionuclides with FEBEX bentonite under Grimsel groundwater conditions in the presence of Äspö and Grimsel fracture filling material. *Applied Geochemistry*.

Filby, A., Plaschke, M., Geckeis, H. (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> 01.09.2009 bis 31.12.2009
<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

AP1:

An Tonsteinproben aus dem Mont Terri URL wurden die wärmetechnischen Parameter im Anlieferungszustand und nach Trocknung bei 105 °C bis zur Gewichtskonstanz bestimmt. Im Anlieferungszustand ergaben sich für die Proben eine Wärmeleitfähigkeit von 1.95 W/(m·K), eine Temperaturleitfähigkeit von 0.63 mm<sup>2</sup>/s und eine Wärmekapazität von 1.28E-3 MJ/(kg·K). Die Dichte dieser Proben betrug im Mittel 2443 kg/m<sup>3</sup>. Eine anschließende Trocknung der Proben ergab einen mittleren Feuchtegehalt von 5.9 % und eine mittlere Dichte von 2298 kg/m<sup>3</sup>. Für die getrockneten Tonsteinproben wurden für die Wärmeleitfähigkeit 1.42 W/(m·K), für die Temperaturleitfähigkeit 0.44 mm<sup>2</sup>/s und für die Wärmekapazität 1.41E-3 MJ/(kg·K) ermittelt.

Der Einbau von SB-Material aus 35 % Calcigel und 65 % Sand in horizontale Strecken wurde in Rahmen von Versuchen in einem horizontal gelagerten Plexiglasrohr mit einem Durchmesser von 29 cm, das an der einen Seite verschlossen war, simuliert. Gute Ergebnisse wurden bei Handverdichtung des in Chargen eingebrachten Materials mit einem halbkreisförmigen Stampfer erreicht; der Einsatz eines Rüttlers führte zu Materialentmischung. Mit der ersteren Einbauweise konnte eine Einbaudichte von ca. 1532 kg/m<sup>3</sup> (Trockeneinbaudichte: ca. 1475 kg/m<sup>3</sup>) erreicht werden.

AP3:

Die Modellierung des geplanten HE-E-Versuchs im ehemaligen VE-Mikrotunnel wurde durch Analyse der in CODE\_BRIGHT vorhandenen Modelle zur gekoppelten THM-Modellierung vorbereitet.

Die übrigen Arbeitspunkte werden nach Vertragsabschluss mit der EU-Kommission bearbeitet; der Vertragsabschluss steht unmittelbar bevor.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Laboruntersuchungen zu Wärmeleitfähigkeit, Temperaturleitfähigkeit und Wärmekapazität von Tonstein und SB-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> 01.10.2009 bis 31.12.2009	
<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**

AP1: Die Daten für die dreiwertigen Actiniden Am(III) und Cm(III) wurden in der THEREDA-TDB komplettiert. Dies betrifft vor allem die Daten von An(III) in verdünnter bis konzentrierter NaCl, MgCl<sub>2</sub> und CaCl<sub>2</sub> Lösungen, für die bereits früher ein geochemisches Modell aufgestellt wurde. Damit steht ein Datensatz für Modellierungen in alkalischen und Mg-reichen Salzlösungen zur Verfügung; dies sind Bedingungen die bei der Korrosion von Beton/Zement entstehen. SIT- und Pitzer-Parametern und Modellparameter ternärer Ca-An(III)-OH Komplexe sind ebenfalls enthalten. Weiterhin wurden Daten für das Analogon Sm(III) zusammengestellt, die für die Bewertung der Ableitung von Schätzwerten notwendig sind. Allerdings müssen die Daten in einem nächsten Schritt erst bewertet werden.

AP4: Die Kapitel des THEREDA-Handbuchs Teil 3 ("Richtlinien zur Datenauswahl") und Teil 4 ("Qualitätssicherung") wurden überarbeitet. Diese Kapitel enthalten ausführliche, anhand von Beispielen unterlegte Anleitungen für die Editoren von THEREDA zur Erstellung von Schätzwerten und Analogiewerten, und zur Vergabe der Qualitätsmerkmale für die Datenklasse (data class DC), Datenqualität (data quality DQ) und Datenquelle (data source DC). Außerdem wurde die Dokumentation der Datenerfassung erweitert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die bisher vorliegenden thermodynamische Daten für Neptunium und Technetium werden aufgearbeitet und unter Berücksichtigung der THEREDA-Kriterien in die Datenbasis eingebaut, so dass Mitte 2010 ein Abfrage der Daten für Am(III), Cm(III), 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> 01.10.2009 bis 31.12.2009	
<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 Wirtsumformationen untertägiger Entsorgungseinrichtungen. Hierzu bilden die beteiligten Projektpartner einen Kreis von Experten, der vorhandene thermodynamische Stoffgrößen sammelt, nach einheitlich vorher festgesetzten Kriterien bewertet und in einer Datenbank zusammenfasst. Besonderer Wert wird auf eine lückenlose Dokumentation und Rückverfolgbarkeit von Datenbankeinträgen gelegt. Es ist vorgesehen, den bereits in anderen Datenbasen vorhandenen Datenbestand zu integrieren. Die Datenbank hilft bei der Identifikation von Wissenslücken und beim Entwurf von Strategien zu deren Schließung.

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

Im Ergebnis des Vorhabens wird eine einheitliche, konsistente thermodynamische Datenbasis für geochemische Modellierungen zur Verfügung stehen, mit der das geochemische Milieu in Salinargesteinen einschließlich angrenzender oder eingelagerter Carbonatgesteine im relevanten Temperatur- und Druckbereich behandelt werden kann. Darüber hinaus bildet die in diesem Teilvorhaben zu entwickelnde Datenbasis mit den Bestandteilen Na<sup>+</sup>-K<sup>+</sup>-Mg<sup>2+</sup>-Ca<sup>2+</sup>-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> - Cl<sup>-</sup> -H<sup>+</sup>-OH- HCO<sup>3-</sup> -CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> -CO<sub>2</sub> -H<sub>2</sub>O die Grundlage für die Modellierung in den anderen Teilvorhaben, in denen diese Ionen bzw. Stoffe stets auch Lösungsbestandteile in unterschiedlichsten Konzentrationen darstellen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Projektmanagement (Berichtswesen, Treffen mit Projektpartnern, Intranet)

AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation

(Definition von Richtlinien, Testrechnungen mit vom DB-Generator entwickelten Parameterdateien, Konsistenzprüfungen, Nutzerhandbuch)

AP3: Datenmanagement: Datenbank, Filter, Parameterdateien

(Erstellung und Weiterentwicklung der Datenbankstruktur, Sicherstellung eines Archivierungsmodus, Interface zur Datenrecherche und –verarbeitung)

AP4: Datenbasis für Schwermetalle und Arsen (FZ Rossendorf, GRS Braunschweig)

AP5: Datenbasis für das System der ozeanischen Salze mit Carbonaten und CO<sub>2</sub> in Abhängigkeit von Druck und Temperatur (TU BAF). Die prinzipielle Vorgehensweise besteht in folgenden Arbeitsschritten:

- Selektion einer für die Datenbasis THEREDA geeigneten Form der Zustandsgleichung für reines CO<sub>2</sub> mit einer Gültigkeit von 0 °C bis 120 °C und Drucken bis 300 bar und ihre Implementierung in THEREDA.
- Erfassung und Systematisierung der Literatur zu thermodynamischen Daten und Phasengleichgewichtsuntersuchungen zu den in Abb. 4 – 9 angegebenen Systemen.
  - Systemkomplex 1: Reine Carbonat – CO<sub>2</sub> – Systeme
  - Systemkomplex 2: Chlorid - Carbonat – Systeme
  - Systemkomplex 3: Ternäre Sulfat - Carbonat – Systeme
  - Systemkomplex 4: Quaternär-reziproke Systeme Chlorid-Carbonat
  - Systemkomplex 5 + 6: Quaternär-reziproke Systeme Sulfat-Carbonat + Quaternäre Systeme mit gemeinsamen Carbonat- oder Hydrogencarbonat-Anion
- Bewertung bereits publizierter Modelle von Carbonatsystemen und falls möglich Einarbeitung in THEREDA. Die Bewertung umfasst:
  - das Nachrechnen der Modelle so wie publiziert, Vergleich mit exp. Daten
  - die evtl. Extrapolation in Konzentrations-, T- p-Bereiche, die für THEREDA erforderlich sind
  - die Prüfung auf Kompatibilität mit der existierenden Datenbasis von THEREDA für das hexäre System
  - falls möglich Einarbeitung in die Datenbasis
- Modifizierung publizierter Modelle und Bestimmung fehlender Temperaturfunktionen für Wechselwirkungsparameter und Löslichkeitskonstanten
- Nachrechnen von Gleichgewichten und thermodynamischen Eigenschaften von Lösungen in den höheren Systemen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP5:

Es wurde ein Konzept zur Behandlung der CO<sub>2</sub>-Druckabhängigkeit von Löslichkeiten in THEREDA erstellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung von AP5.1 und Systemkomplex 1.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> 01.12.2009 bis 31.12.2009	
<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: Zu diesem AP wurden im Dezember 2009 keine Arbeiten durchgeführt.
- AP2: Zu diesem AP wurden im Dezember 2009 keine Arbeiten durchgeführt.
- AP3: Zu diesem AP wurden im Dezember 2009 keine Arbeiten durchgeführt.
- AP4: Zu diesem AP wurden im Dezember 2009 keine Arbeiten durchgeführt.
- AP5: Zu diesem AP wurden im Dezember 2009 keine Arbeiten durchgeführt.
- AP6: Ein internes Projektgespräch zur Organisation des AP fand statt. Eine Literaturrecherche zu Natürlichen Analoga wurde begonnen.
- AP7: Zu diesem AP wurden im Dezember 2009 keine Arbeiten durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP1: Beginn der Bearbeitung nach Abschluss der Arbeiten in ISIBEL-I (03/2010).
- AP2: Zu diesem AP sind im ersten Halbjahr 2010 keine Arbeiten geplant.
- AP3: Kick-Off-Meeting der beteiligten Organisationen zur Abstimmung der in den verschiedenen Unterpunkten durchzuführenden Arbeiten.
- AP4: Im AP4 werden die Arbeiten zur Relevanz des Gastransports im Deckgebirge über einem Endlager für HAW begonnen. Im ersten Schritt erfolgt eine Abschätzung der erzeugten aktiven und nicht aktiven Gase bei unterschiedlichen Szenarien und der eventuellen Radionuklidfreisetzung aus dem Endlager.
- AP5: Fortführung der Literaturrecherche zu Natürlichen Analoga in Salzgesteinen. Zusammenfassung der Ergebnisse in einem vorläufigen Bericht.
- AP6: Beginn der Bearbeitung nach Abschluss der Arbeiten in ISIBEL-I (03/2010).
- AP7: Teilnahme an der KTG-Tagung 2010 im Mai in Berlin. Bei Annahme der eingereichten Beiträge werden die Ergebnisse aus ISIBEL 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> 01.12.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 835.712,00 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**

Zu den APs, für die DBE TECHNOLOGY GmbH verantwortlich ist, wurden im Dezember 2009 keine Arbeiten durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Mit den Arbeiten zum AP2 wird nach dem Abschluss von ISIBEL im April 2010 begonnen werden.

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

Teilnahme an der KTG-Tagung 2010 im Mai in Berlin. Bei Annahme der eingereichten Beiträge werden die Ergebnisse aus ISIBEL vorgestellt.



## **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 (Carnallitit); 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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 Carnallitit.

## 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 Verschluss-elementen 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 bis AP11: sind 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 vorbereitet.

Alle Projektmitglieder sind aufgefordert bis 03/2010 die Entwürfe /Gliederungen für den Abschlussbericht vorzulegen.

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

Bzgl. der Schutzrechtssituation wurde 1 Patent erteilt und 2 weitere Patentanmeldungen wurden getätigt. Weitere 5 schriftliche Publikationen und Vorträge wurden erarbeitet und präsentiert. Von besonderer Bedeutung ist eine Publikation über geochemische Fragestellungen zur Langzeitsicherheit von MgO-Beton. In dieser Publikation wurden Forschungsdefizite aufgezeigt.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1244</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2005 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 748.135,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hagemann

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die sichere Prognose der Redoxeigenschaften ist eine wesentliche Voraussetzung zur Vor- ausberechnung der im Falle eines hydrologischen Störfalles zu erwartenden Schwermetall- und Radionuklidkonzentrationen im Nah- und Fernfeld einer untertägigen Entsorgungseinrichtung. Ziel des Vorhabens ist es Methoden zu entwickeln, mit denen sich die Redoxeigenschaften insbesondere salinärer Lösungen verlässlich messen und auch voraussagen lassen. Hierzu werden zum einen analytische Methoden entwickelt, zum anderen aufbauend auf experimentellen Untersuchungen ein Modell zur Voraussage der Speziation von Eisen in salinaren Lösungen und zur Löslichkeit eisenhaltiger Festphasen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Entwicklung eines verlässlichen Messverfahrens zur Bestimmung des Redoxpotentials salinärer Lösungen
- Entwicklung eines Verfahrens zur Messung von Wasserstoffkonzentrationen in salinaren Mischlösungen
- Verfahrensvalidierung
- Bestimmung der Speziation von Eisen(II) und Eisen(III) in salinaren Lösungen
- Untersuchung der thermodynamische Stabilität eisenhaltiger Minerale



### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bei der Bestimmung des Zusammenhanges zwischen „scheinbarem pH-Wert“ und der tatsächlichen Wasserstoffionenkonzentration wurden die noch fehlenden Messreihen der ternären chloridischen Systeme mit  $\text{CaCl}_2$ , nämlich  $\text{NaCl-CaCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{KCl-CaCl}_2\text{-H}_2\text{O}$  und  $\text{MgCl}_2\text{-CaCl}_2\text{-H}_2\text{O}$  ausgewertet und ein Modell aufgestellt.

Die Untersuchungen zur Entwicklung eines verlässlichen Messverfahrens zur Bestimmung des Redoxpotentials in salinaren Lösungen wurden weitergeführt. In Anlehnung an die bereits durchgeführten Messreihen für chloridische Salze wurden sulfatische Salze ( $\text{MgSO}_4$ ,  $\text{K}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ) untersucht. Dabei wurde die Veränderung des E-Wertes bei einer  $\text{Fe}_{\text{ges}}$  Konzentration von  $10^{-4}$  [mol/l], einem konstanten  $\text{Fe(II)/Fe(III)}$ -Verhältnis und konstantem pH, jedoch variierender Hintergrundkonzentration betrachtet.

Bei der Übertragung der Methoden zur Eisen(II)- und Eisen(III)-Bestimmung auf das Kapillar-UV-Spektrometer für die Entwicklung eines Verfahrens zur UV-spektroskopischen Messung in salinaren Lösungen im subnanomolar-Bereich ergaben sich Schwierigkeiten. Zuerst musste festgestellt werden, dass das verwendete destillierte Wasser nur unter bestimmten Voraussetzungen bzw. Vorbehandlungen zur Analyse benutzt werden kann. Aufgrund von Eisen-Verunreinigungen in Chemikalien konnte ein direkter  $\text{Fe(III)}$ -Nachweis im Spurenbereich nicht erreicht werden. Der Nachweis war somit nur indirekt über die Bestimmung der Gesamteisenkonzentration mit Phenanthrolin möglich. Beim Kapillarspektrometer war die Bestimmung von Eisenspezies in salinaren Lösungen zudem durch eine Oszillation der Grundlinie stark erschwert. Zusätzlich traten gerätespezifische Schwierigkeiten beim Gesamteisen nachweis auf, der eine quantitative Bestimmung von  $\text{Fe(III)}$  bzw. Gesamteisen bei gleichzeitigem Vorhandensein von  $\text{Fe(II)}$  und  $\text{Fe(III)}$  in der Probe trotz sorgfältigster Vorbereitungen nicht möglich.

Für die Entwicklung eines Speziationsmodells für  $\text{Fe(II)}$  und  $\text{Fe(III)}$  wurden Redoxmessungen in salinaren Medien durchgeführt. Um zu erkennen, wann die Bildung dieser Komplexe beginnt, wurden Messungen des Redoxwertes bei konstantem  $\text{Fe(II)/Fe(III)}$ -Verhältnis und konstanter Salzkonzentration bei variierendem pH-Wert durchgeführt. Die Messergebnisse zeigen, dass mit zunehmender Chloridkonzentration das Einsetzen der Hydrolyse zu höheren pH-Werten verschoben ist. Für chloridische Lösungen konnte ein mathematisches Modell zur Berechnung des spezifischen Eisen-Redoxpotential aufgestellt werden.

Für die Untersuchung der thermodynamischen Stabilität eisenhaltiger Minerale wurde die Literaturrecherche für bereits vorhandene thermodynamische Daten eisenhaltiger Oxide, Hydroxide, basische Chloride, basische Sulfate und Carbonate bei  $25^\circ\text{C}$  ausgewertet. Die sich einstellenden pH- und Eh-Werte bei Redoxpuffern natürlicher  $\text{Fe(III)}$ -Mineralen in Tiefenwässern sowie die Langzeitlösungsversuche von natürlichen  $\text{Fe(III)}$ -Mineralen in  $\text{NaCl}$  wie auch von  $\text{FeOH}_3$  in  $\text{NaCl}$  und  $\text{MgCl}_2$  wurden abgeschlossen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Entfällt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<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> 01.07.2009 bis 31.12.2009
<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 Untertage-deponie in Salzformationen zeigten nur zum Teil Erfolg versprechende Resultate. Langzeit-stabile 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**

Im Berichtszeitraum wurde der In-Situ-Versuch in Teutschenthal fortgesetzt. Die Verfüllung des Bohrlochs mit SVV sowie der Bau des Widerlagers aus Magnesiabeton und einer Sicherheitsstahlplatte wurden abgeschlossen. Sämtliche Messfühler wurden an die Messwerterfassung angeschlossen und die Datenfernübertragung zur ständigen zeitnahen Kontrolle des In-situ-Bauwerks zum Standort Braunschweig realisiert. Die Flutung des SVV mit tachydritlet gesättigter Lösung wurde termingerecht durchgeführt. Es wurde ein Flutungsdruck von 20 bar im Bauwerk erreicht. Dieser Fluiddruck konnte jedoch nur über einen kurzen Zeitraum aufrecht erhalten werden, da Lösung über den Magnesiabetonstopfen sowie über Kabel- und Ankerbohrungen in die Strecke austrat. Die Flutung wurde daraufhin für einen Monat gestoppt, um zunächst die Reaktion des SVV mit der tachydritlet gesättigten Lösung abzuwarten. Nach dieser einmonatigen Reaktionsphase wurde mittels einer Injektionspumpe ein Lösungsdruck von 5 bar aufgebracht und über eine Woche lang aufrecht erhalten. Danach wurden alle Ventile geschlossen. Der Druckverlauf im abgeschlossenen Bauwerk wird bis zum Beginn des geplanten Injektionstests ständig beobachtet. Die gemessenen Kristallisationsdrucke sind in verschiedenen Teilen des SVV-Stopfens unterschiedlich. Bisher wurde lediglich an dem Druckaufnehmer, welcher direkten Kontakt zum Betonwiderlager hat, ein ansteigender Druck registriert. Die anderen Fühler erkannten den aufgegebenen Lösungsdruck, fielen jedoch nach Abstellen der Pumpe wieder ab, was darauf zurückzuführen ist, dass der Quelldruck im Kontaktbereich zum Tachydritletgebirge bisher noch auf keinen Widerstand stößt. Es wird jedoch erwartet, dass dies bald der Fall sein wird, dann nämlich, wenn noch vorhandene Hohlräume durch den expandierenden SVV vollständig geschlossen worden sind.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Mitte Januar 2010 soll ein Lösungs-Injektionstest mit verschiedenen Druckstufen durchgeführt werden. Ziel dieses Tests ist die Ermittlung der integralen Permeabilität des Bauwerks einschließlich des umgebenden Wirtsgesteins. Die Ergebnisse werden im Abschlussbericht publiziert.

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

Herbert, H.-J. (2009): Verschlussbauwerke aus SVV. - Vortrag auf dem Projektgespräch CARLA am Schacht Halle/Angersdorf, am 02.07.2009.

Herbert, H.-J. und Hertel U. (2009): Neuere Untersuchungen am selbstverheilenden Salzversatz. - Vortrag auf dem Fachgespräch „Verschlussystem“ des Projektträgers an der TU BA Freiberg, am 20.-21. Oktober 2009.

Herbert, H.-J. und Hertel U. (2009): Verschlussbauwerke aus selbstverheilendem Salzversatz (SVV) - Vortrag bei der K+S Entsorgungs-GmbH in Kassel, am 20.1.2009.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1355</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrieren-Gebirge (Salinar)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2005 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 581.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen von Standortvergleichen und standortbezogenen Sicherheitsanalysen müssen die Änderungen von Tragverhalten und langzeitsicherer Abdichtungsfunktion der Barrierengesteinsformation Salzgestein, welche bei einer druckgetriebenen Infiltration von fluiden Medien in das ein Endlager umgebende Salinalgelände zu erwarten sind, qualitativ und quantitativ beschrieben werden können. Dazu sind als Grundlage die zur Infiltration führenden und die davon beeinflussten Prozesse zu identifizieren und zu beschreiben (physikalische Modellierung). Des Weiteren muss ein Instrumentarium erarbeitet werden, mit dessen Hilfe das Tragverhalten und die Funktionsfähigkeit von Gebirge (sowohl als Tragelement wie auch als geologische Barriere) und geotechnischen Barrieren (als Verbundkonstruktionen von umgebendem Gebirge und bautechnischen Abdichtungs- / Tragelementen) analysiert und mit hinreichend zuverlässiger Sicherheit prognostiziert werden können.

Es ist daher Ziel des Vorhabens, unter Nutzung und durch zusätzliche Erweiterung bestehender Software, das vom Antragsteller entwickelte Infiltrationsmodell nach *Lux* mit den notwendigen Modifikationen auf verschiedene Fluide als Infiltrationsmedium zu übertragen und anzuwenden. Aufbauend auf abgesicherten laborativen Erkenntnissen soll herausgearbeitet werden, welche Erweiterungen zukünftig erforderlich sind, um das vorhandene Infiltrationsmodell auch auf Gase als Infiltrationsmedium anwenden zu können.

Die Validierung des Infiltrationsmodells erfolgt in einem ersten Schritt durch die Simulation von Laborversuchen (back-analysis). Durch die Anwendung auf ein exemplarisches Grubensystem ist eine weitere Validierung des Infiltrationsmodells beabsichtigt (Plausibilitätsanalyse).

Das beantragte Vorhaben trägt dazu bei, die Prädiktionsqualität der für eine Prognose des Langzeitverhaltens und der Barrierenintegrität erforderlichen Nachweise zu erhöhen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Infiltrationsversuche an Salzprüfkörpern mit unterschiedlichen Fluiden

AP2: Infiltrationsversuche an Salzprüfkörpern aus verschiedenen Lokationen

AP3: Anpassung / Erweiterung des vorhandenen Infiltrationsmodells (Infiltrationsraten- / Infiltrationsmengenmodell)

AP4a: Implementierung des erweiterten Infiltrationsmodells und Kopplung an das FEM-Programm MISES3

- AP4b: Implementierung des erweiterten Infiltrationsmodells und Kopplung an das FDM-Programm FLAC3D
- AP5: Versuche an vollständig oder teilweise axial gelochten Prüfkörpern
- AP6: Validierung der rechnerischen Simulation des Infiltrationsprozesses anhand laborativer Untersuchungen an speziellen Prüfkörpern
- AP7: Demonstration der Wirkungsweise der Simulationssoftware INFIL anhand von exemplarischen Beispielen
- AP8: Abschlussbericht

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

- AP1: Infiltrationsversuche mit Tracer-Flüssigkeit, gesättigter Salzlösung und Gas sind abgeschlossen. Infiltrationsversuche mit Tracer-Flüssigkeit bei einem signifikant höheren Druckniveau sind größtenteils abgeschlossen.
- AP2: Infiltrationsversuche an Salzprüfkörpern aus unterschiedlichen Lokationen sind abgeschlossen.
- AP3: Im Berichtszeitraum wurde der Modellierungsansatz zur Infiltration von Fluiden in ein Salinargebirge nicht weiter modifiziert. Die Implementierung des bisherigen Ansatzes wurde bereits abgeschlossen und an Beispielrechnungen validiert.
- AP4: Die Implementierung des Modellierungsansatzes wurde abgeschlossen.
- AP5: Infiltrationsversuche an teilweise axial gelochten Prüfkörpern sind abgeschlossen.
- AP6: Die Validierung des Infiltrationsmodells und der Simulationssoftware anhand von ausgewählten Laborversuchen sowie Feldmessdaten ist abgeschlossen.
- AP7: Arbeiten zur Demonstration der Wirkungsweise der Simulationssoftware INFIL an verschiedenen Beispielen sind abgeschlossen.
- AP8: Arbeiten am Abschlussbericht sind abgeschlossen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP1/2: Keine.
- AP3: Keine.
- AP4: Keine.
- AP5: Keine.
- AP6: Keine.
- AP7: Keine.
- AP8: Keine.

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

*Wolters, R., Lux, K.-H. & Düsterloh, U. (2009): Fluid Infiltration Processes into Rock Salt Barriers resulting from Fluid Pressure Build-Up due to Convergence, Thermal Expansion and Gas Generation. Vortrag bei der EC-TIMODAZ-THERESA THMC conference.*

*Wolters, R., Lux, K.-H. & Düsterloh, U. (2009): Evaluation of Rock Salt Barriers with Respect to Tightness: Influence of Damage, Sealing/Healing and Fluid Infiltration. Als Abstract eingereicht für das 44. US Rock Mechanics Symposium, Vortrag in Vorbereitung.*

<b>Zuwendungsempfänger:</b> K-UTEK AG Salt Technologies, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1395</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 615.337,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Heuchel	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Weiterentwicklung und Optimierung bestehender Magnesiabinder-Systeme für Verschlussbauwerke in Untertage-Deponien und atomaren Endlagern im Salinar unter besonderer Berücksichtigung der Langzeitsicherheit, der Resistenz gegenüber zutretenden Lösungen, der Beherrschung der maximalen Abbinde-temperaturen und der Bereitstellung eines praktikablen Verfahrens.

Das Projekt beginnt mit der Grundlagenuntersuchung an Magnesiabindersystemen zum einen auf Basis von Alkali-Phosphaten (INW) und zum anderen auf Basis von Oxysulfaten (K-UTEK). Erfolgsversprechende Baustoffabstimmungen sollen in Folge umfangreicher Eignungsuntersuchungen im Labor unterzogen werden (INW, IBB). Daran schließen sich Handhabungsversuche zur Einbringung und Verarbeitbarkeit der Baustoffe (K-UTEK, IBB) sowie ein kleintechnischer Versuch im m<sup>3</sup> - Bereich an.

Das Vorhaben wird auf der Basis der Zusammenarbeit durch folgende Institutionen bearbeitet:

- Institut für Bergbau, TU Clausthal
- Institut für Nichtmetallische Werkstoffe, TU Clausthal
- K-UTEK AG Salt Technologies – bis 31.12.2007 Kali-Umwelttechnik GmbH (K-UTEK), Sondershausen

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die AP6 und AP7 wurden abschließend bearbeitet:

- Erprobung eines optimierten Systems in einer kleintechnischen Versuchsanlage
- Erarbeitung des Abschlussberichtes

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

Der kleintechnische Versuch mit einer ausgewählten Magnesiabinder-Rezeptur auf Sulfatbasis wurde bis zum 14.09.2009 weitergeführt. Dabei wurde eine Stirnseite mit einer 30 %igen  $MgCl_2$ -Lösung beaufschlagt und nach Konsolidierung des Probekörpers schrittweise druckbeaufschlagt. Über einen Zeitraum von 371 Tagen wurden Drücke, Temperaturen sowie Verformungen an der Versuchseinrichtung an verschiedenen Stellen des Probekörpers registriert und ausgewertet. Dabei zeigte sich, dass der Probekörper Lösung aufnimmt und leicht quillt. Nach der Druckbeaufschlagung – zunächst mit 3 bar, später mit 5 bar, 10 bar, 15 bar und kurzzeitig mit 20 bar – konnte der Druck nicht stabil gehalten werden, was neben dem Eindringen geringer Lösungsmengen in den Probekörper auf eine Phasenumwandlung innerhalb des Probekörpers hindeutete, die sich durch spätere röntgenografische Phasenuntersuchungen bestätigte.

Nach Beenden des Versuches wurde der Probekörper mittels Kernbohrungen beprobt und die an verschiedenen Stellen des Probekörpers entnommenen Proben chemisch und röntgenografisch untersucht, um mögliche Strukturveränderungen nachzuweisen und das Eindringen der beaufschlagten Lösung zu verfolgen.

Als Ergebnis der Forschungsarbeiten ist es gelungen, eine handhabbare und brauchbare Rezeptur für das Oxisulfatsystem zu entwickeln und darzustellen, die für spezielle Anwendungen – z. B. zeitweilige Bauwerke, wie Strömungsbarrieren – im Salinar gezielt einsetzbar ist.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Das Forschungsprojekt wurde zum 30.09.2009 beendet.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1405</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 330.406,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Langefeld	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Weiterentwicklung und Optimierung bestehender Magnesiabinder-Systeme für Verschlussbauwerke in Untertage-Deponien und atomaren Endlagern im Salinar unter besonderer Berücksichtigung der Langzeitsicherheit, der Resistenz gegenüber zutretenden Lösungen, der Beherrschung der maximalen Abbinde-temperaturen und der Bereitstellung eines praktikablen Verfahrens.

Das Projekt beginnt mit der Grundlagenuntersuchung an Magnesiabindersystemen zum einen auf Basis von Alkali-Phosphaten (INW) und zum anderen auf Basis von Oxysulfaten (K-UTEK). Erfolgsversprechende Baustoffabstimmungen sollen in Folge umfangreicher Eignungsuntersuchungen im Labor unterzogen werden (INW, IBB). Daran schließen sich Handhabungsversuche zur Einbringung und Verarbeitbarkeit der Baustoffe (K-UTEK, IBB) sowie ein kleintechnischer Versuch im m<sup>3</sup> - Bereich an.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagenuntersuchung zur Optimierung der Magnesiabinder-Alkali-Phosphat-Baustoffe (INW)
- AP2: Grundlagenuntersuchung zu dem Magnesiabinder Oxysulfat-System (K-UTEK)
- AP3: Gefügeuntersuchung an den Magnesiabindersystemen auf Phosphat- und Sulfat-Basis (INW)
- AP4: Untersuchungen zu den Eigenschaften der Baustoffe unter geomechanischen Gesichtspunkten (IBB)
- AP5: Handhabungsversuche (IBB, K-UTEK)
- AP6: Erprobung optimierter Systeme in einer kleintechnischen Versuchsanlage analog FuE-Projekt 02C1214 (K-UTEK)
- AP7: Versuchsauswertung, Abschlussberichte, Verwertungskonzept (alle Verbundpartner)



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

- Untersuchungen zur Haftscherfestigkeit und Zugfestigkeit, durchgeführt durch die Materialprüfanstalt für Werkstoffe und Produktionstechnik (MPA) Hannover.
- Tests des Baustoffes auf Phosphatbasis (INW); dieser wurde auf Steinsalzproben der K+S KALI GmbH aufgebracht.
- Mittlere Scherfestigkeitswert des MgO Baustoffs auf Phosphatbasis beträgt  $21,6 \text{ kN}$ .
- Mittlere Haftzugfestigkeit des MgO Baustoffs auf Phosphatbasis  $0,73 \text{ N/mm}^2$ .
- Weiterführung der Erstellung des Abschlussberichtes.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Abgabe des Abschlussberichtes (bis 31. März 2010).

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1415</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 290.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Wolter	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel ist die Entwicklung einer gebrauchsfähigen neuartigen Magnesiabinder-Rezeptur mit phosphatischer bzw. sulfatischer Bindung auf der Basis salinärer und/oder salinar-kompatibler Grundstoffe, die

- ein dichtes Gefüge entwickelt (minimale Lösungs- und Gaspermeabilität),
- gegenüber bisherigen Systemen eine deutlich höhere Wasser- und Laugenresistenz aufweist,
- eine entsprechend den geomechanischen Anforderungen ausreichende Stützwirkung und Kriechfähigkeit entwickelt und aufrechterhält,
- leicht einzubringen ist,
- keinen Verdichtungsaufwand erfordert, sondern durch autogene Quellreaktionen selbstverdichtend ist, kraftschlüssig an das umgebende Gestein anbindet, den Quelldruck dauerhaft aufrechterhält und über eine sekundäre Quellung bei Lösungszutritt Umläufigkeiten unterbindet,
- wenig Reaktionswärme freisetzt, um übermäßige Selbsterwärmung zu vermeiden und
- gemessen an den hohen Anforderungen, kostengünstig ist.

Weiterhin soll das Erhärtungsverhalten so steuerbar sein, dass – unbeschadet eines schnellen Erstarrens – die bei der Reaktion entstehende Wärme über einen langen Zeitraum emittiert und dabei auch gut aus dem Verschlussbauwerk abgeleitet werden kann.

Mineralische Bindemittel werden üblicherweise zusammen mit Mineralkörnungen als Verbundwerkstoff konzipiert. Die Magerung verfolgt dabei mehrere Ziele:

- Minimierung des Bindemittelanteils
- Minimierung des Anmischflüssigkeitsbedarfes
- Minimierung der Reaktionswärme bezogen auf den Baustoff insgesamt
- Verbesserte Wärmeableitung ins Nebengestein
- Schneller Aufbau des Expansionsdruckes durch Verminderung der anfänglichen Porosität
- Anpassung der Kriecheigenschaften an das umgebende Wirtsgestein
- Kostenersparnis.

Nach Abschluss dieser umfangreichen Untersuchungen gehen wir von einem Entwicklungsstand aus, der eine Bergerprobung bzw. einen großtechnischen Versuch (Versuchsdamm) zulässt.

## **2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete**

- Rezepturenentwicklung
- Kalorimeteruntersuchungen
- Auswertung der in der Triaxialzelle des IBB getesteten Proben
- Herstellung neuer Probenkörper
- Gaspermeabilität (2. Hj. 2009)
- REM-Untersuchungen (2. Hj. 2009)
- Ermittlung der Ursache für die plötzlich auftretenden hohen Eindringtiefen (2. Hj. 2009)

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

Die im vorherigen Bericht beschriebene Problematik über unerwartet hohe Eindringtiefen konnte durch Änderung der Mischprozedur beseitigt werden. Dies konnte in weiteren Triaxialversuchen ermittelt werden.

Im 2. Halbjahr 2009 wurde als weitere Kenngröße die Gaspermeabilität des entwickelten Baustoffes gemessen. Zudem sind REM-Untersuchungen an den am IBB in der Triaxialzelle getesteten Zylindern durchgeführt worden.

## **4. Geplante Weiterarbeiten**

Erstellung des Endberichtes.

## **5. Berichte, Veröffentlichungen**

Dipl.- Chem. Dittmar Lack, K-UTEC AG Salt Technologies

Prof. Dr. Albrecht Wolter, TU Clausthal:

"Magnesiabinder als Baustoff für Strömungsbarrieren und Verschlusselemente - Erprobung optimierter Systeme", Fachgespräch Verschlussysteme, 20. und 21. Oktober 2009, TU Bergakademie Freiberg

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1426</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS		
<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 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 503.928,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Moog	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es wird eine einheitliche, umfassende und konsistente thermodynamische Referenzdatenbasis zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozessen für die derzeit in Deutschland diskutierten oder bereits realisierten Wirtsformationen untertägiger Entsorgungseinrichtungen erstellt. Besonderer Wert wird auf eine lückenlose Dokumentation und Rückverfolgbarkeit von Datenbankeinträgen gelegt. Es ist vorgesehen, den bereits in anderen Datenbasen vorhandenen Datenbestand zu integrieren. Eine Datenbank dient als zentrale, gemeinsame technisch-wissenschaftliche Basis, um schrittweise eine konsistenten Datenbasis für relevante thermodynamische Informationen für das System des ozeanischen Salz und für ausgesuchte toxische Elemente zu entwickeln. Gleichzeitig hilft sie bei der Identifikation von Wissenslücken und beim Entwurf von Strategien zu deren Schließung. Im weiteren Verlauf des Vorhabens werden Werkzeuge zur Verfügung gestellt, um automatisiert anwendungsspezifische Parameterdateien aus der Datenbank zu generieren. Es wird eine geeignete Strategie entwickelt, um die Rückverfolgbarkeit jedes Einzeldatums in diesen Parameterdateien bis zur Primärliteratur zu gewährleisten. Die Parameterdateien werden über das Internet der interessierten Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt. Damit wird auch eine nützliche Informations-Rückkopplung an die Bereitsteller der Datenbank ermöglicht. Das Vorhaben THEREDA wird in enger Abstimmung mit den Vorhaben THEREDA-RN (BMWi) und THEREDA-SZ (BfS) durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Planung, Strukturierung und Aufbau einer Datenbank zur Aufnahme thermodynamischer Daten
- Entwicklung einer Nutzerschnittstelle zur qualitätsgesicherten Eingabe von Daten in die Datenbank
- Entwicklung, Ergänzung und Dokumentation konsistenter thermodynamischer Datenbasen für Zink, Chrom, Kobalt, Nickel, Kupfer, Arsen, Cadmium, Quecksilber, Blei und Eisen bei 25 °C
- Qualitätsmanagement: Entwicklung von Guidelines zur Bewertung thermodynamischer Daten und zur Aufstellung von Schätzwerten; Validierungen; Durchführung von Konsistenzprüfungen

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

Projektmanagement:

Im Berichtszeitraum erfolgte die Organisation und Durchführung einer Projektbesprechung.  
Koordination des Gesamtvorhabens.  
Verfassen des Abschlussberichts.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Das Projekt wird im Rahmen des Projekts „WeDa-II“ fortgeführt.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1436</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD		
<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 30.09.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 109.732,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Brendler

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundprojektes mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln und der TU Bergakademie Freiberg ist die Erstellung 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.

Im weiteren Verlauf des Vorhabens werden Werkzeuge zur Verfügung gestellt, um automatisiert anwendungsspezifische Parameterdateien aus der Datenbank zu generieren. Die Parameterdateien werden über das Internet der interessierten Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt. Damit wird auch eine nützliche Informations-Rückkopplung an die Bereitsteller der Datenbank ermöglicht.

## 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  
(Sammeln, Auswerten und Auswählen von Daten und Übertragung in ASCII-Dateien für späteres Einlesen in die Datenbank, FZD: stoffliche Schwerpunkte As und Fe<sup>III</sup>)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1: Projektmanagement

- Erarbeitung des Entwurfs des Abschlussberichtes
- kontinuierliche Pflege und Aktualisierung der Intranetseiten unter [www.thereda.de](http://www.thereda.de)
- Aktualisierung des CMS von Joomla! Version 1.0 auf 1.5
- Umzug auf neuen Server und Aktualisierung von Softwarekomponenten
- Umsetzung von verbesserten Backupstrategien

#### AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation

- Hauptverantwortliche Fertigstellung von Kapitel 4 (Qualitätssicherung) und 7 (Datenausgabe) des Handbuchs, Mitarbeit an weiteren Kapiteln

#### AP3: Datenmanagement: Datenbank, Filter, Parameterdateien

- Iterative Verbesserung der Dateneingabetools (gemeinsam mit GRS)
- Arbeit am Exportmodul für das generische Datenformat

#### AP4: Datenbasis für Schwermetalle und Arsen

- Abschluss der Literaturrecherche, Datenbewertung und -eingabe erfolgten

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Projekt abgeschlossen, da aber THEREDA ein Langfrist-Vorhaben ist, erfolgt weiterhin eine kontinuierliche Pflege der Intranetseite.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Altmaier, V. Brendler, S. Gester, S. Hagemann, H.-J. Herbert, C. Marquardt, H. C. Moog, V. Neck, A. Richter, T. Scharge, W. Voigt, S. Wilhelm, T. Willms, G. Wollmann:  
„THEREDA - A thermodynamic reference database for nuclear waste disposal in Germany”.  
Talk at the 238<sup>th</sup> ACS National Meeting & Exhibition (Fall 2009), August 16-20, 2009, Washington DC, USA, Abstract ID#: 1284436.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1446</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF		
<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 30.09.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 30.09.2009
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 99.646,00 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 Rossendorf ist die Entwicklung einer einheitlichen, umfassenden und konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozessen für die derzeit in Deutschland diskutierten oder bereits realisierten Wirtsformationen untertägiger Entsorgungseinrichtungen. Hierzu bilden die beteiligten Projektpartner einen Kreis von Experten, der vorhandene thermodynamische Stoffgrößen sammelt, nach einheitlich vorher festgesetzten Kriterien bewertet und in einer Datenbank zusammenfasst. Besonderer Wert wird auf eine lückenlose Dokumentation und Rückverfolgbarkeit von Datenbankeinträgen gelegt. Es ist vorgesehen, den bereits in anderen Datenbanken vorhandenen Datenbestand zu integrieren. Die Datenbank hilft bei der Identifikation von Wissenslücken und beim Entwurf von Strategien zu deren Schließung.

Im weiteren Verlauf des Vorhabens werden Werkzeuge zur Verfügung gestellt, um automatisiert anwendungsspezifische Parameterdateien aus der Datenbank zu generieren. Die Parameterdateien werden über das Internet der interessierten Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt. Damit wird auch eine nützliche Informations-Rückkopplung an die Bereitsteller der Datenbank ermöglicht.

## 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 Dresden-Rossendorf, GRS Braunschweig)
- AP5: Datenbasis für das System der ozeanischen Salze (TU BAF)



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

AP1/AP2: Projektmanagement, Qualitätsmanagement

- Weiterführung der Arbeiten zur grafischen Veranschaulichung der Ergebnisse im Internet zur Dokumentation der Datenqualität für die Öffentlichkeit, erreichbar über [www.thereda.de](http://www.thereda.de) oder über <http://www.chemie.tu-freiberg.de/~voigt/thereda.html>.

Erstellung des Abschlussberichtes.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Weiterführung der Arbeiten in der Phase THEREDA II zur Einarbeitung der Systeme mit CO<sup>2</sup> und Carbonaten.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1456</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Bestimmung der Änderung des räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen nach Wechselwirkung mit Natural Organic Matter (NOM) in geologischen Formationen von Untertagedeponien		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 466.693,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Mansel	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziele dieses Projektes sind eine Erweiterung und Absicherung der thermodynamischen Datenbasis sowie eine kinetische Beschreibung des Verteilungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen, verursacht durch die Wechselwirkung mit dem Heteroatom Schwefel des NOM. Daher sind Untertagedeponie-relevante georadiochemische Untersuchungen, unter Nahfeldbedingungen im räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhalten des ternären Systems: chemotoxische Schwermetalle / NOM / Geomatrix im Rahmen des Projektvorhabens durchzuführen. Diese sollen unter den naturnahen Bedingungen der potentiellen Wirtsgesteine realisiert werden. Mit Hilfe von ICP-OES, ICP-MS und CHNOS-Analytik wird das aus nativen Substanzen extrahierte NOM hinsichtlich seiner Haupt- und Nebenbestandteile charakterisiert. Mit Hilfe der Radiotracer-technik kann der sehr niedrige Konzentrationsbereich der Schwermetalle untersucht werden. Durch Radiomarkierung des NOM ( $^{14}\text{C}$ ,  $^{125/131}\text{I}$ ,  $^{77}\text{Br}$ ) einerseits und der Schwermetalle ( $^{59}\text{Fe}$ ,  $^{64}\text{Cu}$ ,  $^{65}\text{Zn}$ ,  $^{115\text{m}}\text{Cd}$ ,  $^{203/212}\text{Pb}$ ,  $^{203}\text{Hg}$ ) andererseits werden Speziationsuntersuchungen in den drei binären Systemen (M+NOM, M+Geomaterial, NOM+Geomaterial) und dem ternären (M+NOM+Geomaterial) System unter naturnahen Bedingungen durchgeführt. Aus den natürlichen Lagerstätten bildenden Vorgängen soll ein Rückschluss auf das räumliche und zeitliche Rückhaltevermögen für toxische Schwermetalle im Wirtsgestein gezogen werden. Unter Verwendung von XANES und EXAFS sollen die Oxidationszustände des im NOM gebundenen Schwefels und Eisens bestimmt werden. Der Oxidationszustand des Schwefels hat einen wesentlichen Einfluss auf das Komplexierungsverhalten von NOM gegenüber Schwermetallen, bezogen auf die „starken Bindungsstellen“ des NOM. Das Redoxverhalten zwischen Eisen (II, III) und NOM hat einen wesentlichen Einfluss auf das Sorptions- und Migrationsverhalten des mit Schwermetallen beladenen NOM. Die erhaltenen Sorptions- und Komplexierungsdaten chemotoxischer Schwermetalle sollen in die Datenbank ISDA zur Modellerweiterung / Modellzusammenführung integriert werden. Für die Relevanz von Sicherheitsbewertungen sind diese Modelle hinsichtlich Thermodynamik und Kinetik zu aktualisieren bzw. zu erneuern.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Synthese und Reinigung von kommerziell nicht erhältlichen Radioisotopen für die Traceanalytik in geochemisch relevanten Flüssig/Fest-Phasensystemen
- Extraktion, Charakterisierung und Radiomarkierung von NOM
- Ad- / Desorptionsstudien von chemotoxischen Schwermetallen an verschiedenen Geomaterialien mittels Radioisotopen unter naturnahen Bedingungen
- Zeitabhängige Verteilungsmessungen (Ad- / Desorption) von chemotoxischen Schwermetallspezies des NOM an Geomaterialien (Granit, Sand, Kaolinit)
- Komplexierungsstudien von chemotoxischen Schwermetallen mit NOM unter Verwendung von Radioisotopen und unter naturnahen Bedingungen
- Speziation von chemotoxischen Schwermetallen im ternären System Schwermetall / NOM / Geomaterialien mit der Methode der radioaktiven Mehrfachmarkierung
- Speziation der Oxidationszustände des im NOM gebundenen Schwefels (XANES) und Bestimmung der Art der Bindung von chemotoxischen Schwermetallen; Speziation der Redoxzustände des im NOM gebundenen Eisens (II, III) (EXAFS)
- Abschließende Auswertung, Dokumentation und Schlussberichterstellung.

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Oxidationsstufen des im NOM gebundenen Schwefels wurden mit Hilfe von XANES bei ANKA/FZK vermessen. Die Röntgenfluoreszenzspektren befinden sich aktuell noch in der Auswertung.

Das Ad- und Desorptionsverhalten von Huminsäure an Granit (0,2-0,3 mm) wurde mittels Isotopenaustauschtechnik untersucht. Der Granit wurde mit einer  $^{14}\text{C}$ -markierten Huminsäure (10 mg/l; pH 6) beladen. Anschliessend wurde ein Austausch mit einer nicht-radioaktiv markierten Huminsäure durchgeführt und die desorbierte, markierte Huminsäure gemessen. Ein Ad-/Desorptionsgleichgewicht wird nach ca. zehn Stunden erreicht.

Das Komplexierungsverhalten von Zink (20  $\mu\text{mol/l}$ ) und Huminsäure (10 mg/l) wurde bei pH 6 zeitabhängig verfolgt. Nach 16 Tagen stellt sich ein Gleichgewichtszustand ein. Die Komplexbildungskonstante  $\log \beta$  beträgt  $4,87 \pm 0,37$ . Mit dieser Konstante wurde eine Speziationsrechnung in Abhängigkeit vom pH-Wert durchgeführt. Die Humatkomplexe dominieren zwischen pH 5 und 8. Oberhalb von pH 8 tritt die Hydrolyse in den Vordergrund.

Die Geomatrix Granit wurde mittels ICP-OES nach Mikrowellenaufschluss charakterisiert.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

Schlussberichterstellung.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Konrad-Wachsmann-Allee 1, 03046 Cottbus		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1466</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrogeologie und Geochemie des Gesamtsystems		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 des systematischen hydraulischen Monitorings in Zusammenarbeit mit BGR und IHU GmbH, Integration der neu errichteten Messstellen GWE Stf 1, GWE Stf 2
- Fortführung des Oberflächenwassermessprogramm (Wasserstand, Abfluss, Beschaffenheit)
- Durchführung eine Messkampagne (Abfluss und Oberflächenwasserchemie) zur Abschätzung der Grundwasserzu- und Abflüsse in die Bode im Raum Staßfurt in Zusammenarbeit mit dem LHW Sachsen-Anhalt
- Planung, Organisation, Durchführung der hydrochemischen Beprobungskampagne Grundwasser 2009 (Juli/Aug.) in Zusammenarbeit mit der IHU und dem LIAG
- Fortführung der hydrochemischen Auswertung und Interpretation und der hydrogeochemischen Modellierungen, Abgleich mit Isotopenmessungen
- Auswertung der hydraulischen Feldversuche (Hydrotests, Pumpversuche, Schachtverfüllung Leopoldshall I und II usw.) zur Analyse der hydraulischen Situation und Ableitung von Aquiferparametern (Transmissivitäten, Speicherkoeffizienten), statistische Aufbereitung der Daten, upscaling zur Parametrisierung des hydrogeologischen 3D-Modells
- Weiterarbeit am hydrogeologischen 3D-Modell, Abschluss der Aquifergeometrien im Dezember 2010
- Vorbereitung und Präsentation der Ergebnisse der einzelnen Arbeitspakete auf dem Projekt-Workshop in Kelbra, Anfertigung von Publikationen

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der hydrodynamischen Monitoring-Programme in fertig gestellten Gesamtmessnetz (Einschließlich GWE Stf 1, 2, 3, 4) bis Sommer 2010
- Weiterführung zur vertieften Auswertung der hydrochemischen und hydrodynamischen Daten in Zusammenarbeit mit TV2 (AP 2,3,5,6) und TV10, Erarbeitung einer Modellierungsdatenbasis zur exakten Abbildung der Temperaturabhängigkeit der Sättigungsverhältnisse im relevanten Temperaturbereich, hydrogeochemische Modellierungen zu Sättigungsverhältnissen, Reaktionen und Stoffumsätzen
- Abschluss des Aufbaus des hydrogeologischen 3D-Modell in Zusammenarbeit mit TV6, Parametrisierung des Modells einschließlich Definition von Randbedingungen, Mitwirkung an der Konzeption und Interpretation von Modellierungsszenarien des TV6 Mitwirkung an der Umsetzung des Konzeptes für den dichteabhängigen, reaktiven Multispecies-Transports (mit TV6)
- Gesamtauswertung der hydrogeologischen Dynamik in Zusammenarbeit mit dem Forschungsverbund, Erarbeitung des Abschlussberichtes

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

2 Beiträge (BTU, LIAG + BTU) für die geplante EDGG-Veröffentlichung des Projektverbundes (Jahnke et al. „Hydrogeologie des Raumes Staßfurt – Teil 1 Hydrodynamik“, Stadler et al.: „Hydrogeologie des Raumes Staßfurt – Teil 2 Hydrochemie und Isotopenhydrologie“)

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1476</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 2 (BGR): Geophysikalische Untersuchungen, Seismische Erkundung, Geologisches 3D-Modell, Bohrungen, Server-Datenbank, Koordination des Gesamtvorhabens		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 Inversion der elektromagnetischen (HEM) Daten in Schichtmodelle des spezifischen Widerstandes liefert Leitfähigkeitsstrukturen, die bis in maximal 150 m Tiefe zum lithologischen Aufbau, zu Störungen und Schichtgrenzen sowie zur Versalzung des Grundwassers geben. Zur direkten Integration der HEM-Profile in das geologische 3D-Modell, wurden Vertikalschnitte bezogen auf ein präzisiertes digitales Höhenmodell erstellt.

**AP Bodengeophysik / Grundwasser Monitoring / Hohlschneckenbohrungen:** Die Messungen umfassten Geoelektrikprofile über die nördliche Begrenzung des Senkungsgebietes am Strandbad Staßfurt und über den Ansatzpunkt der Bohrung GWE-STF4. In dieser erfolgten geoelektrische Messungen mit der vertikalen Elektrodenkette des TV2. Das Monitoring in den Tiefenpegeln wurde fortgesetzt. Drei von sieben Flachbohrungen (TV2) wurden zu Grundwassermessstellen ausgebaut.

**AP Laserscanbefliegung:** Für die digitale Auswertung der Befliegung wurde die Spezialsoftware LisDesktop beschafft und eine Schulung durchgeführt. Die Auswertung erfolgt durch das TV4.

**AP Seismologisches Monitoring:** Die Seismometerstationen (STF1 – STF6) wurden kontinuierlich betrieben und gewartet. Zusammen mit der Universität Stuttgart wurde ein zweites nanoseismisches Monitoring zur Verifizierung und genaueren Lokalisierung der in der Messkampagne 2008 gemessenen Signale durchgeführt. Die Installation der Bohrlochgeophone in den Bohrungen GWE-STF1 und GWE-STF2 wurde vorbereitet.

**AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung:** Die Arbeiten an den 3D-Hohlraummodellen der Salzbergwerke in Staßfurt wurden abgeschlossen. Der Bau der geologischen Grenzflächen Salzspiegel, Tertiärbasis, Quartärbasis und Top Kaliflöz wurde mit den HEM- und Seismik-Profilen fortgeführt. Bohrkerne (GWE-STF 1 u. STF2) wurden salzgeologisch und mineralogisch-geochemisch untersucht. Die Bohrungen GWE STF 3 und 4 sowie die 3. Flachbohrkampagne 2009/10 (geophysikalische Anomalien) wurden beplant. Die Bereiche Strandbad und Berlepsch/Maybach wurden kartiert.

**AP Server-Datenbank, Tiefbohrung und Koordination des Gesamtprojekts:** In Kelbra fand der 3. Workshop mit dem Beirat und ein Jour-Fixe in Staßfurt statt. Das TV2 hat die Bohrungen GWE-STF3 und 4 geteuft. Außerdem wurden Tiefenproben in GWE-STF1 und 2 genommen und in 6 Bohrungen laseroptische Fließrichtungs- und Geschwindigkeiten gemessen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP Hubschraubergeophysik:** Die Interpretation der Ergebnisse der Hubschraubergeophysik zusammen mit weiteren geowissenschaftlichen Informationen hinsichtlich einer geologischen und hydrogeologischen Deutung im weiten Umfeld des Staßfurt-Egelner Sattels.

**AP Bodengeophysik / Grundwasser Monitoring / Hohlschneckenbohrungen:** Im Bereich des Gipshutes und der vermuteten quartären Rinnen sind Flachbohrungen zur Klärung von Geologie und HEM-Anomalien geplant. Abschließende bodengeophysikalische Messungen zur Charakterisierung von Strukturelementen und die Multi-parameter-Tiefenprofilierungen neuer Bohrungen.

**AP-Hohlschneckenbohrungen:** In Zusammenarbeit mit BTU Cottbus (TV 1) und IHU Stendal (TV 5) werden vom TV2 sechs weitere Erkundungsbohrungen mit Messstellenausbau durchgeführt.

**AP Seismisches Monitoring:** Die kontinuierlichen seismischen Messungen und die Datenanalyse werden fortgesetzt. In den Bohrungen GWE-STF1 und STF2 werden Bohrlochgeophone installiert. Die Datenauswertung wird mit den Ergebnissen des nanoseismischen Monitorings optimiert.

**AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung:** Die geologischen Informationen der Hohlraummodelle werden mit den seismischen, geoelektrischen und HEM-Profilen sowie den revidierten alten und neuen Bohrungen (GWE-STF1, 2 und 3) zu geologischen 3D-Modellen für repräsentative Teilbereiche der Sattelstruktur (z. B. Quartärrinne am Solfeld) kombiniert. Die Gravimetrie der GGL Leipzig wird in das Modell integriert.

**AP Server-Datenbank, Tiefbohrung und Koordination des Gesamtprojekts:** Die Datenpflege wird fortgesetzt. Messungen zur Grundwasserdynamik und ein 4. Workshop sind und geologische Diplommkartierungen (Univ. Mainz) und eine Masterarbeit (Univ. Münster) sind geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Poster: GeoDresden2009, Altbergbau-Kolloquium Leoben; Vorträge: Univ. Münster, Halle, DGG Kiel; Veröffentlichung: GERARDI, J. (Hrsg.): Forschungsverbundvorhaben „Dynamik...“ 2. Workshop Kelbra 2009 -- Statusseminar, EDGG, Hannover (im Druck).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1486</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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

Inhaltlicher Schwerpunkt der im Projektjahr 2009 durchgeführten Arbeiten waren die Arbeitspakete AP4, AP5 und AP6. Übergeordnetes Ziel der Arbeitspakete AP4, AP5 und AP6 ist es, das über Tage beobachtete Senkungs- und Bruchgeschehen durch numerische Berechnungen abzubilden, da erst durch den Nachweis einer rechnerisch möglichen Reanalyse des vergangenen Bruch- und Senkungsgeschehens eine in die Zukunft gerichtete Analyse des Senkungs- und Bruchgeschehens möglich und zulässig erscheint.

Zur Klärung der besonderen Randbedingungen, die ursächlich für den Tagesbruch im Bereich des Strandbades geführt haben, wurde das für die Prognose und Simulation von Tagesbrüchen am Profil C-C (Ater Markt) entwickelte rechnerische Instrumentarium zur Berechnung des Tragverhaltens im Profilschnitt GWE STF 2 ( $\approx$  Strandbad) eingesetzt. Im Ergebnis der Berechnungen konnte eindeutig gezeigt werden, dass weder die für den Profilschnitt „Strandbad“ vorgegebene Abbaukonfiguration noch der angesetzte geotektonische Gebirgsaufbau geeignet sind, die über Tage beobachteten Bruch- und Senkungsprozesse abzubilden. Ursächlich für den Tagesbruch „Strandbad“ müssen vielmehr gegenüber der aufgezeigten bergbaulichen Situation deutlich größere Hohlraumvolumina und tektonische Schwächeelemente im hangenden Deckgebirge sein. Mit dem Ziel aufzuzeigen, welche Hohlraumkonfiguration in Verbindung mit tektonischen Schwachstellen im hangenden Deckgebirge zur Ausbildung des über Tage beobachteten Tagesbruches geführt haben könnten, wurden entgegen der im Bereich der Gebirgsmechanik sonst üblichen Vorgehensweise Simulationsberechnungen für variierte Hohlraumkonfigurationen und Gebirgseigenschaften durchgeführt und die jeweils rechnerisch resultierenden Bruch- und Senkungsprozesse bzgl. Tagesbruchgröße (max. Vertikalverschiebung an der Tagesoberfläche) und Tagesbruchform (laterale und vertikale Ausbildung der Senkungs- bzw. Bruchmulde) den messtechnischen Befunden gegenüber gestellt. Im Ergebnis der rechnerischen Analyse wird postuliert, dass das untertägig anstehende Hohlraumvolumen deutlich größer ist als die aus dem alten Risswerk zu entnehmende bergbauliche Abbaukonfiguration und das im hangenden Deckgebirge tektonische Schwächezonen anstehen müssen. Fachliche Erörterungen bzgl. einer möglichen Aussolung zusätzlicher Hohlraumvolumina im Rahmen des Ersaufungsprozesses mit K-UTEK haben bestätigt, dass Hohlraumvolumina von bis zu 60.000m<sup>3</sup> physikalisch erklärt werden können. Auch haben detaillierte Analysen der seismischen Profile gezeigt, dass deutliche Indikatoren für geotektonische Schwächezonen im Bereich des Strandbades vorhanden sind. Vorbehaltlich der noch nicht abschließenden ortsdiskreten Festlegung der geotektonischen Befunde bleibt zunächst jedoch festzuhalten, dass die bisher erarbeiteten Ergebnisse zur Interpretation der Seismik und zum Lösungsgeschehen während des Ersaufungsprozesses die gebirgsmechanischen Ansätze im Grundsatz bestätigen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Rechnerische Untersuchungen zum Tragverhalten im Profilschnitt GWE STF2 ( $\approx$  Strandbad) für variierte Hohlraumkonfigurationen und Berücksichtigung möglicher Schwächezonen (Trennflächen) im Deckgebirge
- Analyse der Berechnungsergebnisse zur Klärung der Ursachen für die bruchhaften Deformationen im Profilschnitt Strandbad
- Eingabe der Laborversuchsergebnisse in die Datenbank
- Schlussbericht

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

In Vorbereitung - 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>  01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b>  643.387,00 EUR	<b>Projektleiter:</b>  Allendorf	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Abfrage des unkorrigierten Datensatzes für die Befliegung von 2007 bei TopScan. Nach Erhalt und Sichtung der Daten wurde mit der Neubearbeitung und Neuberechnung (Differenzenberechnungen) begonnen. Kontrolle der Daten und Test einer zusätzlichen Auswerte- und Darstellungssoftware (November 2009).
- AP3: Die zweite Befliegungskampagne durch TopScan wurde umgesetzt. Lieferung und Sichtung der Daten ist erfolgt. Kontrolle der Daten und Test einer zusätzlichen Auswerte- und Darstellungssoftware (November 2009).
- AP5: Koordinierung des Mess- und Untersuchungsprogrammes der GWE 2. Für die Bohrungen 3 & 4 erfolgte durch K-UTEC die Erstellung der Leistungsverzeichnisse und der Leistungsbeschreibungen. Zusätzlich erfolgte die Umsetzung von Tiefenprobenentnahmen aus den Bohrungen 1 & 2

(Bohrung 1: 26.11.2009, Bohrung 2: 09.12.2009). Die entnommenen Grundwasser- und Gelöstgasproben wurden im Labor der K-UTEC chemisch untersucht.

- 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 Archivrecherchen im Landeshauptarchiv Dessau, Landeshauptarchiv Wernigerode und der Universitätsbibliothek Jena.
- AP7: Archivrecherchen mit den Schwerpunkten „Chemische Zusammensetzung der Zu- und Abflüsse“ sowie „Chemisch- mineralogische Zusammensetzung der Salzgesteine“.
- AP9: Archivrecherche zu den Themenschwerpunkten „Bergbauinduzierte Bruchvorgänge in den Bergwerken“ und „Tagesbrüche in Staßfurt“.
- AP11: Erarbeitung und Bereitstellung von Grundlagen zur Beurteilung der Tagesbruchgefahr. Zusätzlich wurden auch hier Archivrecherchen in den genannten Archiven durchgeführt. Beschreibung der Mechanismen der Tagesbruchentstehung sowie Vorstellung der Archivergebnisse über „Tagesbrüche in Staßfurt“ in einem Vortrag des Workshops in Kelbra.
- AP12: Archivrecherchen zu Senkungen und Senkungsursachen sowie Ableitung der Auswirkungen auf das Stadtgebiet Staßfurt. Beschaffung und Bewertung von Vermessungsdaten der Firma GEOMETRIK (2000-2008). Einbeziehung und Analyse alter gravimetrischer Daten zum Auffinden verschütteter Senkungsmulden.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Abschluss der Berechnungen der Höhendifferenzen mit Hilfe der Laserscan-Daten. Homogenisierung der Datensätze aus den verschiedenen Erfassungsjahren zum sinnvollen rechnerischen Vergleich der Daten. Test der LIS Software.
- AP3: Homogenisierung der Daten, Berechnung, Darstellung und Interpretation der Höhendifferenzen. Darstellung des Gesamtergebnisses. Zusätzlich Test der LIS Software.
- AP5: Aufbereitung & Zusammenstellung der Erkundungsergebnisse der Tiefbohrungen. Berichterstellung.

Fortführung von Recherchearbeiten zur Vervollständigung der Montanhistorie im Bergschadensraum.

- AP6: Fortführung von Arbeiten zur Ableitung und Erstellung der Grundlagen für das aktualisierte Hohlraummodell anhand lösekinetischer Untersuchungen und der Auswertung der Senkungsentwicklung im Untersuchungsgebiet.
- AP7: Berechnung der gelösten Salzvolumina in Carnallitit- und Kainititbereichen in Leopoldshall und Ableitung von Schlussfolgerungen. Ein noch nicht beschriebener Transportprozess wurde untersucht, es erfolgte die Abschätzung der Lösevorgänge in den abgesoffenen Gruben v. d. Heydt/Manteuffel, Achenbach mit Übertritt der Lösungen aus Leopoldshall. Die Kinetik der Auflöse- und Aussalzungsprozesse wurde abgeschätzt, Experimentelle Untersuchungen durchgeführt und bei den Untersuchungen der Tagesbrüche mitgewirkt.
- AP8: Analyse vorhandener und zu recherchierender Daten, um In-situ-Parameter für eine geomechanische Modellbildung abzuleiten.
- AP9: Darstellung und Klassifizierung der geologisch-tektonischen Störungselemente und der bergbauinduzierten Bruchvorgänge im Bereich des Bergschadensgebietes.

#### 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

Veröffentlichung der Vorträge des 2.Workshops zum Forschungsverbundvorhaben „Staßfurt II“ (in Vorbereitung)

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

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur- Hydro- und Umweltgeologie mbH, Dr.-Kurt-Schumacher-Str. 23, 39576 Stendal		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1506</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 Zeitraum 28.-30. Juli 2009 erfolgte zusammen mit Projektpartnern die letzte umfassende Kampagne des Grundwassermonitorings mit der Beprobung und Untersuchung von insgesamt 29 Aufschlüssen. 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 den ergänzenden geowissenschaftlichen Erkundungsbohrungen GWE STF 3 und 4. Die Bauleistungen der Bohrungen erfolgten im Verantwortungsbereich der BGR (TV2). Die Vor-Ort-Fachbegleitung und geologische Bohrungsaufnahme erfolgte durch die IHU (TV5).

Das Vorprofil der GWE STF 3 auf dem Gelände der Sodawerke ging von einer nur ca. 6 m mächtigen Überdeckung des Gipshutes mit Lockergesteinsmaterial aus. Stattdessen wurde ein fast 60 m mächtiges Quartärprofil aus überwiegend sandig-schluffigen Wechselfolgen sowie kiesigen Ablagerungen erbohrt. Der Gipshut wurde in einer Teufe von 59,5 m unter GOK erreicht. Durch technische Schwierigkeiten konnte die Bohrung nicht mehr bis Ende 2009 fertiggestellt werden.

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.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten im Teilvorhaben werden inhaltlich wie geplant, jedoch mit zeitlicher Verzögerung fortgeführt. Die Schwerpunkte sind die Arbeitspakete 2 und 3: „Erweiterung der Datenbasis durch Bohrungen und geophysikalische Messungen“ sowie „Hydrogeologische Analyse von Strömungsvorgängen und Austauschprozessen“. Anfang 2010 soll die Bohrung GWE STF 03 fertig gestellt werden. Ergänzende Flachbohrungen sollen im Februar 2010 erfolgen. Im Anschluss an den Messstellenbau wird die abschließende Beprobung durchgeführt werden. Die gewonnenen Daten der Geologie, Hydrogeologie und Hydrochemie werden erfasst, geprüft, aufbereitet und den Partner zur Verfügung gestellt.

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

Im zurückliegenden Berichtszeitraum erfolgte die Veröffentlichung der „Ergebnisse der Forschungsbohrungen GWE STF 1/08 und 2/09“ (Thormeier 2009) im EDGG, Sonderheft 242 – Dynamik abgeöffneter oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> DHI-WASY GmbH, Waltersdorfer Str. 105, 12526 Berlin		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1516</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009
<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, und 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 Konzeptionelle Schichtung zum Ausbau des 3D-Modells erfolgte durch Abstimmung mit der BGR (TV2: Hammer-Gruppe) und der BTU Cottbus (TV1). Demnach sind 10 hydraulische/hydrogeologische Einheiten für die vertikale Diskretisierung maßgeblich. Entsprechend dem Bearbeitungsstand vom Nov. 2009 ergibt sich mit weiterer Aufteilung des Bundsandsteins in drei Schichten und durch Berücksichtigung der im nordöstlich vorkommenden Keuper- und Muschelkalk-Schichten ein hydrogeologisches Strukturmodell mit insgesamt 15 hydrogeologischen Einheiten, welche als primäre Modellschichten des 3D-GW-Modells gelten.

Im Lauf der Modellkalibrierung und durch neuen Kenntnisgewinnung aus erzielten Ergebnissen der anderen Projektpartner wurden die GW-Entnahmen und Wasserhaltungsmaßnahmen im Bereich Förderstedt sowie Löderburger Seen als Randbedingungen im 3D-Modell berücksichtigt. Zur Berücksichtigung der zusätzlichen Grundwasserentnahmenbrunnen in Förderstedt und der Wasserhaltung Löderburger Seen wurde das bestehende Modellnetz lokal verfeinert, um die Randbedingungen für die Förderbrunnen und die Seen gemäß ihrer genauen Lage gut abzubilden.

*Ergebnisse der GW-Strömungsmodellierung:*

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. Die Rückwärts-Bahnlinien zeigen anschaulich, woher das von den Wasserhaltungsbrunnen geförderte Grundwasser zufließt. Die Vorwärts-Bahnlinien geben Hinweise darauf, wohin das ins Grundwasser infiltrierte Seewasser abströmt.

*Sonstige Modellierungsarbeiten:*

Es wurden verschiedene Modelle zur Untersuchung dynamischer Prozesse des Lösens und Fällens von Salzen in Anwendung gebracht. Bei der Salzfällung wurden ebenso konstitutive Beziehungen zur Zementierung des Porenraumes berücksichtigt, um eine Limitierung der maximal ausgefällten Mengen zu erreichen.

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

- Weiterführende Kalibrierung des präzisierten 3D-Strömungsmodells anhand von Stichtagsmessungen zur Überprüfung der Plausibilität der berechneten (regionalen) GW-Strömungsverhältnisse; Analyse der Wasserbilanzen
- Komplettierung des dichtegekoppelten 3D-Stofftransportmodells; Simulation der regionalen Salztransportprozesse unter Berücksichtigung beobachteter Salzkonzentrationsverteilungen
- Weiterführende Modellstudien und Szenarienberechnungen
- Auswertung der vorliegenden Temperaturmessungen zusammen mit BTU um Rückschlüsse auf advective Prozesse (Wasserwegsamkeiten) zu gewinnen

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

Zwei Vorträge auf internationalen Tagungen wurden gehalten:

W. Rühaak, J. Luo and H.-J.G. Diersch, Groundwater modeling for an abandoned and flooded historical salt mine. *International FEFLOW User Conference*, Potsdam (September 14-18, 2009).

W. Rühaak, J. Luo and H.-J.G. Diersch, 3D modeling of brine flow - a case study for a flooded salt mine. *International Mine Water Conference*, Pretoria, South Africa (October 19-23, 2009).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1526</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009
<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 2.1 an den Bohrkernen und Proben der LABG-Bohrungen sind abgeschlossen. 12 Kernproben der STF 1 und STF 2 wurden entnommen und werden gegenwärtig entsprechend AP2.1 zusätzlich bearbeitet.

- AP2.2: In 05/08 wurde eine Diplomarbeit zur Charakterisierung von Riss- und Kluftsystemen mit Hilfe des optischen Kernscanverfahrens begonnen. Im Rahmen dieser Arbeit sollen u. a. Daten geophysikalischer Bohrlochmessungen mit den Kernscannerdaten korreliert werden, um eine nachträgliche räumliche Orientierung der Kernbohrungen zu ermöglichen. Die Konzeption und der methodische Ansatz für das Korrelationsverfahren sind entwickelt. Die Diplomarbeit wurde im Dezember 2009 krankheitsbedingt aufgegeben. Die Aufgabenstellung, Korrelation der Kernscan- und Akustiklog-Daten und somit die Nachorientierung der Bohrkern ist abgeschlossen und die Ergebnisse zusammengefasst. Ein nachträglicher Einbau der nachorientierten Kernscans in die Saltcorebase wird geprüft.
- AP2.3: Zwischenergebnisse des AP sind im EDGG-Sonderband (Enzmann et al., 2009) erschienen und werden ausführlich im zu erstellenden Abschlussbericht dargestellt.
- AP2.4: Hier 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 erste 2D/3D Simulationen. Eine massive Parallelisierung zur Effektivitätssteigerung wird gegenwärtig bearbeitet und die Migration auf das HPC-Cluster des Rechenzentrums der Universität Mainz wird vorbereitet. Weiterhin wird die Simulationssoftware um einen Term erweitert, der Kluftfüllungen innerhalb der zu simulierenden Strukturen berücksichtigen kann. Die Ergebnisse dieser Simulationen gehen direkt in AP2.6 ein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Erste experimentelle Ergebnisse der PET-Untersuchungen (TV 8) können mit den Ergebnissen der XCT-Befunde korreliert werden. Interessanterweise zeigen sich dort nicht erwartete Transportphänomene (Kulenkampff 2009) die im Zuge der APs beider Projekte weiter untersucht werden.

Schwerpunkt in der aktuellen Projektphase ist AP2.4 und 2.5, d. h. die Modellierung der hydraulischen Parameter auf Basis der Mikrostrukturen und soweit verfügbar dem Vergleich mit den experimentellen PET-Befunden.

Im Zuge der XCT Messungen sind Strahlaufhärtungseffekte aufgetreten. Im Rahmen des Projektes werden parallel Korrekturverfahren erarbeitet. Eine 1,5D Lösung ist bereits in Verwendung und ein 2D/3D Korrekturverfahren wird erarbeitet und im Rahmen des Projektes getestet.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Enzmann, F., Meier, T., Janz, M., Jovanovic, Z., Rheingans, K., Schwarz, J.-O., Göbbels, J., Kersten, M. (2009): Bestimmung durchflusswirksamer Porosität an Bohrkernproben mittels Computer-Tomographie. EDGG (Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften DGG).

J. Kulenkampff, M. Wolf, M. Gründig, M. Richter: Tomographic Investigations of Transport Processes with Radiotracers in Evaporitic Rock and its Hanging Wall in Staßfurt.

EDGG (Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften DGG).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1536</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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

AP6: Es wurde eine Reihe von Untersuchungen an einem mechanisch vorbelasteten Bohrkern aus TV 3 durchgeführt, wobei die Fließraten variiert wurden. Erstmals wurde bei diesem Experiment mit Hilfe eines Gamma-Durchfluss-Zählers synchron die Durchbruchkurve mit hoher Genauigkeit aufgezeichnet, die bemerkenswerte und mit anderen Methoden nicht detektierbare zeitliche Schwankungen ergab. Aufgrund gelegentlicher Verstopfungen, die entweder auf mobilisiertes Feinmaterial oder auf ausgefallene Lösungsbestandteile zurückzuführen sind, konnte allerdings zeitweise kein konstanter Durchfluss eingehalten werden. Die Identifizierung der Ursache der Verstopfung (Feinmaterial oder Fällungsprodukte) sollte möglichst z. B. mit Hilfe radioaktiver Markierungstechniken erfolgen; sie ist von großer Bedeutung für das Verständnis des Fluidtransports und prozessbedingter Änderungen von Transportpfaden. Die tomographischen Darstellungen zeigen stark lokalisierten Fluidtransport innerhalb des insgesamt höchst durchlässigen Klufnetzwerkes. Die quantitative Analyse der Ergebnisse ist Gegenstand aktueller Arbeiten.

AP7: Die Bildgebung konnte durch geeignete Korrekturen erheblich verbessert werden. Hierzu wurde die Rekonstruktionssoftware überarbeitet, um eigene Routinen für die Korrektur gestreuter Strahlung und für den Schwächungsausgleich einfügen zu können. Die Ursache eines stark störenden, überlagerten Gradientenfeldes konnte identifiziert und teilweise behoben werden. Phantommessungen deuten auf weitere Optimierungsmöglichkeiten hin, die genutzt werden sollen, um den störenden Einfluss von Artefakten zu minimieren und somit die quantitative Auswertung sicherer zu machen. Die Möglichkeiten zur Visualisierung und Quantifizierung wurden durch neue Beschaffungen (Avizo Fire mit Visilog von vsg) deutlich verbessert, so dass nun Algorithmen der statischen 2-3D-Bildanalyse in einfacher Weise angewendet werden können. Zusammenfassende Parameter für 3D-zeitabhängige Prozesse können aber gegenwärtig noch nicht mit routinemäßig anwendbaren Verfahren abgeleitet werden. Das Potential geostatistischer Verfahren (z. B. Variogramme) für diese Zwecke wird zurzeit geprüft.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Verbesserte Bildrekonstruktion aller bisherigen Messungen nach dem aktuellen Stand der Methodik und quantitative Auswertung (z. B. Geschwindigkeitsverteilung, effektives Transportvolumen).
- CT-Untersuchungen der geomechanisch belasteten Proben gemeinsam mit TV7.
- Einfache Modellrechnungen und statistische Untersuchung zur Skalierung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Kulenkampff, M. Wolf, M. Gründig, M. Richter: Tomographic Investigations of Transport Processes with Radiotracers in Evaporitic Rock and its Hanging Wall in Staßfurt. EDGG (Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften DGG).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik (LIAG), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1546</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 9 (GGA-S1): Deckgebirgseigenschaften über einem bergbaubedingt destabilisiertem Untergrund, abgeleitet aus seismischen Beobachtungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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-UTEK) 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

Die fortgeführte Bearbeitung der seismischen Daten erfolgte mit Priorität im Hinblick auf die gemeinsam mit dem TV2 durchgeführte geologische Interpretation, basierend auf den Erkenntnissen aus den verfügbaren Bohrungsdaten sowie den aus dem Grubenhohlraummodell abgeleiteten Informationen. Ein besonderer Stellenwert wurde dabei der räumlichen Korrelation von Störungsmustern im Bereich der Südwestflanke des Sattels südlich der Bode beigemessen. Hier ergeben sich - nach entsprechender 3D-Darstellung und basierend auf den Störungsindikationen der dort vermessenen seismischen Profile - sattelparallel nahe der Hutgrenze verlaufende Störungsstrukturen, die sich in ähnlicher Form auch in der bislang vorliegenden Version der LIDAR-Abbildung (TV4) darstellen und weitgehend mit dem kartierten Verlauf (LAGB) der Senkungs- bzw. Verbruchgeschehnisse korrelieren. Basierend auf den bisher erarbeiteten Parametern zur Zeit-Tiefen-Konversion erstrecken sich die Tiefenlagen der Störungsstrukturen vom Deckgebirge bis in den Bereich der Grubenhohlräume. Eine weitere Verfolgung dieser Strukturen bis an die Oberfläche bzw. in tiefere Bereiche der Salzstrukturen ist aufgrund der Akquisitionsparameter des P-Wellen-Datenmaterials derzeit nicht belastbar möglich und bedarf weiterführender Untersuchungen.

Bei der weiteren Bearbeitung der S-Wellenprofile konnten Erfolge bei der Reduzierung starker Störsignale unterschiedlicher Ursache erzielt werden. Ebenso werden eine ungewöhnlich hohe Dämpfung im Bereich des Deckgebirges und Abweichungen im Funktionsablauf der Scherwellenquelle nicht ausgeschlossen. Am Profil

Mühlengraben konnte exemplarisch gezeigt werden, dass sich nach entsprechender Datenbearbeitung sowohl hohe Strukturauflösungen von ca. 1 m im Bereich der quartären Überdeckung als auch belastbare Informationen über Scherwellengeschwindigkeiten aus dem Oberbau des darunter folgenden Deckgebirges ableiten lassen. Damit konnten elastische Parameter wie z. B. das Poisson-Verhältnis in Form von 2D-Profileschnitten aus den Geschwindigkeitsfeldern der P- und S-Wellen berechnet werden, die Rückschlüsse auf Wassersättigung und mechanischer Festigkeit der geologischen Schichten zulassen. Hierbei ermittelte Poisson-Verhältnisse im Bereich 0.4-0.49 indizieren eine starke mechanische Entfestigung und hochgradige Wassersättigung des Deckgebirges bis in einen detektierbaren Tiefenbereich von ca. 140 m unter Geländeoberfläche.

Im Zeitraum 25.-28.8.2009 wurde eine kombinierte 2D-3D-seismische Messkonstellation mittels P-Wellen über den historischen Erdfall Strandsolbad durchgeführt. Die im Vergleich zu industriellen Maßstäben zwar einfache, aber gezielt auf den Untergrund im Umfeld des Strandsolbads ausgelegte und erstmals im Bereich Staßfurt durchgeführte experimentelle Messung bildete den Abschluss der Messaktivitäten im Projektrahmen. Sie wurde unter anderem durch den Beirat während des Projektworkshops im März in Kelbra angeregt. Im Vorfeld durchgeführte Simulationsrechnungen (sogen. Survey-Design) setzen dabei die jüngst erweiterte LIAG-Ausrüstung von 288 Datenkanälen sowie dafür verfügbares Personal und Transportfahrzeuge möglichst effizient ein. Die Auslegung und Durchführung der mit einem Rasterabstand von 2.5 x 2.5 m hoch auflösend parametrisierten Messung wurde vor dem Hintergrund der dafür generell problematischen Rahmenbedingungen in Staßfurt gemeistert. Außerdem begünstigten die geringe Bebauung, das Entgegenkommen von Pächtern und Grundbesitzern der landwirtschaftlichen Flächen sowie die besonders hilfreiche Unterstützung der Stadt Staßfurt dieses Experiment.

Für den aktuellen Bearbeitungsstand des 3-D-seismischen Datensatzes konnte eine angenäherte Tiefenkonversion basierend auf einer Projektion des Sonic-Log aus der Bohrung STF2 für eine erste Interpretation erarbeitet werden. Der Bearbeitungsstand zeigt die Untergrundstruktur als eine komplizierte 3D-Situation, welche mit einer 2-D-Seismik mit hoher Wahrscheinlichkeit nicht hätte erfasst werden können. Es wird eine Richtungsänderung des Sattelstreichens nach Süden abgebildet, die die Lage der Hutgrenze ca. 100 m weiter südwestlich zeigt als bisher angenommen. Dies führt insbesondere zu einer veränderten Modellvorstellung der geometrischen Lage des Strandsolbads relativ zum Sattel.

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

Der Projektmitarbeiter Thomas Leder wird das LIAG auf eigenen Wunsch mit Auslaufen seines Arbeitsvertrages zum 28.02.2010 verlassen. Für die noch verbleibenden, abschließenden Projektarbeiten wird ein Antrag auf kostenneutrale Umwidmung der noch verbleibenden Mittel gestellt, um die ausstehenden Arbeiten im Rahmen der Projektlaufzeit bis zum 31.12.2010 abschließen zu können. Für eine fachlich adäquate und zeitlich nahezu kontinuierliche Übernahme der Arbeiten liegt die Zusage einer möglichen Mitarbeiterin vor.

Die diesem Bericht anschließenden Arbeiten werden sich mit besonderem Schwerpunkt der weiteren Bearbeitung und Interpretation der 3D-seismischen Daten am Strandsolbad sowie der peripheren 2D-Profile widmen. Hier stehen noch Arbeiten zur genaueren Integration der Bohrungsdaten der Bohrung STF2 sowie zur neuen geologischen Gesamtbewertung der speziellen Situation am Strandsolbad aus. Die Sonic-Log Daten der neuen Bohrung STF4 sind mit denen der STF2 abzustimmen und in das Gesamtmodell zu integrieren. Weiterhin erfolgt die sukzessive Einbindung und Interpretation der seismischen Ergebnisse in das im Rahmen des TV2 in der Erstellung befindliche geologische Modell. Aufgrund der auf aktuellen Bohrungen und Seismik basierenden neuen Erkenntnisse über die geologischen Situationen im Bereich Strandsolbad und auch im Bereich des Sodawerkes sind hier noch iterative Aktualisierungen an den bestehenden Interpretationen durchzuführen. Bei der neuen Bohrung STF3 ist eine kleinräumige, eintägige Testmessung zur seismischen Überprüfung der dort nicht erwarteten Situation mit ca. 60 m mächtigen quartären Sedimenten eingeplant.

Bei der Scherwellenbearbeitung soll die Ableitung seismischer Geschwindigkeiten für die Formationen des Deckgebirges ausgedehnt werden, um mehr Stützstellen für die Bestimmung von elasto-mechanischen Formationsparametern zu generieren. Hier sollen speziell auch Refraktions- und Tauchwellenmethodiken auf ihre methodische Eignung untersucht werden.

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

Die Veröffentlichung der auf dem Workshop in Kelbra im März 2009 präsentierten Ergebnisse in der Zeitschrift EDGG steht noch aus. Der Beitrag des TV9 ist seit September 2009 redaktionell abgearbeitet. Ein Posterbeitrag in Kooperation mit dem TV3 erfolgte im Rahmen der Tagung GEO-Dresden ebenfalls im September 2009. Ein Beitrag im Rahmen der DDG-Tagung im März 2010 wurde angemeldet.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik (LIAG), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1556</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 253.554,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Frechen	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das TV10 umfasst folgendes Arbeitsprogramm:

- Pflege des Datenbestandes inkl. Datenrecherche und Erweiterung des Altdatenbestandes
- Isotopenhydrologische Probennahme vor Ort aus den Tiefbohrungen und aus den Flachpegeln
- Isotopenhydrologische Messanalytik im Labor. Untersuchung der stabilen Isotope, Tritium, Tritium/<sup>3</sup>Helium, <sup>14</sup>C-Datierung, FCKW und SF<sub>6</sub>.
- Dateninterpretation:
  - Bestimmung der 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

Nach Einbeziehung hydrochemischer und geophysikalischer (Hubschrauberelektromagnetik) Projektdaten wurde Ende Juli/Anfang August in Staßfurt eine finale Probenahme durchgeführt, die Erkenntnisse zu Salzaufstieg und Versüßungszonen im quartären Lockergesteinsaquifer berücksichtigt.

Weiterhin wurde die Analytik der Grundwasserproben auf  $^2\text{H}$ ,  $^{18}\text{O}$ ,  $^{14}\text{C}$  (LIAG Hannover),  $^3\text{H}$ ,  $^3\text{He}/^4\text{He}$ ,  $^{20}\text{Ne}/^{22}\text{Ne}$  (Universität Bremen), FCKW/SF6 (Spurenstofflabor Oster, Wachenheim) fortgeführt und weitestgehend beendet. Die Strontiumisotopenanalytik ist noch fortlaufend und wird derzeit Untersuchungen der Magnesiumisotopie einzelner Proben komplementiert. Die Auswertung und Modellierung der einzelnen Umweltraceregebnisse zur Bewertung von Grundwasserverweilzeiten in den einzelnen Aquiferstockwerken wird derzeit fortgeführt. Mit dem Ausscheiden von Frau Dr. S. Stadler im September 2009 aus dem Staßfurt-Projekt war die Stelle bis Mitte November unbesetzt. Die abschließenden isopenhydrologischen Arbeiten haben sich dadurch etwas verzögert. Seit Mitte November konnte mit Frau Dr. N. Varunny eine Wissenschaftlerin gewonnen werden, die die isopenhydrologische Dateninterpretation zum Abschluss bringen wird.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Fortlaufende Analytik und Interpretation gewonnener Daten Hierbei wird in enger Zusammenarbeit mit der BTU Cottbus verfahren. Die letzten Wasserproben werden derzeit im LIAG-Labor (stabile Isotope und  $^{14}\text{C}$ -Datierung) sowie weitere Vergabe von Analytaufträgen (Tritium und Helium) bearbeitet. Die abschließende isopenhydrologische Interpretation erfolgt im 1. Halbjahr 2010.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Stadler, S., Jahnke, C., Bohn, A. (im Druck): Hydrogeologie des Raumes Staßfurt – Teil 2 Hydrochemie und Isopenhydrologie. - EDGG (Exkursionsführer und Veröffentlichungen der Deutschen Gesellschaft für Geowissenschaften) - Sonderband.

Bohn, A., Diersch, H.J., Herrmann, F., Jahnke, C., Luo, J., Rühaak, W., Stadler, S., Voigt, H.J., Walter, N. (eingereicht): Forschungsverbundvorhaben »Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerks« - Hydrogeologische Prozesse und deren Beziehungen zu Bergbaufolgeschäden im ehemaligen Kalibergbau der Stadt Staßfurt - Analyse und Modellierung. Abstract, GeoDresden 2009, 30.09.-02.10.2009.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1577</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 31.07.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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), 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 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 überprüfte der Zuwendungsempfänger zunächst die im Projekt entwickelte Formulierung zur Modellierung des Kriechbruchs mit dem CDM anhand neuer Laborversuchsergebnisse des Partners IfG. Es zeigte sich eine gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den Messdaten, so dass eine Nachkalibrierung der Parameterkennwerte nicht erforderlich war. Anschließend konnte der Zuwendungsempfänger in einigen Simulationsrechnungen mit seiner CDM-Implementation in FLAC-3D aufgetretene numerische Probleme beheben. Mit dem modifizierten Code wiederholte er die Studie zum Einfluss der Modelldiskretisierung auf Simulationsergebnisse. Dazu wurden 34 unterschiedlich fein vernetzte Kammer-Langpfeiler-Modelle mit einer konstanten Pfeilerstauchungsrate von  $1E-5$  1/s bis in den Nachbruchbereich belastet. Die Ergebnisse zeigen, dass der simulierte schlanke (halbe) Modellpfeiler mit mindestens  $8 \times 11$  Elementen vernetzt werden muss, um verlässliche (vernetzungsunabhängige) Ergebnisse zu liefern.

Mit seinem entsprechend verfeinerten FLAC-3D-Modell des gemeinsam allen Partnern vorgegebenen Ausschnitts der Grube Angersdorf führte der Zuwendungsempfänger anschließend eine Reihe von Kriechsimulationen bis weit über 100 Jahre nach der Auffahrung der untertägigen Hohlräume durch. 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 weitergeführte Simulation bis zum Berechnungsende liefert eine Prognose der künftigen Entwicklung.

Seine Zwischenergebnisse präsentierte der Zuwendungsempfänger auf dem 8. Projektworkshop am 12.11.2009 beim IfG Leipzig. Außerdem stellte er die Arbeiten und Ergebnisse des Verbundes auf dem 38. Geomechanik-Kolloquium am 13.11.2009 in Leipzig vor.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2010 wird der Zuwendungsempfänger die Kriechsimulationsrechnungen mit dem Modell des Grubenausschnitts Angersdorf abschließen, auswerten, und den Einzelbericht über sein Teilvorhaben erstellen. Daneben wird er die Berechnungsergebnisse der Partner zur Entwicklung der Spannungen, Verformungen, Dilatanz, Schädigung und Permeabilität im Modell Angersdorf vergleichen sowie gemeinsam mit dem IfG den Synthesebericht des Verbundprojekts erstellen.

Außerdem wird er die Koordination des Vorhabens sowie die Organisation der nächsten Projektworkshops weiterführen und sich an der Planung und Durchführung der Abschlussveranstaltung beteiligen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

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

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1587</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 31.07.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 2009 die In-situ-Messungen in der Grube Teutschenthal bzw. Angersdorf im Wesentlichen abgeschlossen, wobei die Pfeilerquerdehnungsmessungen auch im 2. Halbjahr weitergeführt wurden. Daraus kann für den Messhorizont zwischen den Kammern VIII und IX eine Pfeilerquerdehnungsrate von ca. 4 mm/a abgeschätzt 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 vor den eigentlichen Frac-Messungen gewonnen wurden, konnten Permeabilitäten und Porositäten ermittelt werden. Die Permeabilitäten im Pfeilerkern liegen bei 10-20 m<sup>2</sup>, die entsprechenden Porositäten bei ca. 0,002.

Mit dem FLAC-3D-Modell des gemeinsam für die Benchmark-Modellrechnungen ausgewählten Ausschnitts der Grube Angersdorf und auf der Basis der gesteinsmechanischen Anpassungen wurden mit beiden Stoffmodellen 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 zeigte.

Das IfG hat im zweiten Halbjahr 2009 mit der Erstellung der Einzelberichte für die In-situ-Messungen, die Modellierungsarbeiten mit dem Stoffmodell nach MINKLEY sowie mit dem Stoffmodell nach GÜNTHER/SALZER begonnen.

Weiterhin hat das IfG die Durchführung des 8. Workshops, der am 12.11.2009 am IfG in Leipzig stattfand, organisiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

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

Weiterhin ist die aktive Teilnahme am öffentlichen Ergebnis-Workshop am 15. und 16. April in Clausthal geplant.

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

GÜNTHER, R.-M. (2009): Erweiterter Dehnungs-Verfestigungs-Ansatz, Phänomenologisches Stoffmodell für duktile Salzgesteine zur Beschreibung primären, sekundären und tertiären Kriechens. Veröffentlichungen des Institutes für Geotechnik der TU Bergakademie Freiberg, Heft 2009-4

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Karlsruher Institut für Technologie, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1597</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 31.07.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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

Das Institut für Nukleare Entsorgung (INE) beteiligt sich an dem aktuellen Verbundprojekt mit dem Finiten Elementen Rechenprogramm ADINA und mit dem im ersten Teil des Vorhabens entwickelten Stoffmodell für Steinsalz.

Die im Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Um den numerischen Aufwand zu begrenzen und den Einfluss mehrerer Stoffmodellkennwerte zu untersuchen, wurde zunächst ein vereinfachtes Modell des vorgegebenen Ausschnitts der Grube Angersdorf entwickelt, bei dem nur die westliche Grubenstrecke und die Abbaukammer berücksichtigt sind. Parallel dazu wurden die ergänzenden Laborversuche (Kriechversuche) der IfG - Leipzig und TU - Clausthal ausgewertet, um die Stoffparameter neu anzupassen. Bemerkenswert ist, dass die berechneten Volumendehnungen (Dilatanz) des Steinsalzes um die beiden Hohlräume sehr gering ausfällt. Um die rechnerische Effizienz der in ADINA verfügbaren numerischen Integrationsmethoden bzw. der Iterationsverfahren zu bestimmen, wurden ebenfalls verschiedene Testrechnungen durchgeführt.
- Weitere Simulationsrechnungen unter Berücksichtigung eines verfeinerten Modells, bei dem alle Hohlräume jedoch nicht die Verbindungsstrecken betrachtet sind, wurden begonnen. Die jeweiligen Rechenergebnisse zum Zeitpunkt 50 Jahren nach der Auffahrung sollen bei der nächsten Projektsitzung in Karlsruhe vorgestellt werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2010 wird der Zuwendungsempfänger die Simulationsrechnungen mit dem verfeinerten ADINA - Modell des Grubenausschnitts Angersdorf abschließen, auswerten und den Einzelbericht über sein Teilvorhaben erstellen.

### 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): 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> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 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 hat im aktuellen Berichtszeitraum die Diskretisierung des Modells Grube Angersdorf weiter angepasst. Dadurch konnte die Elementanzahl von rd. 135.000 Zonen auf rd. 75.000 Zonen reduziert und eine Verkürzung der Berechnungszeit erreicht werden. Dem gegenüber ist die Zonenanzahl um die Hohlräume erhöht worden, um einen qualitativ genaueren Verlauf der Zustandsgrößen im hohlraumnahen Gebirgsbereich zu erzielen.

Im Hinblick auf die Stoffgesetzimplementierung wurden Benchmarkrechnungen an kleinen Modellen durchgeführt. Dazu wurden einfache Modelle berechnet, für welche analytische Lösungen für die Spannungs- und Dehnungsverteilung vorlagen. Außerdem wurden die Ergebnisse mit Resultaten eines zweidimensionalen FEM- Programms verglichen. Das Ergebnis der Benchmarkrechnungen zeigte, dass die Qualität der Ergebnisse der Flac3D – Berechnungen schon bei reinen stationären Kriechberechnungen ohne Schädigung sehr stark vom gewählten Zeitschritt abhängt. Diese Tatsache machte eine Bewertung der Ergebnisse komplexer Berechnungen unmöglich.

Nach Rücksprache mit der Firma Itasca wurde entschieden, den transienten und stationären Kriechanteil des Stoffgesetzes IUB\_MDCF neu zu formulieren und durch jene des Stoffgesetzes LUBBY 2 zu ersetzen. Während am IUB die Stoffgesetze IUB\_MDCF und Lubby 2 mit dem Programmsystem UT2D seit Jahren verwendet werden, ist das Stoffgesetz Lubby 2 im Programmsystem Flac3D zusätzlich seit Jahren in Betrieb. Hieraus ergibt sich der Vorteil, dass für die primären und sekundären Kriechanteile keine gesonderten und teils aufwendigen Testrechnungen mehr durchgeführt werden müssen. Die Dehnungsrate aus Schädigung wird im Stoffgesetz IUB\_MDCF zur Dehnungsrate aus Kriechmechanismen hinzuaddiert. Die Ergebniskontrolle zeigt, dass ein Austausch der Formulierung der Kriechmechanismen möglich ist.

Die Implementierung der Neuformulierung des Stoffgesetzes IUB\_MDCF ist abgeschlossen und die durchgeführten Benchmarkberechnungen zeigen qualitativ und quantitativ überzeugende Ergebnisse.

Diese Entwicklung wurde auf dem 7. Workshop in Leipzig dem Projektträger und den Projektpartnern vorgestellt.

Des Weiteren wurden die Parameter für die Neuformulierung des Stoffgesetz IUB\_MDCF angepasst und das Modell der Grube Angersdorf wie von den Projektpartnern festgelegt berechnet. Die Berechnungszeit liegt für eine 100-jährige Kriechberechnung bei rd. 3,5 Tagen. Somit ist es dem Zuwendungsempfänger möglich- verschiedene Berechnungen an dem Modell Grube Angersdorf vorzunehmen und eine Anpassung der Stoffgesetzparameter an die vorhandenen In-Situ-Daten durchzuführen.

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

Es werden weitere Berechnungen zur Anpassung an die In-Situ-Daten mit dem Modell Grube Angersdorf durchgeführt und orientiert an den Vorgaben der Projektpartner ausgewertet. Verschiedene Einzelergebnisse der verschiedenen Berechnungen werden auf dem 8. Workshop in Karlsruhe vorgestellt. Des Weiteren wird die noch ausstehende Diskretisierungsstudie durchgeführt. Parallel wird der Einzelbericht angefertigt und eine Ergebnispräsentation für den Abschlussworkshop im April unter Vorgaben der Projektpartner erstellt und präsentiert.

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

Aktuelle Literatur zum IUB-MDCF Stoffgesetz und zum Vorgängerprojekt:

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

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

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

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

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

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1617</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 31.07.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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: Der beim Projektpartner TUC geplante Kriechversuch mit konstanter mechanischer Belastung bis zum Eintreten des tertiären Kriechens ist abgeschlossen.
- AP3: Sowohl die Modelldiskretisierung als auch die Bestimmung der Stoffmodellkennwerte sind bereits im vorhergehenden Berichtszeitraum abgeschlossen worden.
- AP4: Die 3D-Modellrechnungen des Grubenausschnittes Angersdorf ist im vorliegenden Berichtszeitraum begonnen worden.
- AP5: Mit der Erstellung des Einzelberichts ist im vorliegenden Berichtszeitraum begonnen worden.
- AP6: Keine.
- AP7: Der 8. Workshop wurde im November 2009 durchgeführt. Neue Labordaten und die Berechnungsergebnisse der 3D-Modellrechnung des Grubenausschnittes Angersdorf wurden vorgestellt.
- AP8: Keine.
- AP9: Keine.

### **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: Vergleich der Stoffmodelle, Verfahrensweisen und Ergebnisse der Modellrechnungen sowie Ausarbeitung von Empfehlungen.
- AP7: Durchführung weiterer Workshops und Treffen der Projektpartner zur Darstellung und Diskussion wichtiger Zwischenergebnisse.
- AP8: Durchführung eines Ergebnis-Workshops.
- AP9: Erstellung eines Abschlussberichts und einer Veröffentlichung.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1628</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung - Phase 2, Kurztitel: WeDa-II		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2009 bis 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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:
  - Abschluss der Planungen für ein generisches Datenformat („JSON-Format“)
  - Abnahme der durchgeführten Arbeiten der Firma LINEAS
  - Beginn von Programmierarbeiten zur Erstellung eines Programms, das Daten im JSON-Format in eine Parameterdatei für das Programm Geochemist's Workbench umwandelt
- Datenerfassung: -
- Datenbewertung: -
- Qualitätsmanagement: -
- Dokumentation: -
- Thermodynamische Datenbasis für Phosphat: Die Literatur wurde weiter ausgewertet und so Lücken, für die eigene experimentelle Daten notwendig sind, identifiziert. Für das System  $K_2HPO_4$ -KCl- $H_2O$  wurden mittels isopiesticen Versuchen sieben Isoaktivitätslinien bestimmt. Die daraus hervorgehenden binären Daten sind in guter Übereinstimmung mit schon vorhandenen Literaturdaten. Die Versuche für vier Aktivitätslinien des Systems  $K_2HPO_4$ - $K_2SO_4$ - $H_2O$  sind angesetzt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Datenbank: Korrekturen und Anpassung gemäß Beschlüssen des Verbunds, Planung für das Speichern von Sorptionsdaten
- 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
- Thermodynamische Datenbasis für Phosphat:
  - Weitere Auswertung von Literatur und damit die Identifizierung relevanter Festphasen von Calcium- und Magnesiumphosphaten für die Planung von Löslichkeitsversuchen
  - Weiterführung von isopiesticen Versuchen, bevorzugt Systeme mit den Spezies  $H_2PO_4^-$  und  $HPO_4^{2-}$ .

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1638</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Bentonit als Barrierematerial für den Abschluss von Untertagedeponien - Abschließende Versuche und eine Zusammenstellung von Wissenschaft und Technik (Kurztitel: Bentonit-Barrieren)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2009 bis 31.12.2011		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 für die Gasanalysen notwendigen Gaschromatograph wurde beschafft und installiert sowie auf seine Funktionsfähigkeit überprüft. Eine Literaturrecherche bezüglich der Löslichkeiten der vorgesehenen Gase (Wasserstoff, Methan, Kohlendioxid, Schwefelhexafluorid) in Wasser, NaCl-(sat) und IP 21- Lösung ergab z. T. keine verwertbaren Daten, so dass die entsprechenden Werte experimentell ermittelt werden müssen. Mit diesen Untersuchungen wurde begonnen. Zur Einschätzung der hydraulischen Durchlässigkeit wurde die Permeabilität für Gas mit Argon zu  $2,75 \times 10^{-15} \text{ m}^2$  ermittelt.

Im Rahmen der Untersuchungen an MX 80-Material wurden die Diffusionszellen beschafft, die Probekörper in den Messzellen auf die vorgegebene Dichte von  $1.6 \text{ g/cm}^3$  kompaktiert und an das Analysesystem angeschlossen. Mit den Untersuchungen wurde begonnen.

Zum Testen der Funktionsfähigkeit von GeoSys/RockFlow für Diffusionsprozesse von gelösten Gasen wurde eine 1D reaktiver Stofftransportbenchmark auf der Basis realer Laborergebnisse definiert und simuliert.

AP2: Die Diffusions-Messzellen wurden getestet. Die Diffusionsuntersuchung mit den Schadstoffen Pb, Zn und Cd in NaCl-Lösung wurde begonnen.

Zum Testen der Funktionsfähigkeit von GeoSys/RockFlow für Diffusionsprozess wurde ein Diffusionsexperiment für gesättigten Bentonit mit reiner NaCl-Lösung (1,0 M) anhand von Literaturdatn simuliert.

AP3: Schwermetalle können Komplexe bilden. Beispielsweise bildet Blei in salinärer Lösung sogar Komplexe als Anionen, die niedrigere Diffusionskoeffizienten als bei Kationen aufgrund der negativen Oberflächladung von Montmorillonit aufweisen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: - Weiterführung der Gaslöslichkeitsmessung in IP21-Lösung  
 - Gastransportversuche mit gesättigten und teilgesättigten Proben  
 - Testen der Funktion von Simulationsprogrammen für ungesättigte Materialien  
 - Modellierung der Untersuchungsergebnisse

AP2: - Weiterführung der Diffusionsuntersuchungen mit Schwermetallen  
 - Modellrechnung unter Berücksichtigung von hoher Salinität

AP3: - Weiterführung der Literaturstudie über Bentonitbarrieren für UTD.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Moog, H.-C., M. Xie und U. Noseck (2010): 1D reactive transport modelling of infiltrating groundwater, interacting with UO<sub>2</sub> in the Ruprechtov aquifer system, Applied Geochemistry (to be 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 Safeguardstechniken und -methoden		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Kernmaterialüberwachung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2009 bis 30.04.2013	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.05.2009 bis 31.12.2009	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 627.229,00 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

Programmpunkte und Arbeitspakete sind

- 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: Erarbeitung eines Konzeptvorschlags.
- Geologische Endlagerung: Mitarbeit in der Safeguards-Expertengruppe der IAEO auf der Sitzung in Wien im Juni; Planung eines Messprogramms.
- Datenfernübertragung: Fortsetzung des Dialogs mit Euratom zum vorgeschlagenen technischen Ansatz in Abstimmung mit den Betreibern und BMWi.



- ESARDA: Mitarbeit in den Arbeitsgruppen „Containment and Surveillance“, „Verification Technologies and Methodologies“ sowie Leitung der und Mitarbeit in der Arbeitsgruppe „Integrated Safeguards“, Mitarbeit im Editorial Committee; Vortrag und Sitzungsleitung auf der Jahrestagung; Mitarbeit in der Audit-Arbeitsgruppe.
- 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).
- AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis: Mitarbeit in den safeguardsbezogenen Gremien.
- Standing Advisory Group on Safeguards Implementation (SAGSI): Mitarbeit bei der IAEA.
- Zusatzprotokoll und Implementierung von Integrated Safeguards: Beratung von Betreibern; Unterstützung des BMWi bei Anfragen von IAEA und Euratom, Erstellung von Arbeitspapieren, Teilnahme an Treffen im Mai, Juni, Juli und September, Kommentierung von Vorlagen Dritter.
- IAEA-Inspektionsberichte: Erfassung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Veranstaltung eines Seminars über die Anwendung spieltheoretischer Methoden auf Verifikationsprobleme bei Nuklearkontrollen im Dezember in Wien.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Am 22. Oktober 2009 fand bei der Deutschen Gesellschaft für Auswärtige Politik ein Expertengespräch statt zum Thema „From the NPT to ‚Global Zero‘: Perspectives of Nuclear Nonproliferation and Disarmament“.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Safeguards-Web-Portal: Diskussion des Konzeptvorschlags mit BMWi und Realisierung.
- Geologische Endlagerung: Planung und Beginn eines Messprogramms im Erkundungsbergwerk Gorleben.
- Datenfernübertragung: Beginn einer Realisierung für State-of-Health-Daten.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Gremien
- Safeguardstechniken: Projektabschluss für NGSS, Weiterführung von DMCA.
- Mitarbeit in den nationalen Gremien AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis.
- SAGSI: Beratende Begleitung des neuen SAGSI-Mitglieds.
- Unterstützung des BMWi bei Implementierung des Zusatzprotokolls zur Erreichung des „Integrated Safeguards“-Status für Deutschland.
- IAEA-Inspektionsberichte: Erfassung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Nichtverbreitung von Massenvernichtungswaffen und sensitiven Technologien: Expertensitzungen bei der DGAP.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Richter, B.; The ESARDA Working Group on Containment and Surveillance, Activities in 2008 - Chairman's Report; ESARDA Bulletin, No. 41, June 2009, 41-44.

Reznicek, A., Richter, B.; Assessment of the Performance of Containment and Surveillance Equipment, Part I: Methodology; ESARDA Bulletin, No. 41, June 2009, 46-50.

Reznicek, A., Richter, B., Jussofie, A.; Assessment of the Performance of Containment and Surveillance Equipment, Part II: Trial Application; ESARDA Bulletin, No. 41, June 2009, 51-61.

Reznicek, A., Richter, B., Jussofie, A.; Assessment of the Performance of Containment and Surveillance Equipment - Trial Application; Proc. 31st ESARDA Annual Meeting, Vilnius, 26.-28. Mai 2009.

Stein, M., Richter, B., Möslinger, M., Queirolo, A., Heppleston, M., Neumann, G., Lange, S.; The Next Generation Surveillance System – Development Project Overview; Proc. 31st ESARDA Annual Meeting, Vilnius, 26.-28. Mai 2009.

Stein, M., Lange, S., Möslinger, M., Neumann, G., Queirolo, A., Richter, B.; The IAEA's Next Generation Surveillance System, System Testing – Phase IV Report; Proc. INMM 50th Annual Meeting, Tucson, 12.-16. Juli 2009.

Janssens, W.A.M., Autrusson, B., Boella, M., Bril, L.-V., Gonçalves, J.G.M., Janssens-Maenhout, G.G.A., Martikka, E., Mayer, K., Peerani, P., Reznicek, A., Richard, M., Richter, B., Sevini, F., Stanley, W.T., Stein, G., Weh, R.; A Selection of Recent Achievements and Future Challenges in Safeguards R&D as Identified by the European Safeguards Research and Development Association; Proc. INMM 50th Annual Meeting, Tucson, 12.-16. Juli 2009.



## **2.4 BMWi-Hausvorhaben**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Projektträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>KWA 9003</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2008 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2009 bis 31.12.2009	
<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 02E10437, 02E10669, 02E10679, FZK/INE, BGR)

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

(Vorhaben 02E9894, 02E10045, 02E10116, 02E10377, 02E10427, 02E10437, 02E10618, FZK/INE, BGR)

Schwerpunkte der Arbeiten, die sowohl In-situ- als auch Labor-Untersuchungen umfassen, sind Untersuchungen von THM(C)-Fragestellungen, zur Migration, zum Transport und zur Rückhaltung kolloidaler und gelöster Radionuklidspezies in den technischen und natürlichen

Barrieren, Untersuchungen an technischen Verschlussmaterialien (EBS) sowie Entwicklung und Test numerischer Modelle.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Vorhaben sind eingebunden in internationale Projekte und 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 (Heater Experiment, Ventilations-Test, 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;">📖 64</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;">📖 158</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;">📖 160</span> |
| <b>DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine</b>  |  |
| 02 E 9854   | Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL, Phase 1) <span style="float: right;">📖 14</span>   |
| 02 E 10065  | Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW - Kurztitel: ISIBEL <span style="float: right;">📖 26</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;">📖 30</span>  |
| 02 E 10246  | Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU) <span style="float: right;">📖 56</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;">📖 114</span>                              |
| 02 E 10649  | Vergütung der Auflockerungszone im Salinar (VerA) <span style="float: right;">📖 116</span>   |
| 02 E 10729  | Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA) <span style="float: right;">📖 132</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 | 168 |
|-----------|--|-----|

<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 | 178 |
|-----------|--|-----|

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

- |            |   |     |
|------------|---|-----|
| 02 C 1436  | Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD  | 152 |
| 02 E 10136 | Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD  | 36  |
| 02 E 10156 | Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton | 40  |
| 02 E 10528 | Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2                                       | 92  |
| 02 E 10618 | Mikrobielle Diversität im Tongestein (Opalinus-Ton) und Wechselwirkung dominanter Mikroorganismen mit Actiniden   | 110 |

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

- |            |   |     |
|------------|---|-----|
| 02 E 10357 | Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern | 72  |
| 02 W 6259  | Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden  | 194 |

<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              | 66  |
| 02 E 10578 | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP3 - Kurztitel: A-DuR | 102 |

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


- |           |   |     |
|-----------|---|-----|
| 02 C 1244 | Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen  | 138 |
| 02 C 1426 | Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS  | 150 |
| 02 C 1628 | Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Phase 2, Kurztitel: WeDa-II  | 188 |
| 02 C 1638 | Bentonit als Barrierematerial für den Abschluss von Untertagedepotien - Abschließende Versuche und eine Zusammenstellung von Wissenschaft und Technik (Kurztitel: Bentonit-Barrieren) | 190 |




<b>02 E 9894</b>	Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt	16
<b>02 E 9944</b>	Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2	18
<b>02 E 10045</b>	Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure	22
<b>02 E 10055</b>	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL	24
<b>02 E 10075</b>	Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90	28
<b>02 E 10116</b>	Barriereintegrität des einschlusswirksamen Deckgebirges in Tonformationen (BET)	32
<b>02 E 10146</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS	38
<b>02 E 10236</b>	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	54
<b>02 E 10276</b>	Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-	60
<b>02 E 10336</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$	70
<b>02 E 10367</b>	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	74
<b>02 E 10377</b>	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	76
<b>02 E 10518</b>	Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1	90
<b>02 E 10538</b>	Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit	94
<b>02 E 10548</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	96
<b>02 E 10558</b>	Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit $d^3f$ und $r^3t$ - TP1 - Kurztitel: A-DuR	98
<b>02 E 10608</b>	Werkzeuge und Daten für die Geochemische Modellierung, Kurztitel: WeDa	108
<b>02 E 10669</b>	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2	120
<b>02 E 10689</b>	Long-Term Performance of Engineered Barrier Systems, Kurztitel: PEBS	124

- 02 E 10719 Komplettierung des Instrumentariums zur Technischen Realisierbarkeit und Sicherheitlichen Bewertung von HAW-Endlagern im Salinar (KOMTESSA)  130


**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  136


**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  104


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

- 02 E 10447 Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilität  84


**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 Untertagebauwerkes im Steinsalz; Teilvorhaben 2  180


- 02 E 10256 Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)  58


- 02 E 10659 Laboruntersuchungen des Gastransports in Trennflächen eines Verschlussbauwerkes für ein Endlager zwischen Bentonitformsteinen und zum Gebirge  118

**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  166

**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  174

- 02 C 1556 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen  176



**Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig,  
Permoserstr. 15, 04318 Leipzig**

- 02 C 1456 Bestimmung der Änderung des räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen nach Wechselwirkung mit Natural Organic Matter (NOM) in geologischen Formationen von Untertagedeponien  156
- 02 C 1536 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen  172
- 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  44



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

- 02 E 10467 Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT  88



**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  170
- 02 E 10166 Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein  42


**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  68
- 02 E 10568 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit  $d^3f$  und  $r^3t$  - TP2 - Kurztitel: A-DuR  100








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

- 02 C 1395 Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1  144
- 02 C 1496 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTEK): Grundlagen für Geomodellierung  164


- |  |   |
|--|---|
| <b>Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover</b>  |   |
| 02 C 1607  | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4 <span style="float: right;">📖 184</span>   |
| <b>Öko-Institut e.V. – Institut für angewandte Ökologie, Merzhauser Straße 173, 79100 Freiburg</b>   |   |
| 02 E 10628   | Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case <span style="float: right;">📖 112</span>   |
| <b>Projekträger Karlsruhe im Karlsruher Institut für Technologie, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen</b> |   |
| KWA 9003   | Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine <span style="float: right;">📖 198</span>   |
| <b>Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Regina-Pacis-Weg 3, 53113 Bonn</b>  |   |
| 02 E 10296   | Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d <sup>3</sup> f und r <sup>3</sup> t - Visualisierung und Datenanalyse <span style="float: right;">📖 62</span>  |
| <b>Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstraße 150, 44801 Bochum</b>   |   |
| 02 E 10437   | Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen <span style="float: right;">📖 82</span>  |
| <b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Postfach 36 40, 76021 Karlsruhe</b>  |   |
| 02 C 1597  | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3 <span style="float: right;">📖 182</span>   |
| 02 E 10126   | Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe <span style="float: right;">📖 34</span>   |
| 02 E 10206   | Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere <span style="float: right;">📖 50</span>   |
| 02 E 10679   | Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado 2 <span style="float: right;">📖 122</span>  |
| 02 E 10699   | Verbundprojekt: Entwicklung einer einheitlichen, konsistenten thermodynamischen Referenzdatenbasis für Sicherheitsanalysen zur Endlagerung nuklearer und nicht-nuklearer Abfälle - THEREDA-II; Teilprojekt FZK: Thermodynamische Datenbasis für Radionuklide <span style="float: right;">📖 126</span> |
| <b>Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg</b>  |   |
| 02 C 1446  | Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF <span style="float: right;">📖 154</span>  |
| 02 E 10457   | Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag <span style="float: right;">📖 86</span>  |

- 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  128


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

- 02 C 1355 Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrieren-Gebirge (Salinar)  142
- 02 C 1405 Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2  146
- 02 C 1415 Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3  148
- 02 C 1486 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung  162
- 02 C 1617 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5  186
- 02 E 10427 Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC  80
- 02 E 10598 Externer unabhängiger Review des im Vorhaben Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW (ISIBEL) erstellten FEP-Katalogs  106


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

- 02 E 10015 Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockerungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein  20


**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  78


**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  46

**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  48

**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  52