

Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft

PTE Nr. 36

Bericht über die im zweiten Halbjahr 2008
vom BMBF und BMWi geförderten FuE-Arbeiten zur
„Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“

Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe
Wassertechnologie und Entsorgung
(PTKA-WTE)

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
März 2009

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. Die Forschungszentrum Karlsruhe GmbH übernimmt keine Gewähr insbesondere für die Richtigkeit, Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie die Beachtung privater Rechte Dritter.

Vorwort

Die Forschungszentrum Karlsruhe GmbH betreut im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) als Projektträgerschaft 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 Forschungszentrum 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

1	Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen	1
1.1	<i>Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche *</i>	1
1.2	<i>Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse</i>	5
1.3	<i>Kernmaterialüberwachung</i>	11
1.4	<i>Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete</i>	13
2	Formalisierte Zwischenberichte	15
2.1	E-VORHABEN	15
2.2	C-VORHABEN.....	149
2.3	W-VORHABEN.....	239
2.4	BMWl-HAUSVORHABEN.....	243
3	Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....	247

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

1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

1.1 Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche

02 C 0993	Geochemische Modellierung des Langzeitverhaltens von silikatischen und alumosilikatischen Materialien im Temperaturbereich 30 °C bis 90 °C	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 152
02 C 1064	Weiterentwicklung eines TDR-Messverfahrens zur Quantifizierung von Feuchte- und Dichteverteilungen in Bentonitversuchsbauwerken	Materialforschungs- und prüfanstalt an der Bauhaus-Universität, Weimar	📖 154
02 C 1074	Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Weiterentwicklung der räumlichen Auswertung von richtungssensitiven EMR-Bohrlochmessdaten	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 156
02 C 1084	Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung eines aktiven richtungssensitiven Bohrlochantennensystems	Bergische Universität Wuppertal	📖 158
02 C 1094	Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung und Bau der Steuer- und Digitalisierungseinheit, der mechanischen Komponenten und der Datenerfassungseinheit	DMT GmbH, Essen	📖 160
02 C 1104	Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme	Bauhaus-Universität Weimar	📖 162
02 C 1114	Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme	Eberhard-Karls-Universität Tübingen	📖 164
02 C 1124	Diversitäre und redundante Dichtelemente für langzeitstabile Verschlussbauwerke	TU Bergakademie Freiberg	📖 166
02 C 1134	Untersuchungen an Calciumsulfat-Steinsalz-Baustoffen für Dammbauwerke in Untertage-Deponien und Endlagern	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 168
02 C 1204	Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leicht löslichen Salzgestein (Carnallit); Teil 2: Erprobung von Funktionselementen in situ	GTS Grube Teutschenthal Sicherungs GmbH & Co. KG	📖 170

02 C 1305	Verbundprojekt: Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswertinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. Teilprojekt Uni Leipzig: Geologie, Geoelektrik, Seismik und Szenarienmodellierung	Universität Leipzig	📖 184
02 C 1315	Verbundprojekt: Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswertinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. Teilprojekt GGA: Elektromagnetik, Georadar und Quantitative Charakterisierung von Problemzonen	Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Hannover	📖 186
02 C 1325	Verbundprojekt: Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswertinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. Teilprojekt FhG: Sonarverfahren	Fraunhofer Gesellschaft z. Förderung d. angewandten Forschung e.V. (FhG), München	📖 188
02 C 1335	Qualifizierung von Strömungsbarrieren in Salzformationen, Phase 1 bis Phase 4	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 190
02 C 1395	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1	K-UTEC Salt Technologies, Sondershausen	📖 194
02 C 1405	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 196
02 C 1415	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 198
02 C 1426	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 200
02 C 1436	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 202
02 C 1446	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF	TU Bergakademie Freiberg	📖 204
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	IIF e.V., Leipzig	📖 206

02 E 9854	Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL, Phase 1)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 20
02 E 9985	Mobilisierung von Actiniden durch mikrobiell produzierte Liganden unter Berücksichtigung der Endlagerung von radioaktivem Abfall	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 28
02 E 10025	Stabilität von Organotonen als Anionen-Adsorber unter Endlagerbedingungen – Experiment und Modellierung	Leibniz Universität Hannover	📖 34
02 E 10035	Wechselwirkungen von Actiniden mit Anorganohuminkolloiden	TU München	📖 36
02 E 10045	Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 38
02 E 10075	Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 44
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 Wirtsfornation -TemTon-	DBE Technology GmbH, Peine	📖 46
02 E 10286	Referenzkonzept für ein Endlager für radioaktive Abfälle in Tongestein (ERATO)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 82
KWA 9003	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH	📖 244

1.2 Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse

02 C 0922	Verschlussystem mit Äquipotenzialsegmenten für die untertägige Entsorgung (UTD und ELA) gefährlicher Abfälle zur Sicherstellung der homogenen Befeuchtung der Dichtelemente und zur Verbesserung der Langzeitstabilität	Universität Karlsruhe (TH)	📖 150
02 C 1244	Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 172
02 C 1254	Geochemische Barriereeffizienz im anaeroben Depositionsfeld einer UTD	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 174
02 C 1264	Beweissicherungsprogramm zum geomechanischen Verhalten von Salinarbarrieren nach starker dynamischer Beanspruchung und Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie zum dauerhaften Einschluss	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 176
02 C 1275	Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt TUC: Gekoppelte Modellierung des C:HM Verhaltens von selbstverheilendem Salzversatz	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 178
02 C 1285	Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt GRS: Laborversuche und Geochemische Modellierung	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 180
02 C 1295	Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt Uni Tübingen: Validierung Numerischer Modelle für geochemische Prozesse in geotechnischen Dichtelementen	Eberhard-Karls-Universität Tübingen	📖 182
02 C 1355	Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrierengebirge (Salinar)	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 192
02 C 1577	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1	Dr. Andreas Hampel, Mainz	📖 228

02 C 1587	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 230
02 C 1597	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH	📖 232
02 C 1607	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4	Leibnitz Universität Hannover	📖 234
02 C 1617	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 236
02 E 9783	Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittelaktiven Abfällen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 16
02 E 9793	Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittelaktiven Abfällen	Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Freiburg	📖 18
02 E 9894	Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineralgemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 22
02 E 9944	Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 24
02 E 9954	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlager	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 26
02 E 9985	Mobilisierung von Actiniden durch mikrobiell produzierte Liganden unter Berücksichtigung der Endlagerung von radioaktivem Abfall	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 28
02 E 9995	Grundlegende Prozesse zum Radionuklidtransport im Fernfeld eines Endlagers im Salz - FUNMIG-RTDC-5	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 30
02 E 10015	Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockerungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein	Technische Universität Darmstadt	📖 32


02 E 10055	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 40
02 E 10065	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL	DBE Technology GmbH, Peine	📖 42
02 E 10096	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH	📖 48
02 E 10106	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 50
02 E 10116	Barriereintegrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs in Tonformationen (BET)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 52
02 E 10126	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH	📖 54
02 E 10136	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 56
02 E 10146	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 58
02 E 10156	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 60
02 E 10166	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	📖 62
02 E 10176	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actinidentransports in potenziellen Wirtsgesteinsformationen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementarprozess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport	IIF e.V., Leipzig	📖 64
02 E 10186	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien	Technische Universität München	📖 66
02 E 10196	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen	Universität des Saarlandes, Saarbrücken	📖 68

02 E 10206	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH	📖 70
02 E 10216	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid-Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen	Universität Potsdam	📖 72
02 E 10236	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 74
02 E 10246	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 76
02 E 10256	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 78
02 E 10276	Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 80
02 E 10296	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Visualisierung und Datenanalyse	Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn	📖 84
02 E 10306	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse	Albert-Ludwigs-Universität Freiburg	📖 86
02 E 10316	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen	Friedrich-Schiller-Universität Jena	📖 88
02 E 10326	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen	Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main	📖 90
02 E 10336	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 92
02 E 10346	Entwicklung und Umsetzung von technischen Konzepten für tiefe geologische Endlager in allen Wirtsgesteinen (EUGENIA)	DBE Technology GmbH, Peine	📖 94
02 E 10357	Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern	Forschungszentrum Jülich GmbH	📖 96
02 E 10367	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 98

02 E 10377	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 100
02 E 10387	Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 102
02 E 10397	Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX	Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Freiburg	📖 104
02 E 10407	Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX	DBE Technology GmbH, Peine	📖 106
02 E 10417	Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer	TU Dresden	📖 108
02 E 10427	Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 110
02 E 10437	Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen	Bauhaus-Universität Weimar	📖 112
02 E 10447	Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung	IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack & Partner, Freiberg	📖 114
02 E 10457	Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag	TU Bergakademie Freiberg	📖 116
02 E 10467	Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT	Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec), Garching	📖 118
02 E 10477	Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 120
02 E 10487	Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm	DBE Technology GmbH, Peine	📖 122
02 E 10498	Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz (Vorprojekt) – Kurztitel: VIRTUS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 124
02 E 10508	Machbarkeitsstudie zur Vorbereitung eines 2-Bohrloch-Erhitzerversuches im URL Mont Terri, Schweiz „MACH-2“	DBE Technology GmbH, Peine	📖 126



02 E 10518	Verbundprojekt:Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 128
02 E 10528	Verbundprojekt:Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2	Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden	📖 130
02 E 10538	Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 132
02 E 10548	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 134
02 E 10558	Verbundprojekt:Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP1 - Kurztitel: A-Dur	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 136
02 E 10568	Verbundprojekt:Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP2 - Kurztitel: A-Dur	Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main	📖 138
02 E 10578	Verbundprojekt:Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP3 - Kurztitel: A-Dur	Friedrich-Schiller-Universität Jena	📖 140
02 E 10588	Verbundprojekt:Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP4 - Kurztitel: A-Dur	Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Leipzig	📖 142
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	TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld	📖 144
02 E 10628	Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case	Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Freiburg	📖 146

1.3 Kernmaterialüberwachung

02 W 6243 Institutionelle und technologische Weiterentwicklung von internationalen Kernmaterialkontrollen **Forschungszentrum Jülich GmbH**  240

1.4 Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete

02 C 1466	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrogeologie und Geochemie des Gesamtsystems	Brandenburgische Technische Universität Cottbus	📖 208
02 C 1476	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	Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover	📖 210
02 C 1486	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung	Technische Universität Clausthal	📖 212
02 C 1496	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTECH): Grundlagen für Geomodellierung	K-UTECH AG Salt Technologies, Sondershausen	📖 214
02 C 1506	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie	IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur-Hydro- und Umweltgeologie mbH, Stendal	📖 216
02 C 1516	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung	DHI-WASY GmbH, Berlin	📖 218
02 C 1526	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität	Johannes Gutenberg-Universität Mainz	📖 220
02 C 1536	Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen	IIF e.V., Leipzig	📖 222

- 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 **Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Hannover**  224
- 02 C 1556** Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen **Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Hannover**  226

2 Formalisierte Zwischenberichte

2.1 E-Vorhaben

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 9783	
Vorhabensbezeichnung: Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittelaktiven Abfällen			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2003 bis 30.09.2008		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 30.09.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 604.485,00 EUR		Projektleiter: Prof. Dr. Brewitz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Handbuch der Endlagerung soll einen fachlichen Überblick über das in Deutschland auf dem Gebiet der Endlagerung bisher erreichte Wissen in allen für die Endlagerung relevanten Forschungsgebieten geben. Es soll dokumentieren, inwieweit die grundlegenden wissenschaftlichen und technischen Probleme der Endlagerung zum jetzigen Zeitpunkt gelöst sind und wo noch offene Fragen vorhanden sind.

Aufgrund des breit angelegten Ansatzes und seiner übergreifenden Zielsetzung berührt das Vorhaben alle Themenbereiche des BMWi-Förderkonzeptes „Schwerpunkte zukünftiger FuE-Arbeiten bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle (2002- 2006)“ sowie den internationalen Fortschritt bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das aktualisierte Arbeitsprogramm umfasst folgende Schritte:

- Geschlossene Darstellung der Vorhabensthematik in allgemein verständlicher Sprache in einem Hauptband.
- Ausführlichere Erläuterungen zu wichtigen Themen, die im Hauptband angesprochen werden, aber aufgrund des zusammenfassenden Charakters nicht detaillierter ausgeführt werden können, in einer Reihe von Anhängen.
- Umfangreiche Bibliographien zu den einzelnen Anhängen mit neuerer, für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland relevanter Literatur und wichtigen Ergebnisse aus Forschungsvorhaben (insbesondere vom Bund geförderte Vorhaben).

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum (2. Halbjahr 2008) wurden die Arbeiten zur Weiterführung des Vorhabens im Rahmen einer kostenneutralen Verlängerung bis zum 30.09.2008 in der mit dem Auftraggeber im November 2007 vereinbarten Weise durchgeführt.

Der Hauptband und die insgesamt 22 Anhänge wurden fristgerecht zum 30.09.2008 vorgelegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Vorhaben ist abgeschlossen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

GRS mbH, Öko-Institut: Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in Deutschland, GRS-247, Köln, September 2008.

Auftragnehmer: Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Merzhauser Straße 173, 79100 Freiburg		Förderkennzeichen: 02 E 9793
Vorhabensbezeichnung: Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittelaktiven Abfällen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2003 bis 30.09.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 30.09.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 624.916,00 EUR	Projektleiter: Sailer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Auf dem Gebiet der Endlagerforschung werden Arbeiten gefördert, die dazu dienen, technisch-wissenschaftliche Grundlagen für eine fundierte und nachvollziehbare Bewertung sicherheitsrelevanter Aspekte und Anforderungen für ein Endlager für radioaktive Abfälle zu erarbeiten.

In dem vorliegenden Vorhaben soll, unter Nutzung der in Deutschland vorhandenen Expertise, ein fachlicher Überblick über das in Deutschland bisher erreichte Wissen in allen dafür relevanten Forschungsgebieten erarbeitet werden. Dabei sollen neben dem in den vergangenen Jahren überwiegend untersuchten Wirtsgestein Salz auch alternative Wirtsgesteine in die Zusammenstellung mit einbezogen werden.

Aufgrund des breit angelegten Ansatzes und seiner übergreifenden Zielsetzung berührt das Vorhaben alle Themenbereiche des BMWi-Förderkonzeptes „Schwerpunkte zukünftiger FuE-Arbeiten bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle (2002-2006 und 2007-2010)“ und den internationalen Fortschritt bei der Endlagerung radioaktiver Abfälle.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Arbeitspakete wurden entsprechend der bestehenden Zielstellung korrigiert.

- AP1: Geschlossene Darstellung der Vorhabensthematik in allgemein verständlicher Sprache in einem Hauptband.
- AP2: Ausführlichere Erläuterungen zu wichtigen Themen der Endlagerung, die im Hauptband aufgrund des zusammenfassenden Charakters nicht detaillierter ausgeführt werden können, in einer Reihe von Anhängen.
- AP3: Umfangreiche Bibliographien zu den einzelnen Anhängen mit neuerer, für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Deutschland relevanter Literatur und Literatur mit wichtigen Ergebnissen aus Forschungsvorhaben (insbesondere vom Bund geförderte Vorhaben).

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im zweiten Halbjahr 2008 wurden die Arbeiten an allen drei Arbeitspaketen abgeschlossen.

In diesem Zeitraum wurde eine umfangreiche Qualitätssicherung des Hauptbandes durchgeführt. Der Hauptband wurde termingerecht fertig gestellt.

Die 22 Anhänge und die zugehörigen Bibliographien wurden ebenfalls fertig gestellt.

Auch im Berichtszeitraum wurden regelmäßige Besprechungen des Redaktionsteams unter Teilnahme des Projektträgers durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 9854
Vorhabensbezeichnung: Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.02.2004 bis 31.06.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.158.876,00 EUR	Projektleiter: 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.

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.

In der Phase 2 werden die Versuchskomponenten bis zur Ausführungsreife geplant, gefertigt und zusammen mit den vorhandenen Komponenten Plateauwagen und Einlagerungslokomotive für den Demonstrationsversuch bereitgestellt. Im Einzelnen soll 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 sowie ein Dokumentationsfilm erstellt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Grundlagenermittlung: Die Grundlagen und Randbedingungen für die technischen Komponenten des Einlagerungssystems werden im Rahmen des IP ESDRED zusammengestellt und abgestimmt. Der Entwicklungsbedarf für relevante Komponenten wird ermittelt und die Verwendbarkeit vorhandener Komponenten geprüft.

AP2: Konzeptplanung: Es werden Konzeptionen für das Gesamtsystem der Einlagerung von Brennstabkokillen in tiefe vertikale Bohrlöcher entwickelt und die, gemäß den Anforderungen aussichtsreichste hinsichtlich der Realisierung, über ein Bewertungsverfahren ermittelt.

AP3: Entwurfsplanung: Das in der Konzeptplanung entwickelte und ausgewählte Gesamtsystem und dessen Komponenten zur Einlagerung von Brennstabkokillen werden in Entwurfsplanungstiefe bearbeitet. Eine durchzuführende Betriebsstörungsanalyse ermöglicht die Überprüfung des Gesamtsystems auf

Schwachstellen. Mit der Erstellung der Ausschreibungsunterlagen für Ausführungsplanung und Fertigung von Komponenten wird die Phase 1 des Projektes abgeschlossen.

AP4: Ausführungsplanung: Das ausgewählte Gesamtsystem wird in Ausführungsplanungstiefe bearbeitet.

AP5: Fertigung der Komponenten: Im Arbeitspaket werden die Komponenten gefertigt und zusammen mit den vorhandenen Komponenten am Versuchsort aufgebaut.

AP6: Versuchsdurchführung: In einem übertägigen Versuchsstand wird der Einlagerungsvorgang mit allen Komponenten unter realitätsnahen Bedingungen demonstriert und die Zuverlässigkeit überprüft.

AP7: Versuchsauswertung: Es erfolgt die Versuchsauswertung und die Erstellung des Abschlussberichtes.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP5: Anfang Juli wurde der interne Transferbehälter in Landesbergen angeliefert. Eine Abnahme aller Komponenten am Versuchsstand war für den 01.08.08 vorgesehen. Aufgrund des Vorliegens wesentlicher Herstellungsmängel, die während der Inbetriebnahme der Einlagerungsvorrichtung festgestellt wurden, konnte der Testbetrieb des Gesamtsystems erst im September 2008 aufgenommen werden.

AP6: Nach dem 50. Doppelzyklus (Doppelzyklus $\approx 1 \times$ Einlagern der BSK 3 und $1 \times$ Herausholen der BSK 3) erfolgte eine erste Überprüfung der Komponenten Transferbehälter und Bohrlochschleuse hinsichtlich Verschleißverhalten. Bei dieser Überprüfung wurde kein Verschleiß festgestellt. Nach Behebung weiterer Herstellungsmängel der Einlagerungsvorrichtung wurden bis Ende 2008 ca. 190 Doppelzyklen entsprechend 380 Einlagerungsvorgängen erfolgreich durchgeführt.

Die Winde der Einlagerungsmaschine wurde durch DMT analog zur Prüfung einer Schachtwinde mit Volllast getestet und nach den vorgeschriebenen Bremsversuchen abgenommen.

Nach einem weiteren fehlgeschlagenen Abnahmeversuch für die Einlagerungsvorrichtung (Fehler beim Streckentransporttest der Einlagerungsvorrichtung) wurde vereinbart, nach Beendigung des Dauerversuchs (500 Doppelzyklen) die restlichen Nachbesserungen durchzuführen.

AP7: Die Arbeiten zur Berechnung der Gebirgsbelastung auf das eingelagerte Endlagergebäude wurden aufgenommen. Durch das Filmteam konnten die ersten Dokumentationsaufnahmen des Einlagerungsvorgangs aufgenommen werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Versuchsdurchführungen
- Abnahme der Einlagerungsvorrichtung
- Erstellung des Statusberichtes „Fertigung Komponenten und Versuchsstand“
- Erstellung des Statusberichtes „Versuchsdurchführung“
- Erstellung des Abschlussberichtes für die EU und PTKA

5. Berichte, Veröffentlichungen

Disposal of Spent Fuel in Salt using Borehole Technology: BSK 3 Concept, St. Fopp, R. Graf, GNS - Gesellschaft für Nuklear-Service mbH, Essen, W. Filbert, DBE Technology GmbH, Peine, Proceedings IYNC 2008, Interlaken, Switzerland, 20 - 26 September, 2008

New Transport and Emplacement Technologies for Vitrified Waste and Spent Fuel Canisters, W. Bollingerfehr, W. Filbert, J. Wehrmann, DBE Technology GmbH, Peine, Germany, J.-M. Bosgiraud, ANDRA, France, Proceedings Euradwaste '08 conference, Luxembourg

Optimization of Emplacement Technology for Spent Fuel, W. Filbert, W. Bollingerfehr, J. Wehrmann, DBE Technology GmbH, Peine, Germany, R. Graf, GNS - Gesellschaft für Nuklear-Service mbH, Essen, Germany, Proceedings EAFORM 2008, Tokyo, Japan, 20 - 23 October, 2008

Demonstration Tests for Direct Disposal of Spent Fuel, W. Filbert, W. Bollingerfehr, DBE Technology GmbH, Peine, Germany, Proceedings EAFORM 2008, Tokyo, Japan, 20 - 23 October, 2008

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 9894	
Vorhabensbezeichnung: Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor - Hauptprojekt			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2004 bis 31.03.2010		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.574.783,00 EUR		Projektleiter: 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 (Ton/Sand-Mischung 35/65) sich nahezu stationäre Fließbedingungen eingestellt haben, wurde am 07.07.2008 die Wasserinjektion beendet. Dazu wurde die Injektionsleitung geschlossen, so dass sich der Druck über die Ausgangsseite des Dichtelements abbauen kann. Unter Verwendung der Daten der letzten 12 Tage vor Beendigung der Wasserinjektion ergab sich an der Eingangs- und an der Ausgangsseite eine Fließrate von 9,65 ml/Tag bzw. 9,91 ml/Tag, bei einer Druckdifferenz von 1,011 MPa. Damit ergibt sich eine mittlere Wasserpermeabilität von $2,85 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$. Insgesamt wurden 28,4 l Wasser in das Dichtelement injiziert. Der Gesamtdruck (Porenwasserdruck + Quelldruck) im Dichtungsmaterial unterhalb des Packers betrug ca. 0,23 MPa. Der am Eingang des Dichtelements registrierte Druck hat sich z. Zt. bis auf ca. 0,28 MPa abgebaut, liegt aber immer noch oberhalb des Atmosphärendrucks. Die im unteren und mittleren Teil des Dichtelements gemessenen Poren- und Quelldrücke haben ebenfalls abgenommen und liegen z. Zt. bei 0,2 und 0,29 MPa (unterer Teil) sowie bei 0,2 MPa und 0,4 MPa (mittlerer Teil). Nach Abbau des Porendrucks in der Dichtung wird mit der Bestimmung des Gasdurchbruchsdrucks begonnen.

Bei den In-situ-Untersuchungen an den 4 Bohrlöchern 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) hat sich während der Aufsättigung am grundsätzlichen Verhalten im Vergleich zum vorherigen Berichtszeitraum keine Änderungen ergeben.

Die injizierte Wassermenge beläuft sich bei der Bohrung BSB1 auf 50,6 l, bei der Bohrung BSB2 auf 94,3 l, bei der Bohrung BSB13 auf 20,2 l und bei der Bohrung BSB15 69,4 l. Die entsprechenden Fließraten betragen 1 ml/Tag (BSB1, Injektionsdruck 0,37 MPa), 2 ml/Tag (BSB2, Injektionsdruck 0,37 MPa), 0,4 ml/Tag (BSB13, Injektionsdruck 0,38 MPa) und 2,2 ml/Tag (BSB15, Injektionsdruck 0,38 MPa). Für die Bohrung BSB1 kann bzgl. der Druckverläufe keine Aussage getroffen werden, da wie im letzten Bericht erwähnt, die entsprechenden Drucksensoren ausgefallen sind. Die Gesamtdruckverläufe gemessen unterhalb des Packers, belaufen sich bei BSB2 auf 0,16 MPa sowie bei BSB15 auf 0,41 MPa und weisen einen nahezu konstanten Verlauf auf. Bei BSB13 nimmt der Gesamtdruck stetig zu und liegt bei 2,45 MPa.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des Technikumsversuchs mit Bestimmung des Gasdurchbruchsdrucks und 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

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 9944	
Vorhabensbezeichnung: Goelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2004 bis 31.12.2011		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 438.557,00 EUR		Projektleiter: 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: Im Streckenversatz in Sektion I ist die Resistivitätsverteilung inzwischen sehr homogen und hat sich im letzten Jahr 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. In 2008 wurde allerdings eine leichte Resistivitätserhö-

lung festgestellt, insbesondere im oberen Bereich des Versatzes. Der Grund dafür ist noch unklar; die Messungen werden fortgesetzt. Im Streckenversatz in Sektion II ändert sich die Resistivität inzwischen nicht mehr, nachdem sie auf Werte um $3 \Omega\text{m}$ im Zentrum (Wassergehalt 21-22 %) und $2-3 \Omega\text{m}$ nahe der Tunnelwand gesunken ist. Damit ist auch hier der Versatz nahezu 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 2010 möglich.

Die Resistivitätsverteilungen entlang der Messketten im Gebirge ähneln einander sehr und änderten sich bis Mitte 2006 kaum. Nahe den Elektroden werden 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 $7000 \Omega\text{m}$, was dem gesättigten Gebirge entspricht. Eine Widerstandserhöhung entlang der Messkette nahe dem Lagerbohrloch 4, die sich seit Mitte 2006 andeutete, baut sich inzwischen wieder ab. Möglicherweise handelt es sich um Sättigungsschwankungen des Betons zur Ankopplung der Elektroden und des umgebenden Gebirges.

AP2: Zur Simulation der Versatzauf-sättigung mit begleitender Geoelektrik wurde ein weiterer Versuch mit verdichtetem Versatz in einem mit Elektroden bestückten Plexiglasrohr erfolgreich durchgeführt. Im Gegensatz zum ersten Versuch wurde der Versatz mit einem für den In-situ-Versuch repräsentativen Wassergehalt eingebaut. Der Versatz wurde von unten her mit Äspö-Wasser teilweise geflutet und die Resistivitätsverteilung vor und nach der Flutung gemessen. Außerdem wurde der Wassergehalt an vor und nach der Flutung genommenen Proben bestimmt.

Der aufgesättigte Bereich wurde räumlich gut erfasst und weist eine Resistivität von $2-5 \Omega\text{m}$ auf, was einem Wassergehalt von 18-25 % entspricht. Der nicht weiter aufgesättigte Versatz im oberen Bereich des Rohres hat eine Resistivität von $14-20 \Omega\text{m}$ (entspricht 11-13 % Wassergehalt). Die an den Proben gemessenen Wassergehalte lagen bei 19.4-24.3 % für den aufgesättigten Bereich und bei 10.0-13.8 % für den nicht aufgesättigten Bereich. Diese Werte stimmen sehr gut mit den aus der Geoelektrik ermittelten Wassergehalten überein, so dass der Versuch zeigt, dass die geoelektrische Tomografie tatsächlich Resistivitäten liefert, die für die vor Ort herrschenden Sättigungsbedingungen repräsentativ sind.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung der In-situ-Messungen

AP2: Wassergehaltsbestimmungen an Proben aus dem Versuchsfeld (ab 2010)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 9954
Vorhabensbezeichnung: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2004 bis 31.07.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.07.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.478.242,00 EUR	Projektleiter: 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, wie zur Erstellung eines vollständigen Safety Case oder zur Verwendung geeigneter Sicherheits- und Performanceindikatoren.
- 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 chemischer Effekte im Endlagernahbereich: Einbau neuer Modellansätze und Daten zu Quellterm und Löslichkeiten in das Nahfeldmodul und Überprüfung der Auswirkung bestehender Unsicherheiten auf Ergebnisse der Langzeitsicherheitsanalysen.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Fertigstellung des Berichts „Chemical effects in the near field of a HLW repository in rock salt“ (GRS-240).
- Fertigstellung des zusammenfassenden Abschlussberichts „Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern“ (GRS-237).

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine. Das Vorhaben wurde am 31.07.2008 beendet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Noseck, U. et al.: Scientific basis for the assessment of the long-term safety of repositories. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. GRS-237. Braunschweig 2009.

Müller Lyda, I., Mönig, J., Noseck, U.: Elemente eines Safety Case zur Realisierung eines Endlagers in Deutschland. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. GRS-238. Braunschweig 2009.

Noseck U., Wolf, J., Moog, H., Hagemann, S.: Chemical effects in the near field of a HLW repository in rock salt. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. GRS-239. Braunschweig 2009.

Wolf, U., Rübel, A.; Noseck U., Becker, D.: Safety and performance indicators for repositories in clay and salt formations. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. GRS-240. Braunschweig 2009.

Noseck, U., Fahrenholz, Ch., Flügge, J., Fein, E., Pröhl, G., Schneider, A.: Impact of climate change on far-field and biosphere processes for HLW repositories in rock salt. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. GRS-241. Braunschweig 2009.

Rübel, A., Mönig, J.: Gase in Endlagern im Salz. Workshop der GRS Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH. GRS-242. Braunschweig 2008.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 9985
Vorhabensbezeichnung: Mobilisierung von Actiniden durch mikrobiell produzierte Liganden unter Berücksichtigung der Endlagerung von radioaktivem Abfall		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2005 bis 31.10.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.10.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 282.060,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Bernhard	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel dieses Vorhabens ist es, die Komplexierung von Uran, Curium und Neptunium mit von Pseudomonaden (z. B. *P. fluorescens* isoliert im Äspö HRL) freigesetzten natürlichen Bioliganden und mit relevanten Modellverbindungen aufzuklären. Es werden Aussagen zu Struktur und Bildung der Actinid-Bioligand Verbindungen erwartet. Die erhaltenen Daten dienen der Bewertung des Einflusses von Bioliganden, freigesetzt von Bodenbakterien, auf die Mobilität von Actiniden insbesondere aus radioaktiven Endlagern in Gesteinsformationen.

Teilziel 1 des Projektes ist die Isolierung und Charakterisierung der Bioliganden (an der Universität Göteborg, Arbeitsgruppe von Prof. K. Pedersen). Dies beinhaltet eine Trennung der Bioliganden in einzelne Fraktionen und im günstigsten Falle eine Substanzidentifizierung in den Fraktionen.

Teilziel 2 ist die Aufklärung der Wechselwirkungen der Modellverbindungen mit Uran, Neptunium und Curium. Teilziel 3 umfasst die Charakterisierung der gebildeten Uran-, Neptunium- und Curium-Spezies mit den natürlichen Bioliganden bzw. Bioligandfraktionen.

Die Untersuchung der Komplexierung mit den Bioliganden und Modellverbindungen erfolgt mit Hilfe modernster spektroskopischer Methoden (laserspektroskopische Verfahren, UV/Vis-, Infrarot- und Röntgenabsorptionsspektroskopie).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm gliedert sich in die Arbeitsaufgaben:

AP1: Isolierung, Fraktionierung und Charakterisierung der natürlichen Bioliganden die von Pseudomonaden (im Äspö HRL isoliert) gebildet wurden

AP2-AP4: Wechselwirkung der ausgewählten Modellverbindungen (Salicylhydroxamsäure, Desferrioxamin B, 6-Hydroxychinolin, Peptidoglykan und Lipopolysaccharid u. a.) mit den Actiniden Uran(VI), Curium(III) und Neptunium(V)

AP5-AP7: Studium der Wechselwirkung der natürlichen Bioliganden mit U(VI), Cm(III) und Np(V)
Bestimmung der Actinidenspeziation in der Lösung (rechnerisch, spektroskopisch) vor und nach der Wechselwirkung mit den Bioliganden bzw. Modellsystemen
Abhängigkeit der Speziation vom pH-Wert und der Ligandkonzentration

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- spektroskopischen Untersuchungen zur Cm(III) Komplexierung mit 6-Hydroxychinolin (6-HQ)
- absorptionsspektroskopische Untersuchungen zur Np(V) Komplexierung mit BHA, LPS, PYO und PGN
- Probenpräparation in den Systemen U(VI)-LPS und U(VI)-PGN für Strukturuntersuchungen an ROBL in Grenoble (Nachmessungen erforderlich)
- Teilnahme an der Konferenz Actinide XAS 2008 in Saint-Aubin Frankreich vom 15.-17.7.2008 mit einem Vortrag: *Uranium(VI) complexation with pyoverdins and related model compounds studied by EXAFS*
- Teilnahme an der internationalen Radiochemiekonferenz NRC-7 in Budapest, Ungarn (24.-28.8.2008): Vortrag: *Interaction of uranium(VI) with peptidoglycan* und Poster: *Curium(III) speciation in aqueous solutions of bacterial siderophores*
- Teilnahme an der Konferenz Uranium Mining Hydrogeology (UMH V), 14.-18.09.2008, Freiberg, Deutschland: Vortrag: *Comparative investigation of the interaction of uranium with lipopolysaccharide and peptidoglycan*

Ergebnisse, Teilziele 2 und 3 (AP2-AP7):

- U(VI) + PGN: Manuskript: *Complexation of uranium(VI) with peptidoglycan* von A. Barkleit et al. bei Dalton Transactions eingereicht.
- Np(V) + BHA, LPS, PGN, PYO: Erstmalig wurde die Np(V)-Speziation in diesen Bioligand-Systemen mittels NIR-Spektroskopie bestimmt.
Np(V)-BHA: zwei Spezies charakterisiert, Stabilitätskonstanten: $\log\beta_{110} = 4.57$ (988 nm) und $\log\beta_{120} = 7.59$ (996 nm);
Np(V)-LPS: zwei Np(V)-LPS Komplexe identifiziert: a) $R-O-PO_3-NpO_2^-$ mit $\log\beta_{110} = 6.34 \pm 0.11$ (991 nm) und b) $(R-O)_2-NpO_2^-$ mit $\log\beta_{120} = 11.64 \pm 0.90$ (998 nm);
Np(V)-PGN: Np(V)-Wechselwirkung mit Karboxyl-Gruppen zu schwach, keine Spezies nachweisbar; Np(V)-PYO: Np(V) bildet mit den Pyoverdinen die stabilsten Komplexe in diesem Projekt.
Zwei 1:1 Komplexe nachgewiesen: $\log\beta_{111} = 20.14$ (993 nm) und $\log\beta_{110} = 12.84$ (1002 nm);
Nun können diese relevanten Np(V)-Bioligand-Spezies bei komplexen Modellierungen berücksichtigt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchungen zur Struktur der Cm(III)-LPS Komplexe mit dem homologen Element Europium (IR, EXAFS)
- Spektroskopische Untersuchungen zur Np(V) Komplexierung mit 6-HQ
- Zusammenfassung der wichtigsten Np(V)-Ergebnisse in einer Publikation
- Fertigstellung des Projektabschlussberichts (geplanter Termin: September 2009)
- Abschluss der Dissertation von Maja Glorius (geplanter Termin: Dezember 2009)

5. Berichte, Veröffentlichungen

Moll, H.; Glorius, M.; Bernhard, G.: *Curium(III) complexation with desferrioxamine B (DFO) investigated using fluorescence spectroscopy*. Bulletin of the Chemical Society of Japan 81(2008)7, 857-862.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 9995
Vorhabensbezeichnung: Grundlegende Prozesse zum Radionuklidtransport im Fernfeld eines Endlagers im Salz – FUNMIG-RTDC-5		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2005 bis 31.05.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 169.825,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens soll das Verständnis zum geochemischen Verhalten von Schadstoffen in natürlichen Systemen und zum Einfluss von organischer Materie auf diese Prozesse erhöht werden. Schwerpunktmäßig soll das Verhalten organischer Materie und das geochemische Verhalten von Uran und anderen Spurenelementen unter Bedingungen, wie sie im Fernfeld von Endlagern in Salzformationen auftreten, charakterisiert und beschrieben werden.

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen des Projekts „Anwendung von Transportprogrammen auf die Nuklidmigration in natürlichen Gesteinsformationen mit Feldmessungen“ (FKZ 02E9551) auf und stellt den nationalen Beitrag zur Komponente RTDC-5 des integrierten EC-Projekts FUNMIG dar. Partner in dieser Komponente sind INE (Institut für Nukleare Entsorgung), NRI (Nuclear Research Institute), Czech Republic und University Helsinki, Finland.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Im ersten Arbeitsschritt sollen vom INE Kolloidmessungen am Standort Ruprechtov durchgeführt werden. Der Beitrag der GRS umfasst die Durchführung zeitgleicher Messungen des Eh- und pH-Werts mit einer In-situ-Sonde und Messungen der Grundwasserzusammensetzung in den entsprechenden Grundwassermessstellen am Standort Ruprechtov.

Im zweiten Arbeitsschritt soll mit modernen analytischen Methoden wie μ -XRF (INE) und U(IV)/U(VI)-Trennung (University Helsinki) der geochemische Zustand von Uran in natürlichen Sedimentproben vom Standort Ruprechtov mit einem hohen Urangehalt analysiert und charakterisiert werden. Der Beitrag der GRS besteht in der Identifikation und Verteilung geeigneter Proben und in der chemisch-mineralogischen Charakterisierung dieser Proben.

Der dritte Arbeitsschritt hat die Integration der Ergebnisse aus den beiden anderen Arbeitsschritten zusammen mit den bereits vorliegenden Daten zum Standort Ruprechtov zum Inhalt. Es soll eine möglichst genaue Beschreibung der Prozesse zum Verhalten von organischer Materie im Hinblick auf die Bildung von Huminkolloiden und auf das geochemische Verhalten von Uran und anderen Spurenelementen in einem natürlichen System, das dem eines Deckgebirges über einem Salzstock ähnlich ist, erreicht werden. Als Task Leader des RTDCs ist GRS für die Koordination aller Arbeiten verantwortlich.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AS1: Das Arbeitspaket ist abgeschlossen.
- AS2: Die Ergebnisse der U(IV)/U(VI)-Trennung im Grundwasser des Ton/Lignit-Horizonts, bei der etwa 20 % des gelösten Urans als U(IV) nachgewiesen wurde, lassen sich durch geochemische Modellrechnungen zu einem gewissen Grad nachvollziehen. Die relativ hohen CO₂-Partialdrücke führen trotz der stark reduzierenden Bedingungen zu einer Stabilisierung von Uran(VI) in Lösung.
- AS3: Die Ergebnisse der MALDI TOF Analyse der durch alkalische Extraktion sowie durch Freisetzungsversuche mit Modellwasser erhaltenen Huminstofffraktionen zeigen, dass diese eine hohe Ähnlichkeit mit dem DOC des Grundwassers haben und damit als repräsentativ angesehen werden können. Die Huminstoffe am Standort sind durch relativ niedrige Molekulargewichte gekennzeichnet. Die Auslaugversuche mit Modellwasser bestätigen, dass nur ein geringer Anteil des SOC mobilisierbar ist. Die Konzentrationen des mobilisierten organischen Kohlenstoffs liegen mehr als eine Größenordnung niedriger als die in gleichartigen Experimenten an Boom Clay beobachteten. Die Integration aller Ergebnisse zeigt, dass das sedimentäre organische Material am Standort Ruprechtov hauptsächlich zur Immobilisierung von Uran beigetragen hat, indem durch mikrobiologischen Abbau von SOC reduzierende Bedingungen herrschen, Eisensulfide gebildet und durch Freisetzung von Phosphat Uran(IV)phosphat-Mineralphasen (Ningyoit) gebildet wurden.
- Die Ergebnisse zur Geochemie des Urans bestätigen die bisherigen Ergebnisse und das konzeptionelle Modell zur geologischen Entwicklung des Standorts. Thermodynamische Rechnungen zeigen, dass die Mineralphasen Uraninit und Ningyoit auch heute die niedrige Urankonzentrationen bestimmen. Dies bestätigt die anhand von Nichtgleichgewichtszuständen der Uranisotope beobachtete Langzeitstabilität von U(IV) im Ton/Lignit-Horizon.
- Vorstellung der Ergebnisse des Projekts in einem Vortrag und einer Posterpräsentation auf der Konferenz Euradwaste 2008 und dem Workshop des Projekts FUNMIG.
- Dokumentation der Ergebnisse in wissenschaftlichen Beiträgen zum 4th Annual FUNMIG Workshop und Beginn der übergreifenden Dokumentation mit Beiträgen aus anderen RTDCs zum Thema „Real system analyses and natural analogues“ für eine Sonderausgabe der Zeitschrift Applied Geochemistry.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung des Beitrags für den EUR-Abschlussbericht und der übergreifenden Dokumentation mit Beiträgen aus anderen RTDCs zum Thema „Real system analyses and natural analogues“ für eine Sonderausgabe der Zeitschrift Appl. Geochem.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Noseck U, Havlová V, Cervinka R, Suksi J, Denecke M, Hauser W (2008): Investigation of far-field processes in sedimentary formations at a natural analogue site - Ruprechtov. - Proceedings of the Euradwaste Conference, Luxemburg, 20.-23. October 2008.

Noseck U, Rozanski K, Dulinski M, Havlova V, Sracek O, Brasser Th, Hercik M, Buckau G (2008): Characterisation of hydrogeology and carbon chemistry by use of natural isotopes - Ruprechtov site, Czech Republic. - Accepted by Appl. Geochem.

Noseck U, Suksi J, Havlova V, Cervinka, R. (2008): Uranium geochemistry at Ruprechtov site. - 4th Annual Workshop Proceedings of the IP Project FUNMIG, Karlsruhe, 24.-27. November 2008.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt		Förderkennzeichen: 02 E 10015
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockerungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2005 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 500.312,00 EUR	Projektleiter: 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. Zu untersuchen ist, unter welchen Bedingungen Korrosions- und Degradationsgase das in den Rissen und Poren vorhandene Formationswasser verdrängen können, und ob sich dadurch wieder Wegsamkeiten bilden können.

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.
- Durchführung der zentralen Experimente zum Durchlässigkeitsverhalten und Gastransport. In Abhängigkeit von Überlagerungsdruck, Gas- bzw. Flüssigkeitseintrittsdruck und Temperatur werden Änderung von Permeabilität, Fluiddurchbruch sowie Verdrängung von Flüssigkeit durch Gas untersucht.
- Auswertung, Bewertung und Dokumentation

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Zur Quantifizierung des Einflusses der Gasfeuchte auf den zeitlichen Permeabilitätsverlauf wurde eine Messanordnung zur Bestimmung der Auswirkungen hoher relativer Feuchten bei der Gaspermeation bei Temperaturen bis 90 °C entworfen, gebaut und in Betrieb genommen. Erste Messungen bei 50 °C und Überlagerungsdrücken von bis zu 3,2 MPa wurden an einer orthogonal zur Schichtung angeströmten Probe durchgeführt. Gegenüber der Durchströmung mit trockenem Stickstoff ist eine Verringerung der Permeabilität etwa um den Faktor drei zu erkennen.
- 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. Bei einigen Proben zeigen Öffnungs- oder Dilatationsphänomene bei Druckaufgabe mit hoher Geschwindigkeit, so dass bei schneller Druckaufgabe höhere Gaspermeabilitäten als bei langsamer Druckaufgabe ermittelt werden konnten.
- Bei den mit Formationswasser gesättigten Proben erfolgt über einen sehr langen Zeitraum ein Auspressen des Restgases und der Flüssigkeit aus der Probe, ohne dass ein Druckgradient angelegt wird, was zu einer scheinbaren Permeabilität führt, was bei der Auswertung der Messungen zu berücksichtigen ist.
- Die Untersuchungen zur Verdrängung des Porenwassers durch einen am Poreneintritt angelegten Gasdruck zeigen sehr unterschiedliche Ergebnisse bezüglich der hierzu notwendigen Gasdrücke. Die Bandbreite der Probeneintrittsdrücke liegt zwischen 1 und 17 bar. Werden die Bedingungen, bei denen der Gasdurchbruch erfolgt, über einen längeren Zeitraum konstant gehalten, so reduziert sich die Durchlässigkeit wieder, was wieder bis zum Verschluss der Probe führen kann.
- Die bei 60 °C durchgeführten Messungen zeigten bisher ist im Permeabilitätsverhalten kein signifikanter Unterschied zu den bei Raumtemperatur vermessenen „bergfeuchten“ Proben.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Durchlässigkeitsuntersuchungen bei höheren Temperaturen.
- Abschließen der Untersuchungen zur Quantifizierung des Einflusses einer hohen relativen Feuchte des Messgases bei hohen Temperaturen auf die Permeabilität.
- Beendigung der laufenden Untersuchungen zum Gasdurchbruch nach Probenaufsättigung und Wiederbeaufschlagung mit Gas.
- Fortführung der Detailauswertung und abschließende Auswertung und Bewertung der Ergebnisse.
- Fertigstellung des Abschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 E 10025
Vorhabensbezeichnung: Stabilität von Organotonen als Anionen-Adsorber unter Endlagerbedingungen – Experiment und Modellierung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2005 bis 30.11.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.11.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 463.334,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Michel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zum Nachweis von Funktion und Langzeitstabilität von Organotonen werden diese nach Einwirken simulierter Endlagerbedingungen (erhöhte Temperatur, ionisierende Strahlung, Einfluss von Mikroorganismen, Konkurrenz durch DOM) hinsichtlich ihrer Sorptionsfähigkeit für Iod und ihrer Mikrostruktur geprüft. Weiterhin werden zur Verbesserung des Verständnisses der Tonstrukturveränderungen bei Sorptionsprozessen und bei Einwirkung der Nahfeldbedingungen Monte-Carlo Simulationen durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Herstellung von Organotonen (OT) im Labormaßstab
- AP2: Exposition der Organotone (Temperatur, Strahlung, Mikroorganismen)
- AP3: Sorptionstests in Batchversuchen vor und nach der Exposition
- AP4: Strukturanalyse der Organotone bei verschiedenen Temperaturen, vor und nach der Exposition
- AP5: Wechselwirkung der Organotone mit gelöster organischer Substanz
- AP6: Kennzeichnung des Zwischenschichttraums der OT
- AP7: Monte-Carlo Simulationen der Zwischenschichtstruktur der Organotone und der Sorptionsprozesse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Die Exposition von Organotonen gegenüber hohen Temperaturen war bereits abgeschlossen. Die Ergebnisse des letzten Wiederholungstests bei 110 °C ließen allerdings vermuten, dass neben der einwirkenden Temperatur andere Faktoren Einfluss auf das Ausmaß der IodSORPTION ausüben. Daraufhin wurde ein weiterer Versuchsansatz bei 110 °C gestartet, und weiterhin ein Ansatz bei 120 bzw. 130 °C. Zur Untersuchung des Einflusses von Mikroorganismen wurden die verschiedenen Organotone mit Kulturen von *Bacillus subtilis* angeimpft und bebrütet.

AP3: Temperatur: Bei der Temperaturbehandlung von Organotonen sind nicht nur die Höhe der Temperatur und die bei der Behandlung herrschende Atmosphäre entscheidend für die anschließende Iod-SORPTIONS-Fähigkeit der Tone, sondern auch die Dauer der an die Behandlung anschließende Lagerung. In Batchversuchen zeigte sich ein Unterschied zwischen Probenreihen, bei denen alle Proben zunächst in einen Trockenschrank mit einer bestimmten Temperatur gestellt, einzelne Proben nach definierten Zeitintervallen entnommen und bei Labortemperatur bis zum Batchversuch gelagert wurden und solchen Probenreihen, bei denen einzelne Proben zu bestimmten Zeitpunkten in den Trockenschrank hineingestellt wurden, am Ende die gesamte Probenreihe herausgenommen und sofort in den Batchversuch gegeben wurde. Bei der zweiten Variante blieb die IodSORPTION nach leichter Abnahme innerhalb der ersten 60 Tage Behandlungszeit auf etwa gleichbleibendem Niveau von rund 87-88 (HDPy) bzw. 84-85 % (BE) relativer Sorption.

Mikroorganismen: Bei Agardiffusionstests unter Verwendung von *B. subtilis*-Kulturen zeigte sich wie erwartet eine deutliche bakterizide Wirkung von HDPy-, BE- und HDTMA-Tonen. Auf den mit TPP-Ton versehenen Agarplatten bildeten sich keine Hemmhöfe, während reines TPP-Chlorid ebenfalls bakterizid wirkte. Bei der Untersuchung der Dehydrogenase-Aktivität als Maß für die Intensität mikrobieller Stoffumsetzungen im untersuchten Material zeigte sich ein Abnahme der Aktivität bei den Organotonen in der Reihenfolge HDTMA-Bentonit > BE-Bentonit > HDPy-Bentonit. Der TPP-Ton konnte mit den verwendeten Methoden nicht untersucht werden.

AP4: Proben der Organotone aus Zeitreihen mit verschiedener Temperaturbehandlung wurden zur Untersuchung der Veränderung der Sorptionseigenschaften röntgenographisch auf den Basisnetzebenenabstand und bezüglich der Oberflächenladung mit einem Ladungsdetektor untersucht. Darüber hinaus wurde der C-Gehalt an diesen Proben bestimmt. Die beobachtete Abnahme der Oberflächenladung ist auf Ordnungsreaktionen der organischen Kationen durch Temperaturbehandlung zurückzuführen. Mit der Auswertung wurden zusammen mit den Sorptionsversuchen kritische Größen für die Stabilität des Adsorbers erhalten.

AP6: An verschiedenen belegten BE-Montmorilloniten wurden abschließende Versuche zum diffusiven Transport in Organotonen in der ATR-Einheit des FTIR-Spektrometers durchgeführt und durch Untersuchung der Oberflächenladung ergänzt. Die Fehler bei den Diffusionskoeffizienten wurden nach einem neuen Verfahren berechnet.

Es wurde festgestellt, dass mit Abnahme der Wassersättigung und Zunahme der Dichte die Diffusionsgeschwindigkeit sinkt. Darüber hinaus sind Einflüsse des Belegungsgrades mit organischen Kationen auf den diffusiven Transport nachweisbar. Die am FTIR-Spektrometer ermittelten Diffusionskoeffizienten für den ursprünglichen Bentonit zeigen gute Übereinstimmung mit Literaturwerten, so dass aus den ermittelten Diffusionskoeffizienten der Organotone Rückschlüsse auf deren Anwendbarkeit in Barriersystemen gezogen werden können.

AP7: Monte-Carlo-Simulationen der TPP-Anordnung an der äußeren Oberfläche des Montmorillonits in Abhängigkeit vom Belegungsgrad wurden erfolgreich abgeschlossen. Die modellierten Strukturen zeigen, dass eine Aggregation von TPP-Ionen an der Grenzfläche zwischen dem Montmorillonit und der aquatischen Lösung bei höheren Belegungsgraden (über 100 % KAK) stattfindet. Aufgrund dieser Aggregation ist die Oberfläche des TPP⁺-modifizierten Montmorillonits positiv geladen. Sowohl diese Beobachtung, als auch der aus der Modellierung geschätzte Wert der positiven Oberflächenladung sind in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der elektrokinetischen experimentellen Untersuchungen des TPP⁺-modifizierten Montmorillonits. Diese Übereinstimmung ermöglicht Schlussfolgerungen bezüglich des Mechanismus der Anionensorption an diesem organisch-modifizierten Tonmineral.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Ein Manuskript mit dem Titel: „Determination of diffusive transport in HDPy-montmorillonite by H₂O-D₂O exchange using in situ ATR-FTIR-spectroscopy“ wurde im Oktober 2008 bei der Zeitschrift 'Clay Minerals' eingereicht.

Ein zweites Manuskript zur Diffusion in Organotonen in Abhängigkeit von der Struktur des organischen Kations ist in Bearbeitung.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		Förderkennzeichen: 02 E 10035
Vorhabensbezeichnung: Wechselwirkungen von Actiniden mit Anorgano-Huminkolloiden		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2005 bis 30.09.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 300.583,77 EUR	Projektleiter: Dr. Priemyshev	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die Erforschung der Bildung von aquatischen Kolloiden, wie Actinidionen darin inkorporiert werden und wie die kolloidgetragene Migration der Actinide ablaufen wird. Die Entstehung von aquatischen Kolloiden im Nahbereich eines Endlagers wird zwangsläufig von einer Wechselwirkung mit den im Grundwasser gelösten Actinidionen begleitet sein. Actinidhaltige Kolloide (Pseudokolloide von Actiniden genannt) die dabei erzeugt werden, können dann ungehindert mit dem Grundwasser migrieren. Angesichts der Tatsache, dass die kolloidgetragene Migration der Actinide der größte Unsicherheitsfaktor eines nuklearen Endlagers darstellt, ist eine genaue Analyse der Entstehungsprozesse von aquatischen Kolloiden sowie von Pseudokolloiden von Actiniden unerlässlich. Die Bildung dieser Kolloide beruht auf vielfältigen und komplizierten Reaktionsverläufen, die nicht direkt in natürlichen Systemen untersucht werden können, sondern nur an Einzelvorgängen und durch Simulationen in Laborsystemen schrittweise aufgeklärt werden können.

Dieses Vorhaben, das sich mit den Wechselwirkungen von Actiniden mit Anorgano-Huminkolloiden befasst, ist als eine Ergänzung zum Vorhaben 02E9763 zu sehen. Letzteres Projekt befasst sich hauptsächlich mit anorganischen aquatischen Kolloiden bzw. entsprechenden Pseudokolloiden von Actiniden. Das Forschungsprojekt wird in Kooperation und mit Unterstützung des Instituts für Nukleare Entsorgung des Forschungszentrums Karlsruhe (FZK-INE) durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- (I): Untersuchung der Bedingungen für die Bildung und Stabilität von Huminkolloiden
- (II): Untersuchung der Wechselwirkungen von Actiniden mit Huminkolloiden
- (III): Untersuchung des Migrationsverhaltens von Actiniden in kolloidalem Zustand

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Dieser Bericht umfasst weitergehende Untersuchungen zur Bildung und Charakterisierung von Aktinid-Pseudokolloiden, insbesondere den Einfluss der Huminsäure (HA) auf die Bindung zwischen Aktiniden und Hydroxyl-Aluminosilikat (HAS) - Kolloiden.

Die Untersuchungen befassten sich mit der Beständigkeit von HAS, Huminsäure Gohy-573 (HA) Kolloiden und kolloidgetragenen Aktiniden gegenüber Veränderungen, die bei natürlichen offenen Systemen auftreten, nämlich Verdünnungen, unterschiedliche pH-Werte, Temperaturveränderung, Auftreten von Liganden wie EDTA und Huminsäure, oder die Anwesenheit von Kationen wie Na^+ , Ca^{2+} and $\text{Al}(\text{OH})_x^{3-x}$. Diese Untersuchungen sind Teil der Gesamtzielsetzung Vorhersagen über die Verteilung und die Mobilität von Radionukliden in der Umwelt machen zu können. Die Ergebnisse zeigen, dass stabile HAS Kolloide in wässrigen Lösungen bei in der Natur relevanter Konzentration von Silizium und Aluminium und bei neutralem pH-Wert bestehen können. Längere Reaktionszeiten und / oder erhöhte Temperaturen stabilisieren sowohl Kolloide als auch Aktinide-Kolloid-Bindungen. Die gleichzeitige Anwesenheit von HAS und HA in Lösungen haben im Allgemeinen stabilisierenden Einfluss auf die Pseudokolloidbindung von Aktiniden (bezüglich pH-Wert und Si/Al-Konzentration). In diesem Vorhabenszeitraum wurden die gewonnenen Ergebnisse interpretiert und in Form einer Dissertationsarbeit, eines Abschlussberichts sowie in Publikationen zusammengefasst bzw. im Detail wiedergegeben.

4. Geplante Weiterarbeiten

- die laufenden Experimente wurden abgeschlossen
- die Stabilität der HAS-Kolloide nach der Verdünnung wird durch die Kontrolle ihrer durchschnittlichen Größe und Teilchenzahl in Abhängigkeit von der Zeit untersucht

5. Berichte, Veröffentlichungen

M.A. Kim, P.J. Panak, D.C. Breban, A. Priemyshev, J.I. Yun, A. Mansel, J.I. Kim: "Interaction of Actinides(III) with Aluminosilicate Colloids. Part IV. Influence of Humic Acid", Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects 296 (2007) 206-215.

D. Breban, Ph.D. Thesis "Provenance and Characterization of Aquatic Actinide Colloids: Nucleation of Aluminosilicate Colloids with Actinides", Fakultät für Chemie, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg (2007).

A. Priemyshev, M.A. Kim, J.I. Kim: Binding affinity of humic colloids to actinides – and what's behind, 2nd. Annual Workshop Proceedings 6th EC FP – FUNMIG IP, Stockholm, November 2006.

P.J. Panak, M. Bouby, M.A. Kim, J.I. Yun, D. Breban, A. Priemyshev, J.I. Kim, H. Geckeis, Th. Schäfer: „Colloid formation processes“. FZKA 7249 Annual Report 2005 (2006) 19-22.

GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2007, Ulm, 16. – 19. September 2007: A. N. Priemyshev: "Trace metal-humate interactions. Effect of aging time and metal concentration on the kinetic dissociation of Th(IV) from humic colloids".

2nd Annual Workshop of IP FUNMIG FP6 Integrated Project: Fundamental Processes of Radionuclide Migration, Stockholm, Sweden, November 21 – 23, 2006: A. Priemyshev, M.A. Kim, J.I. Kim: "Binding affinity of humic colloids to actinides – and what's behind".

2nd FUNMIG RTDC-2 Progress Meeting, Karlsruhe, Germany, July 31, 2006: A. N. Priemyshev, M. A. Kim, D.C. Breban, P. J. Panak, J. I. Yun, J. I. Kim, A. Mansel: "Interaction of actinides(III) with hydroxy-aluminosilicate colloids: influence of humic acid".

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10045
Vorhabensbezeichnung: Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2005 bis 30.09.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008
Gesamtkosten des Vorhabens: 828.660,00 EUR	Projektleiter: 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:

Der zweite Simulationsversuch an einer axial-gelochten großen Tonprobe (D/d/L=280/100/520mm) aus dem Untertagelabor Bure wurde durchgeführt, um die Entwicklung und Verheilung der Auflockerungszone (ALZ) um HAW-Einlagerungsbohrlöcher in einer Tonformation zu untersuchen. Von einem Gebirgsdruck von 15 MPa aus wurde der innere Bohrlochdruck auf 2,5 MPa reduziert, um die Erstellung eines Bohrloches zu simulieren. Anschließend wurde die Stützwirkung des Versatzes durch Erhöhung des inneren Bohrlochdruckes auf 15 MPa simuliert. Dabei wurde eine Verringerung der Gaspermeabilität von $4 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ auf $1 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2$ ermittelt. Interessant ist auch, dass eine nachfolgende Reduktion des Bohrlochdruckes auf 1,5 MPa keine deutliche Permeabilitätsänderung bewirkte. Das kann auf eine dauerhafte Schließung der in der Probe vorhandenen Risse zurückgeführt werden. Aufgrund eines Stromausfalls wurde leider die Probe zerstört und somit konnte die anschließend geplante Aufheiz-/ Abkühlungsphase nicht erfolgen. Ein weiterer Simulationsversuch wird Anfang 2009 gestartet und 3 Monate dauern.

Neben dem großen Versuch wurden triaxiale Versuche an normalen Tonproben zur Untersuchung des Temperatureinflusses auf die Verformung des Tonsteins durchgeführt. Bei Temperaturerhöhung bis zu 150°C und unter unterschiedlichen mechanischen / hydraulischen Randbedingungen wurde keine deutliche Schädigung an den getesteten Tonproben erkannt.

Die langzeitigen Kriechversuche an 6 Tonproben wurden bei unterschiedlichen Belastungen von 1 bis 13 MPa über eine gesamte Zeitdauer von ca. 3 Jahren weitergeführt. Jede Belastungsstufe dauerte 4 bis 12 Monate. Diese Kriechversuche werden bei reduzierten Spannungen fortgeführt.

Modellrechnungen:

Ein großer Simulationsversuch an einem gelochten Tonprüfkörper bzw. das in-situ TER-Experiment sollen mit CODE-BRIGHT numerisch modelliert werden. Zur Vorbereitung sind die Stoffparameter aus der Literatur und den GRS-Laborergebnissen vorläufig ermittelt worden. Damit wurden einige typische Laborversuche simuliert und der durchzuführende Simulationsversuch durch gekoppelte THM Modellrechnungen prognostiziert. Die Hauptergebnisse zeigen, dass (a) eine Auflockerungszone nur in einem engen Bereich um die Zentralbohrung durch Reduktion des inneren Bohrlochdruckes entsteht, (b) die Temperaturerhöhung bis zu 90°C zu einer Verdichtung der ALZ infolge der Ausbreitung des Porenwassers führt, und (c) keine deutliche Erhöhung der Permeabilität in der ALZ erzeugt wird. Die letzte Vorhersage (c) stimmt mit den Laborbeobachtungen an normalen und großen Tonproben nicht überein.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des dritten ALZ-Simulationsversuchs an einem Großbohrkern
- Verbesserung der Qualität der Stoffparameter für Modellrechnungen
- Modellierung des In-situ-Experiments TER und des großen Laborversuchs

5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang, C.-L., Rothfuchs, T.: Damage and sealing of clay rocks detected by measurements of gas permeability, in the journal "Physics and Chemistry of the Earth" 33 (2008) S363-S373

Zhang, C.-L., Rothfuchs, T., Wieczorek, K., Herbert, H.-J.: Experimental Study on Self-Sealing of Indurated Clay, on the symposium "Fault Zones: Structure, Geomechanics and Fluid Flow", Geological Society London, 16-18 September 2008

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10055
Vorhabensbezeichnung: Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 779.960,00 EUR	Projektleiter: Dr. Buhmann / Dr. Wolf (ab 01.01.2009)	

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 September 2009 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 15.07., 28.08., 16.09., 24.10. und 09.12.2008.

- AP1: Die von DBE entwickelte Datenbank wurde getestet. Alle FEP des derzeitigen Katalogs wurden in die Datenbank aufgenommen. Das Aussehen der FEP-Beschreibungen wurde weiter vereinheitlicht (Zitate etc.). Treffen mit den Reviewern zur Erläuterung und Diskussion.
- AP2: Definitionen für Szenarienbezeichnungen und die Zuordnung von Szenarien in Szenarienklassen wurden gemeinsam mit DBETec und BGR erarbeitet. Der von BGR vorgelegte Entwurf zur Vorgehensweise bei der Szenarientwicklung wurde während der Arbeitstreffen diskutiert. Festlegung des weiteren Vorgehens.
- AP3: Modellrechnungen für ein einfaches Grubengebäude wurden durchgeführt und auf Arbeitstreffen präsentiert und diskutiert.
- AP4: Es haben noch keine Arbeiten stattgefunden.
- AP5: Die von GRS erarbeiteten Unterlagen zum Safety Case (Übertragung der Elemente eines Safety Case auf Endlager im Salz) wurden diskutiert. Ein Berichtsentwurf wurde von GRS vorgelegt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Nach Vorliegen des externen Reviews des FEP-Katalogs Beginn mit der Überarbeitung der einzelnen FEP. Verwendung der Datenbank.
- AP2: Diskussion des Vorschlags zur Szenarientwicklung und Erarbeitung einer abgestimmten Vorgehensweise. 1. Schritt: Entwicklung eines Referenzszenarios, bzw. einer Referenz-Szenariengruppe.
- AP3: Weitere Auswertungen der Modellrechnungen am einfachen Grubengebäude zur Ermittlung des potenziellen einschlusswirksamen Gebirgsbereichs. Festlegung der Grenzen des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs und Erarbeitung eines Entwurfs für die realitätsnahe Definition des sicheren Einschlusses.
- AP4: Zusammenstellung des internationalen Stands bei der Vorgehensweise zur Berücksichtigung von Unsicherheiten.
- AP5: Fertigstellung des Berichts zum Safety Case.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die Berichte der Phase I liegen in gedruckter Form vor.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10065
Vorhabensbezeichnung: Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW – Kurztitel: ISIBEL		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.012.476,00 EUR	Projektleiter: 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 Unsicherheiten 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 Sicherheitsnachweis-konzept 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.

Die Datenbank wurde gemäß den von BGR, GRS und DBE Technology GmbH abgestimmten Anforderungen programmiert und allen Teilnehmern als Testversion zur Verfügung gestellt. Die Datensätze des FEP-Kataloges wurden komplett in die Datenbank übernommen. Die übernommenen Datensätze wurden anschließend von den Projektbeteiligten auf Korrektheit und Vollständigkeit überprüft. Weiterhin wurden die Datensätze redaktionell überarbeitet. Erfahrungen aus der Anwendung der Datenbank wurden diskutiert und haben in Einzelpunkten zu Ergänzungen und Optimierungen der Datenbank geführt.

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

Das Kick-off-Meeting mit der externen Expertengruppe unter Führung von Prof. Röhlig hat am 24.10.08 stattgefunden. Nach der Vorstellung des FEP-Katalogs wurde die Aufgabenstellung für Review diskutiert. Weiterhin wurden die weiteren Schritte für das Review und die Abstimmung/Diskussion mit dem ISIBEL-Team erörtert und festgelegt. Die Expertengruppe hat von BGR, GRS und DBE Technology GmbH alle Berichte der Phase I des ISIBEL-Projektes als Grundlage für die Arbeit erhalten.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Fertigstellung und weitere Erprobung der Datenbank. Review des FEP-Kataloges und Überarbeitung der FEP-Beschreibungen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10075
Vorhabensbezeichnung: Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 698.417,00 EUR	Projektleiter: 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:

Tests zur Funktionsfähigkeit des entwickelten Prototyps eines isopiesticen Topfes für höhere Temperaturen ergaben, dass die Apparatur für die vorgesehenen Versuche geeignet ist. Es wurden vier dieser isopiesticen Töpfe für höhere Temperaturen in Auftrag gegeben.

Literaturstudie:

Keine neuen Arbeiten durchgeführt.

Löslichkeitsversuche:

Im Berichtszeitraum wurden die Untersuchungen zur Löslichkeit des Monohydrats im System Fe(II)-SO₄-H₂O fortgesetzt. Bei 66 und 85 °C konnte eine Gleichgewichtseinstellung gefunden und die Beprobung bei 85 °C auch bereits abgeschlossen werden. Aufgrund eines Stromausfalls im Dezember 2008 kam es hier zu Verzögerungen. Der Koexistenzpunkt zwischen dem Tetrahydrat und dem Monohydrat ließ sich nicht zweifelsfrei feststellen. Wir vermuten, dass er bei ca. 63,1 °C liegt. Da die Gleichgewichtseinstellungen in diesem System auch bei höheren Temperaturen extrem lange brauchen (manche Proben werden bereits seit einem Jahr beobachtet), erwarten wir nicht mehr, den Koexistenzpunkt analytisch bestimmen zu können.

Korrosionsversuche:

Es wurde eine aufwändige zweite Beprobung der Korrosionsprodukte in hochsalinaren Lösungen bei 25 und 83 °C durchgeführt und die Proben an der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen mit einer wesentlich empfindlicheren Fe-Röhre röntgendiffraktometrisch vermessen. Die Auswertung ergab, dass Hibbingit nicht sicher und wenn nur in sehr geringen Anteilen in einer Probe nachgewiesen werden konnte, Amakinit wurde gar nicht gefunden.

4. Geplante WeiterarbeitenDampfdruckmessungen:

Zurzeit wird anhand von Messungen im System MgSO₄-H₂O bei unterschiedlichen Temperaturen die nötige Versuchsdauer ermittelt. Sobald die neuen isopiesticen Töpfe geliefert worden sind, erfolgt die Validierung anhand von Messungen im System NaCl-H₂O. Anschließend wird mit den Messungen im System Fe(II)-Cl-H₂O und Fe(II)-SO₄-H₂O begonnen.

Literaturstudie:

Auswertung der Literaturrecherche bezüglich Fe(II)-OH-H₂O und für Fe(II)-Cl-H₂O im System der ozeanischen Salze.

Löslichkeitsversuche:

Weiterführung der Untersuchung des Systems Fe(II)-SO₄-H₂O im Monohydratfeld (66° - 80 °C). Von der Untersuchung des Systems Fe(II)-OH-H₂O wird abgesehen, da die Ergebnisse der Korrosionsversuche ergaben, dass Amakinit und Hibbingit in diesem System keine Rolle spielen.

Korrosionsversuche:

Da sich die Korrosionsprodukte Amakinit und Hibbingit nicht bzw. nicht sicher nachweisen ließen, wird auf die Untersuchung fester Lösungen verzichtet. Unsere Bemühungen konzentrieren sich nun auf untersättigte Fe(II)-Lösungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10086	
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche			
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2006 bis 31.01.2010		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 893.212,00 EUR		Projektleiter: 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 Wärme entwickelnden Abfällen. Die Wärme belastet die geotechnische Barriere, das Nahfeld bzw. den unterirdischen Einlagerungsbereich und das Fernfeld in der Umgebung des gesamten Endlagers. Es ist Ziel dieses Vorhabens, die Temperaturbelastung auf die drei genannten Bereiche im Zusammenhang mit dem Isolationspotenzial der Wirtsformation sowie mit der ingenieurtechnischen Realisierbarkeit der untertägigen Bohrlochlagerung zu charakterisieren. Aktuelle Untersuchungen in einem anderen Vorhaben (GENESIS) zeigen, dass Endlagerkonzepte für Tonstein-Formationen in Deutschland erreicht werden können, wenn man die Wärmeleitfähigkeit des Buffermaterials durch Zusatzstoffe erhöht. Dadurch wird die eingebrachte Wärme besser in die Tonformation abgeführt. Um diese Konzepte hinsichtlich ihrer Realisierbarkeit zu prüfen, sind entsprechende Materialuntersuchungen vorgesehen. Die eingebrachte Wärme bedingt auch permanente temperaturinduzierte Spannungsveränderung, deren Einfluss auf die Stabilität von Einlagerungsbohrlöchern analysiert werden soll. Bei organischen Bestandteilen führt eine Temperaturerhöhung zu einer Reifung im Hinblick auf eine Kohlenwasserstoffgenese. Die Reifung organischer Bestandteile hängt wesentlich davon ab, welchen Temperaturen die Substanz im Laufe ihrer Geschichte ausgesetzt war und wie lange die Temperaturen gewirkt haben. Die durch die eingebrachte Wärme künstlich hervorgerufene Reifung vorhandener organischer Substanz soll anhand von Modellberechnungen quantifiziert werden. Eine Temperaturerhöhung in einer Tonformation würde auch Umwandlungsreaktionen beschleunigen und damit den chemisch/mineralogischen Stoffbestand des Gesteins verändern. 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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Im Untertagelabor in Bure läuft der Erhitzer Versuch „TER“. Dieser hat zum Ziel, das thermo-hydro-mechanische Verhalten des Callovo-Oxfordian Tonsteins bei einer maximalen Temperaturbelastung von 100°C zu untersuchen. Durch mehrmalige Erhitzerausfälle ergaben sich ungewollt verschiedene Aufheizphasen des Gebirges, die sowohl einzeln, als auch in ihrer Gesamtheit ausgewertet werden können.

Im Berichtszeitraum wurde eine Parameteranpassung für die thermischen Leitfähigkeiten in horizontaler und vertikaler Richtung unter Anwendung statistischer Analysen zunächst für die letzte ca. 1-jährige Aufheizphase durchgeführt und anschließend eine Gesamtanpassung unter Einbeziehung aller Aufheizphasen. Es konnte ein Parametersatz identifiziert werden, der nahe an denen der anderen Modellierungsteams liegt. In Anbetracht der technischen Probleme während des Versuches und der Unsicherheiten im Rahmen der Messtechnik, war eine Übereinstimmung auch nicht zu erwarten. Je nach angewandtem Computercode und Analyseverfahren unterschieden sich die Ergebnisse im Bereich von 10 bis 25 % für die thermischen Parameter.

AP5: Im Rahmen dieses AP beteiligt sich DBE TECHNOLOGY an dem von der NAGRA geplanten Versuch, dem sogenannten MB test (mine-by test) im URL Mt. Terri. Ziel ist es, die hydromechanische Reaktion des Opalinustons auf eine Streckenauffahrung zu erfassen. Diese wird dazu messtechnisch begleitet, wobei der zu durchörternde Gebirgsbereich im Vorfeld instrumentiert wird. Die Beteiligung an diesem Experiment beinhaltet die Interpretation der Versuchsergebnisse, insbesondere die versuchsbegleitende numerische Modellierung.

Am 02. Dezember fand das Kick-off Meeting der Modellierungsteams in St. Ursanne in der Schweiz statt. Auf diesem Treffen wurden die Bedingungen und organisatorischen Aspekte für die gemeinsame Modellierung diskutiert und festgelegt. Der folgende Zeitplan wurde vereinbart:

- Bereitstellung der Datenbasis für die Modellierung: 01/09
- Bereitstellung der Standardvorlage zur Abgabe der Vorausberechnungen: 03/09
- Abgabe der Vorausberechnungen: Fr, 17. April 2009
- Treffen zur Diskussion der Vorausberechnungen und Bereitstellung der Messdaten zur Modellanpassung: Do, 30. April 2009
- Abgabe der interpretierten Modellergebnisse: Di, 31. Juli 2009
- Treffen zur Diskussion der interpretierten Ergebnisse: Di, 08. September 2009

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: 1. Fortführung der versuchsbegleitenden Modellierung der Erhitzerphasen im TER-Versuch in Bure zur Verbesserung der Parameter-Identifikation.
2. Simulation der zeitlichen Entwicklung der EDZ und ihres Riss-Systems.

AP5: Modellerstellung zur versuchsbegleitenden Modellierung inkl. Funktionstest.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10096
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2006 bis 30.04.2009		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008
Gesamtkosten des Vorhabens: 447.400,00 EUR		Projektleiter: Dr. Geckeis

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 Endlager ist für ein bestimmtes Szenario derzeit schwer zu quantifizieren. Als eine relevante Kolloidquelle in vielen Endlagerkonzepten gilt die Bentonitbarriere. Je nach den geochemischen Gegebenheiten können kolloidale Tonpartikel aus ihr freigesetzt werden.

Hauptziel des Vorhabens ist es, ein verbessertes Verständnis der Radionuklid-Kolloid- und der Kolloid-Gesteinsoberflächen-Wechselwirkungen und der zugrunde liegenden 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, auf den sich der vorliegende Bericht bezieht, konzentriert sich auf experimentelle Arbeiten im Labor und in Untertagelabors sowie die begleitende Erstellung hydraulischer Modelle. Die Arbeiten der GRS fokussieren sich auf die Anwendung, Weiterentwicklung und Qualifizierung von Rechenprogrammen für die Langzeitsicherheitsanalyse. In dem vorliegenden Bericht werden die Arbeiten des INE 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 (Executive Summary) (GRS/INE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Status: Die experimentellen Arbeiten zur Kolloidstabilität sind weitestgehend abgeschlossen. Die Arbeiten zur Kolloidgeneration, zur Wechselwirkung von Modellkolloiden mit Gesteinsoberflächen, die CFM In-situ-Experiment begleitenden Labormigrationsstudien an Bohrkernen werden fortgesetzt.

AP1.1: Die Bentonit- Erosionsexperimente zeigten eine Kolloidfreisetzung (max. 10-20 mg/L) als Funktion der Zusammensetzung der Kontaktlösung (I, $[M^+]$, $[M^{2+}]$, pH). Die Ergebnisse des Erosionsverhaltens stehen in Einklang mit den Arbeiten zur Kolloidstabilität unter vergleichbaren geochemischen Randbedingungen und können

möglicherweise mit elektrostatischen Ansätzen (DLVO-Theorie) erklärt bzw. prognostiziert werden. Momentaner Fokus der Arbeiten liegt auf dem Prozessverständnis des in allen Versuchen beobachteten Plateaus der Kolloidkonzentration (dynamisches Gleichgewicht, Abreicherung der Kolloidquelle?). Die Kraft-Abstands-Messungen (Kolloid- Kluft Wechselwirkung) wurden auf verschiedene Minerale (Quarz, Biotit, Muskovit, Feldspat, Apatit) unter Variation des Hintergrundelektrolyt (pH 2-10, I = 0.01 M NaCl); 2) und Zusatz von Europium ($10^{-5}/10^{-6}$ M Eu(III)) von pH 2-6) oder 10^{-4} M Calcium (pH 2-10) erweitert. Die Kationen Eu(III) und Ca(II) erhöhten die Adhäsionskräfte bei den Mineralen Quarz, Biotit, Muskovit, Feldspat bei pH-Werten > 3 . Die Ergebnisse dokumentieren, dass die Kolloidwechselwirkung mit Mineraloberflächen durch elektrostatische Wechselwirkungen gesteuert wird. Weiterhin wurden die gemessenen Kraft-Abstandskurven (Quarz) mit theoretisch berechneten Kurven (nach DLVO-Theorie) verglichen. Die gemessenen Kräfte konnten gut mit dieser Theorie beschrieben werden und die gemessenen Oberflächenpotentiale lagen im Bereich theoretisch vorausgesagter Oberflächenpotentiale.

AP1.2: Die Arbeiten sind durch Probleme/Substitution des Megapacker-System zeitlich verzögert worden. Ein erster Homologen-Test (Th, Hf, Tb) mit Febex- Bentonitkolloiden fand im Frühjahr 2008 in der MI- Scherzone statt. Trotz vierfach erhöhter Kluftverweilzeit konnte ein quantitativer Wiedererhalt der Kolloide und sehr hohe Wiedererhalte für die Homologen beobachtet werden. Die gemessene An(IV) Mobilität steht grundsätzlich in Einklang mit Untersuchungen (AP1.1) zur Sorptions- Reversibilität. Die beobachtete hohe Mobilität und fehlende Größenchromatographie der Kolloide lässt vermuten, dass es sich bei dem Strömungsfeld dieses Dipols um einen breiten Fließkanal handelt und dokumentieren die Sensitivität des Kolloidtransports hinsichtlich der Fließkanalgeometrie und Heterogenität der Kluft.

AP 2.5: In der ersten Phase des CFM-Projekts im Grimsel Untertagelabor wurden verschiedene in situ Experimente mit Uranin als konservativem Tracer durchgeführt. Ziel der Versuche war es, das grundlegende Verständnis der Transportprozesse in der Scherzone zu verbessern. Außerdem dienen die Tracerexperimente unter kontrollierten Bedingungen zur Kalibrierung der vorhandenen numerischen Modelle. Die begonnene numerische Simulation der komplexen Grundwasserströmung und des Tracertransports im Umfeld des CFM Versuchs wurden mit verbesserten Rechenmodellen fortgesetzt. Die Rechenergebnisse sind detailliert in dem Arbeitsbericht dargestellt (NAB 08-31, July 2008). Weiterhin wurde ein Interpolationscode zur Übertragung der vorgegebenen heterogenen Verteilung der hydraulischen Kennwerte des Kluftmaterials auf vorhandene Rechenmodelle entwickelt. Zurzeit werden Testrechnungen mit dem ADINA-F Programm durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Kolloidgenerationsexperimente mit kompaktiertem, markiertem Bentonit werden fortgeführt. Migrationsexperimente an dem Bohrkern Mock-up Test werden fortgeführt, In-situ-Experimente mit Radionuklidhomologen und Bentonitkolloiden unter Variation der Dipols und der Verweilzeit sind in Vorbereitung und die Durchführung ist für Febr./März 2009 geplant. Experimente mit der AFM Technik werden fortgesetzt.

AP2.5: Die Bohrkernexperimente werden modelliert, um die im Labor ablaufenden Prozesse besser zu verstehen. Durch eine Parametervariation sollen die Transporteigenschaften des porös- geklüfteten Materials ermittelt werden. Am Beispiel eines CRR - Dipolexperiments sollen die Rechenergebnisse von ADINA-F und R3f direkt verglichen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Pudewills, A. (2008): Modelling of Tracer Tests in a Shear Zone at the Grimsel Test Site, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 7417.

Kunze, P., Seher, H., Hauser, W., Panak, P.J., Geckeis, H., Schäfer, T. (2008): Radionuclide speciation in the Grimsel granite groundwater Febex bentonite pore water mixing zone. 6th EC FP IP FUNMIG Edinburgh 26 -30 November 2007, (Buckau, G.; et al.; eds), NDA Report p. 167-176.

Seher, H., Schäfer, T., Geckeis, H., Fanghänel, Th. (2008): Bentonite colloid stability under geochemical conditions relevant for a deep geological repository in fractured rocks. 22nd Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS), August 31 - September 5, Cracow, Poland, Book of abstracts p. 387.

P. Kunze, H. Seher, W. Hauser, P. J. Panak, H. Geckeis, T. Schäfer, Radionuclide speciation in the Grimsel granite ground-water Febex bentonite pore water mixing zone, *J. Contam. Hydrol.* 102(1-2) 263-272.

A. Filby, M. Plaschke, H. Geckeis, Th. Fanghänel, Interaction of carboxylated latex colloids with mineral surfaces. Abstracts of the X. Annual Linz Winter Workshop: Advances in single-molecule research for biology and nanoscience, Linz, February 15-19, 2008 (Abstract), S. 1-9.

A. Filby, M. Plaschke, H. Geckeis, Th. Fanghänel, Interaction of carboxylated latex colloids with mineral surfaces, *J. Contam. Hydrol.* 102(1-2) 273-284.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10106	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2006 bis 30.04.2009		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 271.750,00 EUR		Projektleiter: 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 zugrunde liegenden 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 hydraulischer Modelle. Die Arbeiten der GRS fokussieren sich auf die Anwendung, Weiterentwicklung 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 (Executive Summary) (GRS/INE)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Ermittlung aktualisierter Parameter für Desorptionsraten aus neuen Batch Experimenten des FZK-INE und Raten für die irreversible Filtration nach der Deep Bed Filtration Theorie.
Durchführung von 1D Transportrechnungen zum Einfluss der aktualisierten Parameter auf die Durchbruchkurve und die Wiedererhaltung eines kolloidgetragenen Tracers in Abhängigkeit von der Transportzeit.
Beiträge zur Weiterentwicklung und Verifikation von r3t durch Anwendung des Programms auf bisher ungetestete Problemstellungen. Im Zuge der Arbeiten wurden einige Inkonsistenzen insbesondere eine Verletzung der Massenerhaltung aufgedeckt und behoben.
Erstellung eines hydrogeologischen Simulationsmodells für das Tracer-Experiment CFM-08-02 und Kalibrierung der hydrogeologischen Parameter anhand der Durchbruchkurve mit Parametervariationen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Vergleichsrechnung zwischen r^3t/d^3f -ADINA-F mit FZK-INE am Beispiel eines abgeänderten GRS-Modells des Experiments CFM-08-02.
Auslegungsrechnungen zu potentiellen CFM-Homolog-Experimenten mit veränderten Ausstromraten.
Simulation der Radionuklid-desorption von den Kolloiden und der Kolloidfiltration und deren Auswirkung auf die Ausbreitung und Wiedererhaltung eines kolloidgetragenen Tracers bei veränderten Ausstromraten.
Durchführung von 1D-Rechnungen für Bedingungen eines Endlagersystems mit aktualisierten Parametern.
- AP3: Das nächste Projekttreffen GRS/INE findet im Januar 2009 in Braunschweig statt. Ein weiteres Treffen des CFM-Projekts ist für April 2009 geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Beitrag mit Darlegung der GRS Modellierungsstrategie zum Bericht.

P. A. Smith, I. Blechschmidt, V. Cvetkovic, C. Degueldre, I. Gaus, K. Iijima, M. Kuentzel, G. W. Lanyon, I. Neretnieks, U. Noseck, A. Pudewills, T. Schaefer and P. Reimus: CFM Phase I Modelling Report. NAGRA, NAB 08-31, 2008.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10116
Vorhabensbezeichnung: Barriereintegrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs in Tonformationen (BET)	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008
Gesamtkosten des Vorhabens: 709.575,00 EUR	Projektleiter: Dr. Miehe

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die im Mai/Juni 2008 durchgeführten Wasserinjektionstests wurden ausgewertet. Dabei zeigte sich, dass die Permeabilität gegenüber Wasser in der Regel geringer war als vor den Gasinjektionstests. Generell nehmen die Werte mit dem Hohlraumabstand ab und sind in den Bohrlöchern, die parallel zur Schichtung orientiert sind ($3 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$ bis 10^{-22} m^2), höher als bei denjenigen senkrecht zur Schichtung (10^{-19} m^2 bis 10^{-21} m^2). Die Messung im tiefsten Intervall senkrecht zur Schichtung (BET6) konnte nicht ausgewertet werden, da es hier zu einer Drucküberlagerung durch die Auffahrung der Gallery 08 kam.

AP2: Die Untersuchungen an einer dritten Probe (F), bei der bereits bei Beginn der Gasdruckaufgabe ein Gasfluss feststellbar war, wurde weitergeführt und mit Untersuchung an einer vierten Probe (G) begonnen. Die Proben wurden hydrostatisch bei 3.5 MPa eingespannt und der Gasinjektionsdruck über eine Zentralbohrung stufenweise aufgebracht. Daran schloss sich eine Druckabbauphase an. Dieser Vorgang wurde wiederholt. Bei der Probe G wurde wie vorher beobachtet, ein Gasfluss erst ab einem höheren Injektionsdruck (hier 2.5 MPa) registriert. Die haben Versuche gezeigt, dass sich die Variation des Injektionsdrucks in gleicher Weise auf die Permeabilität auswirkt. Ein Überschreiten des Einspanndrucks bewirkt einen sehr starken Anstieg in der Permeabilität. Es ist z. Zt. noch nicht völlig auszuschließen, dass dieses Verhalten apparativ bedingt ist. Zur Klärung werden Versuche mit einer modifizierten Messapparatur vorgenommen. Die Verläufe, unterhalb des Einspanndrucks, weisen auf ein dilatantes Öffnen bzw. Schließen von vorhandenen Fließwegen hin. Die Permeabilitäten, die nach der Druckabbauphase bei erneuter Druckerhöhung gemessen wurden, lagen oberhalb der zu Versuchsbeginn ermittelten Werte. Die geöffneten Fließwege werden zumindest innerhalb des Versuchszeitraums nicht wieder vollständig restauriert. Dieses Verhalten harmoniert auch mit den in situ gemachten Beobachtungen, dass bei erneuter Druckaufgabe der Eintrittsdruck geringer war als zu Beginn der Untersuchungen. Die unterhalb des Einspanndrucks ermittelten Permeabilitäten der Proben F und G, beliefen sich auf 10^{-19} m^2 bis 10^{-21} m^2 bzw. auf 10^{-19} m^2 und 10^{-23} m^2 .

AP3: Die bisher aus den Labor- und In-situ-Versuchen vorliegenden Daten (einschließlich der Daten aus dem kürzlich beendeten HG-C Projekt) legen nahe, dass es beim Gaseintritt in der Regel nicht zur Ausbildung diskreter Risse kommt, sondern dass die dilatante Gebirgsaufweitung die hydromechanische Kopplung besser beschreibt. Dieses Ergebnis muss durch die noch ausstehenden Untersuchungen allerdings bestätigt werden. Anschließend kann ein entsprechendes Modell formuliert werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Wiederholung der Wasserinjektionstests.
Nach Erreichung des Ausgangszustandes Wiederholung des Gasinjektionstests.
- AP2: Fortsetzung der Untersuchungen zur gasdruckinduzierten Schädigung.
Untersuchungen zur Wiederverheilung.
- AP3: Wird bearbeitet, sobald hinreichende Ergebnisse der übrigen AP's vorliegen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10126
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 298.298,00 EUR	Projektleiter: 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. $\log K^\circ$, $\Delta_f G_m^0$, $\Delta_r G_m^0$), die dazugehörigen Reaktionen, Wechselwirkungsparameter für das Pitzer- bzw. SIT-Modell, Qualitätsstufen, Quellenangaben und Kommentare.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Radionuklide Neptunium, Plutonium, Americium, Curium und Technetium wurden weitere Einlese-Listen im Excel-Format erstellt. Für die primären Masterspezies der angegebenen Elemente sind alle Bildungsdaten und dazu relevante Informationen, soweit sie in der Literatur vorhanden waren und selektiert wurden, in der Datenbasis enthalten.

Es ist ein umfassender Parametersatz bei 25 °C ($\log K^\circ$ -Werte, SIT- und Pitzer-Parameter) erstellt worden zur Modellierung der Löslichkeit, Hydrolyse und ternären Komplexbildung dreiwertiger Actiniden (Pu, Am, Cm) und Lanthaniden (Nd als Analogon für Sm) in NaCl-, MgCl₂- und CaCl₂-Lösungen sowie vierwertiger Actiniden (Th, Np, Pu) in alkalischer CaCl₂-Lösung.

Die Bildungsreaktionen für die Lösungsspezies und Festphasen von Np, Pu, Am, Cm und Tc mussten umformuliert werden. Dies war notwendig geworden wegen der Einschränkungen bei der Handhabung von Redoxreaktion in den meisten Rechencodes wie *EQ3/6* und *Geochemists Workbench*, die nur über die Masterspezies H₂(g) oder die Produktspezies O₂(g) laufen. Entsprechend dieser Erfordernisse zur Erstellung von Parameterdateien waren konsistente Neuberechnungen der Gleichgewichtskonstanten $\log K^\circ$ notwendig. Dies betrifft insbesondere die Redoxreaktionen zur Bildung sekundärer Masterspezies, Reaktionen mit Festphasen, Reaktionen mit OH⁻ als Reaktand sowie einen Großteil der Reaktionen für Technetium(IV) und Technetium(VII).

Weiterhin wurde an der Datenauswahl gearbeitet: a) Durchsicht der für THEREDA-relevanten neueren Literatur zu Technetium, die nach dem Erscheinen des NEA-TDB-Reviews [1999RAR/RAN] (NEA/OECD: Chemical Thermodynamics Vol. 3. Chemical Thermodynamics of Technetium) publiziert wurde, und Datenauswahl unter Wahrung der Konsistenz mit den aus [1999RAR/RAN] übernommenen Daten.

b) Zusammenstellung thermodynamischer Daten ($\Delta_f G^\circ_m$, $\Delta_f H^\circ_m$, S°_m) für primäre und sekundäre Masterspezies für Cm, Sm und Pa, für die keine NEA-TDB-Reviews existieren.

Für das Arbeitspaket „Dokumentation (Handbuch)“ wurde das Kapitel 3 "Richtlinien zur Datenauswahl" überarbeitet und um Kapitel 3.3 "Richtlinien für Analogie- und Schätzwerte" erweitert. Letzteres ist jedoch noch nicht vollständig fertiggestellt. Diverse Unterkapitel zum Kapitel 4 "Datenkategorisierung" stehen ebenfalls noch aus.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für das letzte Halbjahr der Projektphase I werden die bisher vorliegenden thermodynamische Daten für Neptunium, Plutonium, Americium, Curium und Technetium aufgearbeitet und unter Berücksichtigung der THEREDA-Kriterien in die Datenbasis eingebaut. Das THEREDA-Handbuch wird fertig gestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10136
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 91.185,00 EUR	Projektleiter: 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

- Weiterarbeit an Kapitel 3 (Richtlinien zur Datenauswahl) und 5 (Technische Grundlagen der Datenbank) des Handbuchs

AP3: Datenbasis für die Radionuklide

- Weitere Dateneingabe zum Uran (thermodynamischer Daten und Wechselwirkungsparameter)
- Dateneingabe zum Radium

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Pflege und Erweiterung der Intranetseite

AP2:

- Fertigstellung von Kapitel 5 (Technische Grundlagen der Datenbank)
- Weiterarbeit an Kapitel 3 (Richtlinien zur Datenauswahl)
- Erstellung weiterer Kapitel (6 – Dateneingabe) und Überarbeitung der Entwürfe Handbuch

AP3:

- Datenbewertung der Daten zum Uran

5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Richter und V. Brendler „Vorstellung des Online-Zugangs von THEREDA“. Fachgespräch des Projektträgers Forschungszentrum Karlsruhe, Bereich Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE) "Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - THEREDA", 12. November 2008, Forschungszentrum Karlsruhe.

M. Altmaier, V. Brendler, S. Gester, S. Hagemann, H.-J. Herbert, C. Marquardt, H. Moog, V. Neck, A. Richter, W. Voigt, S. Wilhelm: „THEREDA – Thermodynamic Reference Database for Nuclear Waste Disposal in Germany. International High (IHLRW 2008), 08.-12.09.2008, Las Vegas, USA und Proceedings of the 12th International High-Level Radioactive Waste Management Conference, September 07-11, 2008, Las Vegas, 287-290.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10146
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 77.452,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hagemann	

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 Wirtsformationen 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:

Im Berichtszeitraum erfolgte die Organisation und Durchführung von drei Projektbesprechungen: 5./6.2.2008 (FZD-IRC), 9./10.2.2008 (FZK-INE), 11.11.2008 (FZK-INE).

Gemeinsam mit PTKA-WTE: Organisation des Fachgesprächs „Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - THEREDA“.

- Datenerfassung:

Si, Al: die Datenerfassung für Si und Al verzögerte sich, da neue Literaturdaten gefunden wurden, insbesondere für saure Al-Lösungen. Diese wurden (und werden) mit den bereits vorhandenen Löslichkeits- und Dampfdruckdaten kombiniert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im kommenden Projektzeitraum erfolgt eine erneute Auswertung aller Si- und Al-Daten mit dem Ziel eines verbesserten und dem Stand der Wissenschaft entsprechenden Parametersatzes. Danach erfolgt die Erfassung in THEREDA.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10156
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 517.504,00 EUR	Projektleiter: 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

1. Synthese stickstoff- und schwefelhaltiger Huminsäure-Modellverbindungen und spektroskopische Charakterisierung der Heteroatom-Funktionalitäten
2. Untersuchung des Einflusses stickstoff- und schwefelhaltiger Funktionalitäten auf die U(VI)- und Am(III)-Komplexierung mit Huminsäuren und organischen Modellliganden
3. Bestimmung der Konzentrations- und Temperaturabhängigkeit der Komplexbildungskonstante für die U(VI)-Huminsäure-Komplexierung
4. Untersuchung der Bildung ternärer U(VI)-Carbonato-Humat-Komplexe
5. Untersuchung der U(IV)-Komplexierung durch Humin- und Fulvinsäuren
6. Identifizierung der für die Komplexierung von Actiniden in verschiedenen Oxidationszuständen relevanten funktionellen Gruppen der Huminstoffe
7. Quantifizierung und Charakterisierung der von Tonen freigesetzten anorganischen und organischen Kolloide
8. Untersuchungen zur U(VI)-Sorption an Opalinus-Ton und zum Einfluss von Huminstoffen auf die U(VI)-Sorption
9. Diffusionsexperimente zum U(VI)-Transport in Opalinus-Ton

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Basierend auf der Synthese der Huminsäure (HS) Typ M1 wurden schwefelhaltige Huminsäuremodellverbindungen unter Einsatz variierender Mengen an Cystein synthetisiert und im Vergleich zu dazugehörigen schwefelfreien Huminsäuremodellsubstanzen charakterisiert. Schwefelgehalt und Protonenaustauschkapazität der HS steigen mit steigender Cysteinkonzentration im Synthesegemisch. Es wurden HS mit 1.9, 3.9 und 7.7 % S synthetisiert. Unabhängig vom Schwefelgehalt zeigen die HS vergleichbare FTIR-Spektren, was auf vergleichbare Gesamtstrukturen hinweist. Erste XPS-Messungen an der HS M1-S-1 (S: 1.9 %) in Zusammenarbeit mit der Universität Mainz (Institut für Kernchemie) zeigen, dass der Schwefel in dieser HS zu ca. 82 % in reduzierter Form in Thiol-, Dialkylsulfid- und/oder Disulfidgruppen vorliegt. Die restlichen ca. 18 % des Schwefels liegen in Form von Sulfoxiden vor.
- Erste TRLFS-Untersuchungen ergaben, dass die schwefelhaltigen funktionellen Gruppen der HS M1-S-1 (S: 1.9 %) keinen signifikanten Einfluss auf die U(VI)-Komplexierung haben.
- Diffusionsversuche unter aeroben Bedingungen zeigten eine Eisenauswaschung aus dem Ton. Deshalb werden die Diffusionsversuche nun unter anaeroben Bedingungen durchgeführt. Mit der Konditionierung zweier neu bestückter Diffusionszellen wurde begonnen.
- Eine anaerobe Opalinustonprobe BDR-2 (Täufe 7.13 → 7.60 m) wurde mittels IR, XRD, TC, TOC, ICP-MS, BET und CEC charakterisiert. Es wurden keine signifikanten Unterschiede zur aeroben Probe festgestellt.
- Die U(IV)-Komplexierung durch Mandelsäure und Glycolsäure wurde zwischen pH 0 und 1 bei einer Ionenstärke von 1.0 M mittels UV-Vis-Spektroskopie untersucht. Dabei wurde die Bildung von 1:1 und 1:2 Uran(IV)-Ligand-Komplexen des Typs $M_pH_qL_r$ nachgewiesen. Die Stabilitätskonstanten wurden mit $\log \beta_{101} = 4.53 \pm 0.09$ und $\log \beta_{102} = 8.02 \pm 0.13$ für Mandelat und mit $\log \beta_{101} = 4.71 \pm 0.08$ und $\log \beta_{102} = 8.25 \pm 0.15$ für Glycolat bestimmt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortsetzung der XPS-Messungen an schwefelhaltigen Huminsäuremodellverbindungen zur Identifizierung von Schwefelfunktionalitäten in synthetischen und natürlichen HS in Zusammenarbeit mit der Universität Mainz.
- Fortsetzung der laserspektroskopischen Untersuchungen zur Bestimmung des Einflusses schwefelhaltiger Huminsäurefunktionalitäten auf die U(VI)-Huminsäure-Komplexierung.
- Fortführung des Diffusionsversuchs unter anaeroben Bedingungen, Start der U(VI)-Diffusion in Abwesenheit und Gegenwart von Huminsäure (^{14}C -markiert).
- Bestimmung der bei der U(VI)-Sorption an Opalinuston in Abwesenheit und Gegenwart von Huminsäure gebildeten Oberflächenkomplexe mittels EXAFS.
- Beginn der Untersuchungen zur Am(III)-Komplexierung mit stickstoff- und schwefelhaltigen Modellliganden mittels UV-Vis-Spektroskopie und Laserspektroskopie.
- Laserspektroskopische Untersuchungen zur Konzentrations- und Temperaturabhängigkeit der U(VI)-Huminsäure-Komplexierung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Joseph, C., Raditzky, B., Schmeide, K., Geipel, G., Bernhard, G.: Complexation of Uranium(VI) by Sulfur and Nitrogen Containing Model Ligands in Aqueous Solution. In: Uranium, Mining and Hydrogeology (Merkel, B.J.; Hasche-Berger, A. eds.), Springer Verlag, Berlin, 539-548 (2008).

Schmeide, K., Bernhard, G.: Spectroscopic Study of the Uranium(IV) Complexation by Organic Model Ligands in Aqueous Solution. In: Uranium, Mining and Hydrogeology (Merkel, B.J.; Hasche-Berger, A. eds.), Springer Verlag, Berlin, 591-598 (2008).

Raditzky, B., Schmeide, K., Geipel, G., Bernhard, G.: Complexation Studies of Uranium(VI) by Nitrogen Containing Model Ligands in Aqueous Solution. In: NRC7 - 7th International Conference on Nuclear and Radiochemistry, 24.-29.08.2008, Budapest, Hungary, Proceedings (Vértes, A. et al. eds.) (2008).

Zuwendungsempfänger: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55099 Mainz		Förderkennzeichen: 02 E 10166
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 631.950,00 EUR	Projektleiter: Prof. Reich	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Batchexperimente mit Np/Pu-Tongestein und Einfluss von Huminstoffen;
- Speziationsuntersuchungen in den Systemen Np/Pu-Tongestein mit XANES und EXAFS und in dem System Tongestein-Huminstoff mit XPS;
- Diffusionsexperimente mit Np(V) in natürlichem Tongestein und Einfluss von Huminstoffen;
- analytisch apparative Entwicklung, u. a. Kopplung CE-ICP-MS, CE-DAD und CE-RIMS.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die pH-Abhängigkeit der Sorption von 8×10^{-6} M Np(V) an Opalinuston (OPA) wurde in mit Calcit gesättigten Lösungen unter anaeroben Bedingungen und einem Partialdruck von $p(\text{CO}_2) = 10^{-2,3}$ atm untersucht. Gegenüber den Experimenten an Luft wurden zwei wesentliche Unterschiede beobachtet. Zum einen wird im Sorptionsmaximum bei pH 8,5 das Np mit 90 % um ca. 30 % stärker sorbiert als unter aeroben Bedingungen. Das ist wahrscheinlich durch die mit Flüssig-flüssig-Extraktion nachgewiesene Reduktion von Np(V) zu Np(IV) unter anaeroben Bedingungen verursacht, wobei als Reduktionsmittel aus Pyrit gelöstes Fe(II) in Frage kommt. Zum Anderen wird bei dem erhöhten CO_2 -Partialdruck des anaeroben Experiments bei $\text{pH} > 8,5$ weniger Np an OPA sorbiert als an Luft. Bei pH 10 bleibt Np vollständig in Lösung.

Der Einfluss von 10 mg/l Huminsäure auf die Sorption von Np(V) an OPA wurde untersucht. Die Anwesenheit von Huminsäure bewirkt im pH-Bereich von 7,5-10,0 eine geringere Sorption von Np an OPA, wobei dieser Effekt im pikomolaren Konzentrationsbereich geringer ausgeprägt ist als im mikromolaren. Unter anaeroben Bedingungen ist der Einfluss der Huminsäure noch geringer, da auf Grund des höheren CO₂-Partialdruckes von 10^{-2,3} atm die Komplexbildung von Np mit Carbonat dominiert.

Die Diffusion von 8 × 10⁻⁶ M Np(V) in einem OPA-Bohrkern mit Porenwasser (pH = 7,6) als mobile Phase wurde unter aeroben Bedingungen über einen Zeitraum von einem Monat studiert. Zum Vergleich mit dem zuvor durchgeführten Diffusionsexperiment mit ²²Na⁺ wurde dieses Nuklid 17 h vor Beendigung des Np-Experimentes zugesetzt. Die Auswertung ergab folgende Parameter:

$$^{237}\text{Np}: D_e = 4,2 \pm 0,1 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ und } \alpha = 156 \pm 4$$

$$^{22}\text{Na}: D_e = 1,8 \pm 0,2 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ und } \alpha = 0,44 \pm 0,03.$$

Die Diffusionsparameter von ²²Na⁺ stimmen gut mit den zuvor bestimmten Parametern ($D_e = 1,9 \pm 0,1 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ und $\alpha = 0,50 \pm 0,02$) überein. Da Np(V) an OPA stark sorbiert, ist der Diffusionskoeffizient um etwa eine Größenordnung kleiner als für das schwach sorbierende ²²Na⁺.

Die Redoxstabilität von Pu(VI) in HClO₄, Essigsäure und Porenwasser wurde in einer Verdünnungsreihe zwischen 6 × 10⁻⁵ und 6 × 10⁻⁸ M Pu mittels Flüssig-flüssig-Extraktion untersucht. Bereits bei einer Verdünnung auf 3 × 10⁻⁶ M Pu erfolgt eine Reduktion von Pu(VI); in 1 M HClO₄ um 25 %, in 1 M Essigsäure um 40 % und in Porenwasser um 50 %. Bei Zugabe des sehr starken Oxidationsmittels Ag²⁺/K₂S₂O₈ wird Pu(VI) nicht reduziert. Diese Ergebnisse stehen im Einklang mit den gemessenen Eh- und pH-Werten sowie früheren CE-ICP-MS Messungen. Die Ergebnisse weisen darauf hin, dass während der Kapillarelektrophorese (CE) die Oxidationsstufe des Pu in dem System OPA-Porenwasser nicht verändert wird.

Mit der CE-RIMS wurden Lösungen, die Pu(III) und Pu(IV) im Konzentrationsbereich von 2 × 10⁻¹¹ bis 2 × 10⁻¹³ M enthielten, analysiert und eine gute Übereinstimmung mit den erwarteten Werten beobachtet.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Batchexperimente zur Sorption von Np(V) an OPA in Porenwasser unter anaeroben Bedingungen bei 60 °C
- Diffusionsversuche mit ²³⁷Np(V) in OPA unter anaeroben Bedingungen
- EXAFS-Messungen zur Speziation von Np(V) bei der Sorption an OPA als Funktion des pH-Wertes in An- und Abwesenheit von Luft
- Batchexperimente zur Sorption von Pu an OPA unter anaeroben Bedingungen und Bestimmung der Pu Speziation in den Lösungen mit Hilfe der CE-RIMS

5. Berichte, Veröffentlichungen

T.Ye. Reich, New Regularization Method for EXAFS Analysis – Application to Uranium and Plutonium Sorption onto Kaolinite, Dissertation, Johannes Gutenberg-Universität Mainz, 2008

Zuwendungsempfänger: Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstraße 15, 04318 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 10176
Vorhabensbezeichnung: 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		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 836.371,00 EUR	Projektleiter: 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

Der Konkurrenzeffekt von Al(III) auf die Actinid-Humatkomplexbildung wurde mittels [^{160}Tb]Tb(III) als Analogtracer zeitabhängig untersucht, um die Gültigkeit von Gleichgewichtsthermodynamischen Ansätzen zu prüfen, welche in Prognosemodellen üblicherweise verwendet werden. Hierzu wurden Systeme aus Al(III) und Huminstoff über einen Zeitraum von bis zu 7 Monaten gealtert, bevor Tb(III) zugegeben und dessen huminstoffgebundener Anteil in Kationen- und Anionenaustauschexperimenten ermittelt wurde. Im Gegensatz zum Konkurrenzeffekt von Fe(III) wurde kein langfristiger Trend festgestellt. Allerdings ist über einen Zeitraum von 2 Tagen eine Zunahme im Konkurrenzeffekt zu verzeichnen, die mit einer Erhöhung der Komplexstabilität konform geht, wie sie in Kationenaustauschexperimenten beobachtet wird. Dieser Befund fand sich in Stopped-Flow-Versuchen zur kurzzeitspektroskopischen Verfolgung der Tb(III)-Humatkomplexbildung bestätigt. Da sich der gebundene Anteil von Al(III) im fraglichen Zeitraum als unverändert herausstellte, ist von induzierten Veränderungen in der Huminstoffstruktur auszugehen, die den Zugang von Tb(III) im Austausch gegen Al(III) erschweren. Untersuchungen mittels statischer und zeitaufgelöster Laserfluoreszenz-spektroskopie erbrachten dafür jedoch bislang keine Hinweise.

Die Verbesserung der Abbildungsqualität mit dem Ausbau des PET-Scanners im Juli 2008 übertraf die Erwartungen. Allerdings sind für die regelmäßige Nutzbarkeit noch Nachbesserungsarbeiten durch den Hersteller und Software-Anpassungen unsererseits notwendig, so dass die Auswertung der Untersuchungen nach dem Ausbau noch nicht beendet werden konnte. Insbesondere steht die Quantifizierung der Messungen noch aus. Diese neueren Untersuchungen beziehen sich auf weitere homogenisierte und mit unterschiedlicher Auflast kompaktierte Tonproben sowie Kristallingestein aus dem Febex-Experiment (in Verbindung mit FUNMIG). Mit Hilfe der verbesserten Bildqualität konnte bereits an vorläufigen Auswertungen gezeigt werden, dass die Untersuchungsmethodik im Kristallin erfolgversprechend ist. Im Gegensatz zu den bisher untersuchten stark kompaktierten Tonmaterialien wies eine gering kompaktierte, stark durchlässige Tonprobe deutlich inhomogene Transportwege auf. Erste längerfristige Diffusionsuntersuchungen (Versuchsdauer 3 Wochen) wurden zunächst zur Methodenentwicklung ersatzweise an Steinsalz durchgeführt.

Für die Ableitung einer optimierten Parametrisierung der Prozessgrößen durch voxelweise Auswertung wird derzeit ein gemeinsamer DFG-Projektantrag mit dem Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik in Berlin und dem Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ) formuliert.

4. Geplante Weiterarbeiten

- direkte Untersuchung der Reversibilität der Huminstoffadsorption an Mineraloberflächen durch Traceraustauschexperimente mittels ^{14}C -Markierung
- weitere Untersuchungen an Proben aus unterschiedlich kompaktiertem Opalinuston unter Einbeziehung von Huminstofftransport
- radiale Diffusionsversuche an intaktem Opalinuston mit [^{124}I]KI und [^{58}Co]K₃[Co(CN)₆]

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kulenkampff, J., Gründig, M., Richter, M., Enzmann, F.: Evaluation of Positron-Emission-Tomography for visualisation of migration processes in geomaterials. *Phys. Chem. Earth* 33 (2008) 937-942

Lippold, H., Lippmann-Pipke, J.: Effect of humic matter on metal adsorption onto clay materials. Abstract Goldschmidt 2008, *Geochim. Cosmochim. Ac.* 72 (12S) (2008) A554

Zuwendungsempfänger: Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		Förderkennzeichen: 02 E 10186
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 538.240,00 EUR	Projektleiter: 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

AP1.3: Alternative funktionelle Gruppen; AP2.3, 2.4, 2.5: Kaolinit: Oberflächen und Sorption.

Arbeiten zur Uranyl-Komplexierung durch Aminosäuregruppen (Glycin, Alanin, α -Aminoisobutyrsäure, Anthranilsäure, AP1.3) wurden fortgeführt. Die Modellierung von Solvatationseffekten ist weitgehend abgeschlossen, ergänzt werden thermodynamische Korrekturen zur Energetik. Angeregt durch experimentelle Arbeiten in Rossendorf wurden Rechnungen zur Komplexierung von Uranyl durch Sulfonsäuren (Methyl-, Benzol-, und Hydroxybenzolsulfonsäure, AP1.3) aufgenommen. Uranyl komplexiert mit diesen Säuren deutlich schwächer als mit Essigsäure und bildet bidentate Komplexe. Wie zu erwarten verhalten sich Benzol- und Hydroxybenzolsulfonat sehr ähnlich.

Bisher liegen Rechnungen in der Gasphase vor, die derzeit um Solvatationseffekte ergänzt werden. Zum Vergleich wird Methylthiol als Ligand herangezogen.

Die Arbeiten zur Modellierung der Sorption von Uranyl (AP2.5) an Kaolinit-Kantenflächen wurden abgeschlossen. Die bisherigen Untersuchungen zur Sorption von Uranyl auf Al-Oktaederflächen werden derzeit durch die Modellierung weiterer bidentater Oberflächenkomplexe ergänzt (AP2.3). Bisher wurden bidentate Oberflächenkomplexe betrachtet, bei denen Uranyl an zwei Hydroxylgruppen bindet, die am selben Al-Zentrum verankert sind ($O-O = 2.8 \text{ \AA}$). Alternativ wurden nun Brückenplätze zwischen deprotonierten OH-Gruppen benachbarter Al-Zentren modelliert ($O-O = 3.4 \text{ \AA}$). Überraschenderweise ergaben sich Adsorptionskomplexe, die nur etwa 10 kcal/mol weniger stabil sind als die Komplexe auf kurzen Brückenplätzen. Dies ist wesentlich auf eine Relaxation der Oberfläche zurückzuführen, die zu einem O-O-Abstand in der Oberfläche von etwa 3.15 \AA führt. Um den Einfluss höheren pHs sowie aerobe Verhältnisse zu simulieren, wurde die Sorption von Uranylmonohydroxid und -monocarbonat auf der Al-Oktaederfläche von Kaolinit modelliert (AP2.4), wobei einfach wie zweifach deprotonierte Adsorptionsplätze betrachtet wurden. Entsprechend der geringeren Ladung der Adsorbate bindet Monocarbonat am schwächsten. Gegenüber Uranyl sinkt die Adsorptionsenergie auf einfach deprotonierten Plätzen (inklusive der Deprotonierung des Adsorptionsplatzes) um 23 kcal/mol für Monohydroxid und 170 kcal/mol für Monocarbonat. Die geringe Stabilität des Monocarbonats entspricht der experimentell festgestellten geringen Sorptionsrate bei Anwesenheit von CO_2 und erhöhtem pH. Derartige Komplexe sollten mittels EXAFS identifizierbar sein, da ihre U-Al-Abstände und mittlere äquatoriale U-O-Bindungslängen für Carbonat um bis zu 8 pm länger sind als bei reinen Aquakomplexen von Uranyl.

Im Bereich der Methodenentwicklung ist die erfolgreiche Implementierung der DFT+U-Methode zur Korrektur der Selbstwechselwirkung lokalisierter Elektronen zu erwähnen. Die Method wurde zunächst an LuF_3 erprobt und lässt sich auch für Aktiniden einsetzen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.3: Fortführung der Arbeiten zur Uranyl-Komplexierung durch Aminosäuregruppen und schwefelhaltige Liganden

AP2.2: Modellierung von Pyrophyllit und seinen Oberflächen

AP2.3, 2.4, 2.5: Weiterführung der Arbeiten zur Sorption von Uranyl an alternativen Plätzen sowie von Uranylmonohydroxid und -monocarbonat.

5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Density Functional Model Studies on Uranyl Adsorption on (001) Surfaces of Kaolinite, *Langmuir* 24 (2008) 9515.

R. Ramakrishnan, A. Matveev, N. Rösch: The DFT+U method in the Linear Combination of Gaussian Type Orbitals Framework: Role of 4f Orbitals in the Bonding of LuF_3 , *Chem. Phys. Lett* 468 (2009) 158.

A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Role of Aliphatic and Phenolic Hydroxyl groups in Uranyl Complexation by Humic Substances, *Inorganica Chimica Acta* (2009), im Druck.

Zuwendungsempfänger: Universität des Saarlandes, Campus Saarbrücken, 66123 Saarbrücken		Förderkennzeichen: 02 E 10196
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 502.243,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Beck	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Innerhalb des Forschungsprojektes wird der Einfluss verschiedener geochemischer Parameter (beispielsweise Metallfrachten, pH, Konkurrenzionen oder organische Komplexligenanden) auf die Migration von Actiniden (Uran) sowie Lanthaniden (Europium, Terbium und Gadolinium) als deren Vertreter im natürlichen Tongestein untersucht. Die dabei erhaltenen Ergebnisse zur Sorption bzw. Desorption der untersuchten Metalle an natürlichem Tongestein (Opalinuston) werden mit den aus Vorgängerprojekten erhaltenen Daten für das Modellmineral Kaolinit verglichen. Im zweiten Projektabschnitt wird mit Hilfe von Säulenversuchen auf Basis einer Miniaturisierung in Analogie zur Flüssigchromatographie das Ausbreitungsverhalten der untersuchten Lanthaniden und Radionukliden in Gegenwart verschiedener Modell-Organika sowie Huminsäure unter Variation geochemischer Einflussgrößen in kompaktem 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 ortsaufgelöste Analytik der Tonsäulen
- AP6: Bereitstellung und Implementierung des erfolgreich getesteten und optimierten Säulenversuchs für alle in Frage kommenden Projektpartner als konkretes Instrumentarium zum Test mit den jeweiligen Radionukliden.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden Batch-Versuche im binären System Opalinuston/Huminsäure (HA) durchgeführt und Untersuchungen zur Sorption bzw. Desorption im ternären System Metall/Opalinuston/Huminsäure fortge-

führt. Die Sorptionsexperimente im binären sowie im ternären System wurden mit Hilfe verschiedener Sorptionsmodelle ausgewertet.

Bei Vergleich zwischen synthetischem Porenwasser und 10 mM Natriumperchlorat-Lösung ergibt sich grundsätzlich eine höhere HA-Sorption an Opalinuston in synthetischem Porenwasser durch erhöhte hydrophobe Wechselwirkungen der HA mit dem Ton aufgrund der vorhandenen Porenwasser-Kationen, die die negativ vorliegende HA neutralisieren. Die Sorptionsisotherme im binären System Opalinuston/HA (in synthetischem Porenwasser bei pH 7,6) konnte am besten durch das Sorptionsmodell nach Freundlich beschrieben werden, wobei die maximale Sorptionskapazität des Opalinustons für die eingesetzte gereinigte Aldrich-Huminsäure mit $2,8 \pm 0,6 \text{ g kg}^{-1}$ bestimmt wurde.

Die weitergehenden Sorptionsversuche von Lanthaniden (Eu, Gd, Tb) im ternären System (Metall/Opalinuston/HA) wurden bei pH-Werten zwischen 3 und 10 durchgeführt. Neben den unterschiedlichen pH-Werten wurde zusätzlich noch die Konzentration an Huminsäure variiert (0, 10 und 25 ppm HA). Aufgrund der hohen Protonen- und Porenwasser-Kationen-Konkurrenz an den Bindungsstellen am Opalinuston konnte für pH-Bereiche < 5 nur eine vergleichsweise geringe Lanthanid-Sorption nachgewiesen werden. Die deutlich höhere Sorption bei $\text{pH} > 6$ kann vor allem durch elektrostatische Wechselwirkungen der Lanthanide mit dem Ton erklärt werden. Zusätzlich werden bei Anwesenheit von HA die negativ vorliegenden LnHA-Spezies mit Porenwasser-Kationen neutralisiert und können dadurch aufgrund hydrophober Wechselwirkungen am Ton sorbieren.

Bei den Desorptions-Versuchen der Lanthanide vom Opalinuston ergibt sich vor allem aufgrund der bei tieferen pH-Werten ($\text{pH} < 5$) vorliegenden Konkurrenz durch Protonen und Porenwasser-Kationen eine starke Desorption der Lanthanide vom Opalinuston, die auch durch die Anwesenheit von Kationen-komplexierender Liganden (HA) im untersuchten Konzentrationsbereich (bis 25 ppm HA) kompensiert werden kann.

Beim Aufbau der miniaturisierten Säulenversuche konnte eine erste Optimierung bezüglich der gerätespezifischen Parameter und Säulendimensionen für die Elution des eingesetzten Inertmarkers Iodid erfolgreich abgeschlossen werden. Hierbei erwiesen sich Flussgeschwindigkeiten von $1\text{-}5 \text{ } \mu\text{l min}^{-1}$ (durch LC-Kapillarpumpe reproduzierbar regelbar) und Säulendimensionen von $20 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ (L x i.D.) als bester Kompromiss zwischen Durchbruchzeiten (im Bereich zwischen 1 und 50 h) und Druckaufbau (5 - 80 bar) innerhalb der Säule.

Durch die weitergehende Optimierung der miniaturisierten Säulen-Experimente konnten erste erfolgreiche Trennungen des Inertmarkers Iodid und eines Modell-Liganden (Salicylat) auf der kompaktierten Opalinuston-Säule (85 % Opalinuston / 15 % Seesand) durchgeführt werden. Zusätzlich konnte erstmals eine Beeinflussung der Salicylat-Durchbruchzeit (Erhöhung der Retentionszeit im Vergleich zum Inertmarker) durch die Anwesenheit verschiedener Konzentration an Europium nachgewiesen werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Vergleichende Desorptions-Untersuchungen mittels Aldrich Huminsäure und natürlicher Organika. Speziation von Eu^{3+} mit Huminsäure und natürlicher Organik mittels CE-ICP-MS.

Optimierung der Säulenversuche, fortführende Untersuchungen mit Metallen, Modellorganika und Aldrich Huminsäure.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kautenburger, R., Nowotka, K. & H.P. Beck (2008): Kinetic investigations in the system HA-metal-kaolinite. In: Migration of actinides in the system humic substance, aquifer: 217-262 (C.M. Marquardt, Ed.). Wissenschaftliche Berichte, FZKA 7407, Karlsruhe.

Kautenburger, R. (2008): Influence of geochemical parameters on the complexation behavior of heavy metal pollutants with humic acid analyzed by CE-ICP-MS. 27th International Symposium on Chromatography, 21.-25.09.2008, Münster (Vortrag).

Kautenburger, R. (2008): Speziationsanalytik mit CE-ICP-MS: Untersuchung des Komplexierungsverhaltens von Lanthanoiden und Huminsäure. 21. ICP-MS-Anwendertreffen und des 8. Symposium "Massenspektroskopische Verfahren der Elementspurenanalyse", 17.-19.09.2008, Dresden (Vortrag).

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 E 10206
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 813.235,00 EUR	Projektleiter: 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

In dieser Projektperiode wurden komplementär zur den Cavollo-Oxfordian-Untersuchungen die Zusammensetzung und die Verteilung funktioneller Gruppen in der Opalinuston-Organik bestimmt, um die Quellen von hydrophilen organischen Komponenten im ungestörten Sediment zu lokalisieren. Zu diesem Zweck wurden die Proben mittels STXM-Messungen an der Kohlenstoff-K-Kante, Kalium-L-Kante und Calcium-L-Kante sowie mit Synchrotron- μ FT-IR-Mikroskopie im mittleren Infrarot-Bereich charakterisiert. Die untersuchte Opalinuston (OPA)-Probe aus dem Benken-Bohrloch (Tiefe 579.19-579.45 m) wurde von der Nagra zur Verfügung gestellt. Der totale organische Kohlenstoff-Gehalt (TOC) der Tonfraktion des OPA beträgt < 0.4 wt. %. Zur Charakterisierung wurden zum einen aus der ungestörten Gesteinsprobe Ultra-Mikrotom-Feinschnitte – hergestellt aus in Schwefel einge-

betteten Gesteinsproben - und Organik, die aus OPA alkalisch ausgelaugte wurde, verwendet. Die Auslaugung ergab circa 1.1 Gewichtsprozent eines fulvinsäure-ähnlichen Materials; Huminsäuren wurden in der Lösung nicht gefunden. STXM- und Infrarot-Messungen wurden an der NSLS in Brookhaven National Laboratories (BNL) durchgeführt. Mit Hilfe der Kombination von C-, K- und Ca-Kanten-Messungen kann man zwischen organischen Assoziaten, Karbonaten, Illit und Smektit unterscheiden. Die Analyse der Mikrotom-Schnitte zeigen die organischen Komponenten in Regionen von signifikanten K- und Ca-Absorptionen. Das letztere deutet auf Illit/gemischte Schichtminerale (MLM) mit eingewachsenen Nanokristalle von Carbonat hin. Beide „Cluster“ sind sehr ähnlich und zeigen eine geringe Aromatizität (13-18 %) und einen hohen aliphatischen Anteil (24-25 %). Der aromatische Anteil zeigt einen sehr geringen Anteil an $C_{\text{arom-O}}$ (Phenoltyp = 0-2 %). Diese Illit/MLM-Regionen dienen mit hoher Wahrscheinlichkeit als Quellen für die isolierten FA-ähnlichen organischen Komponenten im OPA ($\sigma = 0.0195$ aus den Target-Spektren). Die IR-Spektren der tonreichen Regionen zeigen Absorptionsbanden von Kaolinit, Chlorit, Quarz oder Aluminiumsilikate und Karbonate. Eine Bande bei 1163 cm^{-1} wird entweder durch C-C-Bindungen in aliphatischen und polymeren Verbindungen oder durch Si-O-C-Bindungen verursacht. Letzteres weist auf eine Bindung von Organik zum Si-O des Tons hin. Bei der Analyse der Organik mit $\mu\text{FT-IR}$ -Mikroskopie wurden charakteristische Banden von Phenol-, Alkohol-, Carboxyl-, Keton-, Ester-, aromatische CH-, aliphatische CH_2 - und CH_3 -, Peptid-Amido-II- und aromatische C=C-Gruppen in den IR-Spektren gefunden. Die Spektren der amorphen organischen Phase zeigen hohe Absorptionen von organischen OH-Gruppen, aliphatische CH_2 - und CH_3 -Banden, Peptid-Amido-I- und -II-Banden und Absorptionsbanden für aromatische C=C-Gruppen. Bemerkenswert ist die geringe Absorption von Keton-, Carboxyl- und Ester-Gruppen, was auf eine Abreicherung von sauerstoffenthaltenden funktionellen Gruppen hindeutet. Damit steigt natürlich der hydrophobe bzw. polymere Charakter der organischen Komponente in der amorphen Phase.

Ein Teil der Projektarbeit wurde für die Vor- und Nachbereitung des 5. Projekt-Workshops mit internationaler Beteiligung aus Großbritannien, Belgien, Frankreich und der Schweiz benötigt. Von den externen Vortragenden wurden zu folgenden Themen Vorträge gehalten: *Dissolved Organic Matter in the Opalinus Clay and the Callovo-Oxfordian Formation*, Iso Christl (Inst.f.Biogeochemie u.Schadstoffdynamik, ETH Zürich); *Is the natural iodine associated to organic matter within the Callovo-Oxfordian?*, Francis Claret (Bureau de recherches géologiques et minières – BRGM, Orléans, France); *Radionuclide transport in an organic matter rich clay sediment: Experience for the Boom Clay*, Norbert Maes (Unit R&D Disposal, SCK/CEN Mol, Belgium); *Metal ion – humic interactions and the importance of kinetics in radionuclide transport (A Personal View)*, Nick Bryan (University of Manchester, United Kingdom). Die Vortragenden haben interessante Informationen geliefert, die für die Arbeiten des Projektverbunds sehr hilfreich sind.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Die Arbeiten zum Actiniden-Komplexierungsverhalten von extrahierten OPA-Kerogen und synthetischen Ton-Organika-Assoziaten werden gestartet.
- Untersuchung des photodynamischen Verhaltens von Actiniden/ Lanthaniden-Huminstoff-Komplexen (Kooperation mit Universität Potsdam).
- Fortführung der Grundlagenuntersuchungen zur Redoxchemie von Neptunium und Plutonium mit Hydrochinonen und Huminstoffen unter Berücksichtigung der Eigenkolloid-Organik-Wechselwirkungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		Förderkennzeichen: 02 E 10216
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 275.839,00 EUR	Projektleiter: 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: Die Untersuchungen zum Verständnis von intramolekularen Energietransferprozessen in Huminstoff-Lanthanoid-Systemen wurden fortgeführt. Die durchgeführten Experimente bei Raumtemperatur und sehr tiefen Temperaturen (5 K) wurden um den Bereich zwischen 80 K und Raumtemperatur erweitert. Als Huminstoffmodellliganden wurden hier Salicylsäure und Glycolsäure als Analoga zu aromatischen Carboxylgruppen und aliphatischen Carboxylgruppen mit α -ständiger Hydroxylgruppe gewählt. Die Untersuchungen wurden sowohl in H₂O als auch in D₂O durchgeführt.

Zur Wechselwirkung von Lanthanoiden mit Tonmineralen wurde Europium in kolloidale Systeme aus Kaolin und Montmorillonit eingebaut. Von diesen kolloidalen Systemen wurden zeitaufgelöste Lumineszenzspektren aufgenommen.

AP2: Die ablaufenden Energietransferprozesse werden komplementär auch von der Ligandenseite spektroskopisch untersucht und charakterisiert. Hierzu wurde ebenfalls Salicylsäure als Modellligand eingesetzt. In den Experimenten wurden die transienten Spezies (Triplett, Phenoxyradikal und solvatisierte Elektronen) der Salicylsäure in An- und Abwesenheit verschiedener Metallionen (Lanthanoide: Terbium, Europium,

zweiwertige Metallionen: Kupfer) untersucht.

- AP3: Zur verbesserten Messung der Anisotropie von Huminstoffen wurde ein im Arbeitskreis befindliches Fluoreszenzspektrometer umgebaut, damit Messungen im T-Format möglich sind. Nach dem Umbau können die Fluoreszenzabklingzeiten mit der zeitkorrelierten Einzelphotonenzählung zeitgleich sowohl vertikal als auch horizontal zur Polarisierung des Anregungslichtes auf zwei Detektoren gemessen werden. Entsprechende Untersuchungen werden derzeit durchgeführt.
- AP4: Die stationären Löschexperimente mit Modellpolymeren sind abgeschlossen. Zur Untersuchung der Kinetik der Komplexierung werden *stopped-flow* Experimente durchgeführt. Für die *stopped-flow* Untersuchungen von Modellpolymeren wurden dazu geeignete Bandpassfilter angeschafft, die es ermöglichen selektiv die Lumineszenzsignale von Europium beziehungsweise Terbium zu detektieren und so Interferenzen durch die intrinsische Huminstofffluoreszenz zu unterdrücken.
- AP5: Zu den Untersuchungen der Konkurrenz von verschiedenen Metallen bezüglich der Komplexierung mit Huminstoffen wurden in Zusammenarbeit mit dem Institut für Isotopenforschung (Leipzig) Messungen mittels *stopped-flow*-Fluoreszenz, Fluoreszenz-spektroskopie und zeitaufgelöste Lumineszenzspektroskopie durchgeführt. Im Fokus der Untersuchungen stand hierbei die Konkurrenz von Aluminium und Terbium bei der Komplexierung durch Huminstoffe. Dazu wurden vergleichende Messungen zur Komplexierung von Terbium mit Aldrich HA sowie mit Aldrich HA, zu der vorher Aluminium zugegeben wurde, durchgeführt. Die Untersuchungen zeigten, dass sich jeweils leichte Unterschiede in den Fluoreszenz-, zeitaufgelösten Lumineszenz- und *stopped-flow*-Untersuchungen zwischen Aldrich HA und mit Aluminium-konditionierter Aldrich HA ergeben. Eine Abhängigkeit von der Kontaktzeit zwischen Aluminium und Aldrich HA auf die Komplexierung des Terbioms ließ sich jedoch nicht feststellen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: In diesem Arbeitspaket wird der Fokus weiterhin auf die Untersuchung von kolloidalen Systemen gerichtet.
- AP2: In den weiterführenden Messungen der Triplettzustände von (Modell)liganden sollen nun auch Modellpolymere und erstmals Huminstoffe eingebunden werden. Dazu ist besonders geplant, mögliche transiente Spezies in Huminstoffen mittels Laserflash-Untersuchungen zu spektroskopieren. Weiterhin soll die Anbindung einer iCCD-Kamera an das bestehende System realisiert werden, was die Aufnahme von Spektren vereinfachen sollte und die Bildung von Artefakten durch Photoausbleichen minimiert.
- AP3: Nachdem das Fluoreszenzspektrometer im T-Format betrieben werden kann, werden z. Z. die Messungen der Anisotropie von Huminstoffen in An- und Abwesenheit von Metallionen fortgeführt werden.
- AP4: Die Fortführung der *stopped-flow*-Untersuchungen sieht vor, die Kinetik der Komplexierung einerseits unter Verwendung von Modellpolymeren und andererseits durch Erweiterung der Messungen mit Huminstoffen zu verfolgen. Bei Komplexierung von Lanthanoiden mit Modellpolymeren ist eine Zunahme der Lumineszenz der Lanthanoide festzustellen. Diese Zunahme kann genutzt werden, um die Komplexbildung aus „Sicht“ der Lanthanoide zu verfolgen. Für die Messungen mit Huminstoffen soll nicht mehr nur die komplette intrinsische Fluoreszenz verwendet werden. Die Messungen sollen nun einerseits im „blauen“ Bereich und im „roten“ Bereich der Fluoreszenz durchgeführt werden. Da in diesen Bereichen unterschiedliche Fluorophore für die Emission verantwortlich sind, sollte sich aus dem Vergleich der beiden Fluoreszenz-Zeit-Kurven ein besseres Verständnis über die an der Komplexierung beteiligten Unter-einheiten ableiten lassen.
- AP5: Zur Konkurrenz unterschiedlicher Metallionen um Bindungsplätze in Huminstoffen werden weitergeführt. Hier sollen Paare von Fulvinsäuren und Huminsäuren gleichen Ursprungs verglichen werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Stefanie Kuke, Bettina Marmodée, Michael U. Kumke: Luminescence properties of europium complexes revisited – time-resolved emission spectroscopy of complexes with salicylic and glycolic acid in H₂O and D₂O. Manuskript in Vorbereitung.

Bettina Marmodée, Joost de Klerk, Freek Ariese, Cees Gooijer, Michael U. Kumke: Metal binding by humic substances – characterization by high resolution lanthanide ion probe spectroscopy (HR-LIPS), *Zeitschrift für Naturforschung A*, accepted for publication.

Bettina Marmodée, Joost de Klerk, Freek Ariese, Cees Gooijer, Michael U. Kumke: High-resolution steady-state and time-resolved luminescence studies on the complexes of Eu(III) with aromatic or aliphatic carboxylic acids, *Analytical Chimica Acta*, special edition: “*Fundamental and Applied Analytical Science*”, submitted for publication

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10236	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2006 bis 31.10.2009		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 209.500,00 EUR		Projektleiter: 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

- AP3: Zur Bereitstellung der noch notwendigen Daten wurden bei GRS von Herbst 2007 bis zum Frühjahr 2008 mehrere Schädigungs-Verheilungs-Versuche an Steinsalzproben aus dem Bergwerk Asse durchgeführt. Dabei wurde die Entwicklung der Dilatanz und Gaspermeabilität unter unterschiedlichen Spannungen gemessen. Die Ergebnisse wurden den Modellierungsteams zur Weiterentwicklung und Kalibrierung ihrer Stoffmodelle zur Verfügung gestellt, wobei eine gute Übereinstimmung zwischen Messdaten und Modellierungsergebnissen erzielt wurde. Die Modellkalibrierung wurde abgeschlossen das entsprechende Deliverable D6 erstellt.
- AP4: Am 29. August wurde der Benchmark-Versuch gestartet, musste jedoch auf Grund unerwarteter Ergebnisse nach zwei Wochen abgebrochen werden. Nach der Korrektur eines Fehlers im Versuchsaufbau wurde ein zweiter Versuch gestartet, der inzwischen beendet ist. Ein Vergleichsversuch mit einer ungelochten kleineren Salzprobe wurde ebenfalls beendet. Die Messdaten beider Versuche werden den Modellierungsteams Ende März zur Verfügung gestellt, nachdem die Prognoserechnungen abgeschlossen sind.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung der Prognoserechnungen des Benchmark-Versuchs
- Anfertigung der Deliverables D7 (Ergebnisse des Benchmark-Laborversuchs) und D8 (Modellierung des Benchmark-Laborversuchs)
- Durchführung von PA-Rechnungen zu einem Endlager-Referenzfall mit Berücksichtigung der Ergebnisse von AP4
- Kombiniertes TIMODAZ-THERESA-Workshop im Dezember 2008
- Abschlussbericht

5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., U. Heemann, S. Keesmann, A. Pudewills, S. Olivella, P. Kamlot, C. Spiers, K. Herchen (2008): Calibration of Thermal-Hydraulic-Mechanical (THM) Models of the Excavation Disturbed Zone (EDZ) in Rock Salt, THERESA Deliverable D6, European Commission.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10246	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche			
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2006 bis 31.10.2009		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 74.878,00 EUR		Projektleiter: 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 1 und 2 wurden im Berichtszeitraum planmäßig keine Arbeiten durchgeführt.

AP3:

Die mit der Discrete- bzw. Distinct-Element-Methode (DEM) erzielten Ergebnisse, im Vorfeld bereits weitgehend auf dem Task Force Meeting des WP3 im April 2008 in Braunschweig vorgestellt, wurden im Rahmen des THERESA-Meetings im Dezember 2008 in Stockholm abschließend präsentiert. Zur Anwendung des Programms PFC3D für endlagerrelevante Anwendungen im Salz muss weiterhin festgestellt werden, dass zum jetzigen Zeitpunkt zwar einige Effekte im Zusammenhang mit der Modellierung einer EDZ prinzipiell realitätsnäher beschrieben werden können als mit einem FEM- oder FDM-Programm, die Anpassung der Mikroparameter der Materialmodelle jedoch sehr unbefriedigende Ergebnisse liefern und damit der Einsatz der Methode an dieser Stelle noch nicht empfohlen werden kann.

Bei Testrechnungen mit dem neu implementierten Stoffmodell, einer FZK-Modifikation des Ansatzes von Hein, haben sich Inkonsistenzen im Zusammenhang mit der Dilatanzentwicklung gezeigt. Auch darüber ist im Rahmen des o. g. THERESA-Meeting in Stockholm vorgetragen worden. Die Stoffmodellentwicklung musste noch einmal aufgenommen werden, entsprechend werden die Arbeiten zum AP4 zunächst unterbrochen. Zurzeit wird das Stoffmodell um den von Olivella im Deliverable 6 beschriebenen Dilatanzansatz erweitert.

Die Zuarbeiten zu D6 sind dem Projektkoordinator des WP 3 fristgerecht zugesandt worden.

AP4:

Zunächst zu Gunsten von AP3 ausgesetzt.

Innerhalb des 6. EU-Rahmenprogramms wurden die Fragebögen *Wissenschaft und Gesellschaft*, *Statistik des Personaleinsatzes* und *Sozialökonomie* erstellt und auf dem Internetportal SESAM QUEST veröffentlicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Aktualisierung der Issue Evaluation Table.

AP2: Abgeschlossen.

AP3: Stoffmodellerweiterung im Dilatanzbereich.

AP4: Prognoseberechnung des geplanten Versuchs, Nachkalibrierung der Materialparameter.

AP5: Keine.

AP6: Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstraße 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 10256
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2006 bis 31.10.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 62.389,00 EUR	Projektleiter: 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

Im Arbeitspaket 3 wurden vom IfG Leipzig im zweiten Halbjahr 2008 folgende Arbeiten durchgeführt bzw. Ergebnisse erzielt:

Das anlässlich des Task Force Meetings am 15. und 16. April bei der GRS in Braunschweig präsentierte Rechenmodell zur Prognose der beim Benchmark-Versuch an einem gelochten Salzkern zu erwartenden Dilatanz an der Bohrlochkontur wurde weitergeführt und es wurden weitere Belastungszustände und Versuchsabläufe berechnet.

Für die internationale Tagung EURADWASTE vom 20. bis 22. Oktober 2008 in Luxemburg erfolgte gemeinsam mit den anderen Partnern die Erstellung eines Posters, in dem diese Ergebnisse präsentiert werden konnten.

Ein weiterer Arbeitsschwerpunkt bestand in der Zuarbeit für Deliverable 6: „Calibration of Thermal-Hydraulic-Mechanical (THM) Models of the Excavation Disturbed Zone (EDZ) in Rock Salt“. In diesem Bericht wurden vom IfG die hydraulischen Konsequenzen der im Benchmark-Versuch berechneten Dilatanz für die Konturzone in einer untertägigen Steinsalzstrecke bewertet.

Die Präsentation der Ergebnisse des gesamten Jahres und die Fachdiskussion mit Partnern aus dem EU-Vorhaben TIMODAZ erfolgten vom 11. bis 12. Dezember 2008 in Stockholm.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Weiterarbeit im Arbeitspaket 3 erfolgt gemäß dem Arbeitsplan mit den Schwerpunkten:

- Numerische Simulation deformationsgeregelter Laborversuche am Steinsalz Na3 mit dem Stoffansatz Minkley.
- Weiterführung der Prognoserechnungen für den GRS-Benchmarktest.
- Stoffgesetzkalibrierung und Integration notwendiger Parameter für gekoppelte Berechnungen.
- Hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnung und Untersuchung der Anwendbarkeit beider Stoffansätze hinsichtlich der Aufgabenstellung.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10276	
Vorhabensbezeichnung: Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 30.09.2009		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 778.575,00 EUR		Projektleiter: 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

- AP1: Fertigstellung der Beiträge zum zweiten Block der Themengebiete, „Sensitivitätsanalyse“, „Modellierungsstrategie“, „Strategie der Sicherheitsbeurteilung“ und „Entwicklung des Endlagersystems“ sowie Beginn der Arbeiten für den ersten Entwurf der letzten drei Themengebiete „Menschliche Einwirkungen“, „Biosphäre“ und „Kriterien für die Datenauswahl“. Teilnahme am Jahrestreffen des Aktinidenverbunds.
- AP2: Entwicklung eines systematischen Verfahrens zur Bestimmung der Parameterunsicherheit von Eingangsdaten in der Sicherheitsanalyse. Das Verfahren legt fest, wie die Wahl der Verteilungsfunktion bei probabilistischen Rechnungen auf Grund der festgestellten Parameterunsicherheit zu erfolgen hat. Das Verfahren wurde im PAMINA internen Milestone M2.2.4.2 „Protocol for assessing degree of knowledge for specifying parameters“ dokumentiert.
- AP3: Es wurden die Entwicklungsarbeiten am Modul für die Durchführung von Sicherheitsanalysen im Ton CLAYPOS begonnen, die zur Berechnung von Sicherheits- und Performanceindikatoren in Subsystemen benötigt werden.
Das Deliverable D3.4.1 „Report on general concepts on assessing repository safety“ wurde erstellt und ist im Internet unter <http://www.ip-pamina.eu> für die Öffentlichkeit zugänglich gemacht worden. Darin werden die Grundlagen für die weitergehenden Arbeiten zum Thema Sicherheits- und Performanceindikatoren definiert.
- AP4: Der Laugenzutritt in eine mit Salzgrus versetzte Strecke wurde einerseits mit den komplexen Rechenprogrammen Hydrus und Feflow sowie andererseits mit LOPOS modelliert. Die Ergebnisse zeigen, dass im komplexen Modell sowie in LOPOS der Fluss aus der Strecke erst beginnt, sobald die Strecke praktisch vollständig gesättigt ist. Weiterhin zeigt sich, dass die Aufsättigung in LOPOS deutlich schneller erfolgt als im komplexen Modell. Die Modellierung des Schadstofftransports im Deckgebirge wurde für das zweite, erweiterte Modell abgeschlossen. Es zeigen sich prinzipielle Schwierigkeiten bei der Modellierung mit CHET bei diffusiven Transportprozessen und bei advektiven Transport mit stark inhomogener Strömung. Die Arbeiten zur Kopplung von r^3t / PHREEQC wurden durch das Steinbeis Institut fortgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Erstellung der Beiträge zu den letzten drei Themengebieten „Menschliche Einwirkungen“, „Biosphäre“ und „Kriterien für die Datenauswahl“.
- AP2: Test des Verfahrens zur Bestimmung von Parameterunsicherheiten und Verteilungsfunktionen anhand eines Anwendungsbeispiels. Die Arbeiten zur Anwendung Varianz basierter statistischer Methoden werden weiter ausgewertet.
- AP3: Die Berechnung der Sicherheitsindikatoren wird für das Endlagersystem im Salzgestein und für Tonstein fortgeführt.
- AP4: Auswertung und Bewertung und Dokumentation der Rechnungen zum Zufluss in eine mit Salzgrus verfüllte Strecke. Beginn der Testrechnungen zum Transport durch Konvektion. Auswertung, Bewertung und Dokumentation der Modellrechnungen zum Schadstofftransport im Deckgebirge.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- D.-A. Becker, E. Fein, J. Mönig: Protocol for assessing degree of knowledge for specifying parameters (M2.2.4.2)
- D.-A. Becker, J. Wolf: Report on general concepts on assessing repository safety (D3.4.1)

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31201 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10286
Vorhabensbezeichnung: Referenzkonzept für ein Endlager für radioaktive Abfälle in Tongestein (ERATO)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 31.12.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 524.906,00 EUR	Projektleiter: Dr. Pöhler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens besteht in der Entwicklung eines Konzeptes für ein Endlager im Ton in Deutschland. Dabei soll zunächst der Stand der internationalen Erfahrungen bei der Standortsuche und Erkundung von Endlagern in Tonformationen zusammengestellt und auf Übertragbarkeit überprüft werden. Die vorgesehenen Planungen konzentrieren sich auf die Auslegung, die bergmännische und bautechnische Herstellung bzw. Ausbau von unterirdischen Grubenräumen in Tonformationen, die Auswahl von Behältermaterialien und –konzepten sowie die entsprechenden Einrichtungen und Geräte zum Betreiben eines Endlagers im Tongestein. Darüber hinaus werden Fragen zu Safeguards und zu dem erforderlichen Aufwand zur Errichtung und zum Betrieb eines solchen Endlagers behandelt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Im Einzelnen sind folgende Arbeitspakete vorgesehen:

- AP1: Ermittlung des aktuellen Standes von Wissenschaft und Technik zur Standortsuche und -erkundung im Tonstein
- AP2: Ermittlung der Methoden und Verfahren zur Herstellung von Erkundungsbohrungen und Schächten im Tonstein
- Herstellung von Grubenbauen im Tongestein
 - Ermittlung der praktischen Erfahrungen bei der übertägigen Aufhaldung von bergmännisch aufgefahretem Tongestein im Hinblick auf eine spätere Nutzung als Verfüllmaterial
- AP3: Konzeptionelle Planung eines Endlagers anhand vorher ermittelter Daten und Abfallmengen
- Erstellung eines Referenzdatensatzes (Daten für einen Referenzstandort)
 - Behälterkonzepte und Abfallmengen
 - Thermische Auslegungsrechnungen
 - Grubengebäudeplanung
 - Vortriebs- und Bohrtechnik
 - Transport-/Einlagerungssysteme
 - Bewetterung/Strahlenschutz
 - Verfüll-/Verschlusskonzept
- AP4: Safeguards
- AP5: Abschätzen des Aufwandes für die Planung, Genehmigung und Realisierung eines Endlagers im Tonstein
- AP6: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Bearbeitung der Arbeitspakete wurde im Berichtszeitraum vollständig abgeschlossen und ein Abschlussbericht im Entwurf erstellt. Die wesentlichen Ergebnisse lassen sich folgt zusammenfassen. Mit dem Vorhaben ERATO wurde basierend auf vorlaufenden Machbarkeitsstudien ein Referenzkonzept für die Endlagerung wärmeentwickelnder Abfälle im Tonstein in Deutschland geplant. Dieses Konzept sieht vor, dass im Gegensatz zur Einlagerung in einer Salzformation, sämtliche Endlagerbehälter mit einer 30 cm dicken Barriere aus Bentonitformteilen zu ummanteln. Dadurch sollen mögliche Lösungszutritte zu den Behältern verzögert und umgekehrt ein Rückhalteeffekt für in Lösung gegangene Radionuklide gewährleistet werden. Aufgrund der auf 100 °C begrenzten Temperatur an der Kontaktfläche zur geotechnischen Barriere wird bei den Endlagerbehältern für ausgediente Brennelemente zusätzlich eine wärmeverteilende Sandschicht (heat spreader) zwischen Behälter und Ummantelung eingeschaltet und die Behälter nur mit den gezogenen Brennstäben von 3 DWR-BE beladen. Als Standortregion für das generische Endlager wurde eine Unterkreidetonformation im Niedersächsischen Becken (Nord-1) gewählt, die die Errichtung des HAW-Endlagers in einer vergleichsweise geringen Tiefe von etwa 350 m bei gleichzeitig relativ hoher Einlagerungsdichte ermöglicht. Durch die geringe Teufenlage ergeben sich ferner Vorteile im Hinblick auf das Abteufen der Schächte und geringere Anforderungen an den notwendigen Ausbau der Grubenbaue. Als Ergebnis einer Variantenbetrachtung wurde für die Endlagerung ausgedienter Brennelemente das Konzept der Bohrlochlagerung festgelegt. Dieses sieht vor, in das mit einem Außenliner ausgekleidete Bohrloch zunächst die aus einer Bentonitbodenplatte und Bentonitringen bestehende geotechnische Barriere komplett im Bohrloch einzubringen und anschließend die BSK3 im Wechsel mit dem als heat spreader wirkenden Versatzmaterial. Der Verschluss des Bohrlochs erfolgt durch einen in den obersten Bentonitring eingesetzten Bentonitpfropfen. Die Einlagerung der WA-Abfälle (HAW-Kokillen, CSD-B und CSD-C) erfolgt auf dieselbe Weise, jedoch ohne heat-spreader. Das HAW-Endlager ist in zwei Flügel unterteilt; ein Flügel dient der Endlagerung der ausgedienten Brennelemente, der andere der Endlagerung der WA-Abfälle. Im zentralen Mittelfeld befinden sich neben den Schächten die erforderlichen Grubennebenräume. Der Gesamtflächenbedarf des Endlagers beträgt ca. 7 km². Der Umfang für die Herstellung und Herrichtung der Grubenbaue ist hoch und erfordert zahlreiche Betriebspunkte, die wettertechnisch versorgt und transportlogistisch an die betriebliche Infrastruktur angeschlossen werden müssen. Die Verfüllung des überwiegenden Teils der untertägigen Grubenbaue ist aus Kostengründen Haufwerksmaterial aus der Auffahrung vorgesehen. Der Verschluss des Endlagers erfolgt durch Streckenverschlussbauwerke im schachtnahen Bereich und die dazu redundant und / oder diversitär ausgelegten Schachtverschlüsse. Eine Abschätzung der Dauern für Planung, Genehmigung, Errichtung, Betrieb, Stilllegung und Verschluss des Endlagers ergab insgesamt einen Zeitrahmen von rund 100 Jahren, von denen ca. 60 Jahre auf den eigentlichen Endlagerbetrieb fallen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fertigstellung des Abschlussberichtes und Abstimmung mit dem Auftraggeber.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Regina-Pacis-Weg 3, 53113 Bonn		Förderkennzeichen: 02 E 10296
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d ³ f und r ³ t - Visualisierung und Datenanalyse		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 82.938,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Rumpf	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit der Entwicklung der Programmpakete d³f und r³t 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 r³t 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 ersten neuen Datenformaten weiterentwickelt. Das Projekt wurde 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 2008 wurde ein Visualisierungswerkzeug für Kluftoberflächen in GRAPE implementiert, das berücksichtigt, dass die Kluftgeometrien nur implizit zur Verfügung stehen. In einem Postprocessing-Schritt werden die Kluftgeometrien aus den Daten- bzw. Geometriedateien rekonstruiert und in einem passenden Datenformat, welches in GRAPE implementiert wurde, gespeichert. Neben der eigentlichen Visualisierung der Kluftgeometrien können nun auch Daten in bzw. an der Kluft dargestellt werden. Auch diese Daten sind nur implizit gegeben und werden aus den Datendateien generiert und in passenden Datenformaten gespeichert. Im Anschluss an das Statustreffen im Oktober 2008 wurden die Visualisierungstools nach Absprache mit der Arbeitsgruppe Wittum detaillierter zugeschnitten und weiterentwickelt. Begonnen wurde mit der Berücksichtigung von Verzweigungspunkte in einer Kluft.

Im *Kontext der Multiskalenmethoden* wurde ein Verfahren zur simultanen Segmentierung und Registrierung von freien Oberflächen (zunächst basierend auf skalaren Daten) erweitert.

Die Segmentierung basiert nun auf der Minimierung eines konvexen Funktionals. Das neue Model kommt nun ohne Einschränkungen der konvexen Formulierung aus, die beim Minimieren beachtet werden mussten, weder explizit noch mit künstlichen Straftermen. Dies ermöglicht eine deutliche effizientere numerische Behandlung des Problems. Das Model wurde außerdem auf eine Multiphasen Segmentierung erweitert. Diese Methode ist nun Grundlage eines entsprechenden Verfahrens für vektorwertige Daten. Es ist nun möglich Vektorfelder stückweise affin zu approximieren und man erhält so eine erste verlässliche Segmentierung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fahnenbergplatz, 79098 Freiburg		Förderkennzeichen: 02 E 10306
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 94.760,00 EUR	Projektleiter: 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:

Es wurde ein Visualisierungswerkzeug zur Darstellung von Kluftoberflächen in GRAPE implementiert. Da die Kluftgeometrien implizit durch die eingelesenen Datenfiles gegeben sind, werden in einem Postprocessing-Schritt die Geometriedaten der Kluft aus diesen Dateien rekonstruiert und in einer geeigneten Datenstruktur gespeichert. Neben der Darstellung der Kluftgeometrie lassen sich auch Daten im Inneren und an den Oberflächen der Kluft visualisieren, die ebenfalls implizit gegeben sind und aus den Eingabedateien extrahiert werden. Im Anschluss an das Statustreffen im Oktober wurde in Absprache mit der Arbeitsgruppe Wittum mit der Erweiterung und Anpassung der Kluftvisualisierung begonnen. Hierbei wird die Speicherung der Klüfte als degenerierte Gitterelemente in den Eingabedateien sowie die Möglichkeit verzweigter Klüfte berücksichtigt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise weitergeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 10316
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 82.404,00 EUR	Projektleiter: 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 Wirtformationen 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

- Es wurde mit der Bearbeitung von WP1 fortgefahren. Die Ergebnisse vom Stabilitätskriterium wurden nun rigoros mit den von Welty WRR 27(8) (1991) verglichen. Als Testproblem wurde weiter das Problem aus Schincariol and Schwarz, WRR 26 (1990) benutzt.
- Das Stabilitätskriterium wurde verbessert, manche kritische Fragen deutlicher erklärt. Dazu wurden auch neue numerische Simulationen durchgeführt. Die neuen Erkenntnisse wurden in das überarbeitete Paper von Musuuza et al. 2009 eingebunden und das revised Paper wieder eingereicht. Das Paper ist inzwischen akzeptiert.
- Es wurden numerische Simulationen mit einem stochastisch generierten Permeabilitätsfeld sowohl für das Schincariol Problem als auch für das Elder Problem durchgeführt. Die Korrelationslänge und Streuung wurden variiert, um ihren Einfluss an der Stabilität des Problems zu erforschen. Gleichzeitig wird an der Erweiterung des theoretischen Stabilitätskriteriums gearbeitet.

Ergebnisse:

- Ein explizites Kriterium für die Beurteilung der Stabilität einer numerischen Simulation wurde erarbeitet.
- Die bessere Genauigkeit unseres Stabilitätskriteriums als das Kriterium von Welty wurde nachgewiesen.
- Die numerischen Ergebnisse mit einem heterogenen Permeabilitätsfeld zeigen, dass die Heterogenität stabilisieren kann. Das gleiche Verhalten wurde auch für eine vergrößerte Dispersivität beobachtet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt. Zunächst ist geplant:

- Das theoretische Stabilitätskriterium wird erweitert, um die Effekte von Dispersivität und Heterogenität zu berücksichtigen. Numerische Simulationen werden konsequent weitergeführt, um das Stabilitätskriterium rigoros zu testen.
- Als nächster Schritt werden dann die Temperatureffekte im Stabilitätskriterium berücksichtigt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Das überarbeitete Manuskript An extended stability criterion for density-driven flows in homogeneous media by J. L. Musuuza, S. Attinger and F. A. Radu ist bei Advances in Water Resources, akzeptiert.

Ein Vortrag A stability criterion for homogeneous density-driven flows wurde beim IPSWAT Treff in Badhonnef gehalten.

Ein Vortrag wurde beim EDuR-Statusgespräch in Frankfurt gehalten.

Ein Abstrakt A stability criterion for heterogeneous density-driven flows wurde zur EGU - Konferenz, Wien 2009 eingereicht.

Ein Abstrakt mit dem Titel An extended stability criterion for flow in porous media: the heterogeneous case wurde zur SIAM Conference on Mathematical and Computational Issues in the Geosciences 2009, Leipzig 2009 eingereicht.

Zuwendungsempfänger: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt am Main		Förderkennzeichen: 02 E 10326
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 654.710,00 EUR	Projektleiter: 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 6 und 02C0465 0) und vom 01.10.1998 – 31.12.2003 (FKZ 02E9148 2).

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 .

Unter Einbeziehung der Ergebnisse der Theorie der Thermodiffusion wurden die thermischen Effekte in der Grundwasserströmung und im Schadstofftransport untersucht. Mit Hilfe der Mischungstheorie wurden die erhaltenen Ergebnisse auf poröse Medien erweitert und ein thermodynamisches Modell für eine biphasische Mischung erstellt. Dieses Modell beschreibt sowohl die dichtegetriebene Strömung als auch die Thermodiffusion der Schadstoffe. Es wurde eine verallgemeinerte Form des Darcy- und Fickschen Gesetzes abgeleitet, in welchem die thermischen Gradienten und der Soret-Effekt explizit berücksichtigt werden. Die Fluidphase der biphasischen Mischung wurde als mechanisch inkompressibel, aber als thermisch expansible Flüssigkeit betrachtet. Derzeit arbeiten wir an der Bestimmung der charakteristischen Temperaturbereiche und thermischen Gradienten für welche die Thermodiffusion in unserem Testproblem eine Rolle spielt. Unsere Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit Ergebnissen anderer Autoren. Dies zeigt, dass unser Ansatz konsistent ist.

Das Modell für geklüftet poröse Medien für den isothermen Fall wurde weiterentwickelt und entsprechende Testrechnungen in der Version mit Boussinesq-Approximation durchgeführt. Als Benchmark-Test wurde das 2D Elder-Problem simuliert. Um die Robustheit unseres Ansatzes zu verbessern, verwenden wir die Theorie der Phasengrenzen in dispersen multiphasischen Medien, die auch von anderen Autoren eingesetzt wird.

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

Es wurden weitere wichtige Entwicklungen zur Implementierung der freien Grundwasseroberfläche für den Transport von Schadstoffen im Programm r^3t durchgeführt. Eine allgemeine Prozedur für eine konstante, lineare und quadratische Extrapolation wurde in UG programmiert. Einige erfolgreiche Testläufe für die Konvektion-Diffusions-Gleichungen haben bestätigt, dass das Verfahren für die Verwendung in r^3t gut geeignet ist.

Ferner wurde eine allgemeine Prozedur für alle zwei- und dreidimensionalen Gitterelemente, die in UG verfügbar sind, implementiert, die für ein Element, das durch eine freie Oberfläche geschnitten ist, eine geeignete Extrapolation der Konzentrationswerte berechnet. Diese Prozedur wurde in r^3t für mehrere Testbeispiele mit einer freien Grundwasseroberfläche erfolgreich verwendet; ein Ansatz für d^3f ist in Vorbereitung.

Weil die in UG vorher vorhandene Übergabe des Geschwindigkeitsfelds von d^3f zu r^3t wegen der Ungenauigkeit der Massenerhaltung für die Anwendungen mit freien Grundwasseroberflächen nicht geeignet ist, wird eine direkte Übergabe des Druckes und der Salzkonzentration von d^3f zu r^3t mit Hilfe von so genannten XDR-Dateien verwendet. Eine direkte Berechnung der Geschwindigkeit wurde in r^3t implementiert und erfolgreich getestet. Um die Massenerhaltung auch für den Aus- und Einströmrand und für die Quellen, die alle nur in d^3f und nicht in r^3t bekannt sind, zu erreichen, werden diese Größen in r^3t von der Divergenz der Geschwindigkeit direkt berechnet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10336
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d ³ f und r ³ t		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 31.03.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.288.348,00 EUR	Projektleiter: Dr. Fein	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit der Entwicklung der Programmpakete d³f und r³t stehen Werkzeuge zur Modellierung der salzgetriebenen Dichteströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien zur Verfügung. Um die Anwendbarkeit der beiden Programmpakete auch auf die Wirtsfformationen Ton und Kristallin auszudehnen, ist eine Weiterentwicklung zur expliziten Berücksichtigung von Klüften und Kluftsystemen Voraussetzung. Bei der Modellierung von Einflüssen durch Klimaveränderungen kann der Wärmetransport nicht mehr vernachlässigt werden. Deshalb wird die Modellierung der Dichteströmung auf den Einfluss des Wärmetransportes ausgedehnt. Hierzu wird das Skalenverhalten von thermohalinen Strömungen in heterogenen Medien untersucht. Um Modellierungen im oberflächennahen Bereich zu ermöglichen, wird auch die Berücksichtigung von phreatischen und Potentialströmungen ermöglicht. Selbstverständlich werden auch Prä- und Postprozessoren zur Dateneingabe und zur Ergebnisdarstellung den erweiterten Anforderungen angepasst.

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

Der Zusatzvertrag zwischen BRD, vertreten durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie, vertreten durch den beliebigen Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe, Bereich Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE) und der GRS ist nochmals geändert worden und befindet sich in der Abstimmung.

Am 27. Oktober 2008 fand in der Villa Giersch der Uni Frankfurt das 4. Statusgespräch statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über die bereits erfolgten und die für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten. Das nächste Statusgespräch wird am 20./21. April 2009 in Maulbronn bei Prof. Gabriel Wittum statt finden.

Zur Darstellung der diskreten Funktionen in Klüften wurde in d^3f zunächst die Methode der assoziierten Knoten benutzt. Dabei werden jedem Knoten in der Kluft drei Werte für Druck und Konzentration zugeordnet. Vorteil dieser Methode ist, dass ihre Umsetzung mit der Standarddistribution von u_g möglich ist. Nachteile sind Erhöhung der Freiheitsgrade, komplizierte Gittergenerierung, Schwierigkeiten bei der adaptiven Verfeinerung und Einschränkungen bei der Parallelisierung. Diese Vorgehensweise zur Darstellung von Klüften erwies sich bei der Verwendung in r^3t wegen der großen Anzahl von Freiheitsgraden pro Gitterknoten als wenig effizient. Deshalb wurde eine neue Vorgehensweise, die sogenannten degenerierten Elemente, entwickelt. Hierbei wird die Kluft in Rechteck- bzw. Hexaederelemente eingebettet. Im Innern dieser degenerierten Elemente wird ein FV-Verfahren reduzierter Dimension angewendet. Inzwischen wurde die der degenerierten Elemente auf dreidimensionale Gebiete mit zweidimensionalen Klüften erweitert. Dieses Verfahren wurde auch in d^3f implementiert. Auf dem Statusgespräch wurden weitere Testfälle von der GRS vorgestellt und in das Testprogramm aufgenommen.

Die Erarbeitung der Detailplanung „Enhancement of the Computer Codes d^3f and r^3t (E-DuR); Elaborated Technical Concept“ wurde fortgesetzt. Es wurde damit begonnen für eine Auftragsvergabe die exakten Anforderungen an die graphische Oberfläche zu definieren. Dabei sollen die Erweiterungen so durchgeführt werden, dass die bisherigen Eingabedateien ergänzt und möglichst wenig verändert werden.

Die Identifikation möglicher Testfälle zur Überprüfung der Erweiterungen wurde fortgesetzt. Mit FEFLOW wurden die ersten Testrechnungen durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31201 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10346
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung und Umsetzung von technischen Konzepten für tiefe geologische Endlager in allen Wirtsgesteinen (EUGENIA)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2007 bis 31.12.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 359.280,00 EUR	Projektleiter: Bollingerfehr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das vorliegende Vorhaben wird im Verbund (oder: gemeinsam) mit der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) durchgeführt. Es hat zum Ziel, den internationalen Kenntnisstand zu den verschiedenen länderspezifischen Konzepten für HAW-Endlager in den Wirtsgesteinen Salz, Tonstein und Magmatit sowie zu den Verfahren und Ergebnissen der weltweit durchgeführten Arbeiten zur Suche und Erkundung von Standorten für die Endlagerung hoch radioaktiver Abfälle zusammenzustellen und zu bewerten. Schwerpunktmäßig werden die in Deutschland erzielten umfangreichen FuE-Ergebnisse zur Entwicklung von Endlagerkonzepten, Einlagerungs- und Transporttechniken und geotechnischen Barriersystemen für ein HAW-Endlager im Salz sowie der erreichte fortgeschrittene Stand der Erkundung eines potenziellen Endlagerstandortes am Beispiel der über- und untertägigen Erkundung des Salzstocks Gorleben dargestellt. Ergänzend dazu werden die in Deutschland seit Anfang der 90-iger Jahre bezüglich der HAW-Endlagerung in Magmatiten und Tonstein erzielten Untersuchungsergebnisse zur Auswahl potenziell geeigneter Endlagerregionen bzw. -standorte zusammengefasst und mit den in anderen Ländern durchgeführten Such- und Erkundungsarbeiten verglichen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Zusammenstellung internationaler Konzepte zur Endlagerung in tiefen Gesteinsformationen (DBE Technology)
- AP2: Sicherheitskonzepte für Endlager in tiefen Gesteinsformationen (DBE Technology)
- AP3: Standortsuche und Standorterkundung (BGR)
- AP4: Geologische Modelle und Standortrandbedingungen für HAW-Endlager in verschiedenen Wirtsgesteinen (BGR)
- AP5: Technische Endlagerkonzepte (DBE Technology)
- AP6: Bau und Instandhaltung von Endlagerbergwerken (DBE Technology)
- AP7: Verfüll- und Verschlussmaßnahmen (DBE Technology)
- AP8: Geotechnische Überwachungsmethoden beim Endlagerbetrieb (DBE Technology)
- AP9: Genehmigungstechnische Aspekte (DBE Technology)
- AP10: Abschließende bewertende Gegenüberstellung (BGR und DBE Technology)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Folgenden wird über die Arbeiten zu den Arbeitspaketen berichtet, für die DBE TECHNOLOGY verantwortlich ist. Im Berichtszeitraum wurden zu nachfolgenden Arbeitspaketen jeweils Berichte neu erstellt oder abgeschlossen und mit dem Projektpartner BGR abgestimmt.

- AP5 „Technische Endlagerkonzepte“
- AP6 „Bau- und Instandhaltung von Endlagerbergwerken“
- AP7 „Verfüll- und Verschlussmaßnahmen“ und
- AP8 „Geotechnische Überwachungsmethoden beim Endlagerbetrieb“
- AP9 „Genehmigungstechnische Aspekte“

Der Abschlussbericht, der eine zusammenfassende Beschreibung der Ergebnisse aller Arbeitspakete von beiden Partnern enthält, wurde im Entwurf fertiggestellt. Als wesentliche Ergebnisse lassen sich festhalten, dass es in den betrachteten Ländern (Belgien, Deutschland, Finnland, Frankreich, Schweden, Schweiz und USA) mit fortgeschrittenen Entsorgungsprogrammen für hochradioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente wirtsgesteins-spezifische Endlagerkonzepte gibt. Die technischen Konzepte berücksichtigen dabei die Eigenschaften des Wirtsgesteins sowohl hinsichtlich der Isolationseigenschaften als auch im Hinblick auf die Herstellung und Instandhaltung der Grubenräume. So ist z. B. im belgischen Endlagerkonzept im plastischen Boom-Clay ein vollständiger Ausbau der Hohlräume mit Betontragelementen vorgesehen und die Einkapselung der Endlagerbehälter mit Beton. Im schwedischen und finnischen Endlagerkonzept in Granit, der ohne Ausbau standsicher ist, werden zur langfristigen Isolation die Endlagerbehälter mit Kupfer ummantelt und zusätzlich durch Bentonit vor dem Zutritt des vorhandenen und in Zukunft zutretenden Wassers geschützt. In Deutschland sieht das Referenzendlagerkonzept die Endlagerung wärmeentwickelnder Abfälle in Salz vor. Die Grubenräume können ohne stützenden Ausbau erstellt und über Jahrzehnte sicher betrieben werden. Die Isolation der Abfälle erfolgt in diesem Konzept im Wesentlichen durch das Wirtsgestein Salz, das langfristig aufgrund der Konvergenzeigenschaften die Endlagerbehälter vollständig einschließt. Das Verfüll- und Verschlusskonzept für die vorgenannten Konzepte wird hauptsächlich von den Eigenschaften des Wirtsgesteins und dem erstellten Zugang zum Endlager – über einen Schacht oder eine Rampe – bestimmt. Dafür wurden konzept- und wirtsgesteinspezifische Lösungen entwickelt. Die Technik zum Transport und zur Einlagerung von Endlagerbehältern wurde gerade in den letzten Jahren insbesondere im Rahmen des von der EU mitfinanzierten Integrierten Projektes ESDRED (Engineering Studies and Demonstration of Repository Designs) entscheidend weiterentwickelt. In Demonstrationsanlagen wurden im Maßstab 1:1 die Handhabungs- und Einlagerungstechniken erprobt. In diesem Zusammenhang steht auch die Entwicklung und erfolgreiche Erprobung der Einlagerungstechnik für Brennstabkockillen (BSK 3) im Rahmen des Vorhabens DENKMAL. Zur Überwachung der Veränderungen der geotechnischen und geophysikalischen Eigenschaften des Endlagers während seiner Betriebszeit werden gezielte Monitoringstrategien und -verfahren entwickelt. Der internationale Stand der Technik dazu wurde recherchiert und ebenso die regulatorischen und gesetzlichen Randbedingungen unter denen die Planung und der Betrieb eines Endlagers zu führen ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichtes und Abstimmung mit dem Auftraggeber.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Str., 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 E 10357
Vorhabensbezeichnung: Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2007 bis 31.03.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 798.105,00 EUR	Projektleiter: 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 Auslaugversuche mit den bestrahlten, unterschiedlichen FR-BE-Typen (Dispersionsbrennstoffe: metallisches UAl_x -Al und U_3Si_2 -Al) in Tonporenwasser und in Wasser aus kristallinem Gestein sind noch nicht abgeschlossen. In der bisherigen Laufzeit der Versuche ist allerdings das Maxima des Druckaufbaus erreicht wurden. Aufgrund der mobilisierten Radionuklide zeigen beide Typen ein vergleichbares Korrosionsverhalten.
- AP2: Auslaugversuche mit unbestrahlten FR-BE-Typen (Dispersionsbrennstoffe: metallisches UAl_x -Al und U_3Si_2 -Al) in Salzlauge, Tonporenwasser und Wasser aus kristallinem Gestein bedingen die Bildung von sekundären Phasen. Diese Phasen sollen mit der Klimakammer des XRD-Gerätes in ihrer Struktur bestimmt werden. Die Klimakammer wurde hinreichend kalibriert und einzelne Phasenbestandteile können nun unter definierten Feuchte- und Temperaturbedingungen vermessen werden.
- AP3: Inkorporationsuntersuchungen, um vierwertige als auch dreiwertige Elemente in die Gitterstruktur des Mg-Al-Cl-LDH durch partiellen Austausch des dreiwertigen Aluminiums einzubauen, wurden durchgeführt. Neben Zr-IV konnte nach bisherigen Ergebnissen auch Hf-IV eingebaut werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die Auslaugversuche mit bestrahlten FR-BE unterschiedlicher Zusammensetzung werden in den schwächer mineralisierten Wässern (Tonporenwasser und Wasser aus kristallinem Gestein) aller Voraussicht nach Mitte 2009 abzuschließen sein. Dann erfolgt eine Bilanzierung der mobilisierten und immobilisierten Radionuklide.
- AP2: Momentan wird an der Abtrennung einzelner Phasenbestandteile mittels der Sedimentationstechnik gearbeitet. Eine Quantifizierung der identifizierten kristallinen Verbindungen (Mg-Al-LDH und Lesukit) wird angestrebt. Zudem soll geklärt werden, welche Verbindung das Uran ausbildet.
- AP3: Die Ergebnisse der Inkorporationsuntersuchungen mit Zr-IV sind zur Publikation eingereicht. Im Vordergrund stehen nun Sorptionsuntersuchungen an den mit vierwertigen Elementen „modifizierten LDH-Typen“.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- H. Curtius, Z. Papparigas, G. Kaiser: Sorption of selenium on Mg-Al and Mg-Al-Eu layered double hydroxides, *Radiochim. Acta* 96, 651-655 (2008)
- K. Ufer, R. Kleeberg, J. Bergmann, H. Curtius, R. Dohrmann: Refining realstructure parameters of disordered layer structures within the Rietveld method. *Zeitschrift für Kristallographie*, in press DOI-10.1524/zksu.2008.0020

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10367	
Vorhabensbezeichnung: Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2007 bis 31.12.2010		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.415.200,00 EUR		Projektleiter: Dr. Becker / Dr. Buhmann ab 01.01.2009	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Inhalt des Vorhabens ist eine Umarbeitung und Anpassung des Programmpakets EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit von geologischen Endlagern für radioaktive Abfälle an moderne Softwareanforderungen. Dabei steht neben der Vereinheitlichung von verwandten Modulen und Versionen sowie der Einführung einheitlicher moderner Datenstrukturen insbesondere die Optimierung von Algorithmen und Ablaufstrukturen im Vordergrund. Moderne, anwendungsorientierte Benutzerschnittstellen werden realisiert. Die Ausgabemöglichkeiten werden erweitert und flexibilisiert. Bei der Umsetzung kommen moderne Programmiersprachen zum Einsatz.

Die Arbeiten dienen als Grundlage für die Durchführung von Modellrechnungen zur integrierten Analyse der Langzeitsicherheit in zahlreichen aktuellen und zukünftigen Projekten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in fünf Arbeitspakete:

AP1: Code-Analyse und Know-how-Transfer.

Alle Codeteile des Programmpakets werden sorgfältig erfasst, katalogisiert und analysiert. Tiefgehende Kenntnisse des Programmaufbaus werden von älteren auf jüngere Mitarbeiter transferiert.

AP2: Erarbeitung eines neuen Programmkonzepts.

In zwei Arbeitsschritten werden neue Konzepte für die Programmierung, für die Datenübergabe sowie für den Programmablauf entwickelt. Dafür werden moderne Strategien angewandt. Die Datenverwaltung wird über ein Datenbanksystem realisiert.

AP3: Codeumstellung und -entwicklung.

Das Arbeitspaket umfasst zwei Arbeitsschritte, von denen der erste die Umstellung aller vorhandenen Module auf eine moderne Programmiersprache unter Beachtung der Konzepte aus AP2 umfasst. Im zweiten Arbeitsschritt wird ein neuer Statistik-Rahmen für die Durchführung probabilistischer Analysen entwickelt.

AP4: Steuerung des Programmablaufs und Anbindung an externe Programme.

Die einzelnen unabhängigen Programmmodule werden in drei Arbeitsschritten miteinander sowie mit externen Programmen verknüpft. Im ersten Schritt werden die globale

Programmablaufsteuerung und der Datentransfer zwischen den Modulen neu organisiert. Die weiteren Arbeitsschritte dienen dem Anschluss an externe Programme zur statistischen Analyse und zur grafischen Visualisierung von Ergebnissen.

AP5: Test und Dokumentation.

Im ersten Arbeitsschritt werden mehrere frühere Studien mit dem neuen Programmpaket detailliert nachgerechnet und mit den alten Ergebnissen verglichen. Der zweite Arbeitsschritt dient der ausführlichen Dokumentation der neuen Programme.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die detaillierte Analyse der Module der CHET-Familie wurde fortgeführt und weitgehend abgeschlossen. Die Analyse wurde intern dokumentiert. Mit dem vorhandenen Code wurden Performance-Tests durchgeführt und im Hinblick auf die Programmstrukturen ausgewertet. Durch Optimierungsmaßnahmen konnte die Geschwindigkeit des Codes um den Faktor 2 verbessert werden. Eine Schwäche dieser Module in ihrer gegenwärtigen Form liegt weiterhin in ihrer extremen temporären I/O-Aktivität, die immer wieder zu Ablauffehlern geführt hat. Dieses Problem konnte durch Umstrukturierung des Codes behoben werden.

Die Reihe interner Gespräche zur Konzeption für den zukünftigen Aufbau des Gesamtpakets EMOS wurde fortgesetzt. Nach Festlegung auf einen weitgehenden Einsatz der Programmiersprache C++ wurden grundsätzliche Überlegungen zur objektorientierten Neustrukturierung der Codes angestellt.

Zur Anbindung des Programms an ein Datenbanksystem in Verbindung mit der Realisierung einer Bedienungsoberfläche wurde in einem Unterauftrag mit der Fa. BREDEX ein Konzept erarbeitet. Es wurde festgelegt, dass mit einer relationalen Datenbank (Oracle) gearbeitet werden soll. Dies hat den Vorteil, dass auf vorhandenes Know-How zurückgegriffen werden kann. In der Datenbank sollen nur die Eingabedaten der Rechenläufe sowie allgemeine Informationen verwaltet werden. Die Ausgabedaten werden in einem speziellen durchsuchbaren Format (HDF5) abgelegt. Ein umfangreicher Unterauftrag an die Fa. BREDEX zur Umsetzung des Konzepts wurde vorbereitet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im Rahmen der Code-Analyse wird in einem nächsten Schritt das Modul LOPOS analysiert. Es wird damit begonnen, die Module der CHET-Familie in die neue Programmstruktur umzusetzen. Der Statistikrahmen wird auf Basis der vorhandenen Version analysiert und neu konzipiert. In Zusammenarbeit mit der Fa. BREDEX werden die Datenbankanbindung und die Benutzerschnittstelle umgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10377
Vorhabensbezeichnung: Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 31.12.2011	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008
Gesamtkosten des Vorhabens: 3.073.679,00 EUR	Projektleiter: Dr. Zhang

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat die Weiterentwicklung des Wissens zum thermisch-hydraulisch-mechanischen Verhalten von Tonstein, insbesondere im Nahfeld eines HAW-Endlagers, zum Ziel.

Dieses Ziel lässt sich untergliedern in:

- Die Erweiterung der Datenbasis zum THM-Verhalten des Tonsteins durch geeignete Experimente im Labor und in situ.
- Die Weiterentwicklung vorhandener Modellvorstellungen zur Verbesserung der Beschreibung und Berechenbarkeit des THM-Verhaltens des Tonsteins.
- Die Verbesserung bzw. Bereitstellung geeigneter Untersuchungsmethoden.

Diese Ziele werden durch die Beteiligung am neuen ANDRA-Forschungsprogramm für das Untertage-labor Bure (ULB) in den Jahren 2007 bis 2011 und am Mine-By-Experiment im Mont Terri Rock Laboratory (MTRL) erreicht. Neben dem generellen Erkenntniszuwachs sollen die im Rahmen dieses Vorhabens erzielten Ergebnisse bei der Verbesserung von Prozessmodellen sowie bei der Weiterentwicklung des Instrumentariums für die Langzeitsicherheitsanalyse für Endlager in Tongesteinen genutzt werden.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: *In-situ-Untersuchungen* der mechanisch-hydraulischen Auswirkungen einer Tunnelauffahrung im MTRL auf das umgebende Tonsteingebirge. Diese Untersuchungen werden gemeinsam mit NAGRA, BGR und ANDRA durchgeführt, wobei GRS die Messung von Porenwasserdruck, Permeabilität und Sättigungsänderung übernimmt. Ein weiterer In-situ-Test hat die Untersuchung des Langzeitverformungsverhaltens des Opalinuston im MTRL zum Ziel.
- AP2: *Laboruntersuchungen* am Callovo-Oxfordian-Tonstein und Opalinuston zu Langzeitverformung, Quelldruck/Quellverformung, Schädigung und Verheilung sowie am Auffahrungsrückstand aus dem ULB als Versatzmaterial.
- AP3: *Modellierung* des Mine-By-Experiments, des Langzeitverformungsverhaltens eines Bohrlochs im MTRL und der THM-Laborversuche.
- AP4: *Ergebniszusammenführung und Berichterstattung*.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Mine-By-Test: Die Porenwasserdruck-Messungen an den sieben bereits installierten Messstellen wurden fortgesetzt. Zwei dieser Messstellen wurden im Rahmen der inzwischen abgeschlossenen Auffahrung der Gallery 08 abgetrennt. Die Tunnelauffahrung machte sich bei den Messungen in einem stufenweisen Anstieg des Drucks, der sich mit der Annäherung der Abbaufont korrelieren lässt, und einer Entlastung kurz vor Passieren der Messstellen bemerkbar. Für den eigentlichen Mine-By-Test in der Nische 2 der neuen Gallery 08 wurden vier Porenwasserdruckmessstellen in Bohrlöchern um die zukünftige Nische installiert und in Betrieb genommen. Die Auffahrung der Nische 2 ist inzwischen abgeschlossen. Mehrere Modellierungsteams, darunter GRS, werden die Gebirgsantwort auf die Auffahrung modellieren, bevor die Messdaten bekannt gegeben werden.

Bohrlochverformungsmessung: Die von NAGRA zur Verfügung gestellte Dilatometersonde wurde überholt und wird zurzeit getestet.

Nach der Modernisierungsarbeit im Geotechniklabor sind eine Reihe von Versuchen zur Untersuchung von Verformung, Quellung und Wasserpermeabilität von COX-Tongestein begonnen und fortgeführt worden.

- Das Verformungs- / Festigkeitsverhalten des Tonsteins wurde bei Manteldrücken von 1 bis 7 MPa bestimmt. Zur Beseitigung des Einflusses der durch Präparation erzeugten Probenauflockerung wurden die Proben bis zum Gebirgsdruck von ca. 15 MPa vorkompaktiert. Die gemessenen Festigkeitswerte zeigen keine deutliche Abhängigkeit vom Manteldruck.
- Die Quellversuche wurden an zwei Tonproben in Oedometerzellen zur Quellverformung ohne Belastung und zum Quelldruck bei begrenztem Volumen durchgeführt. Bei Untersuchungen bei einer Luftfeuchtigkeit von ca. 90 % wurde eine Quelldruckerhöhung von ca. 1 MPa beobachtet, während keine Quellverformung über einen Monat gemessen wurde. Die anschließende Befeuchtung mit dem Tonformationswasser bewirkte eine starke Quellverformung von über 7 % und eine Quelldruckerhöhung bis über 3 MPa innerhalb von drei Monaten.
- Die Messungen der Wasserpermeabilität wurden durch Injektion vom Formationswasser in 5 stark geschädigten Tonproben bislang über 5 Monate durchgeführt. Bei einem Manteldruck von 2 MPa und einem Injektionsdruck von 1 MPa war eine ständige Reduzierung der Wasserpermeabilität um eine Größenordnung festgestellt.

Nach Beschaffung der Apparatur zur Ermittlung der wärmetechnischen Parameter wurden erste Messungen zur Erprobung des Geräts an Tongesteinsproben aus dem URL Mont Terri und einer lockeren Ton-Sand-Mischung (SB-Material) vorgenommen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Installation weiterer Messsonden und Weiterführung der bereits angelaufenen In-situ-Messungen im Mine-By-Experiment
- Starten des In-situ-Langzeitverformungstests in einem Bohrloch
- Weiterführung der Schädigungs-/Verheilungsversuche, Quellversuche und Wasserpermeabilitätsmessungen
- Testen und Kalibrierung des triaxialen Kriechversuchssystems mit zwei neuen Zellen
- Testen und Kalibrierung einer triaxialen Quellzelle und der zugehörigen Messgeräte
- Bestimmung der thermischen Parameter von Tongesteinsproben und Ton-Sand-Gemischen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10387	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 30.04.2009		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 205.565,00 EUR		Projektleiter: Dr. Herbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung eines systematisch hergeleiteten und begründeten Nachweiskonzeptes zum Schutz des Grundwassers vor schädlichen Verunreinigungen durch chemotoxische Stoffe eines Endlagers mit hochradioaktiven Abfällen im Wirtsgestein Salz oder Ton. Alle wichtigen Aspekte des Umgangs mit chemotoxischen Stoffen in einem HAW-Endlager werden untersucht und bewertet. Dazu gehören regulatorische Fragestellungen ebenso, wie Fragen nach dem Inventar solcher Stoffe in den verschiedenen Systemkomponenten eines Endlagers, wie auch die wissenschaftlichen Grundlagen und Methoden zur Stoffbewertung und zur Rückhaltung und Mobilisierbarkeit unter den Randbedingungen relevanter Szenarien. Das vorhandene Wissen zu den unterschiedlichen Aspekten dieser Thematik wird ebenso dargestellt, wie offene Punkte, bzw. zu füllende Lücken.

Zur Bearbeitung dieses komplexen Themas haben das Öko-Institut, DBE Technology und GRS eine Arbeitsgemeinschaft gebildet. Die Gesamtprojektleitung liegt beim Öko-Institut.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das folgende Arbeitsprogramm ist zur Erreichung der Vorhabensziele geplant.

- AP1: Regulierung, Vorschriften, Anwendungsfälle - Analyse des Ist-Zustandes (Federführung: DBE Technology GmbH)
- AP2: Inventar chemotoxischer Stoffe in einem HAW-Endlager (Federführung: DBE Technology GmbH)
- AP3: *Wissenschaftliche Grundlagen (Federführung: GRS)*
- AP4: *Randbedingungen für den Nachweis (Federführung: Regulatorische und nachweisbezogene Aspekte: Öko-Institut e. V.; Szenarien: GRS)*
- AP5: *Methoden der Stoffbewertung und Identifizierung relevanter Stoffe (Federführung: GRS)*
- AP6: Nachweiskonzept für chemotoxische Stoffe (Federführung: Öko-Institut e. V.)
- AP7: Koordination (Federführung: Öko-Institut e. V.)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Teilnahme an Projektgesprächen und Durchführung geochemischer Modellrechnungen.

Im Berichtszeitraum wurde an der Modellierung der Freisetzung der 20 Elemente aus einer mit Brennstoff beladenen BSK3-Kokille im Kontakt mit Opalinustonlösung, mit gesättigter NaCl-Lösung und mit IP21-Lösung, gearbeitet. Modelliert wurde mit den geochemischen Rechenprogrammen Geochemist's Workbench (GWB) und mit CHEMAP.

Über die Ergebnisse der Modellierungen der Auflösung eines Polluxbehälters in Opalinustonlösung wurde bereits im ersten Halbjahr 2008 berichtet. Bei dieser Rechnung wurde mit der „dünnen“ Opalinustonlösung mit einem großen Lösungsangebot (32.400 m³ Lösung und ein Plloxbehälter) gerechnet. Die thermodynamische Datenbasis von GWB reichte dafür aus. In den neuen Rechnungen wurde ein neuer Abfall (BSK3) in einem neuen Szenarium betrachtet, in welchem der Wasserverbrauch infolge von Korrosion zu hochsalinaren Lösungen führte. Dafür war die Datenbasis von GWB nicht mehr geeignet. Gleiches gilt für die Rechnungen mit NaCl- und IP21-Lösung. Ein Großteil der Arbeit in diesem Berichtszeitraum bestand also darin, die benötigten Daten zusammenzutragen und sie in das, von den beiden Rechenprogrammen erforderem Format zu bringen. Ein Großteil der benötigten Pitzerkoeffizienten stammt aus dem GRS-Abschlussbericht zum Vorhaben 02 C 0983 „Entwicklung einer thermodynamischen Datenbasis für Arsen, Chrom, Kobalt, Kupfer, Mangan, Nickel und Quecksilber“ von Hagemann et al. (2008). Die Ergebnisse der bisherigen Reaktionspfadmodellierungen lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Alle betrachteten toxischen Elemente (As, B, Cr, Cu, Mn, Mo, Ni, U, V) überschreiten bei vollständiger Auflösung ohne Phasenneubildung auch nur eines Pollux-Behälters in 32400 m³ oder von drei BSK3-Kokillen in einem 30 m Bohrloch mit 8 m³ Opalinustonlösung die jeweiligen Geringfügigkeitsschwellen.
- Im geochemischen Modell liegen Cr, Cu, Ni, U für den Pollux unterhalb dieser Schwelle, es bleibt aber zu prüfen, ob die berechneten Phasen relevant sind.
- Bislang gibt es keine Geringfügigkeitsschwellen für Nb, Sn, Ti und Zr, jedoch sind für Ti und Zr nur sehr kleine Löslichkeiten zu erwarten.
- Relevante Elemente sind aus derzeitiger Sicht der Modellierung: As, B, Mn, Mo, V (Nb, Sn noch unklar).
- Unsicherheiten im chemischen Modell werden sich nicht vollständig innerhalb des Projektes klären lassen, Probleme lassen sich aber aufzeigen.
- Nebenbestandteile in sonstigen ins Endlager eingebrachten Materialien wurden in den Modellierungen nicht betrachtet, da Daten hierzu fehlen.

Mit den Lösungszusammensetzungen aus den geochemischen Modellrechnungen wurden ein- und zweidimensionale Transportrechnungen begonnen. Es wurde ausschließlich diffusiver transport betrachtet. Relevante elementspezifische Transportdaten, Diffusions- und Sorptionsdaten, wurden aus der Literatur zusammengestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Analyse der bisherigen Modellierungsergebnisse, Durchführung von 1- und 2-dimensionalen Transportrechnungen, Erstellung der Dokumentation mit Kommentaren der Ergebnisse, Erstellung des Berichtes zu AP3.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: Öko-Institut e.V. - Institut für angewandte Ökologie, Merzhauser Straße 173, 79100 Freiburg		Förderkennzeichen: 02 E 10397
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 248.572,00 EUR	Projektleiter: Sailer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung eines systematisch hergeleiteten und begründeten Nachweiskonzeptes zum Schutz des Grundwassers vor schädlichen Verunreinigungen durch chemotoxische Stoffe eines Endlagers mit hochradioaktiven Abfällen im Wirtsgestein Salz oder Ton. Alle wichtigen Aspekte des Umgangs mit chemotoxischen Stoffen in einem HAW-Endlager werden untersucht und bewertet. Dazu gehören regulatorische Fragestellungen ebenso, wie Fragen nach dem Inventar solcher Stoffe in den verschiedenen Systemkomponenten eines Endlagers, wie auch die wissenschaftlichen Grundlagen und Methoden zur Stoffbewertung und zur Rückhaltung und Mobilisierbarkeit unter den Randbedingungen relevanter Szenarien. Das vorhandene Wissen zu den unterschiedlichen Aspekten dieser Thematik wird ebenso dargestellt, wie offene Punkte bzw. zu füllende Lücken.

Zur Bearbeitung dieses komplexen Themas haben das Öko-Institut, DBE Technology und GRS eine Arbeitsgemeinschaft gebildet. Die Gesamtprojektleitung liegt beim Öko-Institut.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das nachfolgende Arbeitsprogramm ist zur Erreichung der Vorhabensziele geplant.

AP1: Regulierung, Vorschriften, Anwendungsfälle - Analyse des Ist-Zustandes (Federführung: DBE Technology GmbH)

AP2: Inventar chemotoxischer Stoffe (Federführung: DBE Technology GmbH)

AP3: Wissenschaftliche Grundlagen (Federführung: GRS)

AP4: *Randbedingungen des Nachweises (Federführung: Öko-Institut e. V. und GRS)*

AP5: Methoden der Stoffbewertung und Identifizierung relevanter Stoffe (Federführung: GRS)

AP6: *Nachweiskonzept für chemotoxische Stoffe (Federführung: Öko-Institut e. V.)*

AP7: *Koordination (Federführung: Öko-Institut e. V.)*

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im zweiten Halbjahr 2008 fanden folgende Gespräche statt:

- 01.10.2008 Projektgespräch zum Projektstatus der Arbeitspaketen AP1 bis AP5 und Beginn AP6.
- 17.12.2008 Arbeitsgespräch hinsichtlich der Ergebnisse der Simulationsrechnungen und zur Diskussion der Nachweismethodik.

AP1 und AP2 sind abgeschlossen. Die Bearbeitung der Arbeitspakete AP3 bis AP5 wurde im 2. Halbjahr 2008 fortgesetzt. Mit AP6 wurde im Oktober 2008 begonnen.

- AP3: Öko-Institut hat in AP3 zu den Arbeiten der GRS bei der Zusammenstellung der Grundlagen für geochemische Modellrechnungen beigetragen. AP3 wurde zum Jahresende 2008 weitgehend abgeschlossen, die Ergebnisse wurden in AP4 integriert und dort weiterverarbeitet. Identifizierte Kenntnislücken in der thermodynamischen Datenbasis können im Rahmen des Projektes benannt, aber nicht geschlossen werden. In den beispielhaften Modellrechnungen werden hier konservative Annahmen ersatzweise herangezogen.
- AP4: Hinsichtlich der Bearbeitung von AP4 (Randbedingungen des Nachweises) wurde für die Arbeitsschritte AS4.1 und AS4.5 des Öko-Instituts Vorschläge zur Nachweismethodik erarbeitet, die innerhalb der Gruppe noch diskutiert werden. Die von GRS konzipierten Rechenmodelle zur Demonstration des modelltechnischen Instrumentariums sind lauffähig und können für modifizierte Randbedingungen angepasst werden.
- AP5: Wird federführend von GRS bearbeitet.
- AP6: Im AP6 werden derzeit die Projektergebnisse zusammengetragen und zu einem Nachweiskonzept verdichtet. In einem umfangreicheren Vergleich wurde die unterschiedliche Nachweisführung bei UTDs und Endlagern für hochradioaktive Abfälle gegenübergestellt und damit Vor- und Nachteile von Nachweisvarianten untersucht. Hinsichtlich der verschiedenen Verfahrensmöglichkeiten für Endlager in Salz oder Tongestein und ihrer Berücksichtigung im Nachweiskonzept besteht zwischen den Projektmitgliedern noch Diskussionsbedarf.

Die Bearbeitung erfolgte planmäßig.

4. Geplante Weiterarbeiten

Gemäß dem aktuellen Zeitplan wird das Projekt bis Ende April 2009 mit der Vorlage des Abschlussberichts fachlich beendet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10407
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 192.707,00 EUR	Projektleiter: Tholen	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung eines systematisch hergeleiteten und begründeten Nachweiskonzeptes zum Schutz des Grundwassers vor schädlichen Verunreinigungen durch chemotoxische Stoffe eines Endlagers mit hoch radioaktiven Abfällen im Wirtsgestein Salz oder Ton. Alle wichtigen Aspekte des Umgangs mit chemotoxischen Stoffen in einem HAW-Endlager werden untersucht und bewertet. Dazu gehören regulatorische Fragestellungen ebenso, wie Fragen nach dem Inventar solcher Stoffe in den verschiedenen Systemkomponenten eines Endlagers, wie auch die wissenschaftlichen Grundlagen und Methoden zur Stoffbewertung und zur Rückhaltung und Mobilisierbarkeit unter den Randbedingungen relevanter Szenarien. Das vorhandene Wissen zu den unterschiedlichen Aspekten dieser Thematik wird ebenso dargestellt, wie offene Punkte, bzw. zu füllende Lücken.

Zur Bearbeitung dieses komplexen Themas haben das Öko-Institut, DBE Technology und GRS eine Arbeitsgemeinschaft gebildet. Die Gesamtprojektleitung liegt beim Öko-Institut.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das nachfolgende Arbeitsprogramm ist zur Erreichung der Vorhabensziele geplant.

AP1: Regulierung, Vorschriften, Anwendungsfälle - Analyse des Ist-Zustandes (Federführung: DBE Technology GmbH)

AP2: Inventar chemotoxischer Stoffe (Federführung: DBE Technology GmbH)

AP3: Wissenschaftliche Grundlagen (Federführung: GRS mbH)

AP4: Randbedingungen des Nachweises (Federführung: Öko-Institut e. V. und GRS mbH)

AP5: Methoden der Stoffbewertung und Identifizierung relevanter Stoffe (Federführung: GRS mbH)

AP6: Nachweiskonzept für chemotoxische Stoffe (Federführung: Öko-Institut e. V.)

AP7: Koordination (Federführung: Öko-Institut e. V.)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im zweiten Halbjahr 2008 fanden neben den laufenden inhaltlichen Arbeiten folgende Gespräche statt:

- 01.10.2008 Projektgespräch zum Projektstatus der Arbeitspaketen AP1 bis AP5 und Beginn AP6.
- 17.12.2008 Arbeitsgespräch hinsichtlich der Ergebnisse der Simulationsrechnungen und zur Diskussion der Nachweismethodik.

AP1 und AP2 sind abgeschlossen.

Die Bearbeitung der Arbeitspakete AP3 bis AP5 wurde im 2. Halbjahr 2008 fortgesetzt.

Mit AP6 wurde im Oktober 2008 begonnen.

Wesentliche Ergebnisse sind:

AP3 und AP5 wird federführend von GRS bearbeitet.

AP3 wurde zum Jahresende 2008 weitgehend abgeschlossen. Die Ergebnisse wurden in AP4 integriert und dort weiterverarbeitet. Identifizierte Kenntnislücken in der thermodynamischen Datenbasis können im Rahmen des Projektes benannt, aber nicht geschlossen werden. In den beispielhaften Modellrechnungen werden hier konservative Annahmen ersatzweise herangezogen.

AP4 wird federführend vom Öko-Institut und von GRS bearbeitet.

Das Öko-Institut hat Vorschläge zur Nachweismethodik erarbeitet; diese werden derzeit von den Projektbeteiligten diskutiert. Die von GRS konzipierten Rechenmodelle zur Demonstration des modelltechnischen Instrumentariums sind lauffähig und können für modifizierte Randbedingungen angepasst werden.

AP6 wird federführend vom Öko-Institut bearbeitet.

Derzeit werden die Projektergebnisse zusammengetragen und zu einem Nachweiskonzept verdichtet. Das Öko-Institut stellte die unterschiedliche Nachweisführung bei UTDs und Endlagern für hochradioaktive Abfälle in einem Vergleich gegenüber. Die vom Öko-Institut vorgeschlagene Nachweisführung wird derzeit von den Projektbeteiligten diskutiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Gemäß dem aktuellen Zeitplan wird das Projekt bis Ende April 2009 mit der Vorlage des Abschlussberichts beendet sein.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10417
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 293.420,00 EUR	Projektleiter: 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 Komplexeaktionen 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_4 , Temperaturen von $20^\circ\text{C} > T > 80^\circ\text{C}$, pH von $2 > \text{pH} < 6$, in Anwesen- bzw. Abwesenheit von U(VI) als Konkurrenzion) und unter endlagerrelevanten Bedingungen (synthetisches Porenwasser, reduzierende Bedingungen)

AP3: Sorptionsuntersuchungen im System Am(III)-NOM-natürliches Tongestein unter den gegebenen natürlichen Bedingungen
Durchführung temperaturabhängiger (Langzeit) Batchsorptionsversuchen im System Am(III)-(NOM)-Ton (natürliches Tongestein, Modellton)-Wasser unter Standardbedingungen ($I=0.1 \text{ mol/l}$, $20 \text{ °C} > T > 80 \text{ °C}$, $3 > \text{pH} > 10$) und unter endlagerrelevanten Bedingungen (Porenwasser)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die temperaturabhängigen Untersuchungen zur Komplexierung von Eu(III)/Am(III) mit verschiedenen Modellliganden wurden fortgesetzt. Hierzu wurde die beheizbare Küvettenhalterung für temperaturabhängige TRLFS-Messungen installiert und getestet. Das Eu(III)-Pyromellitsäure-Komplexsystem wurde im Temperaturbereich 25-50 °C mittels TRLFS untersucht. Die Messungen zeigen, dass 2 Komplexe mit unterschiedlichem Deprotonierungsgrad (EuHL, EuL) gebildet werden. Die $\log\beta$ -Werte wurden bei verschiedenen Temperaturen zwischen 25 °C und 50 °C bestimmt (für 25 °C $\log\beta_{111} = 3,92 \pm 0,09$ und $\log\beta_{110} = 4,74 \pm 0,11$) und daraus die thermodynamischen Daten ΔH , ΔG und ΔS ermittelt (z. B. $\Delta H = 23 \pm 10 \text{ kJmol}^{-1}$ für beide Komplexe). Im Rahmen einer Bachelorarbeit wurden die thermodynamischen Daten für den 1:1-Komplex (EuL) der Eu(III)-Komplexierung mit 2,5 Dihydroxybenzoesäure bei pH 5 mittels UV-Vis-Spektroskopie bestimmt.

Analog wurden die Komplexsysteme Eu(III)-Salicylsäure und Am(III)-Salicylsäure wurden bei 25 °C und pH = 4 mittels UV-Vis-Spektroskopie mit kleinen Metallionenkonzentrationen untersucht ($5 \cdot 10^{-5} \text{ M Eu(III)}$ und $5 \cdot 10^{-7} \text{ M Am(III)}$). In beiden Systemen konnte im gewählten Konzentrationsbereich nur eine Komplexspezies nachgewiesen werden. Vermutet wird, dass es sich dabei um den 1:2 Komplex (Am(HL)_2) handelt.

4. Geplante Weiterarbeiten

An das TRLFS-System soll ein Kühlsystem angeschlossen werden, so dass auch Messungen unterhalb Raumtemperatur (bis 0 °C) durchgeführt werden können. Die Komplexierung von Eu(III) mit 2,5-Dihydroxybenzoesäure soll temperaturabhängig mittels TRLFS und potentiometrisch untersucht werden und daraus die thermodynamischen Parameter ΔH , ΔG und ΔS ermittelt und diese mit den mittels UV-Vis bestimmten verglichen werden.

Komplexierungsuntersuchungen von Am(III) mit Pyromellitsäure und 2,5- Dihydroxybenzoesäure mittels TRLFS sollen begonnen werden. Ebenso sollen die Komplexsysteme Eu(III)-Salicylsäure und Am(III)-Salicylsäure temperaturabhängig und pH-abhängig mittels UV-Vis-Spektroskopie charakterisiert werden. Analoge Untersuchungen werden mit einem weiteren Modellliganden, der L-Weinsäure, durchgeführt.

Die in AP3.1 geplanten Sorptionsexperimente von Eu(III) und Am(III) an Opalinuston unter verschiedenen Bedingungen sollen begonnen werden. Die experimentellen Voraussetzungen (Thermoschüttler, beizbare Zentrifuge) sind geschaffen und getestet worden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Schott: Temperaturabhängige Untersuchungen zur Komplexbildung von Eu(III) mit dem Huminstoff-Modellliganden 2,5 Dihydroxybenzoesäure, Bachelorarbeit, TU Dresden, September 2008

M.Müller, J. Schott, M. Acker, G. Bernhard: Absorption spectroscopy of Eu and Am with a Liquid Waveguide Capillary Cell, Posterbeitrag NRC 7, Budapest, August 2008

Zuwendungsempfänger: TU Clausthal, Adolpf-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 10427
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2007 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 586.331,00 EUR	Projektleiter: 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. Dabei zeigt sich nicht unerwartet angesichts der internationalen Erfahrungen, dass die Kopplung thermischer, hydraulischer, mechanischer und chemischer Prozesse (THMC-Kopplung) zumindest bei Tongesteinen eine eher größere Bedeutung haben wird als bei Salinargesteinen.

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.

Eines dieser internationalen Projekte ist das seit mehr als 10 Jahren auf hohem wissenschaftlichen Niveau laufende DECOVALEX-Projekt. Dem Unterzeichnenden ist angetragen worden, im Rahmen einer neuen Phase des DECOVALEX-THMC Projektes mitzuarbeiten und zwar besteht die Möglichkeit der Einbindung in das Nachfolgeprogramm des Teilprojektes TASK C (Excavation Damaged Zone (EDZ) in the argillaceous Tournemire site).

Die Bearbeitung dieser Fragestellung 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 Excavation Damaged Zone (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

- AP1: Durchführung von Gesprächen zur Datenbeschaffung, weitere Aufarbeitung der zur Verfügung gestellten Daten und Einarbeitung in bestehende Unterlagen Tournemire; Dokumentation und Erarbeitung von Datendefiziten vor dem Hintergrund geplanter numerischer Simulationen im Rahmen der Aufgabenstellung.

- AP2: Durchführung einer ersten Bohrkernbeschaffungskampagne im September 2007 am Standort Tournemire in Absprache mit IRSN mit Zwischenlagerung des Bohrkernmaterials in speziell für Tongestein entwickelten Druckzellen; *erneute Kontaktaufnahme mit IRSN für eine zweite Bohrkernbeschaffungskampagne im Frühjahr 2009 (Zusammenstellung von zielführenden Simulationsergebnissen, Schriftverkehr).*
- AP3: Planung von Kalibermessungen an Bohrlöchern der Kernbohrungen im September 2007 am Standort Tournemire in Absprache mit IRSN; Durchführung der Messungen in Zusammenarbeit mit einem qualifizierten Ingenieurbüro im Oktober 2007; erste Interpretation der Ergebnisse; Erarbeitung von Vorschlägen zur Optimierung der Arbeiten; Optimierung der Arbeiten; Interpretation der Ergebnisse; Vorbereitung einer weiteren Messkampagne in Tournemire im Herbst 2008 in Absprache mit IRSN.
- AP4: Aufarbeitung vorhandener laborativer Erkenntnisse aus der verfügbaren Literatur; Zusammenstellung von Materialdaten vor dem Hintergrund der geplanten numerische Simulationen.
- AP5: Durchführung von TC-Festigkeitsversuchen an Vollprüfkörpern mit messtechnischer Erfassung der Dilatanz zur Bestimmung zentraler Gesteinsparameter, d. h. Verformungs- und Kurzzeitfestigkeitsverhalten sowie Volumenänderungs- und Formänderungsarbeit unter Berücksichtigung der Spannungsgeometrie mit Identifikation von lokationsbezogenen Streubreiten; laborative Untersuchungen sind an unter verschiedenen Randbedingungen gelagertem Kernmaterial der Lokation Tournemire erfolgt; *Durchführung von Validierungsversuchen an Sandsteinproben mit Porendruckmessung.*
- AP6: Ableitung eigener Materialkennwerte im Rahmen des Verformungs- und Kurzzeitfestigkeitsverhaltens.
- AP7: Aufbau eines 3-dimensionalen (3D) Berechnungsmodells zur Simulation des Gebirgstragverhaltens am Beispiel des alten Tunnels aus dem Jahre 1881; 3D-Berechnungen mit hinreichender numerischer Genauigkeit (konservative Annahme: kein tragender Ausbau) haben sich als sehr zeitaufwendig herausgestellt; alternativ sind 2D-Modelle *für alle vorhandenen Auffahrungen* erarbeitet worden, mit denen zunächst Parameter- und Sensitivitätsanalysen durchgeführt worden sind (numerische Qualität); *Aufbau von 3D-Berechnungsmodellen für verbliebene Auffahrungen (Querstellen).*
- AP8: Durchführung erster orientierender numerischer Simulationen zum Gebirgstragverhalten mit Materialdaten aus AP4; Herausarbeitung grundsätzlicher numerischer Erfahrungen im Tonsteingebirge durch Stoffmodell- / Parametervariation an 2D-Referenzmodellen aus AP7 mit dem FDM-Programmsystem FLAC3D (Primärspannungszustand, mechanisch-hydraulische Kopplung); Ermittlung der Ausnutzungsgrade η_f und η_s im Hinblick auf die Konturentfestigung (Ausbildung Auflockerungszone); erste Ergebnisse zeigen, dass im Rahmen der bisherigen Analysen weder die Bruch- noch die Gebirgsfestigkeit überschritten werden \rightarrow im Gegensatz zu der dokumentierten Realität noch keine Auflockerungszone; *Durchführung weiterführender Berechnungsvariationen mit viskosem Stoffmodell und Anpassung der laborativ ermittelten Materialdaten aus AP4 an Situation (Trennflächengefüge, tunnelkonturnahe Entsättigungszonen, Orientierung der Schichtungsflächen hinsichtlich der Bohrrichtungen / Gesteinsprüfkörper).*
- AP9: *Erste Gegenüberstellung von Ergebnissen aus den viskosen Berechnungsvariationen aus AP8 mit Arbeiten aus AP1 inkl. Variation der Gebirgsqualität und Untersuchung des Langzeittragverhaltens; Definition eines Kriechbruchkriteriums.*
- AP11: *Beschreibung der 2D-Berechnungsmodelle, Dokumentation der numerischen Simulationen mit elastischem Stoffmodell.*

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Planung und Durchführung einer weiteren Bohrkernbeschaffungskampagne im Frühjahr 2009 am Standort Tournemire in Absprache mit IRSN.
- AP3: Durchführung von Wiederholungsmessungen im 1. Hj. 2009 am Standort Tournemire in Absprache mit IRSN.
- AP5: Planung und Durchführung von weiteren Versuchen an Kernmaterial der Lokation Tournemire zur Identifizierung der lagerungsbedingten Ausprägung der das mechanische Materialverhalten von Tongestein maßgeblich beeinflussenden hydraulischen Verhältnisse (Porenwasserdruck, Wassergehalt); Verwendung von eigens für die Re-sättigung von Prüfkörpern hergestellten und optimierten Zwischenlagerungsbehältern; Porendruckmessung während der Versuche.
- AP6: Ableitung von eigenen zeitabhängigen Materialkennwerten.
- AP7: Modifikation des 3D-Berechnungsmodells (Querstellen 2003).
- AP8: Weiterführende Herausarbeitung grundsätzlicher numerischer Erfahrungen im Tonsteingebirge durch Stoffmodell- / Parametervariation an 3D-Referenzmodellen aus AP7 im Tonsteingebirge mit dem FDM-Programmsystem FLAC3D (*Berücksichtigung des erarbeiteten Kriechbruchkriteriums*).
- AP9: Gegenüberstellung der Ergebnisse weiterer Variationen aus AP8 mit Arbeiten aus AP1 (*Mine-by-test-Experiment*); *Optimierung des Kriechbruchkriteriums und Untersuchung des Langzeittragverhaltens bei viskosem Materialmodell.*
- AP10: Diskussion der Ergebnisse im internationalen Rahmen (*TIMODAZ-conference 2009*).
- AP11: Fortführung der Dokumentation der Forschungsarbeiten, Generalisierung der Befunde, Weiterführung der Arbeiten zum Abschlussbericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Bauhaus-Universität Weimar, Geschwister-Scholl-Str. 8, 99423 Weimar		Förderkennzeichen: 02 E 10437
Vorhabensbezeichnung: Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2007 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 290.316,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Schanz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zurzeit werden die hydraulischen Permeabilitätsversuche an den expansiven Tonen durchgeführt. In einer ersten Versuchsphase werden die Versuchskörper quasi drucklos mit Fluid beaufschlagt und volumenkonstant gesättigt. Dabei werden die Fluidaufnahme und der Quelldruck über die Zeit erfasst. Die Proben sind quasi gesättigt ($> 98\%$) wenn der Quelldruck konstant und (!) die Fluidaufnahme = 0 sind. Es werden auch in Abhängigkeit von den Versuchsrandbedingungen nicht monotone Zeitverläufe der Quelldrücke beobachtet. Diese Versuchsphase dauert zwischen einem bis zwei Monate.

An den gesättigten Proben werden dann die hydraulischen Permeabilitäten bestimmt. Zur Untersuchung der Abhängigkeit der Permeabilität vom hydraulischen Gradienten werden die einzelnen Versuchskörper nach Erreichen eines konstanten Volumenstroms je Laststufe mit anwachsenden Gradienten beaufschlagt. Diese hydraulischen Laststufen dauern zwischen drei bis vier Wochen. Es werden jeweils drei identische Versuchskörper identisch beaufschlagt. Die gemittelten Ergebnisse werden zur Validierung und Verifizierung des theoretischen Modells verwendet. Das theoretische Modell wird durch eine Inventur existierender Modelle vorbereitet. Deren Validierung erfolgt an Hand der bisher gemessenen Permeabilitäten. Die Erstellung eines numerischen Modells zur inversen Analyse der experimentellen Versuchsergebnisse ist abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Berücksichtigung der unterschiedlichen physico-chemischen Kräfte im theoretischen Modell.
- Testberechnungen mit dem inversen Modell.
- Vergleich und Bewertung der gemessenen und prognostizierten Volumenströme und Permeabilitäten.
- Erweiterung der Versuche auf nicht-expansive und natürliche Tone.
- Fortführung der Permeabilitätsversuche unter Variation der Tone, der Fluide und Initialzustände.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Depo- nietechnik Wilsnack & Partner, Lessingstr. 46, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10447
Vorhabensbezeichnung: Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2007 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 180.978,00 EUR	Projektleiter: 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

- Programmtechnische Fertigstellung des Programms für die Versuchsauswertung im dreidimensionalen Strömungsraum mit r-, φ -, z-Geometrie (ModOFP),
- Durchführung erster Beispielsimulation und Testung/Weiterentwicklung im Zusammenhang mit den Auswertungen der ersten Testversuche mit dem Oberflächenpacker,
- Beginn der Entwicklung einer datenbankgestützten Eingabeoberfläche für die Aufbereitung der Messdaten und die numerische Auswertung mit dem Programmsystem ModOFP.

Hardware Oberflächenpacker

- Bau eines Prototypen des Oberflächenpackers und der für die Messung erforderlichen Ausrüstung – Joch, Ankerkonzept, Drucksensorik, Leitungsinstallation und Druckbehälter,
- Beginn des Aufbaus einer in sich geschlossenen Messeinrichtung für Druck- und Temperaturmessung sowie Datenerfassung.

Hardware verlorener Drucksensor

- Fertigstellung des ersten Prototyps des verlorenen Drucksensors mit Sensor und Sendeeinheit,
- Fertigstellung eines Prototyps des Empfängers und des Anschlusses an den Datenlogger,
- Abstimmung des Konzeptes der Kommunikation zwischen verlorenem Sensor, Auslese-einheit, Datenlogger (Schwerpunkt: Abstimmung des Zeittaktes aller erfassten Daten).

Tests

- mit Unterstützung der GTS GmbH und der TS-Bau GmbH Beschaffung eines Blocks aus Magnesiabinder (50 x 50 x 25 cm) – Block wird verwendet für Testmessungen des Oberflächenpackers und Testmessungen für den verlorenen Drucksensor,
- Entwicklung und erfolgreicher Test eines Konzeptes für die Herstellung einer ebenen Auflagefläche für den Prototyp des Oberflächenpackers,
- erfolgreiche Durchführung erster Dichtheitstests für den Oberflächenpacker,
- Durchführung erster Handhabungsversuche und Testmessungen des Oberflächenpackers,
- Beginn der Kalibrierung der für die Versuchsauswertung relevanten Daten für die vorliegende Versuchsausrüstung,
- erste Tests mit verlorenem Drucksensor und Datenübertragung.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortsetzung des Projektes entsprechend Arbeitsprogramm (Abschnitt 2) mit den Arbeitspaketen 2 - 5.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Im Berichtszeitraum wurden keine abgeschlossenen Berichte erarbeitet. In einzelnen Abschnitten erfolgte die Fixierung der Anforderungen und Planungen für die weiteren Arbeiten. Im Rahmen des Workshops „XIV. Workshop über die „Charakterisierung von feinteiligen und porösen Feststoffen“ (Bad Soden, 18.-19.11.2008) wurden das Forschungsvorhaben und das Messkonzept unter dem Titel: „Unsteady measurements as nondestructive testing (NDT) - a method of permeability determination of surface permeabilities“ auf einem Poster und in den Abstracts zu der Veranstaltung vorgestellt.

Zuwendungsempfänger: TU Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 E 10457
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2007 bis 31.03.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 652.391,00 EUR	Projektleiter: 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

- AP1, AP2: Konzeption des numerischen Modells wurde um Cluster-Erzeugung erweitert (Zuschlagskörner).
- AP3: Arbeiten zur automatischen Generierung der Probengeometrie außerhalb PFC3D/3DEC: a) Packungsmodellierung mittels starrer Kugeln für PFC3D: Der Algorithmus zur Abbildung von

Größenverteilung und Form der Zuschlagskörner wurde weiter verbessert durch Nutzung von Formparametern aus der CPA-Analyse. Die diskreten Verteilungen von maximaler Breite und des Verhältnisses Länge zu Breite des Zuschlags wurden in den Algorithmus implementiert.

b) Packungsmodellierung mittels Polyedern für 3DEC: Die geometriebedingten Stabilitätsprobleme konnten weitgehend behoben und erste Druck-/ Zugversuche erfolgreich simuliert werden. Das Vorgehen zur Erzeugung wesentlicher Probeneigenschaften innerhalb von PFC3D (Kompaktheit, Glattheit, niedrige innere Spannungen) wurde untersucht, festgelegt und benötigte Proben erzeugt. Untersuchungen zu Rechenzeit/Speicherbedarf und eine Parameterstudie zu Einflüssen beim Druckversuch wurden vorgenommen.

Die Arbeiten zur Entwicklung von Stoffgesetzen konzentrierten sich bisher auf MgO-Bindemittel (lineares Kontaktbond-Modell). Kalibriert wurde mit einaxialem und triaxialem Druckversuch sowie Spaltzugversuch. Für alle Versuche wurde ein einheitliches Paket von FISH-Routinen entwickelt, das alle Aspekte der unterschiedlichen Versuchsabläufe umfasst (Materialeigenschaften, Anfangszustand, Versuchsablauf, Versuchsauswertung, Prozessinformationen) sowie eine Kalibrierungsstrategie.

Nach der Kalibrierung können bisher E-Modul, Poissonzahl, einaxiale und triaxiale Druckfestigkeiten sowie die Spaltzugfestigkeit mit dem gleichen Satz interner Parameter realistisch abgebildet werden, realistisch erscheinen auch die Bruchbilder.

- AP4: Versuchsprogramm für Asphaltmastix wurde fortgeschrieben und weiter umgesetzt: CPA-Analyse zur Ermittlung der Korngeometrie des Zuschlags, Versuche für Bitumen mit Feinanteil sind weitgehend abgeschlossen (jeweils Kriechkurve, Burgers-Parameter für lineares viskoelastisches Stoffgesetz bestimmt): einaxialer Druckversuch, Druck-Kriechversuch, Zug-Kriechversuch, Scher-Kriechversuch. Versuche für Asphaltmastix sind in Arbeit.
- AP5: Beton-Versuchsprogramm weitgehend abgeschlossen: CPA-Analyse zur Ermittlung der Korngeometrie, Haftscherversuche MgO-Beton auf Quarz, Triaxialversuchen bei niedrigen und höheren Manteldrücken für MgO-Bindemittel und MgO-Beton, erste Dauerlastversuche mit Beton wurden begonnen.
- AP6: Auswahl eines Sensitivitäts- und Optimierungstools: optiSLang von DYNARDO.
Aufrüstung der technischen Einrichtungen gemäß Versuchsplan und mit eigenen Kräften:
a) Automatisierung von drei Dauerlast-Versuchsständen abgeschlossen (Umrüstung, Software).
b) Schaffung eines Bruchzähigkeitsmessplatzes abgeschlossen (Konstruktion und Anfertigung der Mechanik, Messelektronik, Software).

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weiterführung Strukturanalyse/Modellentwicklung Asphalt
AP2: Abschluss Modellentwicklung MgO-Beton
AP3: weiter Routinen zur Mikrostrukturierung, Stoffgesetzentwicklung mit Schwerpunkt Asphalt, Simulationen: Einbeziehung Bruchzähigkeitstest, Druck-/Scherkriechversuche
AP4: Fortführung der Experimente für Asphalt
AP5: restliche Experimente zum MgO-Beton laut Versuchsplan (Dauerlast, Bruchzähigkeit)
AP6: Auswahl Sensitivitäts- und Optimierungstool, Kopplung, Parameterraum

5. Berichte, Veröffentlichungen

Herbst, M., Konietzky, H., Walter, K. "3D Microstructural Modeling" in: Hart, Detournay & Cundall (eds.) Continuum and Distinct Element Numerical Modelling in Geo-Engineering, Proceedings of the 1st International FLAC/DEM Symposium on Numerical Modeling, Paper 08-05, 435-441, ISBN 978-0-9767577-1-9

Auftragnehmer: Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec) GmbH, Forschungs- gelände, 85748 Garching b. München		Förderkennzeichen: 02 E 10467
Vorhabensbezeichnung: Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2007 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 407.850,00 EUR	Projektleiter: 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 Zustandsgleichungsmodul des TOUGHREACT wird weiter für eine bessere Modellierung der CO₂- und CH₄-haltigen Laugensysteme entwickelt, getestet und validiert.

In TOUGHREACT implementierten Porositäts- und Permeabilitätsbeziehungen und Kluft-breite-Permeabilitätsmodelle sowie Zweiphasenfluss-Parameter werden, wie relative Permea-bilität und Kapillardruck, 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 gemäß dem Arbeitsplan durchgeführt:

Wegen der ständig verzögerten Auslieferung der „Pitzer-Version“ des Programmes TOUGHREACT (erweiterter Open Source Code von LBNL, USA) wurde die Erstellung eines eigenen Pitzer Moduls beschlossen. Um weitere Zeitverluste zu vermeiden, wurde eine ähnliche Methodik angewendet wie in TOUGHREACT, Berkeley-Pitzer Benutzer Handbuch, beschrieben. Die Pitzer Formulierung und der von Harvie et al. vorgeschlagene Algorithmus (HMW Model) wurden programmiert und die resultierende Subroutine wurden an TOUGHREACT angepasst. Wegen des zu erwartenden Zeitaufwands der reaktiven Stofftransportrechnungen mit hoher Zahl der komponentenspezifischen Wechselwirkungs-parameter beim Pitzer-Model wurden unterschiedliche Vereinfachungsoptionen vorgesehen. Die existierende TOUGHREACT Datenbank wurde erweitert, um die temperaturabhängigen Pitzer-Parameter sowie die thermodynamischen Konstanten zu enthalten. Der Ansatz von Wolery et al. wurde für die Temperaturabhängigkeit der Pitzer-Koeffizienten im ISTec-Pitzer-Modul implementiert. Nach der Initialisierung des Programms wurden erste Validierungsarbeiten für binäre Systeme durchgeführt. Es wurde eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Aktivitätswerten erhalten. Validierungsarbeiten wurden für komplexe Mehr-Komponenten-Systeme aus der Literatur fortgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Projektarbeiten werden mit den weiteren Validierungsarbeiten des ISTec-Pitzer-Moduls für die repräsentativen Verhältnisse in einem Endlager fortgesetzt. Die Schwierigkeiten, die bei der Benutzung der Pitzer-Version aufgetreten sind, sind der Schwerpunkt der folgenden Arbeiten. Die Weiterentwicklung des Zustandgleichungsmoduls ECO2 für die geplante Anwendung im Pitzer Version Package wird aufgrund der aufgetretenen Probleme mit Vorrang bearbeitet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Die Veröffentlichungen der Projektergebnisse bei Internationalen Tagungen (z. B. EU, THMC Conference and Workshop, Luxembourg, 2009) sind geplant.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10477	
Vorhabensbezeichnung: Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2007 bis 31.03.2009		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 153.625,00 EUR		Projektleiter: Dr. Kröhn	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (HAW) in geologischen Steinsalzformationen sieht die Einbringung verglasteter HAW-Kokillen, teils auch die direkte Endlagerung von 5 m langen Brennstabkokillen in tiefen vertikalen Bohrlöchern und die direkte Endlagerung von Brennelementen in selbstabschirmenden Pollux-Behältern in horizontalen Strecken vor. Einlagerungs-Bohrlöcher und -Strecken werden für den völligen Einschluss der Abfälle im Wirtsgestein mit artgleichem Salzgrusversatz verfüllt. Anhand der bisherigen Ergebnisse kann nicht sicher genug abgeschätzt werden, welcher Kompaktionsgrad und welche Restporosität/-permeabilität erreicht werden, und welche Konsequenzen sich für Langzeitsicherheitsanalysen ergeben.

Es wird ermittelt, welche Prozessabläufe hinsichtlich des vollständigen Einschlusses eine besondere Signifikanz besitzen, und welche experimentellen Daten für verbesserte Systemanalysen bereit zu stellen sind. Ziel ist, die relevanten Prozesse bei der Konsolidierung von Salzversatz zu ermitteln und ein Arbeitsprogramm für die erforderliche Weiterentwicklung von THMC-Modellen für die Langzeitsicherheitsanalyse von HAW-Endlagern bereitzustellen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Bestandsaufnahme aller national und international verfügbaren Daten
- AP2: Orientierende THMC-Simulationen der im Nahfeld vorherrschenden gekoppelten Prozesse
- AP3: Auslegungsplanung für ergänzende Laborexperimente bei geringen Porositäten
- AP4: Auslegungsplanung für ein In-situ-Experiment zum Nachweis der langfristig erreichbaren Restporosität und -permeabilität
- AP5: Auswertung und Berichtserstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im AP 2 wurden Modellrechnungen zur ungestörten Entwicklung eines 300 m tiefen Vertikalbohrlochs in einem Endlager im Salzgestein mit CODE_BRIGHT durchgeführt. Der erste Schritt bestand dabei in der Entwicklung der rotations-symmetrischen Modellgeometrie einschließlich der THM-Randbedingungen. Des Weiteren wurde eine Tabelle entworfen, die eine umfassende standardisierte Beschreibung des Modells hinsichtlich sowohl der verwendeten Stoffgesetze als auch der zugehörigen Parameter ermöglicht. Die zugehörigen Materialeigenschaften wurden zusammengestellt und die erforderlichen Wärmeleistungsdaten für BSK3-Kokillen als Funktion der Zeit von DBE TEC zur Verfügung gestellt. Für die Modellrechnungen wurde eine 15- bzw. 40-jährige Zwischenlagerzeit angenommen.

Entsprechend dem Plan, mit einem einfachen Modell zu beginnen und die Komplexität sukzessive zu erhöhen, wurde mit der Modellierung der Temperaturentwicklung begonnen. Es zeigte sich, dass die Modellierung mit 15-jähriger Zwischenlagerzeit der Abfallbehälter hinsichtlich der erforderlichen Gitternetzauflösung und der Rechenzeiten deutlich aufwändiger ist als eine vergleichbare Rechnung mit 40 Jahren Zwischenlagerzeit.

Im zweiten Schritt wurde eine rein mechanische Rechnung durchgeführt. Die Entwicklung der Porosität ist dabei aufgrund der ähnlichen Modellgeometrien gut vergleichbar mit entsprechenden Ergebnissen aus dem BAMBUS-Projekt.

Ebenfalls abgeschlossen sind die thermo-mechanischen Modellrechnungen. Inwieweit die Ergebnisse ebenfalls mit den BAMBUS-Ergebnissen verglichen werden können, wird zurzeit geprüft.

Während des Berichtszeitraums fand ein Treffen mit den Mitgliedern des Verbundprojektes statt, das der gegenseitigen Darstellung des aktuellen Arbeitsstandes und der Diskussion des geplanten In-situ-Versuchs (AP4) diente.

Weiterhin konnten zwei Mitarbeiter der GRS an einem eineinhalb-tägigen Kurs über Theorie und Einsatz von CODE_BRIGHT bei Problemen im Salzgrusversatz von S. Olivella (UPC) mit Schwerpunkt auf den im REPOPERM-Projekt anstehenden Aufgaben teilnehmen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt. Dabei werden noch THM-Rechnungen zur gestörten Entwicklung durchgeführt und der Abschlussbericht verfasst.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10487
Vorhabensbezeichnung: Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2007 bis 31.03.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 149.212,00 EUR	Projektleiter: Herklotz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Referenzkonzept für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle (HAW) in geologischen Steinsalzformationen sieht die Endlagerung verglasteter HAW-Kokillen aus der Wiederaufbereitung in tiefen vertikalen Bohrlöchern vor. In jüngerer Zeit wird auch die direkte Endlagerung von Brennelementen in ca. 5 m langen Brennstabkokillen in tiefen vertikalen Bohrlöchern diskutiert. Diese Einlagerungsbohrlöcher sollen im Hinblick auf den langfristig vollständigen Einschluss der Abfälle im Wirtsgestein mit artgleichem Salzgrusversatz verfüllt werden.

Auf der Grundlage der vorliegenden Kenntnisse und aktuell zur Verfügung stehenden Modelle und Codes soll die Signifikanz einzelner Prozesse im Nahbereich eines HAW-Endlagers im Hinblick auf den vollständigen Einschluss der radioaktiven Abfälle im Wirtsgestein und damit der Langzeitsicherheit des Endlagers (auf der Grundlage der im Projekt ISIBEL aktuell erarbeiteten Ausgangsbasis) weiterführend überprüft werden. Theoretische Stoffansätze für trockenen Salzgrus wurden im Rahmen des BAMBUS-Projektes entwickelt und für Porositätsbereiche zwischen 10 % und 35 % kalibriert. Aufbauend auf bisher vorliegenden Labor- und In-situ-Messergebnissen (TSS, DEBORA) ist es Ziel dieses Vorhabens, ein besseres Verständnis der komplexen Prozesse im Salzgrusversatz zu erlangen und eine belastbare Stoffgesetzanpassung im Bereich sehr geringer (Rest-)Porositäten unter In-situ-Randbedingungen zu erstellen.

Dieses komplexe Thema wird gemeinsam bearbeitet als Verbundprojekt von BGR, GRS und DBE Technology.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das nachfolgende Arbeitsprogramm ist zur Erreichung der Vorhabensziele geplant.

AP1: *Bestandaufnahme aller national und international verfügbarer Daten*

(Bearbeiter: BGR, DBE TEC, GRS)

AP2: *Orientierende THMC-Simulationen der im Nahfeld vorherrschenden gekoppelten Prozesse*

(Bearbeiter: GRS)

AP3: *Auslegungsplanung für ergänzende Laborexperimente bei geringen Porositäten*

(Bearbeiter: BGR)

AP4: *Auslegungsplanung für ein (ggf. zeit-skaliertes) In-situ-Experiment zum Nachweis der langfristig erreichbaren Restporosität und -permeabilität*

(Bearbeiter: BGR, DBE TEC, GRS)

AP5: *Auswertung und Berichterstellung*

(Bearbeiter: BGR, DBE TEC, GRS)

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Die Arbeiten zum AP1 wurden im vorangegangenen Berichtszeitraum abgeschlossen und in einem gemeinsam von BGR, GRS und DBE Technology GmbH erstellten Zwischenbericht „Hydraulische und mechanische Eigenschaften von stark kompaktiertem Salzgrus“ dokumentiert.

AP4:

Thermo-mechanisch gekoppelte Berechnungen zur Salzgruskompaktion in einem Einlagerungsbohrloch (speziell im Bereich des Bohrlochverschlusses) unter Variation der Lage des Einlagerungsbohrloches im Einlagerungsfeld sowie der geometrischen Parameter im Bohrlochverschlussbereich wurden durchgeführt. Aus den Ergebnissen dieser Berechnungen wurden Eingangsbedingungen auf eine potentielle Versuchsanordnung mit zweigeteiltem Erhitzerelement adaptiert und das Temperaturfeld eines langen Bohrloches mittels kurzen (regelbaren) Quellen modelliert. Das bisherige Konzept der Bohrlochlagerung sah eine reine Salzgrusschüttung für den Bohrlochstopfen vor. Ein Ergebnis der aktuellen Projektphase ist, dass dieses Konzept zwar den Anforderungen des Strahlenschutzes und der Betriebssicherheit genügt, Fragen im Hinblick auf die Nachweisführung im Langzeitsicherheitsnachweis jedoch offen sind. Daher wurde mit dem Einsatz eines Kerns aus Steinsalz (Salzformstein) und der Verfüllung des verbliebenen Ringraumes bereits eine Modifikation des Konzeptes vorgeschlagen. Es konnte numerisch gezeigt werden, dass die Bohrlochkonvergenz und somit auch die Versatzkompaktion im Bohrlochverschlussbereich durch eine gezielte Erhitzersteuerung (d. h. ein Überhitzen im zulässigen Umfang; < 200 °C an der Salzkontur) in der Anlaufphase des Versuches beschleunigt werden können. Die Zeitdauer bis zum Erreichen von Restporositätswerten kleiner 8 % im Verschlussbereich kann somit verkürzt werden und wird innerhalb eines Jahres liegen. Eine daran anschließende Erhitzerphase simuliert repräsentative, thermo-mechanische Randbedingungen der Einlagerungssituation eines tiefen (< 300 m) Bohrlochs.

AP5:

Planmäßig wurden in diesem AP innerhalb des Berichtszeitraumes keine Arbeiten durchgeführt.

Die Ergebnisse des noch laufenden Forschungsprojektes REPOPERM haben deutlich gemacht, dass der Kenntnisstand bezüglich des thermo-hydro-mechanischen Verhaltens von Salzgrus-Schüttversatz bei der Einlagerung von wärmeentwickelnden Abfällen nicht ausreichend abgesichert ist. Gemeinsam mit den beteiligten Projektpartnern wurde eine Projektskizze für die anschließende Projektphase REPOPERM 2 vorbereitet, welche dem Projektträger zeitnah vorgelegt wird.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Fortführung der Arbeiten ist in Übereinstimmung mit der Vorhabensplanung vorgesehen. Gemäß dem aktuellen Zeitplan ist für 2009 bis zum Projektabschluss geplant:

- Erstellen und Übergabe einer gemeinsamen Projektskizze zu REPOPERM 2 aller beteiligten Projektpartner,
- Fortführung der Auslegungsplanung eines In-situ-Versuches und Erstellen des generellen Messkonzeptes für den Großversuch,
- Auswertung der erzielten Ergebnisse, hinsichtlich der erreichten Teilziele und des Gesamtziels, welche Inhalte als abgesichert angesehen werden können und an welchen Stellen die Stoffmodelle mit dem In-situ-Versuch geprüft werden können,
- Erstellen eines gemeinsamen Abschlussberichtes aller Institutionen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10498
Vorhabensbezeichnung: Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz (Vorprojekt) – Kurztitel: VIRTUS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2008 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.05.2008 bis 30.06.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 177.970,00 EUR	Projektleiter: Dr. Herbert	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Um sicherzustellen, dass die nationalen Kompetenzen zur Errichtung eines Endlagers für hochradioaktive Abfälle dem internationalen Stand von Wissenschaft und Technik entsprechen und somit zur Entwicklung eines belastbaren Sicherheitsnachweises für die Salzoption beitragen, ist es erforderlich, das in 30 Jahren Untertageforschung im Steinsalz sowie das im Rahmen der internationalen Kooperationen erworbene Wissen zu erhalten. Dafür sollen die bisher in der Untertageforschung zur Salzoption erzielten Ergebnisse in einer zusammenfassenden Dokumentation zusammengetragen werden. Diese soll die Basis eines **Virtuellen Deutschen Untertagelabors im Steinsalz (VIRTUS)** bilden, das sowohl die numerische Simulation eines Untertagelabors gestattet, als auch über eine Visualisierung der Ergebnisse der Simulationen zu einer Verbesserung des Verständnisses der ablaufenden Prozesse beim forschenden Wissenschaftler und bei der interessierten Öffentlichkeit führt.

Das vorliegende Vorhaben ist ein Verbundprojekt der Partner GRS und BGR. Es stellt ein Vorprojekt dar, in welchem die Realisierbarkeit der gesteckten Ziele geprüft werden und das Hauptprojekt vorbereitet werden soll.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Dokumentation

AP1.1: Vorbereitung der Dokumentation zur Untertageforschung im Steinsalz

AP1.2: Entwurf einer geeigneten Datenbankstruktur

AP2: Definition des virtuellen Untertagelabors

AP2.1: Festlegung eines generischen geologischen Aufbaus (nur BGR)

AP2.2: Festlegung der URL-Auslegung

AP2.3: Festlegung von Experimenten und von Modell- bzw. Modellierungsdetails

AP2.4: Vorbereitung der Software-Entwicklung

AP3: Entwicklung des Arbeitsprogramms für das Hauptprojekt

AP4: Vorbereitung und nationale Abstimmung der Beteiligung an einem europäischen URL-Netzwerk

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Eine Liste der endlagerbezogenen In-situ-Experimente aus Deutschland, Frankreich und USA wurde erstellt. Erfasst wurden Experimente aus den Bergwerken Asse, Bernburg, Hope, ERAM, Hattdorf, Siegfried Giesen, Amelie-Mine und WIPP. Die Liste enthält die Zielsetzung der Versuche, den Zeitraum der Versuchsdurchführung, die Projektleiter und die aus den Experimenten hervorgegangenen Berichte und Veröffentlichungen.
- Eine Liste der endlagerrelevanten Prozesse, die mit den Programmen Code Bright und Jife modellierbar sind und visualisiert werden sollen, wurde erstellt. Dazu gehört eine weitere Liste mit den für die Modellierung erforderlichen Parametern, die von den o. g. Codes verwendet werden.
- Es wurden Leitexperimente definiert, die im Hauptprojekt modelliert und visualisiert werden sollen.
- Für die Erfassung der benötigten Daten und Parameter wurde eine Datenbankstruktur entwickelt.
- Für die Visualisierung der Salzstruktur, des Untertagelabors und der in den Leitexperimenten zu modellierenden Prozesse hatten sich die Projektpartner GRS und BGR zunächst auf das Programm Open Geo geeinigt. Mit Open Geo hat BGR bereits ein geologisches Modell erstellt. Zurzeit ist noch unklar, ob es bei der Visualisierungssoftware bleiben wird oder nicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der verbleibenden Projektlaufzeit werden sich GRS und BGR auf die im Hauptprojekt einzusetzende Visualisierungssoftware einigen. Die Arbeiten an der Datenbankstruktur werden abgeschlossen und dokumentiert. Die im Hauptprojekt zu leistenden Arbeiten werden im Detail definiert und kalkuliert. Der Abschlussbericht des Vorprojektes wird erstellt und der Antrag für das Hauptprojekt wird vorbereitet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		Förderkennzeichen: 02 E 10508
Vorhabensbezeichnung: Machbarkeitsstudie zur Vorbereitung eines 2-Bohrloch-Erhitzerversuches im URL Mont Terri, Schweiz „MACH-2“		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2008 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 111.291,00 EUR	Projektleiter: Jobmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen von Auslegungsberechnungen zur Planung eines Endlagers in einer Tonformation in Deutschland wurde ein Einlagerungs- und Barrierenkonzept entwickelt, das es ermöglicht, auch stark wärmeentwickelnde Abfälle mit brauchbaren Zwischenlagerzeiten in Tonformationen einzulagern. Das Konzept beruht auf der Einlagerung wärmeentwickelnder Abfälle in vertikalen Bohrlöchern, die je nach Behälterttyp einen definierten Abstand zueinander haben. Dieses Konzept soll in-situ unter repräsentativen thermischen Bedingungen getestet und die Plausibilität der bisherigen Auslegungsberechnungen überprüft werden.

Ziel dieses Vorhabens ist es, die Machbarkeit eines 2-Bohrloch-Erhitzerversuches im Maßstab 1:1 hinsichtlich technisch-wissenschaftlicher Aspekte im Mont Terri URL zu untersuchen. Dabei soll aufgezeigt werden, unter welchen Bedingungen die Realisierung eines solchen Demonstrationsversuches zur Einlagerung in vertikalen Bohrlöchern machbar ist. Eine detaillierte Versuchsplanung, ein Mess- und Instrumentierungskonzept und eine Zeit- und Kostenschätzung auf Basis konkreter Angebote ausgewählter externer Firmen sollen die Grundlage für die Bewertung der Durchführbarkeit des Versuches bilden.

Der geplante in-situ Versuch könnte im Mont Terri URL durchgeführt werden. Im Laufe des Jahres 2008 wurde dort ein neuer Versuchsstollen inklusive einiger Experimentiernischen aufgeföhren. Das derzeitige Versuchskonzept sieht vor, zwei vertikale Einlagerungsbohrlöcher mit zwei Dummykokillen (elektr. Erhitzer) zu bestücken und mit einem definierten Buffermaterial zu versiegeln. Der Versuch soll mit ausreichend Sensorik bestückt werden, um die gegenseitige THM-Wechselwirkung beider Einlagerungsbohrlöcher in der geotechnischen Barriere und im Wirtsgestein zu beobachten und durch begleitende numerische Berechnungen zu analysieren.

Diese Studie wird in Kooperation mit der GRS Braunschweig durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Designberechnungen

AP2: Instrumentierungskonzept

AP3: Planungsunterlagen und Berichtserstellung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

Eine wesentliche Grundlage für die Versuchskonzeption bilden Designberechnungen. Diese dienen zur Bestimmung einer zweckmäßigen Versuchskonfiguration, um im Versuchszeitraum aussagekräftige Ergebnisse zu bekommen. Sie dienen auch dazu, sinnvolle Sensorpositionen zu bestimmen und die notwendigen Messbereiche und Auflösungsvermögen zu bestimmen, um aussagefähige Messergebnisse erzielen zu können.

Im Berichtszeitraum wurden die Designberechnungen komplett abgeschlossen und in einem Technischen Bericht dokumentiert. Die wesentlichen Ergebnisse lassen sich wie folgt zusammenfassen: Um die Auslegungstemperatur von 100 °C im Bentonit-Buffer nicht zu überschreiten, sind Erhitzerleistungen von ca. 970 W (Erhitzer 1) und 710 W (Erhitzer 2) notwendig. Diese Leistungen beziehen sich auf einen Abstand der Erhitzerbohrungen von 6 m. Bei diesem Abstand werden an der Nachbarbohrung im angedachten Versuchszeitraum Temperaturerhöhungen erreicht, die auch in einem realen Endlager an einer Einlagerungsbohrung zu erwarten sind, allerdings zu späteren Zeiten.

Die Porenwasserdrücke erreichen in der jeweiligen Anfangsphase der Erhitzung Werte von maximal 3 MPa. Die maximalen Gesteinsverschiebungen liegen im Bereich von 8,5 mm im Bereich der Sohle der Experimentiernische. Das zweite Bohrloch konvergiert im Zeitraum seiner Offenhaltung um ca. 1,5 mm wobei sich eine heterogene, nicht symmetrische Verformung einstellt.

AP2:

Auf Basis der im AP1 durchgeführten Designberechnungen wurde ein Mess- und Instrumentierungskonzept in Zusammenarbeit mit dem Projektpartner GRS entwickelt. Da die Temperaturentwicklung die treibende Kraft für die ablaufenden THM-Prozesse ist, wurde ein Raster von Beobachtungsbohrungen erstellt, mit dem sich die dreidimensionale Temperaturentwicklung in der Umgebung der Erhitzer in ausreichendem Maße verfolgen lässt. Damit soll es möglich werden, die aufgrund der Schichtung anisotrope Wärmeausbreitung messtechnisch zu erfassen, zu visualisieren und modellhaft zu analysieren. Durch eine dichte Instrumentierung soll der Einfluss lokaler Heterogenitäten identifiziert und korrigiert werden im Sinne einer detaillierten Parameteridentifizierung und Stoffgesetzanpassung.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Verfeinerung des Messkonzeptes und Festlegung von Sensorpositionen

AP3: Erstellung eines technischen Berichtes über das entwickelte Messkonzept als Grundlage für eine spätere Ausführungsplanung zur Erstellung der Erhitzer- und Beobachtungsbohrungen sowie zur geotechnischen Instrumentierung.
Erstellung des Abschlussberichtes in englischer Sprache.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10518
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Realistitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) – TV1		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2011	Berichtszeitraum: 01.10.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 886.153,00 EUR	Projektleiter: 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 Radionuklidisorption 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-Experiments, 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: - Erstes Arbeitsgespräch mit FZD in Braunschweig zur Festlegung der nächsten Arbeitsschritte.
- Beschreibung des betrachteten Systems und Entwicklung der Methodik.
- Vorauswahl prioritär zu betrachtender Elemente.
- AP3: - Diskussion der zu betrachtenden Klimazustände und Modelle für die Übergänge.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: - Arbeitsgespräch mit FZD zur Auswahl der für die weitere Projektphase zu betrachtenden Element/Sedimentsysteme und zur Erarbeitung eines Konzepts für den pH-Transport.
- Durchführung von 1D-Modellrechnungen mit Phreeqc zur Erarbeitung eines Konzepts für den pH-Transport bei Meerwassertransgression.
- Festlegung des experimentellen Programms auf Basis der Datenlage für die ausgewählten Elemente/Mineralphasen.
- AP2: - Abstimmung mit dem Steinbeis-Institut zur Festlegung der Arbeiten zur Erweiterung von r^3t , insbesondere zur Implementation des Kd-Abrufs in Abhängigkeit relevanter Grundwasserparameter.
- AP3: - Erstellung der Modelle für die Strömungsrechnungen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstr. 128 (B6), 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 E 10528
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Realistitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) – TV2		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2011	Berichtszeitraum: 01.10.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 214.575,00 EUR	Projektleiter: 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 Sorptionmodelle 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-Experiments, 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: Beschreibung des betrachteten Systems und Entwicklung der Methodik
Literaturrecherche zur geologischen Referenzsituation, Einarbeitung in geochemischen Speziationscode PHREEQC für smart- K_d Berechnung

AP2: Zusammenstellung von Literatur zu numerischen Modellen

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Zusammenstellung der thermodynamischen Datenbasis und der Einflussgrößen einschließlich deren Bandbreiten

AP2: Modellentwicklung zur Abschätzung der Variation der chemischen Stoffgrößen

AP4: Dokumentation der Auswahl standortspezifischer und thermodynamischer Einflussgrößen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10538
Vorhabensbezeichnung: Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen – Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2008 bis 31.12.2010	Berichtszeitraum: 01.05.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 907.527,00 EUR	Projektleiter: 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 Fe²⁺ 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

Die bisherigen Arbeiten haben sich auf die Beschaffungen und den Aufbau der Versuchseinrichtung für die Untersuchungen aus AP1 konzentriert. Es wurden insgesamt acht neue Druckzellen beschafft, mit Sensoren bestückt und in Betrieb genommen. Erste Vorversuche zur Handhabung des extrem sensiblen Versuchsaufbaus, bei dem jede Kontamination mit Luftsauerstoff ausgeschlossen werden muss wurden über drei Monate geführt und erfolgreich abgeschlossen. Es konnte gezeigt werden, dass keine Undichtigkeiten auftraten und entsprechend die FeCl₂-haltige Versuchslösung nicht durch Artefakte verfälscht wird. Als erste Ergebnisse aus den Borversuchen konnte die Permeabilität kompakterer Probekörper mit einer Dichte von 1,6 g/cm³ im Kontakt mit Opalinuston-, NaCl- und IP21-Lösung bestimmt werden. Die gemessenen Werte lagen bei 1,94E-14, 1,07E-12, bzw. bei 1,28E-11 m². Damit wurde erneut bestätigt, dass das Quellvermögen des Bentonits mit zunehmender Konzentration der Lösung abnimmt und mit Q-Lösung vergleichsweise nur noch gering ist. Im Anschluss an die Permeabilitätsmessungen mit den o. g. reinen Lösungen wurde diesen Lösungen 10-1 mol/l FeCl₂ zugemischt und die Probekörper damit durchflutet. Durch die Oxidation des FeCl₂ im Porenraum des Bentonits kam es, wie erwartet, zu einer spontanen Ausfällung von Fe-Hydroxiden und entsprechend zu einer deutlichen Reduzierung der Permeabilität. Diese Versuche laufen noch. Endgültige Permeabilitätswerte stehen noch nicht zur Verfügung, werden aber in Kürze erwartet.

Die Arbeiten zu AP2 können erst begonnen werden, wenn die Ergebnisse aus AP1 vorliegen, da mit den gleichen Proben die Versuche zur Bestimmung von Diffusionskonstanten weiterlaufen sollen.

Die Planung der Arbeiten für AP3 ist im Gang.

Die Versuche zu AP4 werden in Greifswald durchgeführt und laufen parallel. Mit den Arbeiten wurde begonnen.

Zu AP4 ist eine Analyse der Prozesse erfolgt, die bei den Wechselwirkungen von Bentonit mit Wasser und Lösungen eine Rolle spielen. Gleichzeitig wurde untersucht, welche dieser vielfältigen Prozesse bisher modellierbar sind und welche nicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortsetzung der Arbeiten zu AP1.

Die Vorversuche zu AP3 werden in Angriff genommen.

Die Versuche zu AP4 werden fortgesetzt.

Zu AP5 wird eine Strategie zur Programmentwicklung erarbeitet, die die Berücksichtigung der chemischen Wechselwirkungen und die Ableitung des Quelldrucks während der Aufsättigung erlaubt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	Förderkennzeichen: 02 E 10548
Vorhabensbezeichnung: Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse	
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2008 bis 31.07.2012	Berichtszeitraum: 01.08.2008 bis 31.12.2008
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.630.345,00 EUR	Projektleiter: Dr. Noseck

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens werden die wissenschaftlichen Ergebnisse von experimentellen und theoretischen FuE-Vorhaben im Hinblick auf ihre Berücksichtigung in Modellvorstellungen und Modelldaten für Langzeitsicherheitsanalysen ausgewertet. Beantragte und laufende Projekte werden hinsichtlich ihrer Relevanz für die Bewertung der Langzeitsicherheit und die Verwendung in einem Safety Case überprüft.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

TA1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

- Verfolgung und Bewertung internationaler Entwicklungen zu offenen Fragen bei Langzeitsicherheitsnachweisen und Einbringung nationaler Interessen in internationale Aktivitäten.
- Weiterentwicklung methodischer Vorgehensweisen in der Langzeitsicherheitsanalyse.
- Auswertung neuer wissenschaftlicher Ergebnisse und Aufbereitung zur Verwendung in Instrumentarien für Langzeitsicherheitsanalysen.

TA2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

- Untersuchung der Auswirkungen klimatischer Veränderungen auf Prozesse in der Geosphäre und Biosphäre und Abschätzungen des Einflusses auf die Langzeitsicherheit potentieller deutscher Endlager.
- Untersuchung natürlicher Analoga: Abschließende Arbeiten am Analog-Standort Ruprechtov zur Überprüfung des konzeptionellen Modells und des Einflusses von Veränderungen der Redox-Bedingungen.
- Weiterführende Untersuchungen zur Aufsättigung von Bentonit-haltigen Buffermaterialien.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA1:

- Teilnahme am jährlichen IGSC-Meeting und am Kick-off Meeting der neuen IGSC-Initiative SAMeth.
- Strukturierung der Kapitel zu den Themen „Indikatoren“ und „Behandlung von Unsicherheiten“ im Rahmen der IGSC-Initiative SAMeth.
- Prüfung und Korrektur der ersten Beiträge zum Leitfaden für die Erstellung von Oberflächenkomplexmodellen und Teilnahme am 2. Treffen des Management Boards zum NEA-Sorptionsprojekt III.
- Teilnahme an der Sitzung des Arbeitskreises Szenarientwicklung.
- Planung der Vorgehensweise zur Ermittlung aktualisierter HAW-Inventare.

TA2:

- Vorstellung von Ergebnissen zum Einfluss klimatischer Veränderungen auf Strömung und Transport im Deckgebirge eines Endlagers auf dem Workshop des BfS „Use of reference biospheres to prove long-term safety of repositories for radioactive waste“.
- Planung der Arbeiten zur Berücksichtigung von Klimaübergängen in Strömungs-, Transport und Biosphärenmodellen und Abstimmung mit der GSF-Neuherberg über die Arbeiten.
- Durchführung von zwei Arbeitstreffen mit NRI, CTU, UH und GFZ. Festlegung der Lage der neuen Bohrungen und detaillierte Ausarbeitung des Beprobungs- und Laborprogramms.
- Entwicklung des Konzepts für den geplanten Bentonit-Aufsättigungsversuch und Beginn der Konstruktion der Messzellen. Teilnahme am Workshop der Task Force EBS am 12./13. November in Hergiswil. Diskussion des Konzepts mit den Workshop-Teilnehmern.
- Ableitung und Zusammenstellung grundlegender Zusammenhänge von charakteristischen Größen zur Beschreibung eines Bentonit-Sand-Gemischs.

4. Geplante Weiterarbeiten

TA1:

- Teilnahme an der jährlichen Sitzung des RWMC.
- SAMeth-Arbeitsgruppe. Erstellung von Textentwürfen für vier Teilkapitel. Koordinierung der Arbeiten für die Themen „Indikatoren“ und „Behandlung von Unsicherheiten“.
- Arbeitsgespräch mit GNS. Zusammenstellung der vorhandenen Informationen und Ermittlung von aktualisierten Radionuklidinventaren für HAW-Kokillen.

TA2:

- Erstellung von Modellen für die Berücksichtigung von Klimaübergängen in Strömungsrechnungen und Durchführung erster Strömungsrechnungen. Implementierung der Übergabe von transienten Strömungsfeldern von d^3f an r^3t .
- Durchführung einer Bohrkampagne am Standort Ruprechtov und Verteilung von Probenmaterial an die beteiligten Institutionen. Durchführung von Grundwasseruntersuchungen zur Überprüfung, ob bereits Veränderungen durch Sauerstoffeintrag aufgetreten sind.
- Analyse der Mikrostruktur der Bentonit-Sandgemische anhand der abgeleiteten Zusammenhänge und charakteristischen Größen und Überprüfung der im Code VIPER implementierten Gleichungen, um die Modellergebnisse des Benchmark THM 2.1 zu verbessern. Fertigstellung der Messzellen und Beginn der Aufsättigungsversuche.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 E 10558	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP1 - Kurztitel A-Dur -			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2012		Berichtszeitraum: 01.10.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.074.250,00 EUR		Projektleiter: Dr. Fein	

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

Es ist die Aufgabe der Projektleitung mit den Mitgliedern des Verbundprojektes einen Kooperationsvertrag, der das Zusammenarbeiten regelt, abzuschließen. Dieser Vertrag ist formuliert und befindet sich zurzeit zur Abstimmung bei den Verwaltungen der Universitäten bzw. des Helmholtz-Zentrums für Umweltforschung.

Es wurde begonnen, Literatur von Nagra und SKB zu sichten, um eventuelle Testfälle zu identifizieren.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Senckenberganlage 31, 60325 Frankfurt		Förderkennzeichen: 02 E 10568
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP2 - Kurztitel A-Dur -		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2012	Berichtszeitraum: 01.10.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 548.396,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Wittum	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projektes ist es, die Entwicklung eines numerischen Lösers für das mesoskalige Referenzmodell (AP3), die Implementierung eines adaptiven numerischen Mehrskalenlösers 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 Softwarewerkzeuge 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 Lösers für das mesoskalige Referenzmodell

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

AP7: Algorithmen und Softwarewerkzeuge zur inversen Modellierung und Schätzung der relevanten Parameter des Strömungsproblems

AP9: Benchmarking und Vergleichsrechnungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP3: Entwicklung eines numerischen Löser für das mesoskalige Referenzmodell
Vorbereitende Arbeiten wurden durchgeführt.

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

Um eine möglichst nahtlose Integration des Dimensionsübergangs in das Mehrgitterverfahren zu gewährleisten, haben wir uns gegen eine geometrische Dimensionserhöhung entschieden. Stattdessen repräsentieren wir jede Kluft bereits äquidimensional im Grobgitter. Wird eine Kluft als niederdimensional betrachtet, so wird statt auf dem volldimensionalen Gitter auf einer virtuellen niederdimensionalen Zwischenschicht diskretisiert. Besonderes Augenmerk muss dabei auf die Verfeinerung von als niederdimensional betrachteten Klüften gelegt werden. Um die geometrische Qualität der Kluftelemente zu verbessern, wird in der Kluft zunächst nur anisotrop (entgegen der Kluftlänge) verfeinert. Erst ab einer gewissen Gitterfeinheit wird eine Kluft schließlich als äquidimensional betrachtet. Dies äußert sich in einer anderen Art der Diskretisierung sowie in der nun vollständigen (isotropen) Verfeinerung. Ob ein Kluftelement niederdimensional oder äquidimensional behandelt wird, kann über den Quotienten der Seitenverhältnisse festgestellt werden. Wir haben bereits mit der Implementierung dieses adaptiven Übergangs von niederdimensionaler zu äquidimensionaler Modellierung der Klüfte in unserem Simulationswerkzeug UG begonnen und beschäftigen uns aktuell mit den Verfeinerungsalgorithmen im 2-dimensionalen Fall.

Neben der Dimensionsadaptivität haben wir uns außerdem der adaptiven Verfeinerung von Gittern zur Erstellung von Mehrgitterhierarchien gewidmet. Zur Steigerung der Effizienz bei adaptiver Verfeinerung auf massiv parallelen Systemen haben wir die Entwicklung von Verfeinerungsalgorithmen mit hängenden Knoten angestoßen. Eine lauffähige Version für Dreiecksgitter haben wir im Rahmen des Projektes bereits implementiert. Diese beschränkt sich zunächst auf einen Prozessor. Besonderen Wert wurde dabei darauf gelegt, dass die maximale Anzahl an hängenden Knoten auf einer Kante frei spezifizierbar ist. Auch Grundlagen für die Verfeinerung auf gemischten, unstrukturierten Gittern in 2 und 3 Dimensionen wurden gelegt. Wir haben uns für die Implementierung dieses Verfahrens entschieden, da bei parallelen Systemen von einem weitaus geringeren Kommunikationsbedarf zwischen einzelnen Prozessoren als beispielsweise bei der erweiterten "Rot-Grün"-Verfeinerung ausgegangen werden kann. Auch sind die geometrischen Eigenschaften der erzeugten Abschlusselemente besser.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		Förderkennzeichen: 02 E 10578
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP3 - Kurztitel A-Dur -		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2012	Berichtszeitraum: 01.10.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 290.377,00 EUR	Projektleiter: 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 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

Mit den ersten vorbereitenden Aktivitäten wurde begonnen.
Ergebnisse liegen noch keine vor.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die nächsten Schritte werden sein:

- Definition des feinskaligen Referenzmodells und Generierung des Kluftnetzwerkes
- Implementierung einzelner Klüfte in 3D und Reduktion auf effektive 2D Klüfte
- Definition der Benchmarking- und Vergleichsrechnungen zusammen mit der Gruppe Kolditz

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung GmbH - UFZ, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 E 10588
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP4 - Kurztitel A-Dur -		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2012	Berichtszeitraum: 01.10.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 209.743,00 EUR	Projektleiter: 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.

Das Teilprojekt AP8 beschäftigt sich mit der Unsicherheitsanalyse. Dabei geht es um eine Quantifizierung der Unsicherheiten, d. h. Vorhersagegenauigkeit von Modellprognosen, für heterogene poröse Medien.

Im Rahmen des Teilprojekts AP9 wird eine systematisch Suite von Testbeispielen entwickelt, um die Genauigkeit und den Geltungsbereich der numerischen Modelle zu prüfen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Jede Prozesssimulation in Kluftgesteinen ist a priori mit Unsicherheiten behaftet. Daher ist es von großer Bedeutung, den Modellfehler abschätzen zu können. Die Ursachen für Unsicherheiten sind zahlreich, z.B. keine genaue Kenntnis der strukturgeologischen Bedingungen aufgrund von Erkundungsproblemen, Parametrisierungsproblemen und Skalenproblemen. Für die Unsicherheitsanalyse soll das im Bereich „Contaminant Hydrology“ erfolgreich entwickelte und eingesetzte Konzept des „Virtuellen Aquifers“, das eine Kombination von geostatistischen Methoden mit systematischen Prozesssimulationen ist, adaptiert werden. Anhand der statistischen Eigenschaften des realen Systems wird ein virtuelles System, basierend auf dem mesoskaligen Referenzmodell von AP2 generiert; dieses dient als Bezugssystem für Prozessstudien. Auch wenn die Realität (die spezielle Realisierung) nicht (niemals) bekannt ist, kann der Modellfehler oder der Erkundungsfehler bestimmt werden. Das Konzept des „Virtuellen Aquifers“ soll in diesem Vorhaben auf „Fractured Aquifers“ erweitert werden. Sollen Unsicherheiten umfassend analysiert werden, müssen auch schnelle numerische Lösungen mit geringerer Genauigkeit herangezogen werden. In diesem AP sollen daher neben klassischen Lösern auch Random-Walk/Particle-Tracking (RW/PT) Verfahren Anwendung finden. Für die Bewertung der Genauigkeit und der Zuverlässigkeit numerischer Modelle ist die Entwicklung von systematischen Bechmark-sammlungen von großer Wichtigkeit. Dabei ist folgende Systematik von Testaspekten vorgesehen:

- Kluft-Matrix Systeme: Kluft-Matrix Interaktion, Kluftsysteme, Kluft-Matrix-System
- Kopplung von Prozessen (systematisch zunehmende Komplexität)
- Methoden-Vergleiche: Verschiedene numerische Verfahren (FVM, FEM, MFEM, hybride Methoden), Numerische (PDE-basierte) und Partikel-Methoden

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Projektarbeit hat begonnen. Dabei kann auf eine Reihe von Vorarbeiten unmittelbar aufgebaut werden, die im Folgenden kurz aufgelistet sind:

- Entwicklung hybrider (numerisch-analytischer) Verfahren zur Simulation von Matrixdiffusionsprozessen in klüftig-porösen Medien (McDermott et al. 2009),
- Entwicklung von RWPT Verfahren für heterogene poröse Medien (Park et al. 2008),
- Entwicklung von Verfahren für die Unsicherheitsanalyse gekoppelter Prozesse in heterogenen porösen Medien (Watanabe et al. 2009),

4. Geplante Weiterarbeiten

In der Einarbeitungsphase des wissenschaftlichen Mitarbeiters Dr. Taron ist vorgesehen, geeignete Testbeispiele (Benchmarks) für reaktive Transportprozesse in heterogenen und klüftig-porösen Medien entsprechend der im Antrag aufgeführten Beispielsammlung zu entwickeln.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Vorarbeiten, welche die Basis für die geplanten Forschungsarbeiten bilden.

Bauer S, Beyer C, Chen C, Gronewold J, Dietrich P, Kolditz O (2008): Virtueller Aquifer (VA) - Computergestützte Bewertung von Erkundungs-, Sanierungs- und Monitoringstrategien im Hinblick auf das "Natural Attenuation" (NA) und "Enhanced Natural Attenuation" (ENA) - Potential kontaminierter Böden und Grundwässer, Abschlussbericht, BMBF Vorhaben, FK 0330512.

Kolditz O and Shao H (eds.) (2009): GeoSys - Developer Benchmark Book, V4.9, Internet Report, <https://geosys.ufz.de> (certificate based), Helmholtz Centre for Environmental Research (UFZ) and Federal Institute for Geosciences and Natural Resources (BGR).

McDermott CI, Walsh R, Mettier R, Kosakowski G and Kolditz O (2009): Hybrid analytical and finite element numerical modeling of mass and heat transport in fractured rocks with matrix diffusion, Computational Geosciences, DOI: 10.1007/s10596-008-9123-9.

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.

Wang W, Kosakowski G and Kolditz O (2009): A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media. Computers & Geosciences, DOI: 10.1016/j.cageo.2008.07.007.

Watanabe N, McDermott C, Wang W, Taniguchi T, Kolditz O (2009): Uncertainty analysis of thermo-hydro-mechanical processes in heterogeneous geothermal reservoirs. Geothermics, submitted.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 E 10598
Vorhabensbezeichnung: Externer unabhängiger Review des im Vorhaben Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW (ISIBEL) erstellten FEP-Katalogs		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2008 bis 30.09.2012	Berichtszeitraum: 01.10.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 52.847,00 EUR	Projektleiter: 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

- AP1: Gegenwärtig erfolgt der Review des FEP Katalogs in seiner Gesamtheit durch die beteiligten Experten (Phase 1).
- AP2: Im Kick-Off-Meeting haben die Autoren des FEP-Katalogs ihre Intentionen den beteiligten Reviewern dargelegt. Die Reviewer ihrerseits haben ihr weiteres Vorgehen mit den Autoren koordiniert.
- AP3: Aufgrund des frühen Stadiums des Projektes sind noch keine Veröffentlichungen erfolgt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Ein Treffen ist für Anfang Februar geplant, in dem erste Ergebnisse zur Gesamtgestaltung des FEP-Kataloges vorgelegt werden. Weiterhin ist geplant, den einzelnen FEPs die jeweiligen Bearbeiter zuzuweisen, die ihr Expertenwissen bei Beurteilung des entsprechenden Eintrages mit einbringen, um damit die Phase der Einzelauswertungen der Einträge des FEP-Kataloges einzuleiten (Phase 2). Zur Klärung offener Fragen sind Einzelkonsultationen bei den Mitgliedern des Autorenteam des FEP-Kataloges geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: Öko-Institut e.V. - Instiut für angewandte Ökologie, Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg		Förderkennzeichen: 02 E 10628
Vorhabensbezeichnung: Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2008 bis 28.02.2010	Berichtszeitraum: 01.09.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 199.347,00 EUR	Projektleiter: 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 durchgeführten Arbeiten betreffen die Arbeitspakete AP1 und AP2:

Es wurde eine Recherche und Zusammenstellung nationaler und internationaler Erfahrungen durchgeführt. Für ausgewählte Branchen sowie anhand einzelner Endlagerprojekte wurden Hinweise auf Anwendungsbereiche des Safety Case sowie die Bedeutung sozialwissenschaftlicher Faktoren in den jeweiligen Zusammenhängen zusammengestellt.

Die Bestimmung sozialwissenschaftlicher Aspekte für den Safety Case wurde von zwei Seiten angegangen:

Einerseits wurden aus Sicht der technologisch und anlagenbezogenen Erfordernisse verschiedene Handlungskontexte (Phasen des Verfahrens, Themencluster) identifiziert und auf dieser Basis Handlungsfelder herausgearbeitet, die einen sozialwissenschaftlichen Bezug aufweisen. Andererseits wurde eine sozialwissenschaftlich basierte Einordnung der Handlungsfelder vorgenommen und die im jeweiligen Kontext relevanten sozialwissenschaftlichen Aspekte und Teilaspekte identifiziert.

Die mit beiden Methoden und durch eine iterative Fokussierung erhaltenen differenzierten Handlungsfelder in Verbindung mit den relevanten sozialwissenschaftlichen Aspekten wurden in einer vorläufigen Liste potenziell relevanter Handlungsfelder zusammengestellt.

Zur Einordnung der identifizierten Handlungsfelder hinsichtlich ihrer Relevanz wurden drei vorläufige Relevanzkategorien definiert, die sich an dem Einfluss auf die betriebliche Sicherheit und die Langzeitsicherheit orientieren. Eine erste Einordnung der Handlungsfelder nach Relevanz wurde vorgenommen.

Weiterhin wurden organisatorische und inhaltliche Vorbereitungen zur Durchführung eines Fachworkshops (im Februar 2010) zur Diskussion der vorläufigen Ergebnisse aus den Arbeitspaketen AP1 und AP2 durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Gemäß dem aktuellen Zeitplan wird für das erste Halbjahr 2009 geplant:

- Fortführung der Arbeiten zu den AP1 und AP2 und Zusammenstellung von Zwischenergebnissen in einem Kurzbericht
- Durchführung eines Fachworkshops (s. o.)
- Abschluss der Arbeitspakete AP1 und AP2 und Erstellung eines Zwischenberichtes unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus dem Workshop
- Aufnahme der Arbeiten zum AP3

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

2.2 C-Vorhaben

Zuwendungsempfänger: Universität Karlsruhe (TH), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe		Förderkennzeichen: 02 C 0922
Vorhabensbezeichnung: Verschlussystem mit Äquipotenzialsegmenten für die untertägige Entsorgung (UTD und ELA) gefährlicher Abfälle zur Sicherstellung der homogenen Befeuchtung der Dichtelemente und zur Verbesserung der Langzeitstabilität		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2002 bis 28.02.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.226.844,00 EUR	Projektleiter: Dr. Schuhmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Geotechnische Barrieren (Schacht-, Strecken- und Bohrlochverschlüsse) in UTD sind als nachweislich langzeitstabile Verschlussbauwerke auszubilden. Vorhabensziel ist das Design, der konstruktive Entwurf und der Bau eines Verschlussystems, das mittels Äquipotenzialsegmenten eine homogene Durchfeuchtung des dichtenden Bentonitkerns gewährleistet.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeption des Verschlussystems, Versuchsplanung, Grundlagenermittlung
 AP2: Untersuchung der Materialien für die Dicht- (DS) und Äquipotenzialsegmente (ÄS)
 AP3: Modellierung der Vorgänge im Verschluss
 AP4: Halbtechnischer Versuch, Durchführung und Bewertung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Materialuntersuchung im ÄS und DS

Mischung 1000: Auf Basis der vorangegangenen Erkenntnisse wurde ein optimiertes Material designed, 33 % N45 als Gerüst, 17 % Kalk, 42 % FS700 sowie 8 % Arginotec.

Variogramm M-1000: Es wurden insgesamt 9 Rohre mit der Mischung M1000 gefüllt und im Februar 2008 gestartet. 2 Säulen wurden vorsichtig in Schräglage befüllt, um ein Entmischen beim Befüllvorgang zu vermeiden. 3 weitere Säulen wurden standardmäßig befüllt. Alle wurden mit VE-Wasser beaufschlagt. Weitere 2 Säulen wurden schräg befüllt und mit Lauge beaufschlagt und 1 Säule mit Lauge nach Standardbefüllung. Eine weitere Standardsäule wurde oben luftdicht verschlossen und mit VE-Wasser gestartet.

Die schräg befüllten Rohre laufen ein wenig schneller. Durch die schräge Befüllung wird ein Entmischen besser vermieden als beim senkrechten Einschütten des Materials. Beim letzteren führt dies zu einem Gradienten der Korngrößen Verteilung. Das erklärt, warum diese anfangs etwas schneller laufen als die schräg befüllten, dann aber zum Ende durch die inhomogenere Saugspannung einbüßen. Dieser Effekt ist bei der Lauge nicht signifikant erkennbar.

Die oben verschlossene Probe zeigt anfangs stark verzögertes Steigen, später überholt diese die Laugenproben. Es ist nicht auszuschließen, dass eine Öffnung entstand, welche die Luft entweichen ließ oder zumindest nach angestautem Druck diese Luft frei gibt.

Alle Säulen haben die erwartete Höhe erreicht, der stetige Wasserverbrauch ist in einer zusätzlichen Aufsättigung mit zunehmender Versuchsdauer vor allem der Verdunstung geschuldet. Es bestätigt sich, dass das Material M1000 die bisher besten Eigenschaften besitzt und reproduzierbare Messwerte liefert. Die Varianz ist durch Einbaumethoden und Liquid bedingt.

HTV-2: Die mineralogischen Untersuchungen wurden fortgesetzt. Es stehen noch die Ergebnisse der IC und ICP-OES Messungen, der am Jahresende durchgeführten Leitfähigkeitsmessungen zur Bestimmung des Salzgehaltes in einzelnen Ebenen, aus.

MatLab zur visuellen Darstellung der Messergebnisse wurde installiert. Die vollständige Auswertung der gewonnenen Daten steht noch aus.

Materialcharakterisierung ÄS

Ergänzende Untersuchungen zur Korngrößen- und Porenverteilung der eingesetzten Materialien für die ÄS wurden mit einem Korngrößenanalysator nach Dispergierung in Isopropanol durchgeführt. Damit wurden die mittleren Korngrößen- bzw. Porenradien, die auf der Basis von spezifischer Dichte und spezifischer Oberfläche abgeschätzt wurden, bestätigt. Es lässt sich ableiten, dass die ausgewählten ÄS-Materialien Steighöhen von mehr als 300 cm erreichen können.

AP4: Halbertechnischer Versuch, Durchführung und Bewertung

HTV3: Der im November 2007 gestartete HTV-3 sollte schnell auf hohe Druckbeaufschlagung gefahrenen und zusätzlich mit kurzen hohen Druckpulsen belastet werden, um ein mögliches Versagenszenario in Gang zu setzen. Am 13.12.2007 betrug der Druck bereits 100 bar, die seither kontinuierlich anliegen. Die anfänglichen Druckstöße wurden, trotz leichter Wegigkeiten entlang der Sensoren, vom Verschluss-System aufgenommen und gepuffert. Bis Anfang 2008 war die Schichtenfolge bis einschließlich Sensor 7 (DS1, ÄS1, DS2, ÄS2a, ÄS2b) komplett durchfeuchtet, was durch den hohen anliegenden Druck und die eingebauten Sandlinsen in DS1 und DS2 begünstigt wurde.

An Sensor 8 (Grenzschicht DS3/ÄS3a) ist dieser Stand ebenfalls erreicht, das Dichtsegment DS3 ist über die gesamte Fläche durchfeuchtet und hat ÄS3a weitgehend bewässert. Der Sensor 9 (ÄS3a/ÄS3b) zeigt im Sohlebereich einen deutlichen Feuchteinfluss, zum Sensoranfang hin lässt das Absinken der Kurve aber eher noch auf einen Druckeinfluss schließen, der durch das unterschiedliche Verhalten der Materialien N45 und M100 bewirkt wird. Das bestätigt sich bei Sensor 10 (ÄS3b/DS4), bei dem im Sohlebereich bereits eine Feuchtereaktion zu erkennen ist, ansonsten aber nur die breitflächige Absenkung der TDR-Signale als Druckeinfluss (Flüssigkeits- und Quelldruck) auftritt.

Die Signale der längs durch die Schichten eingebauten Sensoren 11 und 12 verlaufen bis in die Grenzschicht DS3/ÄS3a sehr ähnlich, erst in ÄS3a/b zeigt sich der deutliche Unterschied: Sensor 12 zeigt schon bis in den Grenzbereich von DS4 Feuchte an, das Material ist aber noch nicht komplett durchfeuchtet. Sensor 11 zeigt zwar schon etwas Feuchte an, DS4 ist aber davon noch nicht berührt. Die Feuchtefront ist bis ÄS3a homogen fortgeschritten und füllt sehr langsam den Raum ÄS3a/ÄS3b auf, ausgehend von der im Sohlenbereich voreilenden Salzlauge.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der HTV-3 wird weiter geführt, um möglichst lange Kontaktzeiten Bentonit/Lauge sicherzustellen und die Funktion der geometrisch reduzierten Systemelemente zu belegen. Die Materialtests werden weiter ausgewertet, ebenso die mineralogische Charakterisierung des HTV-2.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Auf der Homepage (www.untertageverschluss.de) ist ein ausführlicherer Sachstandsbericht dazu eingestellt. Publikationen:

Saturation process and bentonite transformation in a multi-layer hydraulic sealing system (HTV-1) exposed to rock salt brine (Katja Emmerich, Gerhard Kemper, Franz Königer, Stefan Schlaeger, Matthias Gruner, Wolfgang Gaßner, Martin Hofmann, Rolf Nüesch (†), Rainer Schuhmann) wurde zur Publikation in *Vadose Zone Journal* akzeptiert und wird Anfang 2009 erscheinen.

Die Präsentation der bisher erzielten Ergebnisse aus dem HTV-1 und HTV-2 im Rahmen der Mid European Conference

Emmerich, K., Kemper, G., Königer, F., Buqezi-Ahmeti, D., Schlaeger, S., Gruner, M., Gaßner, W., Hofmann, M., and Schuhmann, R. (2008) Mineralogical reactions in a multi-layer hydraulic sealing system during saturation with a rock salt brine. *Mid European Clay Conference*, Zakopane, Poland.

Resultierte in einer Einladung an der Universität Hohenheim

Emmerich, K., Kemper, G., Königer, F., Buqezi-Ahmeti, D., Gruner, M., Gaßner, W., Hofmann, M., and Schuhmann, R. (2008) Sandwich - sealing system with equipotential layers for underground storage of hazardous waste to ensure homogeneous wetting of sealing layers and to enhance long term stability. *Bodenkundliche Kolloquium*, Institut für Bodenkunde und Standortslehre, Universität Hohenheim.

Material development for equipotential layers of multi-layer hydraulic sealing systems (Gerhard Kemper, Franz Königer, Rainer Schuhmann, Katja Emmerich) soll demnächst bei Applied Clay Science eingereicht werden.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 0993	
Vorhabensbezeichnung: Geochemische Modellierung des Langzeitverhaltens von silikatischen und alumosilikatischen Materialien im Temperaturbereich 30 °C bis 90 °C			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponienkonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten			
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2003 bis 31.10.2008		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.10.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 580.968,00 EUR		Projektleiter: Dr. Meyer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens ist die Erweiterung der Datenbasis für die Modellierung des geochemischen Milieus von Si- und Al-haltigen Materialien in salinaren Lösungen in einem Temperaturbereich von 30 °C bis 90 °C.

Es werden Parametersätze für die geochemische Modellierung durch Datenauswertung von Löslichkeits- und Titrationsmessungen entwickelt, um die Eigenschaften von Al- bzw. Si-Spezies in salinaren Lösungen bei 30 °C bis 90 °C voraussagen zu können. Die Leistungsfähigkeit der Parametersätze wird durch geochemische Modellierung von Auflösungsreaktionen ausgewählter Silikat- und Aluminatphasen überprüft.

Die eingesetzten experimentellen Methoden sind z. T. bereits überprüft worden und finden für die Entwicklung neuer Parametersätze Anwendung. Die geochemische Modellierung erfolgt mit EQ3/6, einem ebenfalls anerkannten Rechenprogramm zur thermodynamischen Gleichgewichtsmodellierung.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Literaturrecherche

AP2: Physikalisch-chemische Eigenschaften Si/Al-haltiger Lösungen

AP3: Löslichkeit einfacher Silikate und Aluminate

AP4: Parameterberechnung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bezüglich der Bestimmung der Löslichkeiten von amorpher Kieselsäure bei Temperatur zwischen 30 °C und 90 °C wurden noch 2 Messungen durchgeführt.

Bei den Isopiesticen Versuchen mit Al wurde die Messapparatur zur Messung bei hohen Temperaturen entwickelt. Da dieses Messsystem wesentlich schwieriger ist, als zunächst gedacht, werden diese Versuche noch über den Vertragszeitraum fortgeführt, um für den Abschlussbericht zur Verfügung zu stehen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten sind abgeschlossen oder werden bis zum Abgabetermin abgeschlossen sein.

- Die Ergebnisse der Literaturlauswertung erfolgt im Abschlussbericht.
- Auswertung der Löslichkeitsversuche für die Si-Systeme.
- Auswertung der isopiestic Messungen für die Al-Systeme.
- Ermittlung von Pitzerkoeffizienten aus den neuen, experimentell ermittelten Daten sowie aus Literaturdaten werden Pitzerkoeffizienten für die oben genannten Si- und Al-Spezies im Temperaturbereich 30 °C - 90 °C berechnet.
- Alle gesammelten oder neu bestimmten Rohdaten sowie die daraus abgeleiteten Parameter für die geochemischen Modellrechnungen werden dokumentiert.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Materialforschungs- und prüfanstalt an der Bauhaus-Universität Weimar, Coudraystraße 9, 99423 Weimar		Förderkennzeichen: 02 C 1064
Vorhabensbezeichnung: Weiterentwicklung eines TDR-Messverfahrens zur Quantifizierung von Feuchte- und Dichte- teverteilungen in Bentonitversuchsbauwerken		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponienkonzeptionen unter Sicherheits Gesichtspunkten		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2004 bis 28.02.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 603.656,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kupfer	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Arbeitsablauf erfolgen Untersuchungen zu dielektrischen Materialeigenschaften, Feldsimulationen zur Kalibrierung von Sensoren, zur Rekonstruktion (Ortsauflösung) von Feuchte- und Dichteverteilung. Test des neuen Messverfahrens in labor- und halbtechnischen Versuchen zur Detektion der räumlichen und zeitlichen Flüssigkeitsausbreitung in Bentonitdichteelementen. Hydraulische Modellierung auf Grundlage von messtechnisch ermittelten Feuchte- und Dichteverteilungen. Auf Basis der Untersuchungsergebnisse soll ein Messsystem für den Einsatz in horizontalen Verschlussbauwerken entworfen werden. Test des Messverfahrens an Verschlussbauwerken im Carnallitit (Teutschenthal, Projekt CARLA FKZ 02C1204). Eine Anpassung des Vorhabens an das Projekt CARLA erfolgt durch Erweiterung der Untersuchungen um die Arbeitspakete AP10 und AP11 (Aufstockung und Verlängerung des Vorhabens).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Untersuchungen zu dielektrischen Materialeigenschaften
- AP2: Elektromagnetische Feldsimulationen zur Rekonstruktion von Feuchte-/Dichteverteilung
- AP3: Quantifizierung von Feuchte und Dichte mit koaxialer Messleitung und Kabelsensor
- AP4: Ortsdiskretisierung von Feuchteprofilen
- AP5: Erfassung der räumlichen Feuchte- und Dichteverteilung
- AP6: Bestimmung von Feuchteprofilen in Abhängigkeit vom Druck
- AP7: Anwendung des TDR-Messsystems in halbtechnischen Versuchen
- AP8: Numerische Simulation der Feuchteausbreitung
- AP9: Konzeption und Entwurf eines Messgerätesystems für den Untertageeinsatz zur quantitativen Bewertung von Feuchte- und Dichteprofilen
- AP10: Entwicklung und Erprobung eines Messgerätesystems zur qualitativen Bestimmung von Feuchteprofilen in einem Verschlussbauwerk; Erarbeitung und Erprobung von Simulations- und Rekonstruktionsalgorithmen
- AP11: Entwurf eines Messsystems zur quantitativen Bewertung von Feuchte- und Dichteprofilen für den Einsatz in Verschlussbauwerken im Projekt CARLA (FKZ 02C1024), Einbau der Messsysteme in die Versuche KV1, GV1, GV2 und Auswertung der Versuchsergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP10: Die Erarbeitung und Erprobung von Simulations- und Rekonstruktionsalgorithmen aus den theoretischen Betrachtungen zum dielektrischen Verhalten von verlustbehafteten Stoffgemischen und zu den Schichtenmodellen (AP1/AP2/AP4/AP5) wurden fortgeführt und daraus ein analytisches Simulations- und Inversionsmodell entwickelt, das das Übertragungsverhalten von Impulsen auf verlustlosen und verlustbehafteten Leitungen beschreibt. Das Inversionsmodell bildet die Basis für ein Rekonstruktionsmodell, welches letztendlich aus den gemessenen TDR-Signalen den Feuchte- und/oder Dichteverlauf entlang der Messleitung berechnet. Funktionalität und Genauigkeit des Inversionsmodells wurden mittels HFSS generierten Simulationsergebnissen überprüft. Das der Simulation zugrunde liegende HFSS-Modell ist ein Kammertrogmodell mit drei 25 cm langen Kammern, die mit unterschiedlichen Materialien befüllt werden können. Die modellierte Messleitung entspricht der PE-Flachbandleitung, wie sie auch zum Messen benutzt wird, und sie kann von beiden Seiten über jeweils 10 cm lange 50-Ohm-Koaxialkabel angeschlossen werden. Zur Kontrolle der Simulationsergebnisse wurde ein Trog mit den Modellabmessungen aufgebaut und mit der modellierten Messkabelkonfiguration bestückt. Die mit dem NWA E8363B (Agilent) und dem TDR100 (Campbell) gemessenen Daten wurden mit den HFSS-Simulationsergebnissen und den Werten aus dem MFPA-Simulationsmodell verglichen und bewertet. Der Vergleich zeigte, dass die Mess- und Simulationsergebnisse gut übereinstimmen, und die Inversion dieser Werte bestätigte das gute Übereinstimmungsergebnis und sogleich die Leistungsfähigkeit des Inversionsmodells.

AP11: Folgende Arbeiten wurden im Rahmen des Projekts CARLA durchgeführt:

- Auswertung MFPA-Versuch KV1: Im Zeitraum vom 19.09.2008 bis zum 10.10.2008 erfolgten weitere Druckbeaufschlagungen mit Lauge. Die erhoffte Dichtheit des Bauwerkes durch eine „Selbstheilung“ infolge der in der Kontaktzone befindlichen Lauge aus den vorherigen Druckversuchen bestätigte sich nicht. Mit dem TDR-Messsystem konnten Zutritt und Fließwege der Lauge innerhalb des Bauwerkes wieder aufgezeigt werden. Die geplanten in situ Injektionsvorversuche am MFPA-Versuchsbauwerk hinsichtlich der Injektionstechnologie und der Wirksamkeit des Injektionsmaterials für den Einsatz im GV1 wurden unter Berücksichtigung der MFPA-Messtechnik vorbereitet.
- Auswertung Großversuch GV1: Eine Druckbeaufschlagung ist noch nicht erfolgt. Gaspermeabilitätsuntersuchungen haben gezeigt, dass das Bauwerk an der Kontaktzone zum Gebirge nicht dicht ist. Die Ergebnisse der Injektionsvorversuche am MFPA-Versuchsbauwerk entscheiden über das weitere Vorgehen am GV1.
- Auswertung Großversuch GV2: Das Verschlussbauwerk, das in Spritzbetontechnologie hergestellt wurde, ist fertig. Die Messelektronik für die eingebauten TDR-Kabelsensoren wurde installiert. Erste Messungen zeigten, dass die Kabelsensoren beim Betonieren nicht beschädigt wurden und die Messergebnisse den erwarteten Werten entsprechen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Dokumentation der an der MFPA entwickelten TDR-Simulations- und Inversionsmodelle
- Fortführung der Auswertung der TDR-Messergebnisse aus dem Projekt CARLA
- Abschlussbericht

5. Berichte, Veröffentlichungen

Trinks, E., Kupfer, K., Wagner, N.: TDR-Messungen in Untertageverschlussbauwerken im Salzgestein. Vortrag am 02.10.2008 zum 5. Fachgespräch „Geophysik und Barrieresysteme“, Universität Leipzig, Institut für Geophysik und Geologie

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 C 1074
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Weiterentwicklung der räumlichen Auswertung von richtungssensitiven EMR-Bohrlochmessdaten		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2004 bis 31.08.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.08.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 433.501,84 EUR	Projektleiter: Eisenburger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die erhöhte Anforderung, umweltbelastende Stoffe sicher zu lagern, erfordert die Errichtung sicherer untertägiger Deponien. Aufgrund der begrenzten Sicherheit technischer Barrieren, ist es wichtig natürliche geologische Barrieren zu finden, die langfristig sicherer sein können.

In diesem FV soll eine neue Radar-Bohrlochsonde entwickelt werden, mit der aus einer allein stehenden Bohrung räumliche Informationen über das anliegende Gebirge gewonnen werden.

Die Entwicklung geht von einem bekannten Bohrlochsystem aus. Zuerst werden die HF-Komponenten (Sende- und Empfangsantenne) auf die Möglichkeit ihrer Verbesserung untersucht, um anschließend neue Radarverfahren auf ihre Eignung als richtungssensitives Bohrlochmessverfahren zu untersuchen. Weiterhin wird durch verbesserte Algorithmen eine schnelle Verarbeitung der Messdaten angestrebt.

Der wirtschaftliche Nutzen ergibt sich für deutsche Unternehmen, indem sie dieses Messverfahren und System nutzen, um in Deutschland oder weltweit Serviceleistungen zu erbringen, die bei Problemen der Erkundung und Bewertung untertägiger Deponien für umweltsensible Stoffe notwendig werden.

Das Forschungsvorhaben ist ein Verbundvorhaben in dem die

- Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover, Fachgruppe Geophysikalische Forschung, Ref. Geophysik für das Ressourcenmanagement.
- Bergische Universität Wuppertal, Fachbereich Elektrotechnik und Informationstechnik, Wuppertal
- Deutsche Montan Technologie GmbH (DMT), Essen Monitoring und Geomesssysteme, Mines and More Division

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundvorhaben gliedert sich in drei Teilvorhaben, die von den angeführten Institutionen in eigener Verantwortung durchgeführt werden.

TVI: „Entwicklung eines aktiven richtungssensitiven Bohrlochantennensystems“; Bergische Universität Wuppertal, Fachbereich Elektrotechnik und Informationstechnik, Wuppertal

TVII: „Entwicklung und Bau der Steuer- und Digitalisierungseinheit, der mechanischen Komponenten und der Datenerfassungseinheit“; Deutsche Montan Technologie GmbH (DMT), Essen

TVIII: „Weiterentwicklung der räumlichen Auswertung von richtungssensitiven EMR-Bohrlochmessdaten“; Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover

Das Untersuchungsprogramm für das Teilvorhaben „Weiterentwicklung der räumlichen Auswertung von richtungssensitiven EMR-Bohrlochmessdaten“ beinhaltet zwei Arbeitspakete:

AP1: Vereinheitlichung und Neustrukturierung des EMR-Auswertesystems der BGR

AP2: Aussagemöglichkeiten der EMR-Messungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die in diesem Halbjahr anfallenden Arbeiten konzentrierten sich auf die Behebung der aufgetretenen Fehler während der untertägigen Tests, sowohl der Hardware als auch der Software. Letzteres bezieht sich sowohl auf die Software der Sondensteuerung und Datenerfassung wie auch auf die Software der Datenbearbeitung und Auswertung. Durch einige Systemfehler die in der Hardware behoben werden mussten sind auch einige Softwareanpassungen erforderlich gewesen.

Vor allem die Steuersoftware für die DABOR-Sonde musste so gestaltet werden, damit alle Funktionalitäten der Sonde überprüft werden konnten und ein fehlerfreier Messablauf gewährleistet wird.

Abgeschlossen wurden auch die Arbeiten hinsichtlich der Untersuchung inwieweit Neuronale Netze für die Erkennung von unterschiedlichen geologischen Strukturen eingesetzt werden können. Dabei wurde eine Vielzahl von Parametern des Netzes, Aufbereitungsmöglichkeiten für die Daten sowie eine große Zahl aus den Daten ableitbarer Merkmale betrachtet.

Die Ergebnisse zeigen, dass Neuronale Netze grundsätzlich in der Lage sind, geologische Strukturen anhand von Georadarsignalen zu unterscheiden und verschiedenen Klassen zuzuordnen. Als neuronaler Netzwerksimulator wurde der der Uni Stuttgart (SNNS) in einer Java Variante (JNNS) für den Aufgabenbereich als sehr gut geeignet befunden.

Der Schwerpunkt der durchgeführten Arbeiten in diesem Zeitraum lag bei der Erstellung des Abschlussberichtes für das gesamte Verbundvorhaben. Parallel dazu konnte ein Test in einer vertikalen Bohrung im Werk Sigmundhall der K+S AG mit der DABOR-Sonde durchgeführt werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Abschlussberichtes für das gesamte Verbundvorhaben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Bergische Universität Wuppertal, Gaußstraße 20, 42119 Wuppertal		Förderkennzeichen: 02 C 1084
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung eines aktiven richtungssensitiven Bohrlochantennensystems		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2004 bis 31.08.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.08.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 679.189,00 EUR	Projektleiter: Prof. Glasmachers	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das an der Bergischen Universität Wuppertal durchgeführte Teilvorhaben wird in Kooperation mit der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) in Hannover und der Deutschen Montantechnologie GmbH (DMT) in Essen durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Arbeiten im Teilvorhaben „Entwicklung eines aktiven richtungssensitiven Bohrlochantennensystems“ umfassten im Berichtszeitraum die Arbeitspakete „Ausführung der durchgeführten Messungen“, „Optimierung der Messsoftware“ sowie „Dokumentation der Ergebnisse“.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Analyse der Messergebnisse der Feldtests erfolgte mit den speziell entwickelten Programmen der BGR sowie mit Matlab-Routinen, die von uns entwickelt wurden. Die Steuersoftware wurde in Bezug auf die Übertragungsgeschwindigkeit optimiert durch Zusammenfassung der Einstellparameter in einem Parameterblock. Die Korrektur der Messwerte mit den bei der Kalibrierung gewonnen Eigenwerte zeigt positive Ergebnisse und wird weiter untersucht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Abfassung der Dokumentation, Veröffentlichung der Ergebnisse.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Für die Konferenz „Ground penetrating radar 2009“ in Granada werden zwei Veröffentlichungen vorbereitet.

Zuwendungsempfänger: DMT GmbH, Am Technologiepark 1, 45307 Essen		Förderkennzeichen: 02 C 1094
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung und Bau der Steuer- und Digitalisierungseinheit, der mechanischen Komponenten und der Datenerfassungseinheit		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2004 bis 31.08.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.08.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 487.347,00 EUR	Projektleiter: Kröger	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die erhöhte Anforderung, umweltbelastende Stoffe sicher zu lagern, erfordert die Errichtung sicherer untertägiger Deponien. Aufgrund der begrenzten Sicherheit technischer Barrieren ist es wichtig, natürliche geologische Barrieren zu finden, die langfristig sicherer sein können.

In diesem Forschungsvorhaben soll eine neue Radar-Bohrlochsonde entwickelt werden, mit der aus einer allein stehenden Bohrung räumliche Informationen über das anliegende Gebirge gewonnen werden.

Das Forschungsvorhaben ist ein Verbundvorhaben an dem sich folgende Institutionen beteiligen:

- Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover, Fachgruppe Geophysikalische Forschung, Ref. Geophysik für das Ressourcenmanagement.
- Bergische Universität Wuppertal, Fachbereich Elektrotechnik und Informationstechnik, Wuppertal
- Deutsche Montan Technologie GmbH (DMT), Essen Geomesssysteme, Exploration & Geosurvey

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Verbundvorhaben gliedert sich in drei Teilvorhaben, die von den angeführten Institutionen in eigener Verantwortung durchgeführt werden.

Teilvorhaben I: „Entwicklung eines aktiven richtungssensitiven Bohrlochantennensystems“; Bergische Universität Wuppertal, Fachbereich Elektrotechnik und Informationstechnik, Wuppertal

Teilvorhaben II: „Entwicklung und Bau der Steuer- und Digitalisierungseinheit, der mechanischen Komponenten und der Datenerfassungseinheit“; Deutsche Montan Technologie GmbH (DMT), Essen

Teilvorhaben III: „Weiterentwicklung der räumlichen Auswertung von richtungssensitiven EMR-Bohrlochmessdaten“; Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Gehäusefertigung und Endmontage

Die Fertigstellung der Bohrlochradarsonde „DABoR“ umfasste noch folgende Arbeiten:

Bestückung der GFK (GFK = GlasFaserverstärkter Kunststoff) Verschraubungen zwischen Kontrollmodul und Empfangsmodul mit den Wellenleitersegmenten sowie Einbau der Isolierkörper zur Aufnahme der Lichtwellenleiter in die GFK Verschraubungen zwischen Empfangsmodul und Sendemodul.

Einkleben der GFK Klebeeinsätze in die Druckrohre zur Aufnahme der Verschraubung (Bolzensseite) und Einbau des Kontroll-, Sende- und Empfangsmoduls in die Druckrohre.

Sendemodul

Die Konstruktion des Senderchassis wurde beendet. Es werden beide Dipolhälften (je 625 mm) des $\lambda/2$ Dipols für die Montage der Einbauten benötigt. Eine Dipolhälfte nimmt hierbei die Elektronik auf, die auf einer Platine 146 mm x 58 mm platziert ist.

Die Batterieversorgung, die aus acht Alkali-Mangan Primärzellen Bauform D (Monozelle), besteht, ist in der zweiten Dipolhälfte angeordnet. Die Leitungsdurchführung zu den Batterien erfolgt über entsprechende Induktivitäten um den Dipol nicht kurzzuschließen. Eine Batteriekapazität von mehr als 12 Ah lässt einen Dauerbetrieb des Sendemoduls von über 12 Stunden zu.

Zubehör

Nach Fertigstellung des Systems galt es als weitere Testmessung / Abschlussmessung, ein vertikales Bohrloch mit einer Teufe von ca. 600 m zu vermessen. Ein Bohrgerät welches auch zum Einbau der DABoR Sonde benutzt werden konnte, war noch vorhanden. Es konnten aber auf Grund der Arbeitshöhe nur die Sondensegmente einzeln eingebaut werden. Für einen Einsatz dieser Art mussten noch eine Abfangklaue mit zugehöriger Abfangplatte sowie ein Zugkopf angefertigt werden.

Die Abfangklaue ist ein aufklappbarer Ring, mit Klemmbacken auf der Innenseite, der jeweils auf dem bolzenseitigen Ende eines Sonderelements montiert werden kann. Er erzeugt ein „dickes“ Sondenende, welches auf der Abfangplatte abgelegt werden kann.

Bei der Abfangplatte handelt es sich um eine 8 mm starke, 700 mm x 700 mm große Stahlplatte mit einem Schlitz von einer Seite bis zur Mitte. Die Schlitzbreite entspricht dem SONDENDURCHMESSER. Über dem Schlitz gibt es einen Klappbügel zur Sicherung gegen ein Herausrutschen der Sonde.

Der Zugkopf hat das gleiche Innengewinde wie die Überwurfmutter der Sondenverschraubungen und ist auf der Oberseite geschlossen und mit einer Öse versehen. Hiermit können Sondenteile ohne den Kabelkopf aufzusetzen verfahren werden.

Diese Komponenten werden in folgender Weise verwendet:

Der Zusammenbau der DABoR Sonde beginnt mit der Montage der Abfangklaue am Sendemodul, nachdem dieses an der Sondenspitze eingeschaltet wurde. Als nächstes wird die Abfangplatte auf den Preventer der Bohrung oder einem geeigneten Auflagepunkt am Bohrgerät aufgelegt und gesichert. Der Sender wird nun von oben durch die Abfangplatte in das Bohrloch eingeführt und mit der Abfangklaue auf die Abfangplatte aufgelegt. Auf ein Sondenverbindungselement wird jetzt der Zugkopf aufgeschraubt und die Winde des Bohrgerätes in die Öse eingehängt. Das Verbindungselement wird ins Bohrgerät gezogen bis es über dem Sendemodul hängt. Die Schutzkappen von Sendemodul und Verbindungselement werden entfernt. Anschließend wird das Verbindungselement langsam abgelassen, bis die Führungszapfen der Verschraubung auf dem Anlauftring aufsetzen. Durch langsames Drehen des Verbindungselements werden die Führungszapfen zum Einrasten gebracht und das Verbindungselement muss weiter abgesenkt werden. Die Überwurfmutter kann jetzt verschraubt werden. Der Spalt zwischen Sondenkörper und Überwurfmutter wird mit den hierfür vorgesehenen Klemmstücken verschlossen.

Das Sendemodul und das erste Verbindungselement sind nun miteinander verschraubt und werden mit der Winde wenige Zentimeter angehoben, damit die Abfangklaue entfernt werden kann. Der Sondenstrang wird abgelassen und die Abfangklaue an der Bolzenseite des ersten Verbindungselements montiert. Der Sondenstrang wird dann auf der Abfangplatte abgelegt, der Zugkopf entfernt und auf das nächste Verbindungselement aufgeschraubt. Dieser Vorgang wiederholt sich, bis der komplette Sondenstrang montiert ist.

Windenkontroller

Die Software des Windenkontrollers wurde an die vorhandene Windenanlage angepasst, um die Abschlussmessung / Testmessung im automatischen Betrieb durchzuführen.

Testmessung / Abschlussmessung

Auf der Schachanlage Sigmundshall der K+S GmbH wurde eine untertägige 600 m Vertikalbohrung mit dem DABoR System vermessen. Die Messung verlief, nachdem anfängliche Telemetrie Probleme behoben wurden, störungsfrei.

Bei der Datenauswertung zeigten sich Unstimmigkeiten zur Geologie, die durch weitergehende Untersuchungen instrumentellen Problemen im Empfangsmodul zu zuordnen waren.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellen des Abschlussberichts und Modifikation des Empfangsmoduls entsprechend der Untersuchungsergebnisse.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Bauhaus-Universität Weimar, Geschwister-Scholl-Straße 8, 99423 Weimar		Förderkennzeichen: 02 C 1104
Vorhabensbezeichnung: Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2004 bis 31.12.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 343.086,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Schanz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bei diesem Vorhaben handelt es sich um eine Fortsetzung des Vorhabens *Experimentelle und numerische Untersuchungen des Langzeitverhaltens von Abschlussbauwerken im Salinar mit Bentonitgemischen als Dichtelement* (Abschluss 7/2004). Lag der Schwerpunkt der Arbeiten bisher bei der experimentellen und theoretischen Behandlung des gekoppelten hydraulischen und mechanischen Verhaltens, so werden hier Fragen der thermischen und chemischen Kopplung mit den mechanischen und hydraulischen Phänomenen betrachtet. Einen zweiten Schwerpunkt bilden die Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Tonen. Die bisher beschriebenen physikalischen Phänomene umfassen das gekoppelte hydraulische (Permeabilität, Kapillardruck-Sättigungsbeziehung) mechanische (Quelldruck, Steifigkeit) Verhalten. Darüber hinaus besteht jedoch eine signifikante Evidenz für die notwendige Berücksichtigung zusätzlicher physikalischer Effekte (Temperatur, Kriechen und Alterung).

Im Gegensatz zur bisher ausschließlichen Betrachtung von so genannten *Elementversuchen* sind für die Phase II ergänzend Versuche im Technikumsmaßstab notwendig (Temperatureinflüsse).

Die Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit des konstitutiven Verhaltens erfolgt sowohl bei den theoretischen, numerischen als auch bei den experimentellen Arbeitsschwerpunkten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

1. Zentraler Inhalt der experimentellen Untersuchungen ist die Untersuchung und Charakterisierung des Einflusses der Temperatur (wiederholte Aufsättigungs-/Trocknungs-Zyklen) auf die konstitutiven Eigenschaften (Struktur/Porengrößenverteilung/Mikrorisse /Permeabilität, Quellen) des Dichtelements (hochverdichtete Bentonit-Sand-Mischung). Dies geschieht im Bezug zur Frage der Langzeitstabilität der Gesamtkonstruktion Verschlussbauwerk
2. Ermittlung der teilgesättigten Permeabilität (in Abhängigkeit von der Saugspannung) von Bentonit-Sand-Mischungen
3. Untersuchung des Zeitverhaltens (Kriechen, Alterung, Phasenübergänge) von Bentonit-Sand-Mischungen

4. Untersuchung des Zusammenhangs zwischen konstitutiven Eigenschaften und der Mikrostruktur (Quecksilberporosimetrie, ESEM-Analyse), Anteil der verschiedenen Porensysteme an der hydraulischen Permeabilität
5. Klärung des Begriffs der Saugspannung bei hochverdichteten Tonen, Einfluss des osmotischen Drucks und dessen Berücksichtigung im numerischen Modell
6. Anwendung der DDL zur Beschreibung des Kompressionsverhaltens von hochverdichteten Sand-Bentonit-Mischungen unter hohen Drücken

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In den letzten 6 Monaten wurden die saugspannungskontrollierten Kompressionsversuche bei 80 °C abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Schlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Eberhard-Karls-Universität Tübingen, Wilhelmstr. 7, 72074 Tübingen		Förderkennzeichen: 02 C 1114
Vorhabensbezeichnung: Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2005 bis 31.12.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 319.906,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kolditz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die im Rahmen der bisherigen Arbeiten beschriebenen physikalischen Phänomene umfassen das gekoppelte hydraulische und mechanische Verhalten von Bentonit-Sand-Gemischen, die zur Erstellung von Dichtelementen für untertägige Deponien und Verschlüsse verwendet werden. Darüber hinaus besteht jedoch eine signifikante Evidenz für die notwendige Berücksichtigung zusätzlicher physikalischer und chemischer Effekte (Temperatureinfluss, Zeiteffekte wie Kriechen und Alterung, mineralische Phasenübergänge, Gasfreisetzung und Migration, Wechselwirkungen mit freigesetzten Schadstoffen), die sich durch teilweise vorhandene experimentelle Beobachtungen unterlegen lässt.

Die Forschungsschwerpunkte der zweiten Projektphase sind nicht-isotherme Effekte, transiente Deformationsprozesse, Veränderungen von Permeabilitäten infolge von THMC Prozessen. Dabei geht es insbesondere um Fragen der Langzeitstabilität von Dichtelementen. Die wissenschaftlichen Ergebnisse werden wie in dem bisherigen Projekt in wissenschaftlichen Fachzeitschriften und auf internationalen Fachtagungen publiziert. Daneben werden eigenständige wissenschaftliche Veranstaltungen in Form von Workshops durchgeführt.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm dieses Vorhabens zur Entwicklung eines numerischen THMC-Simulators orientiert sich an den physiko-chemischen Prozessen in Verschlussmaterialien

WP-T1: Thermische Prozesse, WP-T2: Hydraulische Prozesse, WP-T3: Mechanische Prozesse, WP-T4: Chemische Prozesse.

Numerische Verfahren: WP-T5, Softwareentwicklung: WP-T6 und Höchstleistungsrechnen: WP-T7 bilden den technischen Rahmen des Vorhabens.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Folgende abschließende Arbeiten wurden im Berichtszeitraum durchgeführt:

- Hydraulische Prozesse: Verifizierung der pp- und pS Mehrphasenmodelle anhand von Testbeispielen und im direkten Vergleich mit TOUGH2. Entwicklung und Implementierung einer weiteren pS-Formulierung für den Zweiphasenfluss.
- Chemische Prozesse: siehe Zwischenbericht zum Vorhaben C1295.
- Mechanische Prozesse: Implementierung des Barcelona thermo-elasto-plastischen Quellmodells (TEP Modell) und Vergleiche mit CodeBright. Weitere Stoffmodelle wurden implementiert.

tiert (nichtlineare Elastizität, konstitutive Kriechmodelle), siehe auch Zwischenbericht zum Vorhaben C1295.

- Auswertung experimenteller Daten: Für die Auswertung der experimentellen Ergebnisse der Arbeitsgruppe in Weimar hat sich gezeigt, dass ein vereinfachtes Quellmodell (Rutqvist et al. 2008) bereits eine gute Übereinstimmung zwischen Messungen und Modellierung ermöglicht. Das komplexe TEP Modell führt zu keiner Verbesserung in der Modellanpassung.
- Unsicherheitsanalyse: Im Rahmen einer im Berichtszeitraum begonnenen Doktorarbeit konnten bereits erste Ergebnisse zu Unsicherheitsanalysen von THM Prozessen in Kristallin erreicht werden (Watanabe et al. 2008).
- Höchstleistungsrechnen: Durch die Verfügbarkeit eines Parallelrechners am UFZ (HPCLab: 256-Knoten Linux-Cluster) konnte die Parallelisierung von GeoSys/RockFlow weiter vorangetrieben werden (Wang et al. 2008). Die parallelisierte Version wird von mehreren Anwendern im In- und Ausland (BGR, GRS, PSI (Schweiz), UEdinburgh (UK), UOkayama (Japan)) der Praxis eingesetzt. Durch eine grundlegende Überarbeitung der Datenstrukturen konnte die Recheneffizienz mehr als verdoppelt werden (Wang und Kolditz 2008).
- Qualitätssicherung: Im Verlaufe des Vorhabens wurde die Benchmarksammlung insbesondere für TM, HM und THM Prozesse kontinuierlich erweitert (Kolditz und Shao 2008). Die Benchmarks werden zur Codeverifizierung (Release) verwendet.
- Projektmanagement: Besonders wichtig für die Programmentwicklung und Dokumentation war der Einsatz eines Wikipedias in Kombination mit einem Versionsmanagementsystem.

Mit dem erreichten Stand der wissenschaftlichen Software GeoSys/RockFlow steht ein Modellierungswerkzeug zur Verfügung, mit dem thermo-hydro-mechanische (THM) Prozesse in verschiedenen Geomaterialien und Gesteinen simuliert werden können. Neben der Untersuchung geotechnischer Dichtelemente kann der THM Simulator auch für geothermische und Fragden der CO² Speicherung eingesetzt werden. Weiterer Entwicklungsbedarf besteht insbesondere in der Modellierung chemischer Prozesse.

4. Geplante Weiterarbeiten

Projekt endet zum 31.12.2008.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kolditz O and Shao H (Ed) (2008): GeoSys/RockFlow – Developer Benchmark Book. V4.8, Helmholtz Centre for Environmental Research (UFZ) and Federal Institute for Geosciences and Natural Resources (BGR), Technical Report, 288pp.

Rutqvist J, Deborah Barr, Jens T. Birkholzer, Kiyoshi Fujisaki, Olaf Kolditz, Quan-Sheng Liu, Tomoo Fujita, Wenqing Wang, Cheng-Yuan Zhang (2008): A comparative simulation study of coupled THM processes and their effect on fractured rock permeability around nuclear waste repositories, *Environmental Geology*, DOI: 10.1007/s00254-008-1552-1.

Wang W, Kosakowski G, Kolditz O (2008): A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media. *Computers & Geosciences*, DOI:10.1016/j.cageo.2008.07.007.

Wang W and Kolditz O (2008): Sparse matrix and solver objects for parallel finite element simulations. *Parallel Computing*, submitted.

Watanabe N, McDermott C, Wang W, Taniguchi T, Kolditz O (2008): Uncertainty analysis of thermo-hydro-mechanical processes in crystalline rock. *Geothermics*, submitted.

Im Verlaufe des Vorhabens wurden insgesamt 13 ISI Publikationen veröffentlicht.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademie- straße 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 C 1124
Vorhabensbezeichnung: Diversitäre und redundante Dichtelemente für langzeitstabile Verschlussbauwerke		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2004 bis 30.09.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 30.09.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 642.644,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kudla	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens ist, geeignete Materialien und neuartige konstruktive Lösungen zu finden, mit denen zu bereits bekannten Bentonitdichtelementen weitere Dichtelemente zu einem redundanten Dichtsystem realisiert werden können, so dass das Gesamtsystem auch bei relativ schnell auftretender Flüssigkeitsdruckbelastung oder eventuell wechselndem Chemismus seine Dichtfunktion, einschließlich der Impermeabilisierung des aufgelockerten, ausbruchsnahen Bereiches erfüllt.

Wird dieses Dichtelement aus Bitumen, Asphalt, Asphaltbeton, Gussasphalt o. ä. hergestellt, erreicht man aufgrund der prinzipiell völlig anderen Dichtmechanismen von Bitumen zum Gebirge und zu wässrigen Lösungen sowie der absoluten Flüssigkeitsdichtheit dieser Materialien zusätzlich ein diversitäres Dichtsystem.

Der Nachweis der Funktionstüchtigkeit solcher Dichtsysteme soll durch halbtechnische Versuche bei unterschiedlichen Belastungsszenarien erfolgen.

Ergänzt werden die Materialuntersuchungen mit Untersuchungen zur Bildung von Mikrorissen in Salzbeton und Solebeton. Dazu werden neue mikromechanische Modelle unter Berücksichtigung des Hydratationsverhaltens und unterschiedlicher Zuschlagstoffe entwickelt und experimentelle Arbeiten durchgeführt. Das Ziel dieser Arbeiten ist, Aussagen zur Beeinflussung der Kinetik der Zementsteinkorrosion durch Salzlösungen zu treffen und damit neue Erkenntnisse zum Langzeitverhalten von Beton unter salinaren Bedingungen zu erhalten.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Wissensstand zu kombinierten Ton – Bitumen / Asphalt – Dichtungen
- AP2: Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Beton unter salinaren Bedingungen
- AP3: Anforderungen und Materialauswahl
- AP4: Modifizierung von Bitumen zur Einstellung der Dichte und des rheologischen Verhaltens
- AP5: Zusammenwirken zwischen Bitumen / Asphalt und Bentonit
- AP6: Konstruktive Lösungen und technische Ausführung
- AP7: Test des Gesamtsystems aus beiden Dichtelementen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Der Trend der Ergebnisse der Quecksilberporosimetrie zeigt, dass Rezepturen mit Kieszuschlag 2-8 mm (Solebeton) eine geringere Porosität aufweisen, als Proben mit Salzzuschlag 0,2-2,3 mm (Salzbeton). Die Probe aus Solebeton ohne Quellsatz weist hinsichtlich der Gesamtporosität (5,97 %) und des mittleren Porenradius (8,12 nm) das günstigste Verhalten auf. Bei beiden Materialien wurde festgestellt, dass durch die Zugabe von Quellsatz (CaO) zwar das autogene Schwinden auf nahe Null reduziert werden konnte, aber sich die Gesamtporosität erhöht hatte (bei Solebeton von 5,97 % auf 6,13 %, bei Salzbeton von 7,83 % auf 10,25 %). Es ist daher anzunehmen, dass das Quellsatz (CaO) zu einer Vergrößerung des Porenvolumens führt und das anschließende Schwinden des Betons, nach 28 Tagen, nicht ausreichend ist, um den offenen Porenraum zu schließen. Die optische Auswertung der Dünnschliffe, welche parallel hergestellt wurden, bestätigt den Trend, dass der Porenanteil im Salzbeton größer als im Solebeton ist.
- AP7: Neben den Forderungen einer staubfreien und trockenen Oberfläche des Wirtsgesteins (z. B. Steinsalz) muss an der Grenzfläche Bitumen/Wirtsgestein eine bestimmte Mindesttemperatur (beim Heißeinbau) erreicht werden. Diese ist gleich der Erweichungstemperatur (DIN EN 1427) des eingesetzten Bindemittels, da sonst keine ausreichende Benetzung des Wirtsgesteins geschehen kann. Durch den Einsatz eines Voranstriches können beide genannten Randbedingungen sehr positiv beeinflusst werden. Im Rahmen dieser Untersuchungen wurde ein bergbautauglicher Voranstrich entwickelt und in Labor und in situ getestet. Mit Hilfe dieses Voranstriches ist es möglich, eine auf das eingesetzte Bindemittel abgestimmte Beschichtung aufzubringen, welche vorhandenen Staub bindet und die Oberfläche des Wirtsgesteins derartig konfektioniert, dass Bitumen bereits bei Erweichungstemperatur einen ausreichenden Verbund mit dem Wirtsgestein herstellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Vorhaben ist abgeschlossen. Der Bericht wird derzeit verfasst.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1134
Vorhabensbezeichnung: Untersuchungen an Calciumsulfat-Steinsalz-Baustoffen für Dammbauwerke in Untertage-Deponien und Endlagern		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2004 bis 31.10.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.10.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 449.188,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Langefeld	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel des Vorhabens ist die Untersuchung eines geeigneten Baustoffs für die Erstellung von Dammbauwerken für Untertage-Deponien und Endlager im Salzgebirge unter besonderer Berücksichtigung der Langzeitsicherheit, Dehydratationsvorgänge und Migration von freigesetztem Kristallwasser sowie die Bereitstellung eines einsatzfähigen Verfahrens.

Vor Anlaufen eines Großversuchs sollte die pneumatische Einbringbarkeit des Dammbaustoffes und die Eignung der Technologie im Technikumsmaßstab untersucht werden. Bei der Konzeption des Großversuches ist neben den logistischen und technologischen Fragestellungen auch die Instrumentierung und wissenschaftliche Aufnahme der Ergebnisse zu berücksichtigen.

Das Forschungsziel ist die Untersuchung zur Erstellung eines pneumatisch eingebrachten Verschlussbauwerks von Einlagerungskammern und Strecken nach einer Verbringung von chemisch-toxischen und radioaktiven Abfällen im Salinar.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

1. Untersuchung der pneumatischen Einbringbarkeit des Dammbaustoffes im Technikumsmaßstab am Institut für Bergbau der TU Clausthal und auf dem Forschungsbergwerk Asse
2. Konzeption eines Großversuchs auf dem Forschungsbergwerk Asse
3. Aufbau und Durchführung des Großversuchs
4. Datenerfassung, Auswertung und wissenschaftliche Aufbereitung der Versuchsergebnisse
5. Rückbau des Großversuchs und Erstellung eines Abschlussberichtes

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden hauptsächlich Arbeiten der Arbeitspakete 4 durchgeführt, d. h. es stand die Auswertung und wissenschaftliche Aufbereitung der Versuchsergebnisse im Vordergrund.

Aufgrund der Tatsache, dass der Versuchsdamm auf der Schachanlage demontiert wurde, wurden die Arbeiten im Berichtszeitraum am Institut für Bergbau durchgeführt.

Es wurden Probenkerne aus dem Versuchsbauwerk auf ihre Festigkeit und Durchlässigkeit hin untersucht. Des Weiteren wurden Untersuchungen bezüglich der Wärmeleitfähigkeit durchgeführt sowie das Ausbreitmaß bestimmt.

Am Institut für Nichtmetallische Werkstoffe wurden Untersuchungen zur Zusammensetzung und Inhalt des Versuchsbauwerks vorgenommen, um Rückschlüsse auf die Abläufe bei der Hydratation vornehmen zu können. Außerdem wurde die Längsdehnung untersucht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Das Vorhaben ist zum 30.10.2008 abgeschlossen worden. Aktuell wird ein Abschlussbericht erstellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: GTS Grube Teutschenthal Sicherungs GmbH & Co. KG, Straße der Einheit 9, 06179 Teutschenthal		Förderkennzeichen: 02 C 1204
Vorhabensbezeichnung: Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit); Teil 2: Erprobung von Funktionselementen in situ		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.11.2004 bis 31.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 6.950.390,00 EUR	Projektleiter: Finder	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Planung eines Versuchsbauwerkes und seiner einzelnen Funktionskomponenten
- AP2: Auswahl der Einbaustandorte für die einzelnen zu untersuchenden Funktionselemente des komplexen Absperrbauwerkes
- AP3: Entwicklung eines interdisziplinären Messkonzeptes zum Nachweis der geplanten Eigenschaften der Dammbaumaterialien und des Umgebungsgesteins sowie ihres Verhaltens im Zeitverlauf; Funktionssicherung des Bauwerkes
- AP4: Untersuchungen zur Abdichtung der Kontaktzone und des unmittelbar daran anschließenden Gebirgsbereiches in der Einbauzone
- AP5: Labor- und In-situ-Untersuchungen zu den im Konzept (AP1) aufgeführten Verschluss-elementen und Materialien
- AP6: Modellrechnungen für das Komplettbauwerk (Dämmelemente, 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: Die Untersuchungen zur Kontaktzone und des unmittelbar daran anschließenden Gebirges im Bereich der Einbauorte werden fortgesetzt. Insbesondere für den Großversuch GV2 wurden zusätzlich neue Konzepte entwickelt und umgesetzt.
 AP5: Zusätzlich zu den in der Vorhabensbeschreibung vorgesehenen Konzepten wurden vollkommen neu Prinzipien gefunden, getestet und in den Großversuchen GV2 und GV3 angewendet.
 AP6: Die numerischen geomechanischen Modellberechnungen wurden für den GV1 und GV 2 so weit präzisiert, dass die Ergebnisse für die Steuerung des Versuches (Belastungsaufgabe) zur Verfügung stehen. Für den Großversuch GV3 wurden Berechnungen durchgeführt, die die zusätzliche Behandlung der ALZ beim vorgesehenen runden Querschnitt des Dammelementes präzisieren.
 AP7: Der Aufbau des Dammkörpers für den GV1 ist abgeschlossen. Derzeit erfolgt die Phase der Ausbildung eines Gleichgewichtes als Voraussetzung für die Lastaufgabe. Auch die Errichtung der Dammkörper des GV 2 und GV 3 konnten erfolgreich abgeschlossen werden. Im Verlauf der Druck- und Wärmebeaufschlagung der eingebauten Gummiblase im GV 3 kam es zum Versagen dieses Elementes.
 AP8: An beiden Vorbauelementen wurden die In-situ-Untersuchungen fortgesetzt.
 AP9 bis AP11: sind in Bearbeitung, die abschließende Realisierung hängt jedoch von den Ergebnissen der Großversuche ab. Am GV3 wurde ein erster Belastungstest durchgeführt, die Daten befinden sich in der Auswertung.

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 mit der Druckbeaufschlagung begonnen. Für den GV2 wurden die technologischen Untersuchungen für die Herstellung großer MgO-Spritzbetonkörper abgeschlossen. Für den GV 3 (siehe AP 7) wurde der Rückbau des gesamten Dammbauelementes beschlossen, um die genauen Umstände des Versagens während der Druckbeaufschlagung zu klären.

Die Untersuchungen zum geochemischen Vorbauelement befinden sich noch in der Auswertungsphase.

Die weiteren Arbeiten erweisen sich als umfangreicher (2 zusätzliche Großversuche und 2 mittelmaßstäbliche In-situ-Versuche). Das trifft sowohl für die wissenschaftlichen Inhalte als auch für die versuchstechnischen Aufwendungen zu. Derzeit wird an einem Konzept der möglichst weitgehenden Rationalisierung der Arbeiten bei Aufrechterhaltung der ursprünglichen und der erweiterten wissenschaftlichen Zielstellungen gearbeitet.

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.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 1244
Vorhabensbezeichnung: Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.04.2005 bis 31.03.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 748.135,00 EUR	Projektleiter: 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 wurde für die bislang vermessenen ternären chloridischen Systeme ein mathematisches Modell zur Erklärung des ΔpH (Differenz aus scheinbarem pH-Wert und logarithmierter Wasserstoffkonzentration) entwickelt. Weitere Messungen fanden in den Systemen $\text{Na}_2\text{SO}_4\text{-K}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Na}_2\text{SO}_4\text{-MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ sowie $\text{K}_2\text{SO}_4\text{-MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ und in den Vielkomponentenlösungen IP 9 und IP 21 statt.

Zur Untersuchung der verlässlichen Redoxmessung in salinaren Systemen wurde die Veränderung des Eh-Wertes bei variierender MgCl_2 -Konzentration bei konstantem Fe(II)/Fe(III) -Verhältnis und konstantem pH untersucht. Die Datenreihen zeigen jeweils eine Abnahme der Messspannung mit Zunahme der Salzkonzentration.

Für die Entwicklung eines Verfahrens zur UV-Spektroskopischen Messung von Fe(II) - und Fe(III) -Konzentrationen in salinaren Lösungen im subnanomolar-Bereich wurde festgestellt, dass die Verwendung von Phenanthrolin als Nachweis für Fe^{II} keiner Beeinflussung durch hohe NaCl -Konzentrationen unterliegt. Hingegen wird der Thiocyanat-Nachweis von Fe^{III} durch NaCl -Lösungen geringfügig gestört, was evtl. durch eine höhere Thiocyanat-Konzentration kompensiert werden kann. Aufgrund eines zeitweiligen Geräteausfalls mußten die Messungen mit dem Kapillar-UV-Spektrometer unterbrochen werden.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Untersuchung der Abhängigkeit der Messspannung von pH-Einstabelektroden von der Hintergrundsalkonzentration / Modellbildung.
- Weiterführung der Redoxmessungen in salinaren Lösungen (Variierung des pH, Variierung des $\text{FeII} / \text{FeIII}$ -Verhältnisses).
- Weiterentwicklung eines Verfahrens zur Messung von Fe(II) - und Fe(III) -Konzentrationen im Subnanomolar-Bereich mit der Kapillar-UV-Spektrometrie.
- Entwicklung eines Speziationsmodells für Fe(II) und Fe(III) sowie Datenauswertung zu eisenaltigen Festphasen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 1254
Vorhabensbezeichnung: Geochemische Barriereeffizienz im anaeroben Deponienahfeld einer UTD		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2005 bis 31.03.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 664.920,00 EUR	Projektleiter: Dr. Brassler	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen der Stilllegung einer Untertagedeponie müssen Maßnahmen durchgeführt werden, die einen sicheren Abschluss der abgelagerten Abfälle vom Biozyklus gewährleisten. Unterschiedliche Barriersysteme können aufgrund ihrer hydraulisch-chemischen Eigenschaften wesentliche Beiträge zur Schadstoffrückhaltung leisten. Laboruntersuchungen sollen den Einfluss der Umgebungsbedingung (anaerob/aerob) auf die Oxidationsspeziationen redoxsensitiver Elemente bestimmen. Dazu ist vorgesehen, die geochemischen Gleichgewichte zu identifizieren, welche die Konzentrationen der Schwermetalle unter anaeroben Bedingungen bestimmen, und welche redoxpuffernden Zuschlagstoffe zur Fixierung von Schwermetallen beitragen können. So soll der Schwermetallgehalt von eluierten Abfallproben (anaerob) identifizierten redoxsensitiven Phasen zugeordnet werden. Untersuchungen, welche die Reaktionsmechanismen von Schwermetallen unter anaeroben UTD-Bedingungen aufklären können, stellen eine wesentliche Grundlage zur Beurteilung der Mobilität von schädlichen Abfallinhaltsstoffen dar, aus denen sich technische Maßnahmen zur Verbesserung der Langzeitsicherheit untertägiger Deponiesysteme ableiten lassen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Übersichts-Screening

AP2: Detailuntersuchungen ausgewählter Systeme mit Analyse von Reaktionsmechanismen

AP3: Ableitung redoxpuffernder Zuschlagstoffe

AP4: Begleitende geochemische Modellierung

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Optimierung der Lasereinstellungen zur Probenmessung
- Batchversuche an drei natürlichen und zwei synthetischen Abfällen unter aeroben und anaeroben Versuchsbedingungen und unter Berücksichtigung unterschiedlicher Kornfraktionen
- Weiterführende Probenbearbeitung für die Messungen der Lösungen mittels nasschemischer Analytik und der Rückstände aus den Batch-Versuchen mittels Laserablationsanalytik: Abziehen der Fluide, Trocknen der Feststoffe, Versetzen der Probe mit Cellulose und Herstellung von Presstabletten
- Nasschemische Analytik der Lösungen sowie graphische Auswertung der Ergebnisse: Elementscreening mit anschließender qualitativer Messung von ausgewählten Hauptelementen und redoxsensitiven Elementen (Al, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Sr, Mo, Cd, Sb, Ba, Hg, Pb, Th, U)
- Laserablationsanalytik an Originalabfällen und den Rückständen aus Batchversuchen (aerob/anaerob) unter Berücksichtigung unterschiedlicher Kornfraktionen
- Weitere Literaturrecherchen zur Immobilisierung von Schwermetallen

4. Geplante Weiterarbeiten

- Batchversuche an drei weiteren natürlichen Abfällen unter aeroben und anaeroben Versuchsbedingungen und unter Berücksichtigung unterschiedlicher Kornfraktionen
- Laserablationsanalytik an Originalabfällen und den Rückständen aus Batchversuchen (aerob/anaerob) unter Berücksichtigung unterschiedlicher Kornfraktionen
- Speziesanalytische Bestimmung redoxsensitiver Elemente in Eluat, Oxidationszustände ausgewählter redoxsensitiver Elemente und Bindungsform von Schwermetallen in bestimmten Abfallphasen
- Analyse von Reaktionsmechanismen
- Zusammenfassen der Arbeiten und Literaturrecherchen in Form eines abschließenden Berichtes

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 C 1264
Vorhabensbezeichnung: Beweissicherungsprogramm zum geomechanischen Verhalten von Salinarbarrieren nach starker dynamischer Beanspruchung und Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie zum dauerhaften Einschluss		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2005 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 627.883,00 EUR	Projektleiter: Dr. Minkley	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit Auffahrung einer Wetterstrecke über dem Gebirgsschlagfeld von 1996 in der Grube Teutschenthal sind die Voraussetzungen für Untersuchungen der Schädigungsauswirkungen in der das Bruchfeld umgebenden hangenden Salinarbarriere gegeben. Neben den experimentellen In-situ- und Laboruntersuchungen sind Arbeiten zur Vervollständigung der Schädigungsmechanik und gebirgsmechanische Berechnungen zur Dimensionierung von Salinarbarrieren vorgesehen. Im Ergebnis des Beweissicherungsprogramms lässt sich eine Sicherheit gegenüber einem Integritäts- und Dichtheitsverlust von Salinarbarrieren ausweisen, die letztendlich auf Versuchen im Maßstab 1:1 unter extremen dynamischen Beanspruchungen basiert, die um ein Vielfaches höher sind als quasi statische Beanspruchungen. Die Forschungsergebnisse sollen zu einer Dimensionierungsrichtlinie für Salinarbarrieren zur Gewährleistung eines dauerhaften, dichten Einschlusses unter den anthropogenen und geogenen Randbedingungen in der flachen und steilen Lagerung führen und somit für eine praktische Umsetzung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen zur Verfügung stehen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Vervollständigung der Schädigungsmechanik
- AP2: In-situ-Untersuchungen zu den Schädigungsauswirkungen in der Salinarbarriere nach starker dynamischer Beanspruchung
- AP3: Laboruntersuchungen zu den Schädigungsauswirkungen an gewonnenen Bohrkernproben aus der dynamisch beanspruchten Salinarbarriere
- AP4: Geomechanische Berechnungen zur Dimensionierung von Salinarbarrieren für ein Endlager in der flachen und steilen Lagerung
- AP5: Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie für die erforderliche Mächtigkeit von Salinarbarrieren zur Erlangung des dauerhaften Einschlusses
- AP6: Erarbeitung des Abschlussberichtes und Dokumentation der Ergebnisse.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: In Ergänzung zu Kurzzeit-Permeabilitätsmessungen in 19 Bohrungen im Leine-Steinsalz über dem Bruchfeld, wurde zusätzlich eine Langzeit-Permeabilitätsmessstelle in einem Bohrloch eingerichtet. Das Bohrloch wurde mit einem Permanentpacker verschlossen und der vordere Teil der Bohrung mit MgO-Beton ausgefüllt. Es wird erwartet, dass die Langzeitmessung in einem größeren Bohrlochvolumen eine belastbare Aussage über die integrale Permeabilität der Steinsalzbarriere nach der starken dynamischen Beanspruchung liefert.
- AP3: Die im Labor durchgeführten Permeabilitätsmessungen unter triaxialer Einspannung an 20 Bohrkernen aus der hangenden Steinsalzbarriere wurden abgeschlossen. Nach Re-kompaktion des durch den Bohrprozess aufgelockerten Kernmaterials wurden bei axialer, d. h. schichtparalleler Durchströmung der Bohrkernproben Permeabilitäten, wie am dynamisch nicht beanspruchten Steinsalz der benachbarten Grube Angersdorf gemessen.
- AP4: Mit dem entwickelten Berechnungsmodell für ein Endlager in der steilen Lagerung wurde die Streckenlagerung simuliert und in thermomechanisch gekoppelten Berechnungen die Beanspruchung der Salinarbarriere ermittelt. Für ein Endlager in einer typischen geologischen Struktur in flacher Lagerung wurde ein geomechanisches Berechnungsmodell aufgebaut und erste Testrechnungen durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Berechnungen mit dem lokalen und nicht lokalen visko-elasto-plastischen Stoffmodell zum Schädigungsverhalten von Steinsalzbarrieren bei anstehendem Gasdruck im Endlager.
- AP2: Bestimmung der Systemsteifigkeit und Druckbeaufschlagung der Bohrung für die Langzeit-Permeabilitätsmessung. Stoßen einer Erkundungsbohrung aus der Wetterstrecke über dem Bruchfeld bis in den Hauptanhydrit zur Überprüfung der Radarreflektoren und gesicherten Einschätzung der Schädigungsauswirkungen in der Salinarbarriere nach der starken dynamischen Beanspruchung.
- AP3: Erarbeitung des Abschlussberichtes über Laboruntersuchungen zu den Permeabilitätsuntersuchungen an den gewonnenen Bohrkernproben.
- AP4: Weiterführung der Berechnungen mit den gebirgsmechanischen Modellen für ein Endlager in der steilen und flachen Lagerung unter Einbeziehung der Bohrlochlagerung.
- AP5: Ableitung erforderlicher Mächtigkeiten von Salinarbarrieren zur Erlangung des dauerhaften Einschlusses.

5. Berichte, Veröffentlichungen

MINKLEY, W. (2008): Integrationsverhalten von Salinarbarrieren. FZK- PTKA, WTE
8. Projektgespräch 06./07. Mai 2008, Wissenschaftliche Berichte

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1275
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt TUC: Gekoppelte Modellierung des C:HM Verhaltens von selbstverheilendem Salzversatz		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2005 bis 31.03.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 257.176,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Verbundprojekt verfolgt das Ziel, Programme für das HM-Verhalten von Salz und Bentonit (*FLAC3D* und *GeoSys/RockFlow*) mit geochemischen Modellberechnungen (*CHEMAPP* über *EQLink*) zu koppeln und Ergebnisse von gekoppelten Berechnungen anhand geeigneter Laborversuche an Vollprüfkörpern und an axial-gelochten Großbohrkernen zu testen. Das Forschungsprojekt ist ein gemeinsames Vorhaben der GRS sowie der Universitäten Clausthal und Tübingen. Als Endergebnis des Teilprojektes wird ein numerisches Modell zur Untersuchung von Abschlussbauwerken mit SVV als Dichtelement mit Berücksichtigung der C:HM-Kopplung sowie der Wechselwirkungen zwischen Auflockerungszonen und Abschlussbauwerken zur Verfügung stehen. Ferner wird durch die enge Zusammenarbeit in einer gemeinsamen Programmentwicklung eine langfristige wissenschaftliche Kooperation angestrebt. Die numerischen Algorithmen für die Modellierung mechanischer Prozesse in tonigen und salinaren Medien sind methodisch sehr ähnlich. Daher ist ein weiteres Ziel dieses Teilprojektes eine Vereinheitlichung der Methoden zur Simulation inelastischer Deformationsprozesse in chemisch reaktiven Systemen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP0a: Aufbau einer Anlage zur Herstellung von mehreren Prüfkörpern gleichzeitig nach Rezeptur von GRS und Optimierung des Herstellungsprozesses
- AP0b: Kurzzeitversuche an ausgehärteten SVV - Vollprüfkörpern von GRS und von TUC nach Rezeptur von GRS
- AP0c: Entwicklung eines neuen Verfahrens, um Prüfkörper mit besser reproduzierbarer Qualität herzustellen
- AP0d: Herstellung der für die Versuche benötigten Prüfkörper
- AP1: Kurzzeitversuche an ausgehärteten SVV - Vollprüfkörpern
- AP2: Kompressionsversuche unter isostatischen Dauerbelastungen
- AP3: Kriechversuche bei einem konstanten Manteldruck
- AP3a: Untersuchung der Gas- und NaCl - Lösungspermeabilität
- AP3b: Untersuchung des Materialverhaltens im Bezug auf Homogenität, Schädigung und Verheilung durch Röntgentomografie
- AP4: Entwicklung eines neuen Stoffmodells für SVV zur Beschreibung des langfristigen Kompaktions- und Kriechverhaltens des SVV nach dem Aushärtungsprozess
- AP5: Modellentwicklung zur Beschreibung der Änderung von Porositäten und Permeabilitäten infolge mechanischer Kompaktion nach dem Aushärtungsprozess
- AP6: Implementierung des zu entwickelnden Stoffmodells für SVV in *FLAC3D*
- AP7: Implementierung der zu entwickelnden Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für SVV in *FLAC3D*
- AP8: Implementierung der Schnittstelle zwischen *FLAC3D* und *CHEMAPP* über *EQLink* (abgearbeitet)
- AP9: Mechanisch – hydraulische Modellierung der Versuche von GRS an gelochten Großbohrkernen.
- AP10: Erste Untersuchungen zur Verwendung des SVV zur Verwendung als Versatzmaterial / Verschlussmaterial im Konzept der Bohrlochlagerung
- AP11: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In einem neuen Verfahren wurde die Prüfkörperherstellung über die Vermischung von SVV und NaCl mit Eis getestet. Die exotherme Reaktion verläuft deutlich langsamer, wodurch deutlich mehr Zeit zum Vermischen zur Verfügung steht und es nicht zum Kochen der Prüfkörper kommt. Im Gegensatz zur wässrigen Lösung füllt das Eis nicht den Porenraum des SVV, sondern besitzt und bewirkt selbst noch ein zusätzliches Porenvolumen, so dass nach der Reaktion immer noch eine Porosität von über 50 % vorliegt. Aus diesem Grund wurden die Prüfkörper für die weiteren Untersuchungen nach dem bisherigen Verfahren hergestellt.

Zur Ermittlung des Kompressionsverhaltens wurde ein Kompressionsversuch mit zyklischer Be- und Entlastung durchgeführt. Die dabei aufgetretenen Volumenverformungen sind jedoch im Vergleich zu der Kompaktion unter konstanter isotroper Belastung während der Permeabilitätsmessungen eher gering. Daher wurde beschlossen, die Porositäts - Permeabilitätsbeziehung nicht aus Kompressionsversuchen, sondern aus der Kompaktionsphase der Permeabilitätsmessungen herzuleiten.

Die Untersuchungen zum Kriechverhalten wurden mit 9 einaxialen Kriechversuchen begonnen. Entgegen der Erwartung sind jedoch alle Prüfkörper bereits nach wenigen Tagen zerbrochen. Anschließend einaxiale Bruchversuche zeigten die Ursache: SVV weist bei einaxialer Beanspruchung eine überraschend geringere Spitzenfestigkeit auf, die aus einer Extrapolation der Versuchsdaten bei kleinen Manteldrücken von 1 oder 2 MPa nicht zu erwarten war. Da in situ davon auszugehen ist, dass grundsätzlich eine mehraxiale Beanspruchung vorliegt, wurde mit der Durchführung von triaxialen Kriechversuchen begonnen. Die bisherigen Ergebnisse der Kriechversuche zeigen, dass trotz Vorkompaktion die gemessenen Kriechverformungen signifikant durch Kompaktionsverformungen überlagert werden und Kriechparameter nicht wie üblich ermittelt werden können.

Die Auswertung der zusätzlichen zu den im Projektantrag vorgesehenen Versuche zur Messung der Gas- und Lösungspemeabilität hat ergeben, dass die angereicherten SVV - Prüfkörper sehr kleine Permeabilitäten von $K < 10^{-21} \text{ m}^2$ aufweisen, Verformungen bis zu 10 % bruchlos ertragen können und nach einer Schädigung die Permeabilität schnell zurückgeht. Die Röntgentomografieaufnahmen belegen hierbei, dass eine mechanische Risschließung stattfindet. Eine chemische Risschließung konnte aufgrund der Überlagerung durch die mechanisch bedingte Risschließung weder festgestellt noch ausgeschlossen werden.

Die von GRS gemessenen Verformungen der axialgelochten Großbohrkerne wurden zunächst mit einem linear - elastischen Stoffmodell unter Berücksichtigung von Axial-, Radial- und Kristallisationsdruck nachgerechnet, um die Ergebnisse der numerischen Berechnungen mit Ergebnissen von analytischen Berechnungen vergleichen zu können. Hierbei hat sich gezeigt, dass die Ergebnisse zwischen Analytik und Numerik gut übereinstimmen, jedoch deutlich von den Messungen abweichen. Ursache hierfür ist, dass die Belastungsphase bei Steinsalz nicht ein linear - elastisches, sondern ein pseudo - elastisches (überlineares) Materialverhalten aufweist. Dieser Befund bestätigt sich durch die nachfolgenden Berechnungen mit dem Stoffmodell *Lubby1*, mit dem die gemessenen Verformungen grundsätzlich abgebildet werden können.

Für die Simulation des In-situ-Versuches wurde ein idealisiertes Modell gewählt, da der Versuch im Carnallitit und in direkter Nähe von weiteren Hohlräumen durchgeführt worden ist. Erste Berechnungen mit Salzgrus als Versatz wurden bereits durchgeführt.

Die zusätzlich angedachten orientierenden Untersuchungen an SVV – Bohrkernmaterial aus der Asse konnten nicht durchgeführt werden, da eine Bohrkernentnahme von Seiten GRS nicht erfolgen konnte.

Mit der Dokumentation der in diesem Projekt erarbeiteten Ergebnisse für den abschließenden Bericht ist begonnen worden.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Kriechversuche werden voraussichtlich im Januar 2009 beendet und anschließend ausgewertet. Die so gewonnenen Stoffmodelldaten werden mit der bereits ermittelten Porositäts – Permeabilitäts – Beziehung in *FLAC3D* implementiert und anschließend die Bohrlochlagerung mit einem SVV Verschluss in einer ersten Annäherung simuliert.

Es sind weitere Berechnungen zu den axialgelochten Prüfkörpern mit variierten Parametern geplant, um eine möglichst gute Übereinstimmung zwischen den gemessenen Axial- und Radialverformungen zu erzielen in der Hoffnung, aus den Parametern Rückschlüsse auf das Materialverhalten des SVV ziehen zu können. Es ist jedoch bereits absehbar, dass eine eindeutige Bestimmung aller Parameter (4 elastische, 7 Korthaus/Hein, 1 Innendruck, 6 *Lubby2*, 2 *Lubby1*) anhand der nur 2 Messdaten Axial- und Radialverformung nicht eindeutig möglich sein wird.

Der Abschlussbericht soll planmäßig Ende März fertig gestellt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 1285	
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt GRS: Laborversuche und Geochemische Modellierung			
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse			
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2005 bis 31.03.2009		Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 602.439,00 EUR		Projektleiter: Dr. Moog	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die aktuell in der Entwicklung befindlichen Programme für die Modellierung hydraulischer und mechanischer Prozesse in Salz-/Bentonit-Barrieren MISES III (TUC) und Geo-Sys/RockFlow (ZAG) sollen mit thermodynamischen Gleichgewichtsrechnungen gekoppelt und anhand geeigneter experimenteller Untersuchungen getestet werden (C:HM-Modellierung).

Dieses Teilprojekt:

- Gewinnung von Messdaten für die Überprüfung von Modellergebnissen der Programme MISES III und ROCKFLOW
- Anpassen der Schnittstelle EQLINK an die Erfordernisse von MISES III und ROCKFLOW

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Salz

AP1.1: Stahlrohr: SVV+Q-Lauge/NaCl-Lösung

AP1.2: Bohrkern: SVV+Q-Lauge

AP1.3: Probenherstellung für TUC

AP2: Bentonit

AP2.1: Einfluss der Ionenstärke

AP2.2: Einfluss des pHs

AP2.3: Einfluss des Ionenaustausches $\text{Na} < - > \text{Ca}$

AP2.4: Einfluss von Ausfällungen im Porenraum

AP3: EQLINK

AP3.1: Anpassung an MISES III und ROCKFLOW

AP3.2: Modellierung des Ionenaustausches

AP3.3: Auswertung von Rechenläufen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Fortführung von AP2.1, 2.3, 2.4:

Aufgrund der niedrigen Fluidflüsse dauern diese Versuche sehr lange. Austretende Lösungen werden beprobt um die Einstellung des Gleichgewichtes zu kontrollieren.

Die Charakterisierung des Tonmaterials durch BGR ergab, dass sowohl die Ton-Chargen aus Greifswald als auch von der GRS zu Beginn der Versuche nicht vollständig homoionisch waren. Da die jeweiligen Tone aber jeweils sehr lange mit homoionischen Lösungen nachäquilibriert wurden, wird nicht erwartet, dass sich diese nachteilig auf die Ergebnisse auswirkt.

Vermutlich aufgrund der unterschiedlichen Trocknungs-Verfahren weisen die beiden Materialien unterschiedliche Drücke auf – bei sonst gleichen Lösungen.

AP3.1: Die Kopplung EQLINK / ROCKFLOW wurde anhand einer Reihe von Benchmark-Rechnungen getestet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung von AP2.1, 2.3, 2.4.

Abfassung des Abschlussberichtes.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine, allerdings wurde auf dem letzten Projekttreffen vereinbart, auf Grundlage der durchgeführten Arbeiten zwei gemeinsame Publikationen zu verfassen.

Zuwendungsempfänger: Eberhard-Karls-Universität Tübingen, Wilhelmstr. 7, 72074 Tübingen		Förderkennzeichen: 02 C 1295
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt Uni Tübingen: Validierung Numerischer Modelle für geochemische Prozesse in geotechnischen Dichteelementen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Daten und Instrumente für die Sicherheitsanalyse		
Laufzeit des Vorhabens: 01.05.2005 bis 31.03.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 233.598,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Kolditz	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundvorhabens ist es, das open source Programmsystem GeoSys/RockFlow für die Modellierung hydraulischer und mechanischer Prozesse in Salz-/Bentonit-Barrieren mit thermodynamischen Gleichgewichtsrechnungen zu koppeln und anhand geeigneter experimenteller Untersuchungen zu testen (C:HM-Modellierung).

Dieses Teilprojekt wird sich schwerpunktmäßig mit geochemischen Reaktionen in tonartigen Materialien als auch salinaren Wirtsgesteinen beschäftigen. Insbesondere geht es um die Einwirkung chemischer Prozesse auf hydro-mechanische Phänomene, wie z. B. Alterationen des Porenraums und damit einhergehende Veränderungen hydraulischer Eigenschaften. Die Kopplung chemischer mit hydro-mechanischen Prozessen soll durch die programmtechnische Verknüpfung der Codes ChemApp und GeoSys/RockFlow (GS/RF) erfolgen. Alternativ wird eine Schnittstelle zum geochemischen Simulator GEMS (Paul-Scherrer-Institut, Schweiz) entwickelt. Durch diese Programmschnittstellen kann zum einen die Expertise beider Gruppen auf den Gebieten Geochemie (Braunschweig) und Hydromechanik (Leipzig) zusammengeführt werden. Ferner wird durch die enge Zusammenarbeit in einer gemeinsamen Programmentwicklung eine langfristige wissenschaftliche Kooperation angepeilt. Die numerischen Algorithmen für die Modellierung mechanischer Prozesse in tonigen und salinaren Gesteinen sind methodisch sehr ähnlich, daher ist die zweite Zielstellung dieses Teilprojektes eine Vereinheitlichung der Methoden zur Simulation inelastischer, zeitabhängiger Deformationsprozesse in chemisch reaktiven Systemen (Zusammenarbeit mit TUC).

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm besteht aus drei aufeinander aufbauenden Arbeitspaketen:

- AP1: Modellentwicklung
- AP2: Softwareentwicklung
- AP3: Modellanwendung auf experimentelle Daten der Projektpartner (Modellvalidierung)
- AP4: abschließende gemeinsame Veröffentlichung der wichtigsten Projektergebnisse

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In dieser Projektphase wurden zwei Themenfelder bearbeitet:

Geochemische Modellierung:

- Nach der programmtechnischen Realisierung der Schnittstelle zwischen GeoSys/RockFlow und dem geochemischen Simulator GEMS in der vergangenen Projektphase wurden Anwendungsbeispiele für komplexe geochemische Systeme, wie nicht-ideale Solid-Solutions erarbeitet (Shao et al. 2008a). Dabei geht es um die Bewertung des Retardationspotentials von Bentonite-Buffern (Shao et al. 2008b).

Geomechanische Modellierung:

- In Absprache mit den Projektpartnern hat die Arbeitsgruppe in Leipzig die Modellierung der SVV- und Bohrkernversuche übernommen.
- Hierfür waren entsprechende Modellerweiterungen notwendig, wie die Implementierung weiterer Stoffgesetze (Transientes Kriechen, Görke et al. 2008).
- Qualitätssicherung: Im Verlaufe des Vorhabens wurde die Benchmarksammlung für chemische Prozesse kontinuierlich erweitert (Kolditz und Shao 2008). Die Benchmarks werden zur Codeverifizierung (Release) verwendet.
- Projektmanagement: Besonders wichtig für die Programmentwicklung und Dokumentation war der Einsatz eines Wikipedias in Kombination mit einem Versionsmanagementsystem.

4. Geplante Weiterarbeiten

In der verbleibenden Laufzeit des Vorhabens (März 2009) sind folgende Arbeitsschritte geplant:

- Geochemie: Vergleichsrechnungen zwischen GeoSysChemApp und GeoSysGEMS zur Verifizierung der geochemischen Modelle, Untersuchung des Einflusses chemisch induzierter Porositätsänderungen auf hydraulische und mechanische Prozesse (C:HM Kopplung).
- Geomechanik: Ergänzende Auswertung vorhandener experimenteller Daten der Projektpartner auf der Basis zweckmäßiger konstitutiver Beziehungen.
- Anfertigung des Abschlussberichts.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kolditz O and Shao H (Ed) (2008): GeoSys/RockFlow – Developer Benchmark Book. V4.8, Helmholtz Centre for Environmental Research (UFZ) and Federal Institute for Geosciences and Natural Resources (BGR), Technical Report, 288pp.

Rutqvist J, Barr D, Birkholzer JT, Fujisaki K, Kolditz O, Liu GS, Fujita T, Wang W, Zhang CY (2008): A comparative simulation study of coupled THM processes and their effect on fractured rock permeability around nuclear waste repositories, Environmental Geology, DOI: 10.1007/s00254-008-1552-1.

Shao H, Kosakowski G, Kulik DA, Kolditz O (2008a): Modeling effects of different chemical mechanisms on the retardation of radio nuclides in the near field of a radioactive waste repository. ModelCare2009, 7th International Conference on Calibration and Reliability in Groundwater Modeling “Managing Groundwater and the Environment”, Wuhan, China

Shao H, Dmytrieva S, Kolditz O, Kulik DA, Kosakowski G (2008b): Modeling reactive transport in non-ideal aqueous - solid solution system. Submitted to Applied Geochemistry.

Goerke U-J, Wang W, Kolditz O (2008): Preparation and implementation of the Hou/Lux material model for complex rate dependent material behaviour of rock salt, UFZ, Technical Report.

Zuwendungsempfänger: Universität Leipzig, Ritterstr. 26, 04109 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 C 1305
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswerteeinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. Teilprojekt Uni Leipzig: Geologie, Geoelektrik, Seismik und Szenarienmodellierung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2005 bis 31.10.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.10.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 579.486,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Ehrmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Für die Detektion und Charakterisierung von Problemzonen in der geologischen Barriere von Endlagern und Untertagedeponien liegt in Ansätzen ein komplexes Mess- und Auswerteeinstrumentarium vor, das in Ausgangsvorhaben (02C0558, 02C0568, 02C0578 und 02C0851, 02C0861, 02C0871) entwickelt wurde.

Das Ziel des aktuellen Vorhabens ist die Schaffung eines universellen integrierten geophysikalisches Mess- und Auswerteeinstrumentariums, das unter den allgemeinen Bedingungen der Entsorgung im Salinargestein einsetzbar ist. Im Vorhaben werden geoelektrische und seismische Verfahren sowie spezielle Methoden der Salzgeologie - gekoppelt mit den in den Parallelvorhaben "-Elektromagnetik, Georadar und Quantitative Charakterisierung von Problemzonen (02C1315) und "-Sonarverfahren" (02C1325) bearbeiteten Verfahren - an verschiedenen Standorttypen in Verbindung mit Computermodellierungen eingesetzt. Damit wird ein geophysikalischer Beitrag zur Erkennung, Bewertung und Behandlung von geologisch bedingten Problemen bei der untertägigen Entsorgung geleistet.

Die Ergebnisverwertung umfasst Patentrecherchen, Handlungsempfehlungen, marktfähige Dienstleistungsangebote und Lizenzvergabemodelle. Gegenstand des Vorhabens ist die Einbindung geoelektrischer und seismischer Verfahren in das Verbundvorhaben.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Identifizierung und Charakterisierung der Referenzstandorte
- AP2: Messungen an den Referenzstandorten
- AP3: Bestimmung physikalischer Gesteinsparameter im Labor und in situ
- AP4: FEM-Modellierungen, Szenarienanalyse zur geophysikalischen Erkundung an verschiedenen Standorttypen und geophysikalischer Beitrag zur Problembehandlung
- AP5: Weiterentwicklung des komplexen Mess- und Auswerteeinstrumentariums, Handlungsempfehlungen, Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die geoelektrischen und seismischen Untersuchungen an den Referenzstandorten Sollstedt und Teutschenthal wurden abgeschlossen.

Die Laborarbeiten an Probenmaterial des Referenzstandortes Teutschenthal umfassten die Bestimmung des Wassergehalts nach dem Karl-Fischer-Verfahren, die Ermittlung der Dichte mit Hilfe eines Gaspyknometers sowie die kombinierte Analyse des spezifischen elektrischen Widerstandes in Abhängigkeit vom Wassergehalt. Diese Messungen wurden verdichtet und unter Berücksichtigung der vorliegenden Ergebnisse der geophysikalischen In-situ-Messungen interpretiert. Zur Unterstützung der Interpretation der geoelektrischen Daten sind zusätzliche numerische FEM-Modellierungen unter Annahme konkreter Widerstandsmodelle der Messsituation in der Verbindungsstrecke Teutschenthal – Angersdorf durchgeführt worden. Es erfolgten abschließende Interpretationen der vorliegenden Ergebnisse aller geophysikalischen Methoden in Diskussion mit den Projektpartnern.

Die Zusammenfassung der Forschungsaktivitäten wurde beim 5. Fachgespräch „Geophysik und Barriersysteme“, welches von der Arbeitsgruppe Salinargeophysik in Leipzig in Zusammenarbeit mit dem Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe vorbereitet und am 2. Oktober 2008 durchgeführt wurde, einem breiten Teilnehmerkreis aus Industrie und Forschung vorgestellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die FuE- Arbeiten sind abgeschlossen. Der Abschlussbericht wird erstellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Schütze, C., Just, A., Rücker, C., Zöllner, H., Schicht, T. (2008): Underground DC-geoelectrical and seismic surveys to investigate weakness zones in salt rock formations. Near Surface - 14th European Meeting of Environmental and Engineering Geophysics, Krakow Poland, 15. - 17. September 2008.

Schütze, C., Just, A., Rücker, C., Matthes, K., Serfling, U., Zöllner, H., Schicht, T. (2008): Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswertinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. 5. Fachgespräch „Geophysik und Barriersysteme“, Leipzig, 2. Oktober 2008.

Just, A., Rücker, C., Schütze, C. (2008): Interpretation geoelektrischer Messungen in einem Salzbergwerk mit Hilfe von 3D FE-Modellierungen. 13. Arbeitsseminar „Hochauflösende Geoelektrik“, Leipzig, 8./9. Oktober 2008.

Zuwendungsempfänger: Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 C 1315
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswerteinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. Teilprojekt GGA: Elektromagnetik, Georadar und Quantitative Charakterisierung von Problemzonen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2005 bis 31.10.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.10.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 340.080,00 EUR	Projektleiter: Ziekur	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Für die Detektion und Charakterisierung von Problemzonen in der geologischen Barriere von Endlagern und Untertagedeponien liegt in Ansätzen ein komplexes Mess- und Auswerteinstrumentarium vor, das in Ausgangsvorhaben (02C0558, 02C0568, 02C0578 und 02C0851, 02C0861, 02C0871) entwickelt wurde.

Das Ziel des aktuellen Vorhabens ist die Schaffung eines universellen integrierten geophysikalisches Mess- und Auswerteinstrumentariums, das unter den allgemeinen Bedingungen der Entsorgung im Salinalgestein einsetzbar ist. Im Vorhaben werden die Verfahren Elektromagnetik und Georadar mit den in den Parallelvorhaben "- Geologie, Geoelektrik, Seismik und Szenarienmodellierung" (02C1305) und "- Sonarverfahren" (02C1325) in verschiedenen Standorttypen eingesetzt und die verwendeten Methoden verknüpft. Eine aufwändige geostatistische Auswertung aller geophysikalischen Messergebnisse wird eine quantitative Charakterisierung von Problemzonen ermöglichen. Damit wird ein geophysikalischer Beitrag zur Erkennung, Bewertung und Behandlung von geologisch bedingten Problemen bei der untertägigen Entsorgung geleistet.

Die Ergebnisverwertung umfasst Patentrecherchen, Handlungsempfehlungen, marktfähige Dienstleistungsangebote und Lizenzvergabemodelle.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

1. Identifizierung und Charakterisierung der Referenzstandorte
2. Messungen an den Referenzstandorten
3. Bestimmung physikalischer Gesteinsparameter im Labor und in situ
4. Quantitative Charakterisierung von Problemzonen durch geostatistische Auswertung aller geophysikalische Messergebnisse
5. Weiterentwicklung des komplexen Mess- und Auswerteinstrumentariums, Handlungsempfehlungen, Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die dominierenden Arbeiten sowohl für die Georadarmessungen als auch für die quantitative Charakterisierung von Problemzonen im Salinar bestanden in der Anfertigung der Teilbeiträge zum Abschlussbericht.

Aus den EM-Messungen lassen sich keine geologisch relevanten Schlussfolgerungen ableiten, da die Daten in den beiden untersuchten Standorten Sollstedt und Teutschenthal infolge metallischer Einbauten stark gestört waren und daher bei der kombinierten Auswertung keine Berücksichtigung finden.

Anhand der Georadarergebnisse konnten für beide Standorte Modelle erstellt werden, die an einigen Stellen Hinweise auf mögliche Problembereiche geben. Daneben konnten geologische Schichtgrenzen und mögliche Auflockerungszonen ausgewiesen werden.

Die in den Parallelvorhaben Geoelektrik, Seismik, Sonar und Geologie gewonnenen Ergebnisse wurden mit denen des Georadars verknüpft. Durch die Anwendung der multivariaten statistischen Lernmethoden SVM (Support-Vektor-Maschinen) und ANN (Artificial Neuronal Network) auf alle geophysikalischen Messergebnisse sollte die quantitative Charakterisierung von Problemzonen (insbesondere von Salzlösungsvorkommen im Salzgestein) ermöglicht werden. Damit wurden bessere Resultate erzielt als mit der früher angewendeten univariaten Methode. Insgesamt betrachtet, lassen sich durch Anwendung der Mustererkennungsmethoden Anzeichen für Anomalien verdichten, die in den Ergebnissen der Einzelmethoden nicht eindeutig zuzuordnen wären oder nur andeutungsweise vorhanden sind. Die Mustererkennungsergebnisse sollten aber grundsätzlich unter Einbeziehung der Ergebnisse der Einzelverfahren betrachtet werden. Dennoch liefern sie wichtige Zusatzinformationen über die Lage potentieller Problemzonen.

Die im Rahmen dieses Projektes gewonnenen Erkenntnisse wurden in einem Vortrag (UCHTMANN et al. 2008a) beim 5. Fachgespräch ‚Geophysik und Barriersysteme‘ in Leipzig vorgestellt.

Zusätzlich wurde für die Ergebnisse der Multi-Offset Georadarmessungen der Entwurf einer Veröffentlichung in einer renommierten Fachzeitschrift erstellt.

Ein weiterer Beitrag mit dem Titel „A new rock classification method using GPR attributes and model data with multi-variant pattern recognition.“ wurde fertig gestellt und bei der Zeitschrift *Geophysical Prospecting* eingereicht.

4. Geplante Weiterarbeiten

Keine.

5. Berichte, Veröffentlichungen

UCHTMANN, S., EHRET, B., ZIEKUR, R. & WONIK, T. (2008a). Georadarkerkundung und Komplexauswertung im Salinar. – *Vortrag auf dem 5. Fachgespräch ‚Geophysik und Barriersysteme‘*, 02.10.2008, Leipzig.

UCHTMANN, S. (2008b). Multi-Offset-Georadarmessungen in den Bergwerken Teutschenthal und Sollstedt. – *Interner Bericht des GGA-Instituts*, 30.09.2008; Hannover.

UCHTMANN, S. & EHRET, B. (2008c). Georadar- und Elektromagnetikmessungen in den Bergwerken Teutschenthal und Sollstedt. – *Interner Bericht des GGA-Instituts*, 14.10.2008; Hannover.

EHRET, B. (2008a). Mathematisch-statistische Verfahren zur quantitativen Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. – *Interner Bericht des GGA-Instituts*, 24.10.2008; Hannover.

Zuwendungsempfänger: Fraunhofer Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V. (FhG), Hansastr. 27 c, 80686 München		Förderkennzeichen: 02 C 1325
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswerteeinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. Teilprojekt FhG: Sonarverfahren		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2005 bis 31.10.2008	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.10.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 477.455,00 EUR	Projektleiter: Dr. Kühnicke	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Für die Detektion und Charakterisierung von Problemzonen in der geologischen Barriere von Endlagern und Untertagedeponien liegt in Ansätzen ein komplexes Mess- und Auswerteeinstrumentarium vor, das in Ausgangsvorhaben (02C0558, 02C0568, 02C0578 und 02C0851, 02C0861, 02C0871) entwickelt wurde.

Das Ziel des aktuellen Vorhabens ist die Schaffung eines universellen integrierten geophysikalischen Mess- und Auswerteeinstrumentariums, das unter den allgemeinen Bedingungen der Entsorgung im Salinar flexibel einsetzbar ist. Gegenstand des Vorhabens ist die Einbindung der Sonarverfahren in das Verbundvorhaben, bei dem außerdem die Bearbeitungskomplexe „Geologie, Geoelektrik, Seismik und Szenarienmodellierung“ (02C1305) und „Elektromagnetik, Georadar und Quantitative Charakterisierung von Problemzonen“ (02C1315) an verschiedenen Standorttypen eingesetzt werden. Damit wird ein geophysikalischer Beitrag zur Erkennung, Bewertung und Behandlung von geologisch bedingten Problemen bei der untertägigen Entsorgung geleistet.

Die Ergebnisverwertung umfasst Patentrecherchen, Handlungsempfehlungen, marktfähige Dienstleistungsangebote und Lizenzvergabemodelle.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Auswahl und Charakterisierung von Referenzmessorten
- AP2: Sensorentwicklung hochempfindlicher niederfrequenter Ultraschallaufnehmer
- AP3: Entwicklung bergbautauglicher Sonar-Messtechnik mit hohem Schutzgrad
- AP4: Parametergewinnung, Messkampagnen
- AP5: Weiterentwicklung der Rekonstruktionsverfahren
- AP6: Auswertung des Datenmaterials, Datenfusion
- AP7: Abschlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Im Berichtszeitraum keine Aktivitäten.

AP2: Im Berichtszeitraum keine Aktivitäten.

AP3: Die Softwareentwicklung für das bergbautaugliche 16-kanalige Ultraschall-Messsystems wurde fortgesetzt. Es wurden der Prototyp eines vielkanaligen, dezentral aufgebauten Prüfsystems »AE.net« und spezifische Messsonden entwickelt, mit denen Prüfaufgaben an der Tagesoberfläche, von untertägigen Auffahrungen aus sowie in Bohrungen gelöst werden können. Für alle Gerätemodule besteht die Möglichkeit zur Fernbedienung über Internet. Bestandteil des Prüfsystems sind Sensoren mit integrierten Vorverstärkern und analogen Bandfiltern für Volumen-, Platten- und Oberflächenwellen.

AP4: Im Berichtszeitraum keine Aktivitäten.

AP5: Im Berichtszeitraum keine Aktivitäten.

AP6: Schwerpunkt der abschließenden Interpretationsarbeiten war die Datenfusion der unterschiedlichen Messverfahren. Die Modularität des geschaffenen Auswertesystems gestattete die Übergabe unterschiedlich prozessierter Sonardaten als Trainingsdaten für die bei der Komplexinterpretation eingesetzte Mustererkennung.

AP7: Es wird ein gemeinsamer Abschlussbericht mit den Projektpartnern erstellt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Ergebnisse des Forschungsvorhabens wurden am 2. Oktober 2008 im Rahmen des 5. Fachgesprächs „Geophysik und Barriersysteme“ am Institut für Geophysik und Geologie der Universität Leipzig vorgestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 1335
Vorhabensbezeichnung: Qualifizierung von Strömungsbarrieren in Salzformationen, Phase 1 bis Phase 4		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2005 bis 28.02.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.430.864,00 EUR	Projektleiter: 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 wurden die In-situ-Arbeiten im senkrechten Bohrloch im Carnallit im Bergwerk Asse erfolgreich abgeschlossen. Es konnte gezeigt werden, dass ursprüngliche vorhandene Wegsamkeiten zwischen dem Bohrlochtiefsten und der darunterliegenden Wendelstrecke durch den SVV-Verschluss abgedichtet werden konnten. Lösungen die mit einem Lösungsdruck von 30 Bar auf den SVV-Verschluss aufgegeben wurden, sind auch nach mehrmonatiger Beobachtungszeit nicht in der Wendelstrecke ausgetreten. Proben für Nachuntersuchungen wurden aus den, ebenfalls in der Asse durchgeführten, Versuchen in den großkalibrigen Druckrohren entnommen und im GRS-Labor untersucht. Die ermittelten hydraulischen und mechanischen Parameter liegen in den aus den früheren Labor- und In-situ-Versuchen bereits bekannten Bandbreiten (s. Herbert 2007).

Die Planungen für einen weiteren großkalibrigen In-situ-Versuch, diesmal in einem horizontalen Bohrloch mit dem Durchmesser von ca. 1,2 m, im Carnallit-Tachydrit-Salzgestein im Bergwerk Teutschenthal, wurden begonnen und abgeschlossen. Unterlagen für den Betriebsplan wurden erstellt und eingereicht. Die Genehmigung des Bergamtes für den Versuch liegt vor. Mit den Untertagearbeiten, d. h. der Erstellung des großkalibrigen Bohrlochs, wurde begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Nachdem sich die Herstellung der für den Versuch benötigten Carnallit-Tachydrit gesättigten Lösung durch Aufsättigung von Grubenlauge aus Teutschenthal als sehr aufwendig und teuer herausgestellt hat, werden nun die benötigten Lösungsmengen von ca. 3 m³ aus Chemikalien im Labor in Braunschweig hergestellt und anschließend in einem temperierten Fahrzeug nach Teutschenthal verbracht. Die Beschaffung der im Versuch einzusetzenden Instrumentierung ist weitgehend abgeschlossen. Zurzeit werden Porendruckaufnehmer im Labor auf Temperaturbeständigkeit getestet. Diese Fühler waren im Asse-Versuch bei Temperaturen von über 90 °C ausgefallen. Mit den vorbereitenden Arbeiten im Bohrloch und der Instrumentierung kann Ende Februar begonnen werden. Anschließend erfolgen die Verfüllung des Bohrlochs mit SVV und die Erstellung des Widerlagers. Mit dem eigentlichen Versuchsbeginn, d. h. mit der Einbringung von Lösung in den SVV ins Bohrloch, wird gegen Ende Frühjahr 2009 gerechnet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1355
Vorhabensbezeichnung: Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrieren-Gebirge (Salinar)		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2005 bis 31.12.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 581.000,00 EUR	Projektleiter: 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 Salinalgewirge 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 und Gas werden weiterhin durchgeführt.
- AP2: Weitere Infiltrationsversuche mit Tracer-Flüssigkeit bei einem signifikant höheren Druckniveau sind in das Laborprogramm aufgenommen worden, aufgrund der derzeit durchgeführten Infiltrationsversuche mit Gas allerdings in das erste Halbjahr 2009 verschoben worden.
- AP3: Im Berichtszeitraum wurde der Modellierungsansatz zur Infiltration von Fluiden in ein Salinargebirge nicht weiter modifiziert. Vielmehr wurde die Implementierung des bisherigen Ansatzes abgeschlossen und an Beispielrechnungen validiert.
- AP4: Die Implementierung des Modellierungsansatzes wurde abgeschlossen.
- AP5: Infiltrationsversuche an teilweise axial gelochten Prüfkörpern wurden durchgeführt.
- AP6: Die Validierung des Infiltrationsmodells und die numerischen Simulationen sind derzeitiger Projektschwerpunkt.
- AP7: Arbeiten an verschiedenen Beispielen sind aufgenommen worden.
- AP8: Keine.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1/2: Die weiteren Versuche werden mit Tracer-Flüssigkeit durchgeführt. Dabei werden sowohl das Niveau des Fluidrucks als auch Mantel- und Axiallast angehoben.
- AP3: Weitere theoretische Ansätze sind zurzeit nicht vorgesehen; schwerpunktmäßig wird an der Umsetzung / Implementierung / Verifizierung bzw. Validierung gearbeitet.
- AP4: Die Implementierung der 3D-Infiltration wird weiterhin validiert. Schwerpunkt ist dabei die Berücksichtigung von Gasbildungsprozessen in versetzten Grubenbauen.
- AP5: Die Versuchsdurchführung an vollständig oder teilweise axial gelochten Prüfkörpern wird fortgesetzt.
- AP6: Weitere Verifikations- und Validierungsberechnungen werden nach Erfordernis vorgenommen. Die exemplarische Nachrechnung eines Laborversuchs mit einem teilweise axial gelochten Prüfkörper wird mit Hilfe der Simulationssoftware durchgeführt.
- AP7: Weiterführung der Arbeiten an exemplarischen Beispielen (Bernburg-Kaverne, Bernburg-Bohrlochfracversuch mit Gas).
- AP8: Abschlussbericht.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: K-UTEC AG Salt Technologies, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen		Förderkennzeichen: 02 C 1395
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 615.337,00 EUR	Projektleiter: Dr. Heuchel	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Innerhalb der Arbeitspakete 2 und 3 wurden folgende Schwerpunkte bearbeitet:

- Handhabungsversuche mit ausgewählten Rezepturen auf der Grundlage der Magnesiabindersysteme auf Sulfatbasis
- Erprobung eines optimierten Systems in einer kleintechnischen Versuchsanlage

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Auf der Grundlage verschiedener Rezepturen für ein Baustoffsystem mit Zuschlagstoffen wurden Versuche zur Charakterisierung der Rezepturen durchgeführt. Es wurden inerte Zuschlagstoffe auf Quarzbasis (Quarzsand unterschiedlicher Körnung, Quarzmehl, Microsilica) verwendet und Druckfestigkeiten um 20 MPa erreicht. Einen weiteren Schwerpunkt der Untersuchungen bildete die Verlängerung der Verarbeitungszeit. Mit dem Zusatz eines handelsüblichen Betonverzögerers auf Phosphatbasis und durch Modifizierung der inerten Zuschlagstoffmenge konnte ohne Festigkeitsverlust die Verarbeitungszeit von < 1 Stunde auf > 2 Stunden erhöht werden.

Im Verlauf der Bearbeitung wurden folgende Untersuchungen zur Charakterisierung der Rezepturen bzw. zur Aussteuerung der Eigenschaften durchgeführt:

- Bestimmung der Fließmaße / Verarbeitungszeit
- Suspensionsdichte und Sedimentationsstabilität
- Erstarrungsverhalten
- Temperaturentwicklung
- Quell- bzw. Schwindverhalten
- Festigkeitsentwicklung
- Rheologische Untersuchungen.

Die Untersuchung der rheologischen Eigenschaften erfolgte mit einer ausgewählten Rezeptur in einem Pumpversuch. Dieser Versuch erbrachte die Bestätigung der Verarbeitungszeit, die Sedimentationsstabilität, den Nachweis der Festigkeiten bei einem Scale up auf die 20-fache Probemenge sowie die Ermittlung von rheologischen Kennwerten wie Fließgesetz, Viskosität und Fließgrenze.

Der kleintechnische Versuch wurde mit der ausgewählten Rezeptur realisiert, wobei sich die Verarbeitbarkeit auch im größeren Maßstab (2 m³) bestätigte. Nach Erhärten des Probekörpers wurde eine Stirnseite mit S30-Lösung beaufschlagt und nach Konsolidierung des Probekörpers schrittweise druckbeaufschlagt. Über einen Zeitraum von > 6 Monaten wurden und werden Drücke, Temperaturen sowie Verformungen an der Versuchseinrichtung an verschiedenen Stellen des Probekörpers registriert und ausgewertet.

4. Geplante Weiterarbeiten

Der Versuchsbetrieb der kleintechnischen Versuchsanlage wird weiter aufrecht erhalten.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1405
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 330.406,00 EUR	Projektleiter: 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 m³ - 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

Während des Berichtszeitraumes wurden die Untersuchungen in der Triaxialzelle mit Proben der Firma K-UTEC (System: MgO-MgSO₄-H₂O) und des Institutes für Nichtmetallische Werkstoffe (Proben auf Phosphatbasis) fortgeführt. Der Einbau der Proben erfolgte 28 Tagen nach ihrer Herstellung. Dabei sind die Versuchsparameter gleich geblieben. Es wurde mit einem axialen Druck von 15 MPa und einem Durchströmdruck von 6×10^5 Pa gearbeitet, durchströmt wurde mit einer gesättigten NaCl-Lauge. Die Dauer eines Versuches beträgt ca. 4 Wochen. Die Ergebnisse blieben unverändert. Während die Proben auf Phosphatbasis keine Verformung und Durchströmung (quantitativ) aufwiesen, sind die Proben auf Sulfatbasis schon nach kurzer Zeit durchströmt worden. Nach dem Ausbau sind alle Proben an das Institut für Nichtmetallische Werkstoffe weitergeleitet worden, um eventuell aufgetretene Gefügeveränderungen zu untersuchen.

Parallel zu den Untersuchungen in der Triaxialanlage wurden mit den Proben auf Sulfatbasis (Fa. K-UTEC) Wärmeleitfähigkeitsuntersuchungen durchgeführt. Dazu sind Platten mit den Abmaßen 500 x 500 x 60 mm hergestellt worden und nach ihrer Aushärtung und Trocknung (Trockenschrank 35 °C) in das Messgerät eingebaut worden. Die Messung erfolgte in Anlehnung an DIN 52 612. Es wurde eine mittlere Wärmeleitfähigkeit von 1,27 W/ (m K) ermittelt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im folgenden Berichtszeitraum werden die verbliebenen Rezepturen der Firma K-UTEC und des Institutes für Nichtmetallische Werkstoffe in der Triaxialanlage geprüft. Parallel dazu werden weiterhin Durchlässigkeitsuntersuchungen mit gesättigter NaCl-Lauge und Q-Lauge stattfinden.

Zur Ermittlung der mittleren Wärmeleitfähigkeit der Proben auf Phosphatbasis des Institutes für Nichtmetallische Werkstoffe werden diese als nächstes in das Wärmeplattenmessgerät eingebaut. Da nicht genügend Material zur Verfügung stand, haben die Platten folgende Abmaße: 250 x 250 x 60 mm. Um diese jetzt in das Plattenmessgerät einbauen zu können, müssen am Gerät noch einige Veränderungen vorgenommen werden.

Einen weiteren Untersuchungsschwerpunkt stellt das Anbindevermögen an das umgebende Salzgebirge dar. Dazu werden Untersuchungen zur Haftscherfestigkeit und Zugfestigkeit mit den beiden optimierten Rezepturen auf Sulfat- bzw. Phosphatbasis durchgeführt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1415
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2005 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 290.000,00 EUR	Projektleiter: 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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im 2. Halbjahr 2008 wurden die entwickelten Rezepturen weiter optimiert. Die Druckfestigkeitsuntersuchungen (7d-112d) die im 1. Halbjahr durchgeführt worden sind, wurden aufgrund widersprüchlicher Ergebnisse wiederholt. Hierbei wurde der E-Modul nur vor der Druck- und Biegezugfestigkeitsmessung ermittelt, so dass eine Unterbrechung der Erhärtung durch Abkühlen ausblieb. Die Ergebnisse zeigen eine stark ansteigende Festigkeitsentwicklung bis zum 14. Tag ($\sim 25 \text{ N/mm}^2$). Anschließend nimmt die Druckfestigkeit nach bisherigem Kenntnisstand nur moderat zu.

Ferner wurden Porositätsmessungen sowie röntgenographische Untersuchungen durchgeführt. Einige Porositätsmessungen müssen aufgrund eines defekten Gerätedefektes wiederholt werden.

Die Untersuchungen ergaben für zwei Rezepturen gewünschte Ergebnisse hinsichtlich Verarbeitbarkeit und Druckfestigkeit. Durch Modifikation der Anmachlösung und Einstellung auf einen pH-Wert von $\text{pH} = 9$ konnte die Verarbeitungszeit des Baustoffes ohne organische Stellmittel bei Raumtemperatur auf ca. vier Stunden verlängert werden. Diese Zeitspanne wird für eine untertägige Verpumpung benötigt.

Zur Ermittlung der Wärmeleitfähigkeit wurden aus dem entwickelten Baustoffplatten hergestellt, die im Institut für Bergbau untersucht werden. Zudem wurden weitere Zylinder für die Untersuchung des Baustoffes in der Triaxial- und Durchströmzelle gegossen und an das Institut für Bergbau geliefert.

Die kalorimetrischen Untersuchungen zur Bestimmung der Reaktionswärme sind durchgeführt worden. Hierzu wird aktuell eine Studienarbeit angefertigt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Raumausfüllung des Baustoffs soll abschließend optimiert werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Auftragnehmer: GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		Förderkennzeichen: 02 C 1426
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 503.928,00 EUR	Projektleiter: Dr. Herbert	

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 (BMW) 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 dreier Projektbesprechungen, Koordination des Gesamtvorhabens, Organisation und Durchführung eines öffentlichen Fachgespräches in Karlsruhe.

Datenbank:

Es wurden Planungen für ein Sicherungssystem durchgeführt. Sie sehen prinzipiell vor, dass geänderte Datensätze vor ihrer Änderung in einer parallel geführten Sicherungsdatenbank unter Speicherung des Datums repliziert werden. Allerdings erscheint die Implementierung eines solchen Sicherungssystems in der ersten Projektphase als wenig sinnvoll, da derzeit noch sehr viele Daten in THEREDA eingetragen und auch geändert werden.

Schnittstellen:

Die auf Excel basierende Eingabeoberfläche wurde weiterentwickelt und wird im Rahmen des Verbundvorhabens für die Eingabe von Daten in THEREDA verwendet. Nunmehr können polytherme Daten und wechselwirkungsbezogene Daten eingegeben werden. Die Entwicklung der Delphi-basierten Eingabeoberfläche wurde für die Dauer der ersten Projektphase eingestellt. Im Zuge der Inbetriebnahme und der zunehmenden Nutzung von THEREDA ergeben sich unvermeidlich immer wieder Änderungen an der Datenbank-Struktur, die nur schwer in das bestehende Delphi-Programm zurück portiert werden können.

Datenerfassung:

Es wurden umfangreiche Literaturstudien für die Elemente Cs, Cr und Rb durchgeführt.

4. Geplante Weiterarbeiten

Projektmanagement:

Organisation und Durchführung von zwei Projektbesprechungen und Koordination des Gesamtvorhabens.

Datenbank:

Im verbleibenden Projektzeitraum keine weiteren Aktivitäten geplant.

Schnittstellen:

Weiterentwicklung der Excel-Oberfläche.

Eingabe von Sets, Speichern originaler Bildungsreaktionen sowiet diese aus Gründen der internen Konsistenz nicht direkt übernommen werden können, Änderung des internen Berechnungsschemas (direkte Umrechnung von $\log K(T)$ in $\log K(T=298.15)$).

Datenerfassung:

Cs, Rb, Sr.

Dokumentation:

Einpflegen etwaiger Änderungen an der Datenbankstruktur in die bestehende Dokumentation.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden		Förderkennzeichen: 02 C 1436
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 109.732,00 EUR	Projektleiter: 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^{III})

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Projektmanagement

- Projekttreffen in Karlsruhe
- kontinuierliche Pflege und Aktualisierung der Intranetseiten unter www.thereda.de

AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation

- Aktivitäten wurden dem BMWi-Teilprojekt zugeordnet, siehe dort

AP3: Datenmanagement: Datenbank, Filter, Parameterdateien

- Iterative Verbesserung der Dateneingabertools (gemeinsam mit GRS)
- Weiterarbeit an generischem Datenformat basierend auf JSON. Einbindung von Datenbankabfragen mittels PHP in www.thereda.de

AP4: Datenbasis für Schwermetalle und Arsen

- Fortführung der Literaturrecherche

4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Pflege und Erweiterung der Intranetseite

AP2:

- Erarbeitung von Kapitel 2 (Konventionen und Strukturen), 4 (Qualitätssicherung) und 7 (Datenausgabe)

AP3:

- Fertigstellung des Exportmoduls für das generisches Datenformat

AP4:

- Einpflege der Daten zur Komplexchemie von Arsen

5. Berichte, Veröffentlichungen

A. Richter und V. Brendler „Vorstellung des Online-Zugangs von THEREDA“. Fachgespräch des Projektträgers Forschungszentrum Karlsruhe, Bereich Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE) "Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - THEREDA", 12. November 2008, Forschungszentrum Karlsruhe

M. Altmaier, V. Brendler, S. Gester, S. Hagemann, H.-J. Herbert, C. Marquardt, H. Moog, V. Neck, A. Richter, W. Voigt, S. Wilhelm: „THEREDA – Thermodynamic Reference Database for Nuclear Waste Disposal in Germany. International High (IHLRW 2008), 08.-12.09.2008, Las Vegas, USA und Proceedings of the 12th International High-Level Radioactive Waste Management Conference, September 07-11, 2008, Las Vegas, 287-290.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		Förderkennzeichen: 02 C 1446
Vorhabensbezeichnung: Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.07.2006 bis 30.06.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 99.646,00 EUR	Projektleiter: 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

- Teilnahme am Projekttreffen FZ Karlsruhe am 10. - 11. November 2008
- Teilnahme am „Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - THEREDA“ beim Projektträger in Karlsruhe
- Erstellung weiterer PDF-Files mit Ergebnissen für das Internet zur Dokumentation der Datenqualität für die Öffentlichkeit, erreichbar über www.thereda.de oder über <http://www.chemie.tu-freiberg.de/~voigt/thereda.html>.

AP5: Datenbasis für System der ozeanischen Salze

- Weiterführung Literaturlaufarbeitung zu neuen Daten des ozeanischen Systems.
- Ermittlung von Pitzer-Parametern zur Wechselwirkung der Komponenten des hexären Systems mit den Säuren HCl und H₂SO₄ für 0 °C ≤ T ≤ 120 °C
- Einarbeitung der T-Funktion der Gleichgewichtskonstanten für die Autoprotolyse des Wassers in THEREDA.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Qualitätsmanagement

- Weitere Mitarbeit am Entwurf der verbindlichen Richtlinien zu: Datenbewertung und -klassifizierung, Nomenklatur von Reaktionen, Temperatur- und Druckfunktionen
- weitere Erarbeitung graphischer Darstellungen der Güte der Systembeschreibung durch die Datenbasis von THEREDA

AP5: Datenbasis für System der ozeanischen Salze

- Ermittlung der Pitzer-Koeffizienten für die Wechselwirkung der Komponenten des hexären Systems der ozeanischen Salze mit den Basen NaOH, KOH, Ca(OH)₂ und Mg(OH)₂.
- Einarbeitung der Pitzer-Parameter für Carbonate und CO₂ sowie der Löslichkeitskonstanten der Carbonate von Na⁺, K⁺, Mg²⁺, Ca²⁺ für T = 25 °C.

5. Berichte, Veröffentlichungen

G. Wollmann, J. Seidel, W. Voigt, „Heat of solution of polyhalite and its analogues at T=298.15 K”, J. Chem. Thermodynamics (2008), doi: 10.1016/j.jct.2008.11.007

Zuwendungsempfänger: Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 C 1456
Vorhabensbezeichnung: Bestimmung der Änderung des räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen nach Wechselwirkung mit Natural Organic Matter (NOM) in geologischen Formationen von Untertagedeponien		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.10.2006 bis 30.09.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 466.693,00 EUR	Projektleiter: 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}C , $^{125/131}\text{I}$, ^{77}Br) einerseits und der Schwermetalle (^{59}Fe , ^{64}Cu , ^{65}Zn , $^{115\text{m}}\text{Cd}$, $^{203/212}\text{Pb}$, ^{203}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 Traceranalytik 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)
- Komplektierungsstudien 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 aus den binären Systemen Zn/Huminsäure, Huminsäure/Granit und Zn/Granit erhaltenen Komplektierungskonstanten und Verteilungskoeffizienten wurden in das „Linear Additive Model“ (LAM) für das ternäre System eingesetzt und mit den experimentellen Daten des ternären Systems (Zn/Huminsäure/Granit) in Abhängigkeit vom pH-Wert (4-9) verglichen. Qualitativ ergibt sich ein paralleler Verlauf mit einem Maximum für den $K_{D,Zn}$ -Wert bei pH 7. Quantitativ wird eine Überbewertung des $K_{D,Zn}$ mit LAM bis zu einer Größenordnung erhalten. Es wurde die zeitabhängige Adsorption von [^{14}C]Huminsäure an Granit und Kaolinit bei pH 6 vermessen. Für den Granit wurde eine Adsorptionsreaktion 2. Ordnung bestimmt ($k = 9,65 \pm 0,32 \text{ L s}^{-1} \text{ mg}^{-1}$). Beim Kaolinit konnte keine Reaktionsordnung ermittelt werden, da vermutlich noch ein zweiter Prozess, wie z. B. Umlagerung an der Oberfläche / Kanten des Kaolinit, eine Rolle spielt. Für eine [^{14}C]Fulvinsäure wurde für die Adsorption an Granit ebenfalls eine Reaktion 2. Ordnung bestimmt ($k = 2,32 \pm 0,16 \text{ L s}^{-1} \text{ mg}^{-1}$). Für die kinetische Untersuchung der Fulvat-komplektierung von ^{59}Fe bei pH 2 ergibt sich ein Gleichgewichtszustand nach 11 Tagen. Die nach dieser Zeit ermittelte Komplektierungskonstante beträgt $\log \beta_{FeFA} = 5,14 \pm 0,09$. pH-abhängige Durchbruchkurven mit Granitsäulen und ^{59}Fe ergaben V_{Fe}/V_{Pore} -Werte von 1,96 und 3,41 sowie 49,75 und Wiedererhalte von 100, 93 und 3 % für pH 2, 3 und 4.

4. Geplante Weiterarbeiten

Für das binäre System Cu/Granit sollen zeitabhängige Verteilungsmessungen durchgeführt werden. Die Adsorptionsstudien (Batch) werden anschließend im binären System Cu/Granit und im ternären System Cu/Huminsäure/Granit im chemischen Gleichgewicht durchgeführt. Die Oxidationsstufen des im NOM gebundenen Schwefels sollen mit Hilfe von XANES bei ANKA/FZK bestimmt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

- A. Mansel: „Mobility of $^{65}Zn^{2+}$ in granite filled columns in the absence and presence of ^{14}C -labelled humic substances.“ 7th NRC, Budapest, 24.-29.08.2008 (Vortrag).
- F. Fellmer, J. V. Kratz, A. Mansel: „Effect of humic acid on the adsorption of ^{65}Zn on granite and ^{64}Cu on kaolinite.“ 7th NRC, Budapest, 24.-29.08.2008 (Poster).

Zuwendungsempfänger: Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Konrad-Wachsmann-Allee 1, 03046 Cottbus		Förderkennzeichen: 02 C 1466
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrogeologie und Geochemie des Gesamtsystems		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.217.647,00 EUR	Projektleiter: 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, Instrumentierung von ca. 20 ausgewählten Messstellen im Deckgebirge und Salinargebirge mit Datenloggern zu kontinuierlicher Erfassung von hydraulischen und hydrochemischen Parametern, Erweiterung des Messnetzes zur Beobachtung der Schachtverfüllungen Leopoldshall I + II,
- Fortführung des Oberflächenwassermessprogramm (Wasserstand, Abfluss, Beschaffenheit),
- Stichtagsmessung Wasserstand, Temperatur, elektrische Leitfähigkeit im Gesamtmessnetz zur Erfassung der hydrogeologischen Situation im Sommerhalbjahr,
- Sondierungen in Messstellen und zugänglichen Schächte zur Erfassung der tiefenorientierte Druck-, Temperatur und Leitfähigkeitsverteilung,
- Planung, Organisation, Durchführung des hydrochemischen Herbstmonitorings im Oktober unter Beteiligung der IHU (Beprobung von Grund- und Oberflächenwasser),
- Fortführung der geologisch-hydrogeologischen Auswertung und Interpretation,
- Plausibilitätsprüfung der erhobenen hydrochemischen Daten, Auswertung der hydrochemischen Beschaffenheitsdaten, hydrogeochemische Modellierungen zu Sättigungsverhältnissen,
- Abschluss der Aufarbeitung von Altunterlagen zu hydrogeologisch relevanten Untersuchungen in Staßfurt,
- Aufbau einer an die Anforderungen des Vorhabens angepassten Projekt-Datenbank mit GIS Anbindung zur Zusammenführung der hydrogeologisch relevanten Daten einschließlich der Überführung der Altdaten,
- Erarbeitung 2-dimensionaler hydrogeologischer Modelle in Zusammenarbeit mit WASY GmbH,
- Erarbeitung eines ersten hydrogeologischen Modells in 3D als „Platzhalter-Modell“ für die Integration der Ergebnisse des TV2 B2.5,
- Umfangreiche Literaturrecherche und Anlegen einer Literaturdatenbank im System Referenzmanager/EndNote.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der Monitoringprogramme, Vorbereitung und Durchführung der hydrochemischen Frühjahrsbeprobung in Zusammenarbeit mit TV5,
- Vertiefte Auswertung der hydrochemischen Beschaffenheitsdaten, Aufbau einer Modellierungsdatenbasis zur exakten Abbildung der Temperaturabhängigkeit der Sättigungsverhältnisse im relevanten Temperaturbereich, hydrogeochemische Modellierungen zu Sättigungsverhältnissen, Reaktionen und Stoffumsätzen,
- Fortführung der Arbeiten am hydrogeologischen 3D-Modell unter Berücksichtigung eines dichteabhängigen Multispeciestransports,
- Beginn der zusammenfassenden Analyse der hydrogeologischen Prozesse im Untersuchungsgebiet in Zusammenarbeit mit den anderen Teilvorhaben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 C 1476
Vorhabensbezeichnung: 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		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 2.728.199,00 EUR	Projektleiter: 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 Gruben-hohlräumen für Staßfurt erstellt. Ungeklärte geologische und hydrogeologische Sachverhalte werden durch Bohrungen untersucht. Die Ergebnisse werden mit einer Datenbank in Internet verfügbar gemacht. Mittels airborne LIDAR-Messungen -, Elektromagnetik, Magnetik und Radiometrie werden tektonische Strukturen des Arbeitsgebietes abgebildet. Die Bodengeophysik präzisiert die gefundenen Strukturen. An Messstellen in Flachbohrungen erfolgt ein Langzeitgrundwassermonitoring. Die gewonnenen Daten dienen der hydraulischen Modellierung im TV6. Durch das seismologische Langzeit-Monitoring sollen Bruchereignisse identifiziert und geortet werden, um so das Hohlraum- und das geomechanische Modell (TV3) verifizieren zu können.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das TV2 umfasst folgende Arbeitspakete:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP Aerogeophysik: Das Processing der Daten der Hubschrauberelektromagnetik wurde abgeschlossen. Zudem wurde die 1-D Inversion der prozessierten Daten für 161 Mess- und 33 Kontroll-Profile durchgeführt und die gemessenen Widerstands- und Tiefenwerte in Form von Vertikalschnitten und Karten erstellt.

AP Bodengeophysik / Grundwasser Monitoring: Bodengeophysikalische Messungen erfolgten in der der Salzstelle Hecklingen sowie Leitfähigkeits- und Temperaturmessungen in der Liethe. In der Bohrung GWE STF 1 wurde eine Vertikalelektrische Messung durchgeführt. Ferner wurden hoch-auflösende Temperatur-Tiefenprofile (bis 400 m Teufe) in verschiedenen Messstellen erstellt und das Grundwassermonitoring fortgesetzt.

AP Laserscanbefliegung: die Bearbeitung der vorliegenden Befliegungen wurde fortgeführt.

AP Seismologisches Monitoring: Die Seismometerstationen (STF1 - STF5) wurden kontinuierlich betrieben und gewartet. Die Daten zeigen bisher keine seismischen Ereignisse festgestellt, die auf senkungsbedingte Bruchvorgänge hinweisen. Zusammen mit der Universität Stuttgart (Prof. Joswig) wurde ein Nanoseismisches Monitoring mit mehreren kleinräumigen Stationsanordnungen (Miniarrays) durchgeführt.

AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung: Abschluss der Arbeiten an den 3D-Hohlraummodellen für die in Staßfurter Salzbergwerke und Übergabe an TV1 und TV6. Zur Charakterisierung des Hutgesteins wurden die Kerne der LAGB- und Altbohrungen lithologisch bearbeitet. Die Korrektur der Projektbohrdatenbank und 3D-Flächen wurden mit aktuellem Stand den Teilvorhaben zur Verfügung gestellt.

AP Server-Datenbank und Koordination des Gesamtprojekts: Die Projektdatenbank wurde erweitert und ist über das Internet erreichbar. Die Ausschreibung von 2 Tiefbohrungen ist erfolgt. Von diesen wurde 2008 eine (GWE STF1) fertig gestellt und für die zweite der Bohrkeller errichtet und der Bohrplatzbau begonnen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP Aerogeophysik: Die Karten der spezifischen Widerstände fließen als Grundlage für eine geologische 3D-Modellierung im Gebiet der Stadt Staßfurt und einer hydrogeologischen Modellierung der untersuchten Region ein. Karten für die Hubschrauberradiometrie (HRD) und die Hubschraubermagnetik (HMG) sind in Vorbereitung.

AP Bodengeophysik / Grundwassermonitoring und AP Laserscanbefliegung: Bodengeophysikalische Messungen werden senkrecht zum Sattelstreichen und zur Verfolgung oberflächennaher sattelparalleler Tiefenstörungen in den Ausläufer des Senkungsgebiets Staßfurt Richtung Südost, und in der Bohrung GWE STF 2 eine weitere vertikalelektrische Bohrlochmessung ausgeführt.

AP Seismisches Monitoring: Kontinuierlicher Betrieb von sechs Messstationen und Datenanalyse zur Überwachung der seismischen Aktivität im Hauptsenkungsgebiet in Staßfurt und Installation eines Bohrlochseismometers in der Bohrung GWE-STF1. Zudem wird die Datenauswertung des Langzeit-Monitoring auf der Grundlage der Ergebnisse des Nanoseismischen Monitorings optimiert.

AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung: Fertigstellung der 3D-Hohlraummodelle der Staßfurter Salzgruben, insbesondere der Grube Friedrichshall. Zudem werden die Arbeiten am geologischen 3D-Modell des Staßfurt-Egelner Sattels fortgesetzt. Die Modellierungen der Tertiär- und Quartärbasisflächen werden abgeschlossen. Für spezielle Bereiche der Sattelstruktur werden detaillierte geologische Modelle erarbeitet.

AP Server-Datenbank, Tiefbohrung und Koordination des Gesamtprojekts: Die Bohrungsdaten der Borungen GWE STF1 und 2 werden für die Aufnahme in die DB aufbereitet und graphisch verfügbar gemacht. Die Bohrung GWE STF2 wird abgeteuft.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Dresbach, Ch., Breitfelder, G., Hammer, J., Jost, G., Meier, A., Behlau, J., Mingerzahn, G.: Das geologische 3D-Modell und Grubengebäude-Modell des Staßfurter Sattels auf der Basis des „ISA-KS“ Sachsen-Anhalt. Abstr. 8. Altbergbaukolloquium, TU Clausthal, 06.-08.11.2008, VGE Verlag, Essen (2008), 47.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1486
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 327.815,00 EUR	Projektleiter: 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 Salztun / Kalisalz.
- AP3: Felsmechanische Laborversuche / Ableitung von Grenzwerten und Randbedingungen für die Initialisierung bruchhafter Deformationen.
- AP4: Entwicklung von Modellierungsansätzen für die numerische Simulation bruchhafter Deformationen und Implementierung in FDM/FEM Software.
- AP5: Exemplarische Prognose des Gebirgstragverhaltens bei gekoppelter Berechnung bruchhafter und bruchfreier Deformationen.
- AP6: Analyse der Berechnungsergebnisse hinsichtlich der Möglichkeit zur Ableitung eines Bewertungsschemas für die Einschätzung der Tagesbruchwahrscheinlichkeit (beschränkt auf ja/nein, nicht aber wann) am Beispiel der Stadt Staßfurt in Verbindung mit den bergbaulich und hydrogeologisch orientierten Teilvorhaben.
- AP7: Schlussbericht

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen von AP3 wurden im abgelaufenen Berichtszeitraum weitere Kurzzeitlaborversuche und Langzeitlaborversuche (Kriechversuche) durchgeführt. Es sind insgesamt über 100 Versuche durchgeführt worden. Alle durchgeführten Versuche sind ausgewertet worden. Somit ist AP3 abgeschlossen.

Festigkeitsmechanische Kurzzeitlaborversuche wurden an Buntsandstein-, Hauptanhydrit-, Kali- und Steinsalzprüfkörpermaterial durchgeführt.

Kriechversuche wurden an Kali und Steinsalz durchgeführt. Viskose Materialparameter wurden für Kali und Steinsalz ermittelt.

Im Rahmen von AP4 wurden die bei der Auswertung der Laboruntersuchungen ermittelten Abhängigkeiten der Bruchfestigkeit von der Minimalspannung für Gesteine des Hauptanhydrits und des Kaliflözes als Bruchbedingung bei der plastischen Berechnung für die numerischen Simulationen programmiert.

Im Rahmen von AP5 wurden mehrere Testberechnungen an dem Modell im Profil C-C (aus dem früheren Projekt 2000) mit den neuen aus den Laboruntersuchungen ermittelten Stoffmodellparametern für Buntsandstein, Anhydrit, Kali und Steinsalz durchgeführt. Die Berechnungsergebnisse haben gezeigt, dass das gemessene Absenkungsgeschehen während des Tagesbruchs 1926 mit den eingesetzten Materialparametern für diesen Schnitt abgebildet werden kann.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Sensitivitätsanalyse zum Einfluss der Betriebsgeschichte/Lastfallabfolge auf die Absenkungsentwicklung in Schnitt C-C
- Analyse der Berechnungsergebnisse hinsichtlich der Möglichkeit zur Ableitung eines Bewertungsschemas für die Einschätzung der Tagesbruchwahrscheinlichkeit (beschränkt auf ja/nein, nicht aber wann)
- Erstellung eines Berechnungsmodells (Netzgenerierung) für eines der neuen im Rahmen dieses Projektes von den Projektpartnern ermittelten Profile (0110, 0113 bzw. 0115)
- Verifikationsberechnungen mit den ermittelten Materialparametern für einen der neuen Schnitte (Schnitte V bzw. VI und 0110, 0113 bzw. 0115)
- Zusammenstellung des Ablaufplans der Rechenläufe (Betriebsgeschichte) für die neuen Schnitte und Nachrechnung der geschehenen Absenkungsentwicklung sowie Sensitivitätsanalyse zur Einschätzung der Tagesbruchwahrscheinlichkeit nach dem entwickelten Schema

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: K-UTEC AG Salt Technologies, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen		Förderkennzeichen: 02 C 1496
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTEC): Grundlagen für Geomodellierung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 643.387,00 EUR	Projektleiter: Gerbig	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Teilvorhaben 4 sind aktuelle geologisch – geotechnische Daten für den Referenzstandort Staßfurt zu ermitteln, zurückliegende Bergschadensentwicklungen zu rekonstruieren und induktiv Aussagen abzuleiten, die als Basisdaten für die vorgesehenen Modellerstellungen dienen. Die Bearbeitung und Ergebnisdarstellung der einzelnen Arbeitspakete sind mit den Teilvorhaben

- TV1 (BTU): Beitrag zur geochemischen Modellierung
- TV2 (BGR): Beitrag zur geologischen Modellierung bzw. Hohlraummodellierung
- TV3 (TUC): Beitrag zur geomechanischen Modellierung, Gefährdungsanalyse
- TV5 (IHU): Beitrag zur geologischen Modellierung
- TV6 (WASY): Beitrag zur geohydraulischen, hydrogeologischen Strukturmodellierung zu koordinieren.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Beistellung geologischer Informationen zur Salzstruktur einschließlich Rechercharbeiten
- AP2: Ableitung digitales Geländemodell aus Laserscan 1. Befliegung (Planung, Auswertung)
- AP3: Ableitung digitales Geländemodell aus Laserscan 2. Befliegung (Planung, Auswertung)
- AP4: Planungs- und Forschungsleistungen für Tiefbohrung des LAGB; Erweiterung Datenbasis für Geomodellierung
- AP5: Ingenieurtechnische Koordinierung und geowissenschaftliche Bearbeitung der im Verbundprojekt geplanten Tiefbohrungen
- AP6: Aufbau eines 3D-Hohlraummodells mit Darstellung der Hohlraumentwicklung
- AP7: Untersuchungen zur Lösekinetik an Salinargesteinen
- AP8: Zusammenstellung mechanischer Eigenschaften des deformierten und gefluteten Gebirges
- AP9: Ausweisung der durch Bruchvorgänge vorgeschädigten Gebirgsbereiche
- AP10: Darstellung von Ergebnissen des seismischen Monitorings mit der lokalen seismischen Station Staßfurt

AP11: Untersuchungen zur Einschätzung der Tagesbruchwahrscheinlichkeit

AP12: Validierung der geomechanischen Berechnungsergebnisse zu OT-Deformation anhand der in-situ durchgeführten Senkungsbeobachtungen

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2/3: Vorbereitung der Datensätze für die Berechnung des Höhendifferenzmodells aus den Laserscanbefliegungen 1997, 2000, 2001 und 2007 an ausgewählten Flächen des Untersuchungsgebietes (Tagesbruchgebiet Westeregeln, Douglashall I/II, Neustaßfurt VI/VII, Flutungs- und Tagesbruchgebiete, Senkungsräume Lehrter Straße / Tankstelle sowie Bernburger Straße / Gollnowstraße, Strandbad, Tagesbruchgebiet Friedrichhall I/II).

AP5: Mitwirkung bei der Präzisierung und Festlegung von drei Bohransatzpunkten (GWE STF 1 – 3) für die weitere Tiefbohrerkundung im Untersuchungsgebiet an der SW-Flanke des Staßfurter Sattels. Erarbeitung des fachlichen Teils der Ausschreibungsunterlagen der Bohrungen GWE STF 1 bis 3 mit Beschreibung der geologischen Standortssituation, Formulierung des Leistungsverzeichnisses und des Preisverzeichnisses und Anpassung entsprechend der Änderungswünsche der BGR Hannover. Die Ausschreibung und Vergabe der Bohrungen GWE STF 1 und 2 erfolgten separat. Die ingenieurtechnische Koordinierung und Betreuung der Bohrung GWE STF 1 und dem entsprechenden Untersuchungsprogramm ist abgeschlossen.

Durchführung von Kernscanarbeiten und Aufbereitung von Bildmaterial für die Tiefbohrung GWE STF 1 im Forschungsverbundvorhaben.

AP7: Untersuchungen zur Lösekinetik, Abschätzung von Massentransportverhältnissen, erste Hohlraum- Bilanzberechnungen.

4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Darstellung und Interpretation der Höhendifferenzmodelle anhand der Laserscandaten von 1997, 2000, 2001 und 2007 für ausgewählte Flächen im Untersuchungsgebiet.

AP5: Koordinierung und Betreuung der Bohrarbeiten sowie der BLM- und Testarbeiten an der Bohrung GWE STF 2. Aufbereitung und Zusammenstellung der Erkundungsergebnisse der im Verbundprojekt abgeteuften Tiefbohrungen.

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: Lösekinetische Untersuchungen unter Berücksichtigung der Ergebnisse an den Bohrungen B, G1, G4 sowie GWE STF 1 und 2.

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.

AP10: Zusammenfassende Darstellung der Ergebnisse des seismischen Ortungssystems.

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

Zuwendungsempfänger: IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur- Hydro- und Umweltgeologie mbH, Dr.-Kurt-Schumacher-Str. 23, 39576 Stendal		Förderkennzeichen: 02 C 1506
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 662.064,00 EUR	Projektleiter: 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. Mit Projektbeginn wurden die vorliegenden geologischen und hydrogeologischen Altdaten zusammengestellt, geprüft und aufbereitet, um sie dann den Projektpartnern zur Verfügung zu stellen. Der Datenbestand wurde und wird durch Recherchen laufend ergänzt und erweitert.

Innerhalb der Bearbeitung des AP3 wurde das Monitoringprogramm der Flachpegel mit den Projektpartnern abgestimmt. Im Oktober 2008 erfolgte die vierte Monitoringkampagne von ausgewählten Altmessstellen im Untersuchungsgebiet. Es wurden 63 Grund- und Oberflächenwassermessstellen beprobt und jeweils bezüglich 17 verschiedener chemisch-analytischer Parameter untersucht. Zusätzlich wurde Probenmaterial für Untersuchungen bei Projektpartnern bereitgestellt.

Zur Standortauswahl und Prioritätenabstimmung der Tiefbohrungen des Verbundvorhabens erfolgten mehrere Konsultationen mit den Projektpartnern. Es erfolgte eine Mitwirkung bei der Erarbeitung der Ausschreibungsunterlagen der Tiefbohrungen durch die BGR und die K-UTEK.

Im Juni 2008 erfolgte ein Workshop des Verbundvorhabens mit dem Ziel eines intensivierten Die Bohrarbeiten der geowissenschaftlichen Erkundungsbohrung GWE STF 1 erfolgten im Zeitraum September bis November 2008. Die Vor-Ort-Fachbegleitung erfolgte vornehmlich durch die K-UTEK und die IHU. Durch die IHU erfolgte die geologische Begleitung und Aufnahme der Bohrung. Aufgrund technischer Probleme und des Termindrucks wurde teilweise durchgehend gebohrt, so dass auch die Bohrbetreuung abschnittsweise rund um die Uhr, d. h. 24 h und 7 Tage die Woche erfolgte.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten im Teilvorhaben werden wie geplant fortgeführt.

Die Schwerpunkte sind, wie im zurückliegenden Berichtszeitraum, die Arbeitspakete 2 und 3: „Erweiterung der Datenbasis durch Bohrungen und geophysikalische Messungen“ sowie „Hydrogeologische Analyse von Strömungsvorgängen und Austauschprozessen“.

Die zweite geowissenschaftliche Erkundungsbohrung GWE STF 2 wird im Januar 2009 begonnen. Die geologische Fachbegleitung erfolgt wiederum durch die IHU. Im April 2009 wird die fünfte Kampagne des hydrogeologischen Grund- und Oberflächenwassermonitorings zusammen mit den Projektpartnern durchgeführt werden. Die gewonnenen Daten der Geologie, Hydrogeologie und Hydrochemie werden erfasst, geprüft, aufbereitet und den Partner zur Verfügung gestellt.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: DHI-WASY GmbH, Waltersdorfer Str. 105, 12526 Berlin		Förderkennzeichen: 02 C 1516
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 367.179,00 EUR	Projektleiter: 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

Zusammen mit der BTU Cottbus wurde die Konzeption für den Aufbau des hydrogeologischen Modells weiterentwickelt. Dieses bildete den Ausgangspunkt für das numerische Modell. Es erfolgten umfangreiche numerische Modellstudien an mehreren repräsentativen geologischen Profilschnitten, die von der BGR (Hammer Gruppe) bereitgestellt wurden. In Abstimmung mit der BTU Cottbus umfassten diese Modellierungen auch Berechnungen mit zwei verschiedenen Salzspezies (sog. *multispecies*: NaCl, MgCl₂) unter Verwendung des in FEFLOW enthaltenen Formeleditors zur Reaktionskinetik. Hier wurden verschiedene Modelle zur Untersuchung dynamischer Prozesse untersucht, die durch Lösen und Fällen von Salz verursacht werden. Bei der Salzfällung werden konstitutive Beziehungen zur Zementierung des Porenraumes berücksichtigt. Weiterhin wurde untersucht, inwieweit sich Dichteeffekte (auch thermischer Art) auf die Strömung in den offenen Bergwerkschächten auswirken. Dazu wurden verschiedene Verfahren getestet, um solche offenen Strömungsbereiche zu modellieren (poröses Medium, *discrete feature elements*, verschiedene Strömungsgesetze: Darcy, Hagen-Poiseuille und Manning-Strickler).

Es wurde mit dem Aufbau des 3D-Modells begonnen. Dazu wurde die horizontale Ausdehnung entsprechend der vermuteten hydrogeologisch wirksamen Begrenzungen festgelegt. Hieraus ergibt sich ein geringfügig größeres Modellgebiet als ursprünglich angesetzt. Das Modellgebiet weist im Ergebnis eine Fläche von ca. 88,5 km² aus und ist durch die folgenden Gauß-Krüger-Koordinaten

HW: 5752000 - 5742600

RW: 4466600 - 4476000

abgegrenzt. Die Stadt Staßfurt liegt im zentralen Bereich dieses Modellgebietes. Die bisherige Diskretisierung des Modellgebietes basiert auf einem Polygonnetz, bestehend aus 66 sog. Super-elementen entsprechend der Geometrie des Hauptgewässernetzes (u. a. Bode), der Sattelstruktur und der Lage von tektonischen Störungen. Auf dieser Grundlage wurde ein Modellnetz generiert, das aus 48,992 finiten Elementen bzw. 24,591 Knoten pro Modellebene besteht. Die Seitenlänge der Dreiecke variiert zwischen 3 m bis 400 m, wobei sie im Kernbereich um die Stadt Staßfurt 10 m bis 20 m beträgt. Die Bode wurde entsprechend ihrer Breite durch flächenhafte Elemente abgebildet. In Abstimmung mit der BGR (Hammer Gruppe) und der BTU Cottbus sind für den Aufbau des 3D-Modells 12 hydrogeologische Schichten (Einheiten) zu berücksichtigen. Die maßgeblichen Schichtgrenzen der betrachteten hydrogeologischen Einheiten werden von der Arbeitsgruppe BTU Cottbus, basierend auf den Datengrundlagen der BGR (Hammer Gruppe), schrittweise zur Verfügung gestellt. Es wurde ein ausgewählter Bergwerksbereich in das 3D FEFLOW-Modell integriert, um technische Verfahren zu erproben. Daten der Bode wurden gesichtet und analysiert (Pegelmessungen, Salzfracht). Aufgrund der unbekanntem Größe von anthropogenen Salzeinleitungen ist zurzeit noch unklar, ob sich mittels dieser Daten eine zusätzliche Kalibrierung des Transportmodells durchführen lässt.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Vervollständigung des regionalen 3D-Modells
- Parametrisierung des 3D-Strömungsmodells
- Kalibrierung des 3D-Strömungsmodells
- Parametrisierung eines Transportmodells
- Einbeziehung der vorliegenden Bergwerksgeometrie
- Modellstudien zur Modellierung von zwei Salzspezies (NaCl + MgCl₂)
- Auswertung der vorliegenden Temperaturmessungen zusammen mit BTU, um Rückschlüsse auf advective Prozesse (Strömungswegsamkeiten) zu gewinnen

5. Berichte, Veröffentlichungen

Veröffentlichung in *Mine Water and the Environment* (Heft 1, 2009) mit dem Titel *Numerical modeling of geothermal use of mine water: challenges and examples*.

Zuwendungsempfänger: Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		Förderkennzeichen: 02 C 1526
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 254.420,00 EUR	Projektleiter: Dr. Enzmann	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Vorhaben ist Teil des Arbeitspaketes zur zerstörungsfreien Strukturanalyse repräsentativer Bohrkernproben, das sich in vier Aufgaben gliedert:

(1.) Computertomographie der Bohrkernproben (Messungen an der BAM Berlin), (2.) dreidimensionale Visualisierung der inneren Bohrkernstruktur aus den CT-Daten, (3.) Simulation von Fluidmigration in den durch CT ermittelten real-dreidimensionalen Porenraumstrukturen mit Hilfe des Simulationsprogramms „PoreFlow“ und (4.) der Validierung der Modellsimulationen mit Hilfe von orts- und zeitauflösenden Radionuclidversuchen (PET-Tomogramme des TV8: IIF Leipzig).

Untersuchungsziel ist die strukturelle Analyse an repräsentativen Bohrkernproben zur Bestimmung der durchflusswirksamen Klüftigkeit auf der Skala des Porenraums (μm - cm). Die Erkenntnisse, die aus den Strukturdaten und Fluidsimulationen stammen, sollen u. a. als Inputparameter in die (1) geochemischen Lösungssimulationen (TV1, BTU) und (2) großskaligen hydrogeologischen Grundwassertransportmodelle (TV6, WASY) fließen.

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

AP1.2 + 1.3:

In Absprache mit dem Koordinator und den Projektpartnern erfolgte die Einweisung zweier Mitarbeiter der Fa K-UTEC in die Technik der Kernaufnahme mit dem DMT- CoreScan II. Die Bohrkern der Bohrungen GEW STF1/2 wurden/werden in Verantwortung durch die Fa K-UTEC aufgenommen und gescannt. Im Rahmen der unter AP2.2. erläuterten Diplomarbeit sollen Daten der geophysikalischen Bohrlochmessungen mit Kernscannerdaten korreliert werden, um die Bohrungen nachträglich zu orientieren.

AP1.4:

Insgesamt wurden sechs Proben an der BAM gemessen. Erste an den Datensätzen vorgenommene Auswertungen zeigen nutzbare geologische Strukturen im Sinne der Projektziele von TV7/8. Zusätzlich wurde eine Reihe von Subproben in unserem XCT-Labor untersucht und die Daten werden im Kontext der Projektziele zur Auswertung herangezogen.

AP1.5:

Die Proben stehen dem Projektpartner IIF (TV8) zur Verfügung.

AP2.1:

Entwicklungsarbeiten für das Postprocessing sind abgeschlossen (digitale Bildfilter, 3D Clusteranalyse). Die Arbeiten sind Voraussetzung für AP2.3.

AP2.2:

In 05/08 wurde eine Diplomarbeit zur Charakterisierung von Riss- und Kluftsystemen mit Hilfe des optischen Kernscannverfahrens 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 Anwendung auf die vorhandenen Datensätze (Kernscan + Akustiklog-Daten) ist in Vorbereitung. Die Diplomarbeit ist krankheitsbedingt noch nicht abgeschlossen.

AP2.3:

Die Auswertung und Berechnung der XCT-Daten ist nicht abgeschlossen. In 3/07 wurde eine Diplomarbeit zur räumlichen Referenzierung der XCT- und PET-Datensätze begonnen, die zwischenzeitlich abgeschlossen wurde. Ergänzend zu den XCT und PET Experimenten wurden an ausgewählten Proben Neutronen-Radiographie und Neutronen-Tomographie (NCT) in Verbindung mit XCT an der NEUTRA und ICON Beamline der PSI-SINQ Anlage, Paul-Scherrer-Institut, Villigen, Schweiz, durchgeführt. Die Auswertung dieser Daten ist ebenfalls in Arbeit, erste Ergebnisse liegen vor und wurden im 6./7. Jour Fixe kurz dargestellt. Diese Ergebnisse ergänzen auch die experimentellen PET-Untersuchungen des Projektpartners IIF.

4. Geplante Weiterarbeiten

Gegenwärtig laufen die Auswertungen und Visualisierungen der XCT/HRXCT/NCT Daten und Verbindung mit den Kernscanner-Daten. Erste experimentelle Ergebnisse der PET-Untersuchungen können gezeigt mit den Ergebnissen der XCT-Befunde korreliert werden. Weiterhin wird angestrebt, die begonnene Diplomarbeit mit der thematischen Bearbeitung der Nachorientierung von Kernscann-Daten im Laufe des 2. Quartals 2009 abzuschließen und die Methodik sowie die Ergebnisse dem Projekt (Integration in die Datenbank) zugänglich zu machen.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Kulenkampff, J., Gründig, M., Richter, M., Enzmann, F. (2008): Evaluation of Positron-Emission-Tomography for visualization of migration processes in geomaterials. *Phys. Chem. Earth* 33 (2008) 937-942.

Szeder, T., Janz, M., Enzmann, F., Schwarz, J.-O., Rheingans, K., Goebbels, J. (2008): Application of High Resolution 2D Rock-Core Scanning and 3D X-Ray Computed Tomography to Investigate Geological Features, Posterpresentation MSE 2008, Nürnberg.

Zuwendungsempfänger: Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 C 1536
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 173.362,00 EUR	Projektleiter: 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

- AP2: Eine Verbesserung der Empfindlichkeit und Bildqualität durch den Vollausbau des Scanners konnte nachgewiesen werden, die sogar die Erwartungen übertraf. Einige Nachbesserungsarbeiten, insbesondere bei der Rekonstruktionssoftware, stehen aber noch aus. Aus diesem Grunde sind die bisherigen Auswertungen der Versuchsergebnisse weiterhin als vorläufig zu betrachten.
- AP4: Vorläufige Auswertergebnisse von Experimenten am Deckgestein wurden für die weitere Abstimmung an TV7 (Uni Mainz) übergeben. Nach Absprache mit TV7 sollen im Frühjahr 2009 noch ergänzende Messungen am besonders inhomogenen Buntsandstein vorgenommen werden.
- AP5: Es wurden Injektionsexperimente über zwei Wochen an Steinsalz-Hohlraumversatz durchgeführt, die derzeit ausgewertet werden. Ebenfalls wurden Diffusionsexperimente an Steinsalzproben mit dreiwöchiger Versuchsdauer vorgenommen, um mögliche Umlösungsprozesse im Kontakt mit der Modell-Lauge aus dem Grubenbau und aus dem Buntsandstein nachzuweisen.
- AP6: Mechanisch vorbeladete Proben werden derzeit beschafft.
- AP7: Die bisherigen Messungen dienen zur Kalibrierung der Arbeiten in TV8. Zur weitergehenden Bestimmung von Transportparametern in den heterogenen Materialien aus dem PET-Prozessmonitoring wird derzeit ein DFG-Projektantrag gemeinsam mit dem Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik in Berlin und dem UFZ formuliert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Die Untersuchungen zum Transport- und Löseverhalten von Salinargestein aus dem Deckgebirge an bereits vorbereiteten Proben werden fortgesetzt, nunmehr unter Einbeziehung geomechanisch belasteter Proben. Da aufgrund der ausstehenden Nachbesserungen noch keine endgültige Bildrekonstruktion möglich ist werden nun die Versuchsergebnisse in vorläufiger Form (unkalibriert) aufbereitet.

5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Kulenkampff, M. Gründig, M. Richter, F. Enzmann: Evaluation of Positron-Emission-Tomography for visualisation of migration processes in geomaterials. *Physics and Chemistry of the Earth* 33, 937-942, 2008.

Zuwendungsempfänger: Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 C 1546
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 9 (GGA-S1): Deckgebirgseigenschaften über einem bergbaubedingt destabilisiertem Untergrund, abgeleitet aus seismischen Beobachtungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 265.635,00 EUR	Projektleiter: Dr. Polom	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des TV 9 ist die gebirgsmechanische Analyse und Bewertung des Tragverhaltens des Gebirges über und in den abgesoffenen und z. T. verbrochenen Grubenbauen sowie Ursachenforschung zur Hydrodynamik im oberflächennahen und tieferen Grundwasserstockwerk mit ihren vielfältigen Wechselwirkungen und Lösungsvorgängen.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Erfassung der realen physikalischen Strukturierung der Formation und ihrer internen elastomechanischen Eigenschaften mittels eines 2D-seismischen Profilnetzes unter kombinierter Verwendung von P- und S-Raumwellen und Überführung in das geologische Modell.
- Einbindung dieses Profilnetzes in die punktuell vorliegenden Informationen aus Flach- und Tiefbohrungen (BTU Cottbus) zur schlüssigen Verknüpfung und Extrapolation in die Fläche.
- Anschließende Verschneidung mit anderen Flächen- bzw. Rauminformationen aus der Aerogeophysik, Geoelektrik, Elektromagnetik und dem seismologischen Monitoring (alle BGR).
- Zur Teufenkalibrierung der seismischen Oberflächenmessungen und zur Verifizierung anderer bohrlochgeophysikalischer Daten (K-UTEC) werden zusätzlich vertikalseismische Profile (VSP) unter Verwendung einer digitalen 3K-Geophonsonde und vibrationsseismischer P- und S-Quellen in den Tiefbohrungen sowie in ausgewählten Flachbohrungen durchgeführt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Mit derzeitigem Stand Bearbeitungszeitpunkt ist bei allen bisher gemessenen P-Wellenprofilen ein erfolgreiches Feinprozessing zur detaillierten Extraktion der Wellensignale durchgeführt worden. Zum Teil ergaben sich dabei erhebliche Verbesserungen in der Abbildungsqualität der seismischen Stapelsektionen. Hier ist insbesondere ist das Profil Strandbad-lang zu nennen, das im sukzessiven Fortschritt der Erkundungsergebnisse in drei Segmenten mit unterschiedlicher Parametrisierung vermessen wurde. Durch die verbesserte Abbildungsqualität ist es nun möglich, eine wesentlich detaillierte, profilübergreifende geologische Interpretation unter Einbeziehung der Bohrungsaufschlüsse durchzuführen und zu neuen Indikationen über das Störungssystem in Staßfurt zu gelangen. Die derart indizierten Störungen bilden sich auch in den Ergebnissen der LIDAR Befliegung ab (vgl. Zwischenbericht 1. Halbjahr 2008). Im Rahmen der engen methodenübergreifenden Zusammenarbeit mit den Verbundpartnern und der fortschreitenden Verfügbarkeit der Auswertungsergebnisse können nun auch vermehrt die Ergebnisse verschiedenartiger Verfahren miteinander in Beziehung gesetzt werden. Danach ergeben sich weitere Hinweise auf Störungen aus den Ergebnissen der Bodengeophysik (BGR), insbesondere aus den gleichstromgeoelektrischen Messungen im Bereich Strandbad. Nach dem derzeitigen Erkenntnisstand wird vermutet, dass es sich bei den indizierten Störungsansprachen um ein wasserführendes Störungssystem handelt, was durch erste Auswertungsergebnisse der hydraulischen Messungen in den Tiefbohrungen (BTU Cottbus) erhärtet wird.

4. Geplante Weiterarbeiten

Nach dem aktuellen Stand der Auswertung und Interpretation der P-Wellen-Sektionen erscheint es notwendig, weitere seismische Messungen im Stadtgebiet Staßfurt durchzuführen, um fundierte Kenntnisse über die vermuteten Störungsverläufe im Stadtgebiet zu erlangen. Hier sind P-Wellenprofile von Interesse, welche den ungestörten Bereich im Süden des Strandbades erfassen, da dieser Bereich bislang nur im westlichen Abschnitt des Profils Strandbad-lang abgebildet werden kann. Weiterhin steht eine seismische Linie entlang der Bahnlinie im Bereich des Bahnübergangs Bernburger Straße in der Diskussion, um den Messlinienabstand zwischen dem Profil am Mühlengraben und den Profilen Industriestraße zu verringern. Dieses Profil ist auch hinsichtlich der Fragestellungen zum dort vermuteten Trennpfeiler der Grubenbauwerke von Interesse und war daher schon in früheren Projektphasen als potentiell Profil in die Planungen aufgenommen worden. Aufgrund des deutlich erhöhten logistischen Aufwandes im Zusammenhang mit den Einrichtungen der DB AG, des hohen Verkehrsaufkommens, notwendiger Verkehrssperrungen und eventuell notwendiger Nacharbeiten kann dieses Profil allerdings nicht kurzfristig realisiert werden. Die Bearbeitung der S-Wellenprofile wird fortlaufend neben der prioritären Bearbeitung der P-Profile weitergeführt und die Ergebnisse speziell hinsichtlich der oberflächennahen Interpretation und zu Aussagen bezüglich Strukturfestigkeiten einbezogen. Aufgrund des vorliegenden fortgeschrittenen Interpretationsstandes erfolgt eine sukzessive Verschneidung mit den Ergebnissen der Verbundpartner mit dem Ziel einer methodenübergreifenden Gesamtinterpretation in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Stilleweg 2, 30655 Hannover		Förderkennzeichen: 02 C 1556
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.09.2006 bis 30.06.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 253.554,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Frechen	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das TV10 umfasst folgendes Arbeitsprogramm:

- Pflege des Datenbestandes inkl. Datenrecherche und Erweiterung des Altdatenbestandes
- Isotopenhydrologische Probennahme vor Ort aus den Tiefbohrungen und aus den Flachpegeln
- Isotopenhydrologische Messanalytik im Labor. Untersuchung der stabilen Isotope, Tritium, Tritium/³Helium, ¹⁴C-Datierung, FCKW und SF₆.
- 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

In diesem Berichtszeitraum wurde eine weitere isotopenhydrologische Messkampagne durchgeführt. Dazu wurden im Oktober 2008 in enger Zusammenarbeit mit dem Projektpartner BTU Cottbus und dem Ingenieurbüro IHU Geologie und Analytik Stendal 53 Grundwasser-Messstellen verschiedener Tiefen beprobt und 13 Proben aus Oberflächenwasser entnommen. Die Analytik dieser entnommenen Proben auf ^{18}O , ^2H läuft derzeit. Außerdem erfolgte eine Beprobung wasserführender Horizonte aus der Tiefbohrung GWE ST1 auf ^3H , $^3\text{He}/^4\text{He}$, FCKW, ^{18}O , ^2H , $^{34}\text{S}\text{-SO}_4^{2-}$, $^{18}\text{O}\text{-SO}_4^{2-}$, $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ und ^{13}C und ^{14}C . Die geplante Probenentnahme an der Tiefbohrung GWE STF 2 konnte durch Verzögerung des Bohrbeginns noch nicht durchgeführt werden.

Neben der fortlaufenden Modellierung transienter Tracer (^3H , FCKWs) wurde mit der Bewertung anderer Radiotracer begonnen. So wurden erste Radiokarbondatierungen vorgenommen und die Isotopie gelöster Edelgase betrachtet (^3He , ^4He). Die Analytik der neuen und der Proben aus der Entnahmekampagne April 2008 läuft noch, und wird voraussichtlich im nächsten Berichtszeitraum abgeschlossen sein.

Die Analytik von Gesteinsmaterial auf $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ und $^{34}\text{S}^{18}\text{O}_4$, welches vom Bohrkern G1 entnommen wurde, ist fast abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Fortlaufende Modellrechnungen zur Bestimmung von Grundwasserverweilzeiten im untersuchten System und Bewertung der Isotopensignaturkombinationen zur Bestimmung von Herkunftsindikatoren des Grundwassers. Abgleich der gewonnenen Daten mit wasserchemischen Erkenntnissen der BTU Cottbus.

Planung und Durchführung einer letzten weiteren Beprobungskampagne an bestehenden Bohrungen, um teufen- und lithologiebezogene Isotopenmuster zu spezifizieren. Hierbei wird wieder in der Planung, Durchführung und der Korrelation mit hydrochemischen Daten in enger Zusammenarbeit mit der BTU Cottbus und IHU Stendal verfahren. Weiterhin fortlaufenden Analytik der bereits entnommenen Wasserproben im LIAG-Labor (stabile Isotope und ^{14}C -Datierung) sowie weitere Vergabe von Analytikaufträgen (Tritium und FCKW/SF₆) der noch in 2009 zu entnehmenden Wasserproben.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz		Förderkennzeichen: 02 C 1577
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 238.963,00 EUR	Projektleiter: 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 im Teilvorhaben 1 mit dem von ihm in Kooperation mit der BGR Hannover entwickelten Composite-Dilatanz-Modell (CDM) an dem Stoffgesetzvergleich und verwendet das Finite-Differenzen-Programm FLAC-3D (Fa. Itasca).

Im Berichtszeitraum hat der Zuwendungsempfänger vorrangig die auf dem 4. Projektworkshop im Juli 2008 im FZ Karlsruhe gemeinsam mit den Projektpartnern vereinbarte Studie zum Einfluss der Modelldiskretisierung (Vernetzungsfineinheit) auf Simulationsergebnisse am Beispiel eines Kammer-Langpfeiler-Modells durchgeführt. Dazu wurde das Modell mit einer konstanten Pfeilerstauchungsrate von $1\text{E-}5$ 1/s beaufschlagt und bis in den Nachbruchbereich belastet. Da die bisherige CDM-Version keine Modellierung des Kriechbruchs enthielt, wurde für diese Studie eine entsprechende Stoffgesetz-erweiterung auf der Basis von Laborversuchsdaten für Steinsalz der Grube Angersdorf entwickelt. Diese Grube ist Berechnungsgegenstand der 3D-Simulationen in diesem Verbundprojekt. Mit dem erweiterten CDM und den Kennwerten für das genannte Steinsalz wurden 28 Simulationen mit unterschiedlicher Elementanzahl pro (halbe) Pfeilerbreite (6–24 Elemente) und pro Pfeilerhöhe (6–16 Elemente) berechnet. Die Studie ergab, dass ein solcher hoch belasteter Pfeiler mit mindestens 8 Elementen in der Pfeilerhöhe und mindestens 11 Elementen pro halbe Pfeilerbreite diskretisiert werden sollte, um die Pfeilerstandzeit verlässlich vorhersagen zu können. Das Kriechen des kompakten Steinsalzes vor dem Bruch zeigte dagegen keinen Diskretisierungseinfluss. Diese sowie weitere Ergebnisse wurden auf dem 5. Projektworkshop im Dezember 2008 präsentiert.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2009 wird der Zuwendungsempfänger zunächst die CDM-Parameterkennwerte anhand der inzwischen vorliegenden neuen Laborversuchsdaten des IfG und der TUC zum Steinsalz der Grube Angersdorf überprüfen und ggf. anpassen. Mit ihnen wird er die Vernetzungsstudie noch einmal durchführen und dabei die jeweils erreichte Pfeilergrenzspannung im Bruch auswerten sowie den Vergleich der Ergebnisse der Partner vornehmen. Anschließend wird er sein FLAC-3D-Modell des Ausschnitts der Grube Angersdorf mit den ggf. geänderten Kennwerten und dem erweiterten CDM für einen Zeitraum von wiederum 100 Jahren neu berechnen. Auch hier schließt sich ein Vergleich der Ergebnisse der Projektpartner zum Spannungs- und Verformungszustand im Modell der Grube Angersdorf an – beginnend mit dem Zeitpunkt unmittelbar vor Auffahrung der Hohlräume. Außerdem wird er die Koordination des Verbundprojekts und Organisation der Workshops weiterführen – der gemeinsame 6. Projektworkshop ist für Ende März 2009 geplant.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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

- Hampel, A. & O. Schulze (2007): The Composite Dilatancy Model: A constitutive model for the mechanical behavior of rock salt. In: K.-H. Lux, W. Minkley, M. Wallner & H.R. Hardy, Jr. (Hrsg.): Basic and Applied Salt Mechanics; Proc. Sixth Conf. on the Mechanical Behavior of Salt (Saltmech 6), Hannover, Mai 2007, Taylor & Francis (A. A. Balkema Publ.), Lisse.
- Hampel, A. (2007): Vergleich aktueller Stoffgesetze für die Modellierung von Untertagebauwerken im Steinsalz. – In: C. Drebenstedt, W. Kudla, H. Konietzky & B. Jung (Hrsg.): Modellierung, Simulation und Visualisierung von Prozessen in Bergbau und Bauwesen; Freiburger Forschungsforum, 58. Berg- und Hüttenmännischer Tag 2007, Freiburger Forschungshefte, C515 Geotechnikwesen, TU Bergakademie Freiberg, S. 211-224.
- Hampel, A., O. Schulze, U. Heemann, F. Zetsche, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, Z. Hou, R. Wolters, U. Düsterloh, D. Zapf, R. Rokahr, A. Pudewills (2007): Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesbericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1004-1054), Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Projektträger PTKA-WTE.

Zuwendungsempfänger: IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		Förderkennzeichen: 02 C 1587
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 281.450,00 EUR	Projektleiter: 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 hat im Berichtszeitraum den Messort für die Realisierung der In-situ-Messungen in der Grube Teutschenthal bzw. Angersdorf in Betrieb genommen, d. h. die Installation der Extensometer wurde abgeschlossen. Seitdem werden dort Pfeilerquerdehnungsmessungen durchgeführt. Weiterhin wurde das mit den Projektpartnern abgestimmte Laborversuchsprogramm des IfG abgeschlossen, das sieben (ein Versuch wurde zusätzlich realisiert) triaxiale Druckversuche mit synchroner Messung der Permeabilität, der Ultraschalllaufzeiten sowie der Dilatanz und zwei triaxiale Mehrstufenkriechversuche unterhalb der Dilatanzgrenze beinhaltet. Die triaxialen Druckversuche dienen als Basis für die Ableitung einer Porositäts-Dilatanzbeziehung mit der Rechen- und Messergebnisse für den Messort zu vergleichen sind. Aus den Mehrstufenkriechversuchen, die für den Abschnitt der Deviatorspannungsabsenkung inverses transientes Kriechen ausweisen, können realistische stationäre Kriechraten in relativ kurzen Zeiträumen auch bei Zimmertemperaturen bestimmt werden.

Das IfG hat alle vorliegenden Versuchsdaten ausgewertet und eine Anpassungen zur Bestimmung der salztypspezifischen Kennwerte der Stoffgesetzparameter für beide benutzten Stoffmodelle weitestgehend abgeschlossen. Mit dem im ersten Halbjahr 2008 erstellten FLAC-3D-Modell des gemeinsam für die Benchmark-Modellrechnungen ausgewählten Ausschnitts der Grube Angersdorf und auf der Basis der gesteinsmechanischen Anpassungen wurde auch mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach MINKLEY eine Prognoserechnung durchgeführt, um die angenommenen Kriechparameter an die beobachtete Senkungsentwicklung anzupassen. Mit diesen Kriechparametern wurde zunächst eine Prognoserechnung bis zu 127 Jahren realisiert. Weiterhin wurde die auf Vorschlag des IfG zusätzlich durch die Vorhabenspartner beschlossene Studie zur Vernetzungsabhängigkeit am Beispiel eines Einzelpfeilermodells für beide Stoffmodelle abgeschlossen. Dabei zeigte sich, dass für eine Zonenanzahl von > 10 pro Pfeilerhöhe und halbe Pfeilerbreite keine signifikante Änderung der berechneten maximalen Pfeilertragfähigkeit mehr zu belegen ist.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2009 wird das IfG die Berechnungen mit beiden Stoffmodellen abschließen und mit der Erstellung des Einzelberichtes beginnen.

Außerdem wird das IfG Leipzig die In-situ-Messungen zur Ermittlung von Permeabilität und Minimalspannung im Pfeilerquerschnitt realisieren.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

Zuwendungsempfänger: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: 02 C 1597
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 120.265,00 EUR	Projektleiter: 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

Die im Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten betrafen die folgenden Themen:

- Weiterentwicklung des 3D-Modells zur genaueren Beschreibung der vorgegebenen Hohlraumstrukturen (Strecken und Kammern) sowie der Schichtgrenzen. Anschließend wurde der Primärspannungszustand berechnet, da in dem ADINA Programm der Anfangsspannungszustand nicht initialisiert (vorgegeben) werden kann. Aufgrund der Dichteunterschiede der verschiedenen geologischen Schichten kommt es zu einer Verspannung des Modells und zu unrealistischen Verformungen. Um diese Effekte zu umgehen und vergleichbare Ergebnisse mit denen vom Programm FLAC-3D des Projektpartners zu erreichen wurde beschlossen, den Anfangsspannungszustand mit einer einheitlichen Dichte für allen Gesteinschichten zu berechnen. Damit stellte sich nach der Berechnung des Primärspannungszustandes eine maximale Oberflächenverschiebung von ca. 6 mm ein.
- Am Beispiel eines lokalen Modells um die lange Kammer herum wurde der Einfluss der Vernetzung untersucht. Diese Studie ergab, dass das ursprüngliche 3D-Modell des Grubenausschnitts Angersdorf im Nahbereich der Hohlräume wesentlich feiner diskretisiert werden muss. Zum Beispiel sollte der hoch belastete Pfeiler mit mindestens 8 Elementen in der Pfeilerhöhe und mindestens 10 Elementen pro halbe Pfeilerbreite diskretisiert werden, um die Pfeilerstandzeit zuverlässig vorherzusagen zu können.
- Weiterhin wurde die Auswertung der neuen Festigkeitsversuche von IfG und TUC begonnen. Ziel dieser Rechnungen ist es, die bereits verwendeten Stoffmodellkennwerte an die Messdaten der Salzproben aus Angersdorf anzupassen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2009 werden zunächst die Parameterkennwerte anhand der vorliegenden neuen Laborversuchsdaten des IfG und der TUC zum Steinsalz der Grube Angersdorf angepasst. Mit diesen Daten soll die Vernetzungsstudie noch einmal durchgeführt sowie den Vergleich der Ergebnisse der Partner vorgenommen werden. Anschließend wird das Modell des Ausschnitts der Grube Angersdorf mit den ggf. geänderten Kennwerten und denen der Kriechbruchmodellierung für einen Zeitraum von wiederum 100 Jahren berechnet. Ein Vergleich der Ergebnisse der Projektpartner zum Spannungs- und Verformungszustand im Modell der Grube Angersdorf soll auch noch durchgeführt werden.

5. Berichte, Veröffentlichungen

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

Zuwendungsempfänger: Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		Förderkennzeichen: 02 C 1607
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 132.635,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Rokahr	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die im Halbjahreszwischenbericht des 1. Halbjahres 2008 angesprochenen Schwierigkeiten mit dem von der Firma Itasca implementierten Stoffgesetz IUB-MDCF konnten durch die Firma Itasca nicht vollständig gelöst werden. Der Zuwendungsempfänger und die Firma Itasca haben sich dazu entschlossen, die Stoffgesetzimplementierung komplett neu zu programmieren, da einige Teile der bisher verwendeten Programmierung nicht mehr nachzuvollziehen waren. Dem Zuwendungsempfänger liegt die neue Stoffgesetzprogram-

mierung vor. Zum Ende des Berichtszeitraumes wird die Neuprogrammierung des Stoffgesetzes IUB-MDCF durch den Zuwendungsempfänger getestet. Dazu ist eine Reihe von Testmodellen erarbeitet worden, an denen die Ergebnisse des Programms FLAC3D nach der Neuimplementierung des Stoffgesetzes mit analytischen Ergebnissen sowie mit Ergebnissen des Programms UT2D verglichen werden können. Diese Überprüfungen sind notwendig für die Vertrauensbildung im Hinblick auf die Bewertung der Berechnungsergebnisse.

Darüber hinaus wurden die Parameter für das stationäre Kriechen an die neuen, von TUC durchgeführten Versuche angepasst und die stationäre Kriechdehnung für drei verschiedene Temperaturen und einem Effektivspannungsbereich von 0,1 MPa bis 100 MPa ermittelt. Auf dem 5. Workshop im Dezember 2008 in Clausthal wurden die Ergebnisse im Rahmen eines Vergleiches der stationären Kriechdehnungen mit den anderen Projektpartnern vorgestellt.

Das Modell Angersdorf wurde gemäß den Vorgaben aus den vorherigen Workshops weiter modifiziert, den einzeln modellierten Schichten wurden die jeweils festgelegten Stoffgesetze (Hooke, Norton, Mohr-Coulomb, IUB-MDCF) mit den entsprechenden Kennwerten zugewiesen. Der Primärspannungszustand wurde für das Modell ermittelt, initialisiert und elastisch berechnet. Es wurde gemäß den Vorgaben des 4. Workshops in Karlsruhe in drei Vertikalschnitten des Modells Linienplots der Hauptspannungen und der Verschiebung in z-Richtung über die Teufe erzeugt und auf dem 5. Workshop vorgestellt. Die Berechnung des Sekundärspannungszustandes zum Zeitpunkt $t=0$ ist abgeschlossen.

4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2009 wird der Zuwendungsempfänger weitere Testrechnungen mit der Neuprogrammierung des Stoffgesetzes durchführen. Des Weiteren werden neue Versuchsergebnisse in die Parameterbestimmung eingearbeitet. Nach Abschluss dieser Testphase wird die auf dem 4. Workshop beschlossene Vernetzungsstudie durchgeführt. Weiterhin werden Simulationsrechnungen am Modell Angersdorf durchgeführt. Auf weiteren Projekt-Workshops werden die Ergebnisse und die weitere gemeinsame Vorgehensweise im Detail diskutiert. Gegebenenfalls wird das Modell der Grube Angersdorf bezüglich des Diskretisierungsgrades weiter modifiziert, da momentan noch keine Einschätzung der Berechnungszeit vorliegt.

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 + Synthesericht) 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.

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		Förderkennzeichen: 02 C 1617
Vorhabensbezeichnung: Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2007 bis 30.04.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 187.145,00 EUR	Projektleiter: Prof. Dr. Lux	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Der Start-Workshop wurde im August 2007 durchgeführt.
- AP2: Die beim Projektpartner TUC geplanten Festigkeitsversuche wurden vollständig durchgeführt, ebenso ein Kriechversuch mit 5 Laststufen (Gesamtversuchsdauer über 220 Tage), d. h. der Versuch enthält eine Stufe mehr als in der Planung angesetzt. Dabei sind einige Stufen auch wesentlich länger durchgeführt worden als in der Planung angesetzt.
- AP3: Im vorliegenden Berichtszeitraum ist das zu berechnende 3D-Modell mit Blick auf die notwendige Rechenzeit optimiert worden. Im Nahfeld der zu betrachtenden Hohlräume ist die Modelldiskretisierung erheblich verfeinert worden, die Gesamtelementanzahl des Modells ist allerdings dennoch im Vergleich zum bisherigen Modell wesentlich reduziert worden. Die salztypspezifischen Kennwerte sind anhand der durchgeführten Laborversuche ermittelt worden, und einige Laborversuche sind mit dem ermittelten Parametersatz nachgerechnet worden.
- AP4: Zusätzlich zu den 3D-Modellrechnungen des Grubenausschnittes Angersdorf ist seit dem 4. Workshop die Nachrechnung einer Diskretisierungsstudie am Beispiel eines ebenen Langpfeilermodells vorgesehen. Diese Berechnungen sind im betrachteten Berichtszeitraum durchgeführt worden, allerdings zunächst noch nicht mit den aktuellen Parametern, da noch nicht alle Labordaten zur Verfügung standen. Inzwischen werden die Berechnungen mit dem endgültigen Parametersatz wiederholt.
- AP5: Keine.
- AP6: Keine.
- AP7: Der 4. Workshop wurde im Juli 2008 durchgeführt. Einige Labordaten wurden vorgestellt und die Nachrechnung einer Diskretisierungsstudie wurde vereinbart.
Der 5. Workshop wurde im Dezember 2008 durchgeführt. Weitere Labordaten sowie die Berechnungsergebnisse der Diskretisierungsstudie wurden vorgestellt.
- AP8: Keine.
- AP9: Keine.

4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Der Start-Workshop ist abgeschlossen.
- AP2: Aufgrund der sehr großen Versuchszeit bei dem durchgeführten Kriechversuch ist ein zweiter mehrstufiger Kriechversuch mit geänderten Belastungsrandbedingungen nicht mehr vorgesehen. Der geplante Kriechbruchversuch mit einer Laststufe, in der transientes, stationäres und tertiäres Kriechen zu beobachten sein soll, wird noch durchgeführt.
- AP3: Weitere vorbereitende Arbeiten sind nicht vorgesehen.
- AP4: Durchführung der geplanten 3D-Modellrechnung am Grubenausschnitt Angersdorf.
- 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.

2.3 W-Vorhaben

Zuwendungsempfänger: FZ-Jülich, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		Förderkennzeichen: 02 W 6243
Vorhabensbezeichnung: Institutionelle und technologische Weiterentwicklung von internationalen Kernmaterialkontrollen		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Kernmaterialüberwachung		
Laufzeit des Vorhabens: 01.08.2003 bis 30.04.2009	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 1.047.262,00 EUR	Projektleiter: Dr. Richter	

1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben baut auf den Ergebnissen der Vorhaben 02W6184 und 02W6218 auf und zielt ab auf Lösungsvorschläge zur Implementierung des Zusatzprotokolls, Entwicklung von anlagen- und brennstoffkreislaufspezifischen Kontrollmethoden sowie Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden im Rahmen der Proliferationsresistenz.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Programmpunkte und Arbeitspakete sind:

- die Entwicklung von Prozeduren für die Durchführung von Complementary Access, Managed Access sowie Unannounced Inspections,
- die Erarbeitung qualitativer Kriterien zur Inspektionsplanung von IAEO und Euratom und zur Bewertung der Inspektionsergebnisse,
- die Erarbeitung von Vorschlägen zu zukünftigen Betreiberpflichten,
- die Zusammenarbeit mit ESARDA,
- die Entwicklung von Komponenten für Unattended Remote Monitoring and Measurement Systems,
- die Entwicklung von Methoden der Fernerkundung,
- die Bearbeitung von Fragen zur nuklearen Abrüstung,
- die Entwicklung von zerstörungsfreien Methoden zur Verifizierung abgebrannter Brennelemente in kraftwerksstandortnahen Zwischenlagern,
- die Erarbeitung von Kriterien zur Beendigung der Kontrollen,
- die Untersuchung und Bewertung geophysikalischer Methoden für die Überwachung der geologischen Endlagerung abgebrannter Brennelemente,
- die Definition von Kriterien zur Proliferationsresistenz und
- die Analyse von technischen, institutionellen und politischen Ansätzen zur Stärkung der Nichtverbreitung.

Die Arbeiten erfolgen im internationalen Kontext nach vorgegebenen Zeitplänen von BMWi, Euratom und IAEO, parallel laufend und unter Einbeziehung in internationale Diskussionen. Sie zielen 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

- Fernerkundung: Weiterentwicklung von nichtlinearen Änderungsdetektionsverfahren mittels Kern-Hauptkomponenten-Analyse; Vorbereitung einer Buchveröffentlichung: „International Safeguards and Satellite Imagery“.
- Geologische Endlagerung: Mitarbeit in der Safeguards-Expertengruppe der IAEO.
- Standortlager: Mit IAEO und Betreibern Diskussion der von IAEO vorgeschlagenen Versiegelungsprozedur von Behältern mit abgebrannten Brennelementen bei der Standortlagerung.
- Datenfernübertragung: Fortsetzung der Diskussion des von Euratom vorgeschlagenen technischen Ansatzes in Abstimmung mit den Betreibern, BMWi und BSI.
- ESARDA: Leitung und Mitarbeit in der Arbeitsgruppe „Containment and Surveillance“, Entwicklung einer Bewertungsmethode für Containment and Surveillance-Techniken und Vorbereitung einer Veröffentlichung; Leitung und Mitarbeit in den Arbeitsgruppen „Verification Technologies and Methodologies“ und „Integrated Safeguards“; Herausgabe von Publikationen über Exportkontrollen in Heft Nr. 40 des ESARDA Bulletin; Mitarbeit in Executive Board und Editorial Committee; Diskussion und Bewertung von Unannounced Inspections; Teilnahme am ESARDA/INMM-Workshop „Meeting Safeguards Challenges in an Expanding Nuclear World“ und Vorbereitung der Proceedings.
- Proliferationsresistenz: Veröffentlichung in Heft Nr. 39 des ESARDA Bulletin.
- Unattended Systems: Entwicklung des Kamera-Serienprototyps für das IAEA Next Generation Surveillance System (NGSS) mit Projektsitzungen und Telefonkonferenzen; Vorbereitung der Entwicklung eines Digital Multi-channel Analyzer (DMCA).
- Zusatzprotokoll und Implementierung von Safeguards gemäß Euratom-Vertrag: Bewertung von Safeguards in Europa, Mitarbeit in nationalen und internationalen Gremien (z. B. Atomic Questions Group), Vortrag und Veröffentlichung zur Übertragung des „State-level Approach“ der IAEO auf EU-Verhältnisse.
- IAEO-Inspektionsberichte: Elektronische Erfassung und Auswertung.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Teilnahme am und Vortrag beim IAEO-Seminar über die Anwendung spieltheoretischer Methoden auf Verifikationsprobleme bei Nuklearkontrollen.

4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Gremien
- „Safeguards by Design“
- Unterstützung des BMWi bei Implementierung des Zusatzprotokolls zur Erreichung des „Integrated Safeguards“-Status für Deutschland nach Erhalt der „Broader Conclusion“ (Dezember 2008).
- zukünftige Safeguardstechniken und -strategien
- Dokumentation der Ergebnisse

5. Berichte, Veröffentlichungen

Allan A. Nielsen and Morton J. Canty (2008): Kernel principal component analysis for change detection. SPIE Europe Remote Sensing Conference, Cardiff, Great Britain, 15-18 September 2008.

Allan A. Nielsen and Morton J. Canty (2008): MAD change detection: a simple spatial extension and a nonlinear version. Book of Abstracts from Remote Sensing for International Stability and Security: Integrating GMOSS Achievements in GMES, Ispra, Italy, 19-20 February 2008.

Stein, M., Heppleston, M., Lange, S., Möslinger, M., Neumann, G., Queirolo, A., Richter, B.: The IAEA's Next Generation Surveillance System. The Final System Design– Phase III Report, Proc. 49th INMM Annual Meeting, Nashville/USA 2008, erschienen auf CD-ROM, 2008.

Stein, M., Stein, G., Richter, B.: Safeguards Instrumentation for Future Nuclear Fuel Cycles, ESARDA Bulletin, No. 39, October 2008, 26-30.

2.4 BMWi-Hausvorhaben

Zuwendungsempfänger: Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		Förderkennzeichen: KWA 9003
Vorhabensbezeichnung: Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine		
Zuordnung zum FuE-Programm: Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Endlagerkonzepte und Endlagerteilbereiche		
Laufzeit des Vorhabens: 01.01.2008 bis 31.12.2010	Berichtszeitraum: 01.07.2008 bis 31.12.2008	
Gesamtkosten des Vorhabens: 935.030,00 EUR	Projektleiter: Dr. Hemberle	

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 sind Untersuchungen zu 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 mit Russland und der VR China auf Basis bzw. in Anlehnung an bestehende WTZ-Abkommen 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 mit Projekten, die durch Haushaltsmittel bzw. Institutsmittel finanziert werden, an den Untersuchungen in den URL.

2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

FuE-Arbeiten zu Hartgesteinen/Granit im Felslabor Grimsel und im HRL Äspö

(Vorhaben 02E9944, 02E9985, 02E10096, 02E10106, FZK/INE, BGR)

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

(Vorhaben 02E9894, 02E10045, 02E10116, 02E10226, 02E10377, 02E10427, 02E10508 FZK/INE, BGR)

Schwerpunkte der Arbeiten sind In-situ- und Labor-Untersuchungen und Entwicklung numerischer Modelle sowie Untersuchungen zu geomechanischen Fragestellungen, Migration,

Transport und Rückhaltung von kolloidalen und gelösten Radionuklidspezies in den technischen und natürlichen Barrieren.

Für die Bestimmung der Feuchtigkeitsausbreitung und die Charakterisierung des Gebirges in der Umgebung untertägiger Hohlräume werden experimentelle Methoden weiterentwickelt und erprobt.

3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Vorhaben sind eingebunden in internationale Projekte und werden zum Teil von der Europäischen Kommission im Rahmen des FP6 kofinanziert. Innerhalb der Vorhaben wurden Arbeiten mit Bezug zu folgenden Projekten ausgeführt:

Hartgestein/Granit

Felslabor Grimsel (CFM); HRL Äspö (Projekte: Prototype Repository, Task Force EBS, Temperature Buffer Test, Microbe, LASGIT, Alternative Buffer Materials)

- Weiterentwicklung der Methoden zur Messung des Aufsättigungsverhaltens des technischen Barriere-Systems, des Porenwasserdrucks und der Temperaturen im Endlager-Nahbereich mit Hilfe geoelektrischer und faseroptischer Sensoren sowie quantitative Bestimmung der jeweiligen Parameter
- In-situ- und Labor-Untersuchungen zum Transport und zur Ausbreitung von Aktiniden im Gebirge, auch unter dem Einfluss von Kolloiden und Mikroben
- Numerische Modellierung und Laboruntersuchungen zum Aufsättigungsverhalten des Versatzmaterials

Tonstein

Bure (Teilnahme am Versuchsprogramm der ANDRA), Mont Terri (Heater Experiment, Ventilations-Test, SB-Experiment), Tournemire

- 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.














Das Vorhaben setzt die Aktivitäten im zwischenzeitlich beendeten Vorhaben mit dem Förderkennzeichen KWA 2003 fort.

5. Berichte, Veröffentlichungen

Siehe Berichte zu den einzelnen Vorhaben in Kapitel 2.1.

3 Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen

- | | |
|---|--|
| Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fahrenbergplatz, 79098 Freiburg | |
| 02 E 10306 | Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse 📖 86 |
| Bauhaus-Universität Weimar, Geschwister-Scholl-Straße 8, 99423 Weimar | |
| 02 C 1104 | Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme 📖 162 |
| 02 E 10437 | Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen 📖 112 |
| Bergische Universität Wuppertal, Gaußstraße 20, 42119 Wuppertal | |
| 02 C 1084 | Verbundvorhaben „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung eines aktiven richtungssensitiven Bohrlochantennensystems 📖 158 |
| Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Konrad-Wachsmann-Allee 1, 03046 Cottbus | |
| 02 C 1466 | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrologie und Geochemie des Gesamtsystems 📖 208 |
| Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover | |
| 02 C 1074 | Verbundvorhaben „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Weiterentwicklung der räumlichen Auswertung von richtungssensitiven EMR-Bohrlochmessdaten 📖 156 |
| 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 📖 210 |
| DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine | |
| 02 E 9854 | Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL, Phase 1) 📖 20 |
| 02 E 10065 | Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW - Kurztitel: ISIBEL 📖 42 |
| 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- 📖 46 |

- 02 E 10246 Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)  76
- 02 E 10286 Referenzkonzept für ein Endlager für radioaktive Abfälle in Tongestein (ERATO)  82
- 02 E 10346 Entwicklung und Umsetzung von technischen Konzepten für tiefe geologische Endlager in allen Wirtsgesteinen (EUGENIA)  94
- 02 E 10407 Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX  106
- 02 E 10487 Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm  122
- 02 E 10508 Machbarkeitsstudie zur Vorbereitung eines 2-Bohrloch-Erhitzerversuches im URL Mont Terri, Schweiz „MACH-2“  126
-
- DHI-WASY GmbH, Waltersdorfer Str. 105, 12526 Berlin**
- 02 C 1516 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung  218
-
- DMT GmbH, Am Technologiepark 1, 45307 Essen**
- 02 C 1094 Verbundvorhaben „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung und Bau der Steuer- und Digitalisierungseinheit, der mechanischen Komponenten und der Datenerfassung  160
-
- Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz**
- 02 C 1577 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1  228
-
- Eberhard-Karls-Universität Tübingen, Wilhelmstraße 7, 72074 Tübingen**
- 02 C 1114 Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme  164
- 02 C 1295 Kopplung Numerischer Modelle für C:HM - Transportprozesse, Teilprojekt Uni Tübingen: Validierung Numerischer Modelle für geochemische Prozesse in geotechnischen Dichteelementen  182
-
- Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich**
- 02 E 10357 Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern  96
- 02 W 6243 Institutionelle und technologische Weiterentwicklung von internationalen Kernmaterialkontrollen  240

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Postfach 36 40, 76021 Karlsruhe
--

- | | | |
|------------|--|-------|
| 02 C 1597 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3 | 📖 232 |
| 02 E 10096 | Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado | 📖 48 |
| 02 E 10126 | Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe | 📖 54 |
| 02 E 10206 | Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere | 📖 70 |

Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. (FZD), Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden

- | | | |
|------------|---|-------|
| 02 C 1436 | Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD | 📖 202 |
| 02 E 9985 | Mobilisierung von Actiniden durch mikrobiell produzierte Liganden unter Berücksichtigung der Endlagerung von radioaktivem Abfall | 📖 28 |
| 02 E 10136 | Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD | 📖 56 |
| 02 E 10156 | Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton | 📖 60 |
| 02 E 10528 | Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV2 | 📖 130 |

Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V. (FhG), Hansastraße 27c, 80686 München










- | | | |
|-----------|--|-------|
| 02 C 1325 | Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswerteinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar – Sonarverfahren | 📖 188 |
|-----------|--|-------|

Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena


- | | | |
|------------|---|-------|
| 02 E 10316 | Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen | 📖 88 |
| 02 E 10578 | Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP3 - Kurztitel: A-Dur | 📖 140 |

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


02 C 0993	Geochemische Modellierung des Langzeitverhaltens von silikatischen und aluminosilikatischen Materialien im Temperaturbereich 30 °C und 90 °C	152
02 C 1244	Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen	172
02 C 1254	Geochemische Barriereeffizienz im anaeroben Deponienahfeld einer UTD	174
02 C 1285	Kopplung Numerischer Modelle für C:HM - Transportprozesse, Teilprojekt GRS	180
02 C 1426	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS	200
02 E 9783	Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittelaktiven Abfällen	16
02 E 9894	Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt	22
02 E 9944	Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2	24
02 E 9954	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlager	26
02 E 9995	Grundlegende Prozesse zum Radionuklidtransport im Fernfeld eines Endlagers im Salz – FUNMIG-RTDC-5	30
02 E 10045	Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure	38
02 E 10055	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL	40
02 E 10075	Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90	44
02 E 10106	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kollorado	50
02 E 10116	Barriereintegrität des einschlusswirksamen Deckgebirges in Tonformationen (BET)	52
02 E 10146	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS	58
02 E 10236	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	74
02 E 10276	Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-	80
02 E 10336	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d ³ f und r ³ t	92

- 02 E 10367 Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen  98
- 02 E 10377 Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen  100
- 02 E 10387 Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX  102
- 02 E 10477 Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm  120
- 02 E 10498 Virtuelles Untertagelabor im Steinsalz (Vorprojekt) – Kurztitel: VIRTUS  124
- 02 E 10518 Verbundprojekt: Realitätsnahe Einbindung von Sorptionsprozessen in Transportprogramme für die Langzeitsicherheitsanalyse (ESTRAL) - TV1  128
- 02 E 10538 Experimentelle Untersuchungen und Modellierung der Wechselwirkungen Eisen - Bentonit, Kurztitel: Fe-Bentonit  132
- 02 E 10548 Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern  134
- 02 E 10558 Verbundprojekt: Abbildungen von Imhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP1 - Kurztitel: A-Dur  136


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  170




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

- 02 E 10588 Verbundprojekt: Abbildungen von Imhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP4 - Kurztitel: A-Dur  142


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

- 02 E 10447 Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilität  114




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

- 02 C 1264 Beweissicherungsprogramm zum geomechanischen Verhalten von Salarbarrieren nach starker dynamischer Beanspruchung und Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie zum dauerhaften Einschluss  176
- 02 C 1587 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2  230
- 02 E 10256 Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)  78




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  216

Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Stilleweg 2, 30655 Hannover

- 02 C 1315 Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswerteinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar – Elektromagnetik, Georadar und Quantitative Charakterisierung von Problemzonen  186
- 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  224
- 02 C 1556 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen  226



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  206
- 02 C 1536 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen  222
- 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  64



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

- 02 E 10467 Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT  118



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  220
- 02 E 10166 Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein  62



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  90
- 02 E 10568 Verbundprojekt: Abbildungen von Inhomogenitäten bei der Strömungs- und Transportmodellierung mit d^3f und r^3t - TP2 - Kurztitel: A-Dur  138


K-UTEC 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  194
- 02 C 1496 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTEC): Grundlagen für Geomodellierung  214




Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover

- 02 C 1607 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4  234
- 02 E 10025 Stabilität von Organotonen als Anionen-Adsorber unter Endlagerbedingungen – Experiment und Modellierung  34


Materialforschungs- und prüfanstalt an der Bauhaus-Universität Weimar, Amalienstraße 13, 99423 Weimar

- 02 C 1064 Weiterentwicklung eines TDR-Messverfahrens zur Quantifizierung von Feuchte- und Dichteverteilungen in Bentonitversuchsbauwerken  154


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

- 02 E 9793 Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittelaktiven Abfällen  18
- 02 E 10397 Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX  104
- 02 E 10628 Behandlung sozialwissenschaftlicher Aspekte im Safety Case  146

Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen

- KWA 9003 Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine  244

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

- 02 E 10296 Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d^3f und r^3t - Visualisierung und Datenanalyse  84

Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg

- | | | |
|------------|---|-------|
| 02 C 1124 | Diversitäre und redundante Dichtelemente für langzeitstabile Verschlussbauwerke | 📖 166 |
| 02 C 1446 | Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF | 📖 204 |
| 02 E 10457 | Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag | 📖 116 |

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

- | | | |
|------------|---|-------|
| 02 C 1134 | Untersuchungen an Calciumsulfat-Steinsalz-Baustoffen für Damm-
bauwerke in Untertage-Deponien und Endlagern | 📖 168 |
| 02 C 1275 | Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse, Teil-
projekt TUC: Gekoppelte Modellierung des C:HM Verhaltens von
selbstverheilendem Salzversatz | 📖 178 |
| 02 C 1355 | Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des
druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht per-
meables Barrieren-Gebirge (Salinar) | 📖 192 |
| 02 C 1405 | Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die
Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und
Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2 | 📖 196 |
| 02 C 1415 | Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die
Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und
Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3 | 📖 198 |
| 02 C 1486 | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke
und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geome-
chanische Modellierung | 📖 212 |
| 02 C 1617 | Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehenswei-
sen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Lang-
zeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorha-
ben 5 | 📖 236 |
| 02 E 10025 | Stabilität von Organotonen als Anionen-Adsorber unter Endlagerbe-
dingungen – Experiment und Modellierung | 📖 34 |
| 02 E 10427 | Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein
anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rah-
men DECOVALEX-THMC | 📖 110 |
| 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 | 📖 144 |

Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt
--

- | | | |
|------------|--|------|
| 02 E 10015 | Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockerungszone in einem
geologischen Endlager in Tongestein | 📖 32 |
|------------|--|------|

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 | 108 |
|------------|---|-----|

Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München
--

- | | | |
|------------|--|----|
| 02 E 10035 | Wechselwirkungen von Actiniden mit Anorgano-Huminkolloiden | 36 |
| 02 E 10186 | Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien | 66 |

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 | 68 |
|------------|--|----|

Universität Karlsruhe (TH), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe

- | | | |
|-----------|---|-----|
| 02 C 0922 | Verschlussystem mit Äquipotenzialsegmenten für die untertägige Entsorgung (UTD und ELA) gefährlicher Abfälle zur Sicherstellung der homogenen Befeuchtung der Dichtelemente und zur Verbesserung der Langzeitstabilität | 150 |
|-----------|---|-----|

Universität Leipzig, Ritterstraße 26, 04109 Leipzig
--

- | | | |
|-----------|---|-----|
| 02 C 1305 | Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswertearbeitsinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar – Geologie, Geoelektrik, Seismik und Szenarienmodellierung | 184 |
|-----------|---|-----|

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 | 72 |
|------------|--|----|