

# **Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft**

## **PTE Nr. 34**

Bericht über die im zweiten Halbjahr 2007  
vom BMBF und BMWi geförderten FuE-Arbeiten zur  
„Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formatio-  
nen“

Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe  
Wassertechnologie und Entsorgung  
(PTKA-WTE)

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH**  
März 2008

## **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 hat im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) die Durchführung der Projektträgerschaft für den Programmbereich „Entsorgung“ übernommen. Dieser umfasst die FuE-Arbeiten, die im Förderkonzept „Forschungsförderung zur Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen“ und 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
Weiterentwicklung der 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 ⇒ „Weiterentwicklung der Kernmaterialüberwachung“

Die vom BMWi betreuten FuE-Vorhaben, die so genannten Hausvorhaben, sind mit der Buchstabenfolge KWA gekennzeichnet.

Im Teil 3 sind die FuE-Vorhaben den jeweils ausführenden Forschungsstellen zugeordnet.



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen .....</b>	<b>1</b>
1.1	<i>Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheits Gesichtspunkten .....</i>	<i>1</i>
1.2	<i>Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien .....</i>	<i>5</i>
1.3	<i>Weiterentwicklung der Kernmaterialüberwachung .....</i>	<i>13</i>
1.4	<i>Sicherheitsforschung für Bergbauregionen - Prozessanalyse und Prognosewerkzeuge für Bergschadensgebiete .....</i>	<i>15</i>
<b>2</b>	<b>Formalisierte Zwischenberichte .....</b>	<b>17</b>
2.1	E-VORHABEN .....	17
2.2	C-VORHABEN .....	157
2.3	W-VORHABEN .....	269
2.4	BMW-HAUSVORHABEN .....	273
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen.....</b>	<b>277</b>



# 1 Verzeichnis der Fördervorhaben gemäß FuE-Themenbereichen

## 1.1 Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten

<b>02 C 0983</b>	Komplettierung der Datenbasis zur Modellierung der Schwermetallmobilisierung in salinaren Systemen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 162
<b>02 C 0993</b>	Geochemische Modellierung des Langzeitverhaltens von silikatischen und alumosilikatischen Materialien im Temperaturbereich 30 °C bis 90 °C	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 164
<b>02 C 1064</b>	Weiterentwicklung eines TDR-Messverfahrens zur Quantifizierung von Feuchte- und Dichteverteilungen in Bentonitversuchsbauwerken	<b>Materialforschungs- und prüfanstalt an der Bauhaus-Universität, Weimar</b>	📖 166
<b>02 C 1074</b>	Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Weiterentwicklung der räumlichen Auswertung von richtungssensitiven EMR-Bohrlochmessdaten	<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>	📖 168
<b>02 C 1084</b>	Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung eines aktiven richtungssensitiven Bohrlochantennensystems	<b>Bergische Universität Wuppertal</b>	📖 170
<b>02 C 1094</b>	Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung und Bau der Steuer- und Digitalisierungseinheit, der mechanischen Komponenten und der Datenerfassungseinheit	<b>DMT GmbH, Essen</b>	📖 172
<b>02 C 1104</b>	Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme	<b>Bauhaus-Universität Weimar</b>	📖 174
<b>02 C 1114</b>	Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme	<b>Eberhard-Karls-Universität Tübingen</b>	📖 176
<b>02 C 1124</b>	Diversitäre und redundante Dichtelemente für langzeitstabile Verschlussbauwerke	<b>TU Bergakademie Freiberg</b>	📖 178
<b>02 C 1134</b>	Untersuchungen an Calciumsulfat-Steinsalz-Baustoffen für Dammbauwerke in Untertagedeponien und Endlagern	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 180

02 C 1184	Entwicklung eines Messsystems zur hochauflösenden zerstörungsfreien Erkundung von Gesteinsnahbereichen mittels Sonar	Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V., München	190
02 C 1194	Entwicklung eines Messsystems zur hochauflösenden zerstörungsfreien Erkundung von Gesteinsnahbereichen mittels Höchsthfrequenz-Radar	TU Ilmenau	192
02 C 1204	Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leicht löslichen Salzgestein (Carnallitit); Teil 2: Erprobung von Funktionselementen in situ	GTS Grube Teutschenthal Sicherungs GmbH & Co. KG	194
02 C 1214	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlusselement im Salinar – Hauptprojekt	Kali-Umwelttechnik GmbH, Sondershausen	196
02 C 1224	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlusselement im Salinar. Teilprojekt Bauhaus Uni: Experimentelle Untersuchungen zur Struktur, dem Anbindeverhalten, der Kompressibilität und den volumetrischen Eigenschaften	Bauhaus-Universität Weimar	198
02 C 1234	Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlusselement im Salinar. Teilprojekt IfG: Untersuchungen der mechanischen Anforderungen und Eigenschaften	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	200
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	214
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	216
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	218
02 C 1335	Qualifizierung von Strömungsbarrieren in Salzformationen, Phase 1 bis Phase 4	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	220
02 C 1395	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1	Kali-Umwelttechnik GmbH vorm. Kaliforschungsinstitut, Sondershausen	224

<b>02 C 1405</b>	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 226
<b>02 C 1415</b>	Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 228
<b>02 C 1426</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 230
<b>02 C 1436</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 232
<b>02 C 1446</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF	<b>TU Bergakademie Freiberg</b>	📖 234
<b>02 C 1456</b>	Bestimmung der Änderung des räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen nach Wechselwirkung mit Natural Organic Matter (NOM) in geologischen Formationen von Untertagedeponien	<b>IIF e.V., Leipzig</b>	📖 236
<b>02 E 9854</b>	Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillienlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL, Phase 1)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 32
<b>02 E 9965</b>	Untersuchungen zur Wirksamkeit des geologischen und geotechnischen Barriersystems im Hinblick auf die Standortauswahl in magmatischen Gesteinen - WIBASTA	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 52
<b>02 E 9975</b>	Untersuchungen zur Wirksamkeit des geologischen und geotechnischen Barriersystems im Hinblick auf die Standortauswahl in magmatischen Gesteinen - WIBASTA	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 54
<b>02 E 9985</b>	Mobilisierung von Actiniden durch mikrobiell produzierte Liganden unter Berücksichtigung der Endlagerung von radioaktivem Abfall	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 56
<b>02 E 10025</b>	Stabilität von Organotonen als Anionen-Adsorber unter Endlagerbedingungen – Experiment und Modellierung	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	📖 62
<b>02 E 10035</b>	Wechselwirkungen von Actiniden mit Anorganohuminkolloiden	<b>TU München</b>	📖 64
<b>02 E 10045</b>	Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 66

<b>02 E 10075</b>	Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 72
<b>02 E 10086</b>	Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsfornation -TemTon-	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 74
<b>02 E 10286</b>	Referenzkonzept für ein Endlager für radioaktive Abfälle in Tongestein (ERATO)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 114
<b>KWA 2003</b>	Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine	<b>Forschungszentrum Karlsruhe GmbH</b>	📖 274

## 1.2 Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien

<b>02 C 0922</b>	Verschlussystem mit Äquipotenzialsegmenten für die untertägige Entsorgung (UTD und ELA) gefährlicher Abfälle zur Sicherstellung der homogenen Befeuchtung der Dichtelemente und zur Verbesserung der Langzeitstabilität	<b>Universität Karlsruhe (TH)</b>	📖 158
<b>02 C 0952</b>	Modellentwicklung zur Gaspermeation aus unterirdischen Hohlräumen im Salzgebirge	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 160
<b>02 C 1144</b>	Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-FZD)	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 182
<b>02 C 1154</b>	Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-DMT)	<b>DMT GmbH, Essen</b>	📖 184
<b>02 C 1164</b>	Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-GRS)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 186
<b>02 C 1174</b>	Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-EnviCon)	<b>Dr. Veerhoff &amp; Scherschel GbR erd_sicht, Alfter</b>	📖 188
<b>02 C 1244</b>	Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 202
<b>02 C 1254</b>	Geochemische Barriereeffizienz im anaeroben Depositionsfeld einer UTD	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 204
<b>02 C 1264</b>	Beweissicherungsprogramm zum geomechanischen Verhalten von Salinarbarrieren nach starker dynamischer Beanspruchung und Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie zum dauerhaften Einschluss	<b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>	📖 206
<b>02 C 1275</b>	Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt TUC: Gekoppelte Modellierung des C:HM Verhaltens von selbstverheilendem Salzversatz	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 208
<b>02 C 1285</b>	Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für	<b>Gesellschaft für An-</b>	📖 210

	C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt GRS: Laborversuche und Geochemische Modellierung	<b>lagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	
<b>02 C 1295</b>	Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt Uni Tübingen: Validierung Numerischer Modelle für geochemische Prozesse in geotechnischen Dichteelementen	<b>Eberhard-Karls-Universität Tübingen</b>	📖 212
<b>02 C 1355</b>	Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrierengebirge (Salinar)	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 222
<b>02 C 1577</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1	<b>Dr. Andreas Hampel, Bingen</b>	📖 258
<b>02 C 1587</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2	<b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>	📖 260
<b>02 C 1597</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3	<b>Forschungszentrum Karlsruhe GmbH</b>	📖 262
<b>02 C 1607</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4	<b>Leibnitz Universität Hannover</b>	📖 264
<b>02 C 1617</b>	Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 266
<b>02 E 9390</b>	Untersuchungen zur Gasentwicklung und -freisetzung aus dem Tonversatz sowie dessen Gas- und Wasserpermeabilität im Projekt "Full Scale Engineered Barriers Experiment in Crystalline Host Rock - Phase II" FEBEX II	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 18
<b>02 E 9743</b>	Messtechnische und modelltheoretische Untersuchungen zum THM-Verhalten einer Bentonit-Barriere im Bereich des Phasenübergangs der Porenflüssigkeit unter Einsatz faseroptischer Technologie im Rahmen von Versuchen im URL Äspö	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 20
<b>02 E 9783</b>	Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittel-	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktor-</b>	📖 22

	aktiven Abfällen	sicherheit (GRS) mbH, Köln	
02 E 9793	Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittelaktiven Abfällen	Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Freiburg	📖 24
02 E 9813	Entwicklung eines Instrumentariums zur Berechnung des Radionuklidtransports in Tonformationen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 26
02 E 9834	Laborprogramm zur Untersuchung der Entwicklung und Verheilung von Auflockerungszonen in Tonsteinformationen – LUVEAT	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 28
02 E 9844	NF-PRO5, Process Couplings and Integration in Performance Assessment	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 30
02 E 9874	Untersuchung der komplexen mechanischen und hydraulischen Eigenschaften von Tongesteinen unter besonderer Berücksichtigung der Foliation	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 34
02 E 9884	Langzeitwechselwirkungen von Tonen und Zementen in Ton- und Salzformationen	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 36
02 E 9894	Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 38
02 E 9904	Untersuchung des mechanischen Verhaltens von kompaktiertem Salzgrus im Kontakt mit dem Wirtsgestein	IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig	📖 40
02 E 9914	Geoelektrische Untersuchung der Entsättigung des Opalinuston im Ventilationsversuch im Mt. Terri Untertagelabor Phase 2, Kurzzeitentwicklung der EDZ	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 42
02 E 9924	Verbundprojekt: Migration von Actiniden im System Ton, Huminstoff, Aquifer - Spektroskopische Bestimmung von thermodynamischen und kinetischen Kenngrößen zur Beschreibung der Humin-Metall-Komplexierung	Universität Potsdam	📖 44
02 E 9934	Modellierung des großräumigen Schadstofftransports (Kurztitel: MOST)	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln	📖 46
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	📖 48

<b>02 E 9954</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlager	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 50
<b>02 E 9985</b>	Mobilisierung von Actiniden durch mikrobiell produzierte Liganden unter Berücksichtigung der Endlagerung von radioaktivem Abfall	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 56
<b>02 E 9995</b>	Grundlegende Prozesse zum Radionuklidtransport im Fernfeld eines Endlagers im Salz - FUNMIG-RTDC-5	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 58
<b>02 E 10015</b>	Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein	<b>Technische Universität Darmstadt</b>	📖 60
<b>02 E 10055</b>	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 68
<b>02 E 10065</b>	Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 70
<b>02 E 10096</b>	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado	<b>Forschungszentrum Karlsruhe GmbH</b>	📖 76
<b>02 E 10106</b>	Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 78
<b>02 E 10116</b>	Barriereintegrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs in Tonformationen (BET)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 80
<b>02 E 10126</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe	<b>Forschungszentrum Karlsruhe GmbH</b>	📖 82
<b>02 E 10136</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 84
<b>02 E 10146</b>	Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 86
<b>02 E 10156</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton	<b>Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Dresden</b>	📖 88
<b>02 E 10166</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein	<b>Johannes Gutenberg-Universität Mainz</b>	📖 90

<b>02 E 10176</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actinidentransports in potenziellen Wirtsgesteinsformationen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementarprozess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport	<b>IIF e.V., Leipzig</b>	📖 92
<b>02 E 10186</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien	<b>Technische Universität München</b>	📖 94
<b>02 E 10196</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen	<b>Universität des Saarlandes, Saarbrücken</b>	📖 96
<b>02 E 10206</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere	<b>Forschungszentrum Karlsruhe GmbH</b>	📖 98
<b>02 E 10216</b>	Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid-Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen	<b>Universität Potsdam</b>	📖 100
<b>02 E 10226</b>	Gasmigration im Opalinus Ton in Abhängigkeit vom Gasinjektionsdruck (unterhalb des Fracdruckes) Kurztitel: HG-C	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 102
<b>02 E 10236</b>	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 104
<b>02 E 10246</b>	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 106
<b>02 E 10256</b>	Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)	<b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>	📖 108
<b>02 E 10266</b>	Numerische Modellierung der Dilatanz-induzierten, perkolativen Permeation in Salzgestein	<b>Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec) GmbH, Garching</b>	📖 110
<b>02 E 10276</b>	Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 112
<b>02 E 10296</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Visualisierung und Datenanalyse	<b>Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn</b>	📖 116

<b>02 E 10306</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse	<b>Albert-Ludwigs-Universität Freiburg</b>	📖 118
<b>02 E 10316</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen	<b>Friedrich-Schiller-Universität Jena</b>	📖 120
<b>02 E 10326</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen	<b>Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg</b>	📖 122
<b>02 E 10336</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 124
<b>02 E 10346</b>	Entwicklung und Umsetzung von technischen Konzepten für tiefe geologische Endlager in allen Wirtsgesteinen (EUGENIA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 126
<b>02 E 10357</b>	Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern	<b>Forschungszentrum Jülich GmbH</b>	📖 128
<b>02 E 10367</b>	Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 130
<b>02 E 10377</b>	Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 132
<b>02 E 10387</b>	Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 134
<b>02 E 10397</b>	Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX	<b>Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Freiburg</b>	📖 136
<b>02 E 10407</b>	Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 138
<b>02 E 10417</b>	Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer	<b>TU Dresden</b>	📖 140
<b>02 E 10427</b>	Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 142

<b>02 E 10437</b>	Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen	<b>Bauhaus-Universität Weimar</b>	📖 144
<b>02 E 10447</b>	Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung	<b>IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Deponietechnik Wilsnack &amp; Partner, Freiberg</b>	📖 146
<b>02 E 10457</b>	Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag	<b>TU Bergakademie Freiberg</b>	📖 148
<b>02 E 10467</b>	Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT	<b>Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec), Garching</b>	📖 150
<b>02 E 10477</b>	Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln</b>	📖 152
<b>02 E 10487</b>	Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 154



### 1.3 Weiterentwicklung der Kernmaterialüberwachung

**02 W 6243** Institutionelle und technologische Weiterentwicklung von internationalen Kernmaterialkontrollen **Forschungszentrum Jülich GmbH**  270



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

- |                  |   |  |       |
|------------------|---|--|-------|
| <b>02 C 1466</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrogeologie und Geochemie des Gesamtsystems  | <b>Brandenburgische Technische Universität Cottbus</b>   | 📖 238 |
| <b>02 C 1476</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 2 (BGR): Geophysikalische Untersuchungen, Seismische Erkundung, Geologisches 3D-Modell, Bohrungen, Server-Datenbank, Koordination des Gesamtvorhabens | <b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>                           | 📖 240 |
| <b>02 C 1486</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung  | <b>Technische Universität Clausthal</b>  | 📖 242 |
| <b>02 C 1496</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTECH): Grundlagen für Geomodellierung   | <b>Kali-Umwelttechnik GmbH, Sondershausen</b>  | 📖 244 |
| <b>02 C 1506</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie  | <b>IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur-Hydro- und Umweltgeologie mbH, Stendal</b> | 📖 246 |
| <b>02 C 1516</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung  | <b>WASY Gesellschaft für Wasserwirtschaftliche Planung und Systemforschung mbH, Berlin</b>         | 📖 248 |
| <b>02 C 1526</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität  | <b>Johannes Gutenberg-Universität Mainz</b>  | 📖 250 |
| <b>02 C 1536</b> | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen   | <b>IIF e.V., Leipzig</b>   | 📖 252 |

- 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**  254
- 02 C 1556** Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen **Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Hannover**  256

## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 E-Vorhaben**

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9390</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Gasentwicklung und -freisetzung aus dem Tonversatz sowie dessen Gas- und Wasserpermeabilität im Projekt "Full Scale Engineered Barriers Experiment in Crystalline Host Rock - Phase II", FEBEX II			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2000 bis 31.12.2007		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 394.581,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Jockwer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Felslabor Grimsel führt ENRESA seit 1997 den Versuch FEBEX zur Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Granitformationen durch. Hierfür ist eine Versuchsstrecke angelegt worden, in die 2 elektrische Erhitzer installiert worden sind. Die Resthohlräume im Versuchsfeld sind mit Bentonitformsteinen versetzt worden.

Versuchsziel ist neben der Demonstration dieser Endlagermethode die Ermittlung der thermo-hydro-mechanischen und der chemisch-mineralogischen Prozesse im Versatzmaterial.

Im Jahre 2002 wurden für die Interpretation der bisherigen Versuchsergebnisse der Erhitzer 1 und das Versatzmaterial ausgebaut.

Da der Prozess der Aufsättigung der Bentonitformsteine mit Formationswasser noch nicht abgeschlossen ist, wird der Versuch am Erhitzer 2 fortgeführt.

GRS untersucht hierbei die Gasentwicklung und -ausbreitung in den Bentonitformsteinen. Hierfür wurden im Jahre 2003 im Versatz am Erhitzer 2 Edelstahlfilterrohre installiert, die ihrerseits zur Gasprobenahme, Gasinjektion und Porendruckmessung an eine Ventilstation mit Druckaufnehmer und Datenerfassungsanlage angeschlossen wurden.

Seit September 2003 werden die Messungen zur Gasfreisetzung im Versatz und der Gaspermeabilität des Versatzes erfolgreich fortgeführt. Die Messeinrichtungen und Auswerteverfahren sind aus den bisherigen Untersuchungen vorhanden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Vorhaben (Arbeiten der GRS) untergliedert sich in:

- Laboruntersuchungen zur Gasentwicklung aus dem Bentonit
- Qualitative und quantitative Erfassung der Gasfreisetzung am Erhitzer 2
- Permeabilität des Versatzes um Erhitzer 2 in Abhängigkeit von der Zeit
- Erfassung des Innerporendruckes in Versatz infolge Gasfreisetzung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Dezember 2007 wurden im FEBEX Versuch die letzten Messungen zur Gasfreisetzung aus dem aufgeheizten Tonversatz und Permeabilität des teilweise wassergesättigten Tonversatzes durchgeführt.

Die Analyse der entnommenen Gase ergab weiterhin einen Anstieg der Komponenten

- Wasserstoff bis auf 25 000 vpm (2,5 vol %)
- Kohlenwasserstoffe bis auf 45 000 vpm (4,5 vol %)
- Kohlendioxid bis auf 51 000 vpm (5,1 vol %)

Die Gasdruckmessungen im Bentonitversatz zeigen, dass der Betonverschluss zwischen Versuchsfeld und offenen Grubengebäude nicht gasdicht ist. Hierdurch kommt es infolge der atmosphärischen Luftdruckschwankungen zu einer permanenten Verdünnung der aus Versatz freigesetzten Gase.

Die letzten Gasinjektionstests zur Permeabilitätsbestimmung wurden ebenfalls im Dezember 2007 durchgeführt. Eine detaillierte Auswertung wird durchgeführt. Die effektiven Gaspermeabilitäten nehmen weiterhin allmählich ab, was auf eine langsame Aufsättigung des hochkompaktierten Bentonitversatzes hindeutet. Die Zahlenwerte liegen überwiegend im Bereich  $10^{-19}$  bis  $10^{-17}$  m<sup>2</sup>.

Das Versuchsfeld ist zurückgebaut worden.

Mit der Erstellung des Abschlussberichts wurde begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine weiteren Arbeiten im Versuchsfeld. Das Vorhaben wurde offiziell beendet.  
Erstellen des Abschlussberichtes.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9743</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Messtechnische und modelltheoretische Untersuchungen zum THM-Verhalten einer Bentonit-Barriere im Bereich des Phasenübergangs der Porenflüssigkeit unter Einsatz faseroptischer Technologie im Rahmen von Versuchen im URL Äspö		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2003 bis 30.06.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 544.748,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist es zum einen, faseroptische Temperatur-, Totaldruck- und Porenwasserdruck-Sensoren, die aus unterschiedlichen Materialien (Titan und Edelstahl) gefertigt sind, im Rahmen der auf 5 respektive 10 Jahre angesetzten Versuche im URL Äspö einem In-situ-Langzeittest unter hohen Temperaturen und in korrosiver Umgebung zu unterziehen. Zum anderen sollen die Messungen modelltheoretisch begleitet werden, um die gemessenen Werte im Modell nachvollziehen und somit das Verständnis bezüglich des thermo-hydro-mechanischen Verhaltens der mehrkomponentigen Barriere verbessern zu können.

Das Verhalten des Barrierematerials wird rechnerisch simuliert und mit den gemessenen Werten analysierend verglichen. Die Modellierung erfolgt dabei in drei Phasen. Da die Temperatur neben dem Wasserdruck eine wesentliche treibende Kraft ist, soll zunächst in einer rein thermischen Simulation die dreidimensionale Temperaturentwicklung innerhalb des gesamten Versuchsaufbaus analysiert werden, um eine Parameteridentifikation zu erarbeiten. In einer zweiten Phase soll das hydraulische und das thermo-mechanische Materialverhalten untersucht werden, um anschließend in einer dritten Phase gekoppelte THM Berechnungen auf Basis bisheriger Ergebnisse zur Versuchsanalyse durchführen zu können.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

1. Projektmanagement
2. Messtechnische Datenerfassung
3. Modelltheoretische Versuchsbegleitung
4. Rückholung und Nachanalyse der Mess-Systeme
5. Berichtswesen

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

Die durchgeführten Arbeiten konzentrierten sich auf den Temperature-Buffer-Test (TBT). Dies ist ein Erhitzerversuch im Maßstab 1:1, bei dem zwei Behälter in einer kurzen vertikalen Bohrung im Granit eingelagert werden. Der untere Behälter ist mit Bentonit umgeben, der obere zunächst mit einer Sandschicht und dann mit Bentonit. Der Versuchsaufbau ist umfangreich mit Sensoren instrumentiert u. a. zur Messung von Temperaturen, Druck und Porenwasserdruck.

Neben der messtechnischen Begleitung wurden im Rahmen des Versuches begleitende numerische Berechnungen durchgeführt, um die ablaufenden physikalischen Prozesse sowohl getrennt, als auch in ihrer gegenseitigen Wechselwirkung zu untersuchen und zu verstehen. Da die Temperatur eine wesentliche treibende Kraft für hydro-mechanische Veränderungen innerhalb der Bentonit/Sand-Barriere ist, kommt der möglichst realitätsnahen Simulation der Temperaturentwicklung eine besondere Bedeutung zu.

Es wurden thermisch-hydraulisch gekoppelte Berechnung (TH) an einem vereinfachten axial-symmetrischen 2D-Modell (Quasi3D-Modell) durchgeführt. Aus Laborversuchen ist hinlänglich bekannt, dass die Wärmeleitfähigkeit des Bentonits mit steigendem Wassergehalt ansteigt. Dies wurde auch im Rahmen des In-situ-Versuches bestätigt, wobei eine Erhöhung der Wärmeleitfähigkeit im bereits wassergesättigten äußeren Bereich des Buffers festgestellt wurde. Der Kapillarkraft gesteuerte Aufsättigungsprozess wurde mittels des van Genuchten Gesetzes im Rahmen der Berechnungen simuliert und die Wärmeleitfähigkeit als Funktion der Temperatur und des Wassergehaltes ermittelt. Nach einer Serie von Berechnungen konnte auch unter hydrothermisch gekoppelten Bedingungen eine gute Wiedergabe der Temperaturentwicklung im Modell erreicht werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Weiterführend werden Parametervariationsberechnungen innerhalb physikalisch belegter Grenzen durchgeführt, um eine weitere Verbesserung der Modellanpassung zu erreichen. Dabei wird das numerische Modell weiter verfeinert und bisher vereinfachte Randbedingungen werden abgebaut. Neben der Anpassung der Temperaturentwicklung soll auch eine Verbesserung der Porenwasserdruckanpassung erfolgen, um eine abschließende Analyse des thermo-hydraulischen Systems darstellen zu können.

Zum Ende der Projektlaufzeit wird die Datenerfassung seitens DBE TECHNOLOGY eingestellt und die Datenerfassungsanlage abgebaut.

Zum Abschluss des Vorhabens werden alle Ergebnisse dokumentiert und ein Abschlussbericht erstellt.

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9783</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittelaktiven Abfällen			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2003 bis 30.09.2008		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 625.000,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 2007) wurde in erster Linie zusammen mit dem Auftraggeber über eine geeignete Weiterführung des Vorhabens beraten. Auf der Grundlage von im August 2007 vorgelegten Vorschlägen zur weiteren Bearbeitung des Vorhabens wurde im November zwischen AG und AN eine Neuausrichtung des Projektes festgelegt.

Diese beinhaltet eine Verlängerung der Laufzeit des Vorhabens bis zum 30.09.2008 sowie die Erstellung eines Abschlussberichtes, der sich aus einem kurz gefassten Hauptband, etwa zwanzig fachlich vertiefenden Anhängen und umfangreichen Bibliographien zu den jeweiligen Anhängen zusammensetzt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Umsetzung der geplanten Weiterarbeiten umfasst folgende Punkte:

- Entwurf, Abstimmung und anschließende Endfassung des Hauptbandes
- Überarbeitung und Aktualisierung der Fachkapitel als fachlich vertiefende Anhänge zum Hauptband
- Zusammenstellung von Bibliographien zu den einzelnen Anhängen
- Regelmäßige Redaktionssitzungen

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> Öko-Institut e.V., Institut für angewandte Ökologie, Merzhauser Straße 173, 79100 Freiburg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9793</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittelaktiven Abfällen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2003 bis 30.09.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 624.916,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 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 Ergebnisse aus Forschungsvorhaben (insbesondere vom Bund geförderte Vorhaben).

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

Im zweiten Halbjahr des Jahres 2007 wurde die Weiterführung des Vorhabens zwischen Auftraggeber, Projektträger und Auftragnehmern abgestimmt. Darüber hinaus wurden Teilleistungen aus den Arbeitspaketen 1 und 2 erbracht.

Die im November festgelegte Neuausrichtung des Projektes beinhaltet eine Verlängerung der Laufzeit des Vorhabens bis zum 30.09.2008 sowie die Erstellung eines Abschlussberichtes, der sich aus einem kurz gefassten Hauptband, etwa zwanzig Anhängen und einer umfangreichen Bibliographie zusammensetzt.

Es wurde festgelegt, welche Kapitel der bestehenden Materialsammlung nach ggf. erforderlicher Überarbeitung als Anhang zum Hauptband fertig gestellt werden.

Mit den Arbeiten zur Fertigstellung des Abschlussberichtes wurde unverzüglich begonnen. Hierzu wurde bereits im Dezember 2007 eine Besprechung des Redaktionsteams unter Teilnahme des Projektträgers durchgeführt. In dieser Besprechung wurde der bestehende Zeitplan konkretisiert, redaktionelle Fragen zum Hauptband und den Anhängen geklärt und Zuständigkeiten für durchzuführende Arbeiten abgestimmt.

Im Dezember 2007 wurde im Wesentlichen an den Textabschnitten für den Hauptband (Arbeitspaket 1) gearbeitet. Außerdem wurden inhaltliche Fragen zur Überarbeitung der Anhänge (Arbeitspaket 2) geklärt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Für das erste Halbjahr 2008 sind regelmäßige Besprechungen des Redaktionsteams zur Erstellung und Abstimmung des Hauptbandes vorgesehen. Darüber hinaus werden redaktionelle und inhaltliche Fragen zur Überarbeitung der bestehenden Textentwürfe der Anhänge geklärt.

Parallel zu den Besprechungen des Redaktionsteams ist eine kontinuierliche Erarbeitung des Hauptbandes, die Überarbeitung der Anhänge und die Erstellung der Bibliographie vorgesehen.

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9813</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines Instrumentariums zur Berechnung des Radionuklidtransports in Tonformationen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2003 bis 31.07.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.07.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 773.470,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Rübel	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung eines Instrumentariums zur Durchführung von Langzeitsicherheitsanalysen für Endlager in Tonformationen. Dieses soll die nach dem derzeitigen Stand der Wissenschaft relevanten Prozesse für die Langzeitsicherheit berücksichtigen.

Zu diesem Zweck werden Rechenprogramme entwickelt. Dabei wird von vorhandenen Transportprogrammen ausgegangen. Das Ton-Instrumentarium liefert einen wichtigen Beitrag, um zusammen mit den bestehenden Instrumentarien für Granit- und Salzformationen vergleichende Langzeitsicherheitsanalysen durchzuführen, die für bei zukünftigen Standortentscheidungen erforderlich sind.

Durch das Projekt TONI werden die Arbeiten in den Arbeitspaketen 3.3 und 3.4 im europäischen Projekt FUNMIG kofinanziert.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Im Arbeitspaket 1 werden das konzeptionelle und numerische Modell für Tonformationen entwickelt. Danach werden die Rechenprogramme GRAPOS, CHETMAD und  $r^3t$  weiterentwickelt und angepasst.

Im Arbeitspaket 2 werden die Rechenprogramme verifiziert und validiert. Dazu werden die Vergleiche mit analytischen Rechenfällen durchgeführt. Weiterhin werden zum einen natürliche Spurenstoffverteilungen an den Standorten Benken und Mont Terri und zum anderen Bohrlochversuche aus dem Untertagelabor Mont Terri modelliert. In den Arbeitspaketen 3.3 und 3.4 des kofinanzierten Projekts FUNMIG werden diese Arbeiten fortgeführt und erweitert.

Im Arbeitspaket 3 wird basierend auf dem Endlagerkonzept aus den Forschungsvorhaben GEIST und GENESIS eine Systemstudie durchgeführt. Dabei werden mögliche Szenarien definiert und ein Referenzfall festgelegt. Mit Hilfe der neu entwickelten Rechenprogramme werden für das generische Endlager Modellrechnungen zur Langzeitsicherheit durchgeführt. Durch Parametervariationen sollen Unsicherheiten bezüglich des Radionuklidtransports ermittelt werden.

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

Der Abschlussbericht wurde fertig gestellt und liegt dem Projektträger vor.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine

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

Rübel, A.: Influence of the transport parameter uncertainty on the long-term-safety of nuclear waste repositories in clay formations. Abstract und Präsentation für die Konferenz "Clays in natural & engineered barriers for radioactive waste confinement", 17.-20. September in Lille.

Rübel, A.: Long-term safety assessment for a generic nuclear waste repository in a clay formation. Abstract und Posterpräsentation für die Konferenz "International conference on radioactive waste disposal in geological formations", 6.-9. November in Braunschweig..

Rübel, A.: Influence of the transport parameter uncertainty on the long-term-safety of nuclear waste repositories in clay formations. Eingereicht zu Physics and Chemistry of the Earth.

Rübel, A.; Becker, D.-A.; Fein, E.: Radionuclide transport modelling to assess the safety of repositories in clays. GRS-228, Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, 2007. ISBN: 978-3-939355-02-1. Abschlussbericht im Druck.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9834</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Laborprogramm zur Untersuchung der Entwicklung und Verheilung von Auflockerungszonen in Tonsteinformationen - LUVEAT		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2004 bis 31.12.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 207.286,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Zhang	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel der Arbeiten besteht in der Untersuchung potentieller Rissbildung und Störungen in Auflockerungszonen (ALZ) in Tonsteinformationen und der Möglichkeit ihrer Selbstheilung durch plastische Verformung und Quellung.

Im Rahmen des EU-Projektes NF-PRO wird die GRS in Abstimmung mit den Projektpartnern ein Arbeitsprogramm in der großen MTS-Presse im GRS-Labor an großen Tonkernen mit Zentralbohrungen unter relevanten hydromechanischen Bedingungen durchführen. Es werden die Auffahrung, Ventilation und Verfüllung von Schächten, Bohrlöchern und Strecken simuliert, wobei sich die Entstehung sowie die Entwicklung der Auflockerungszone im Tonkern infolge der Beanspruchung und schließlich die Heilung der ALZ nach der Verfüllung und Aufsättigung des Verfüllmaterials im Bohrloch beobachten lässt.

Mit dem Vorhaben werden die vorhandenen Grundlagen und Methoden für die Vorhersage der Dichtwirkung von Tonsteinbarrieren gegenüber schadstoffbelasteten Fluiden verbessert und weiterentwickelt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Entwicklung und Erprobung eines Versuchssystems
- Vorversuche zur Entwicklung/Verheilung der ALZ in gelochten Tonkernen mit  $D/d/L = 100/20/200$  mm
- Hauptversuche zur Entwicklung/Verheilung der ALZ in großen gelochten Tonkernen mit  $D/d/L = 280/55/600$  mm
- Modellrechnungen der Laborversuche

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

Nach Beendigung der Auswertung aller Laboruntersuchungen und der Modellrechnungen wurde der Abschlussbericht des Projekts mit folgenden Kapiteln erstellt:

- Einleitung
- Laboruntersuchungen zur Verheilung von stark geschädigten Tonkernproben
- Prognoserechnungen für die Schädigungs-/Verheilungsversuche an großen Tonkernen mit Verwendung eines Schädigungsmodells für Tonstein
- Zusammenfassung und Schlussfolgerungen.

Die Ergebnisse wurden in den zusammenfassenden Abschlussberichten des NFPRO-Projekts (RTDC4 und WP4.4) aufgenommen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine

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

Zhang, C.-L., Rothfuchs, T. (2007): Damage and Sealing of Clay Rocks Detected by Permeability Measurements, Poster presentation on the 3rd International Meeting „Clays in natural and engineered barriers for radioactive waste confinement“, Sept. 17-20, 2007, Lille, France.

Deliverable 4.4.16 – GRS final activity report for WP4.4: Investigations on Self-Sealing of Indurated Clay.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9844</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> NF-PRO 5, Process Couplings and Integration in Performance Assessment	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2004 bis 31.12.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 130.168,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Becker

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben umfasst den Anteil der GRS am Unterprojekt 5 (RTDC 5) des von der Europäischen Kommission geförderten Projekts NF-PRO.

Einzelne, besonders relevante Effekte im Nahbereich von Endlagern für radioaktive Abfälle sollen im Hinblick auf eine spätere Berücksichtigung in Rechenprogrammen zur Analyse der Langzeitsicherheit identifiziert werden. Dazu werden existierende Studien und die parallel laufenden Arbeiten des Gesamtprojekts NF-PRO ausgewertet. Die identifizierten Prozesse werden in phänomenologische Modelle umgesetzt. Rechenschemata zur Berechnung von Massenbilanzen und Massenströmen werden erarbeitet und angewendet. Anhand der Ergebnisse werden wechselseitige Einflüsse zwischen geochemischen und Transportvorgängen abgeschätzt und bewertet.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Unterprojekt 5 (RTDC) des Gesamtprojekts NF-PRO gliedert sich in zwei Arbeitspakete. Der Anteil der GRS wird in mehreren Arbeitsschritten durchgeführt.

AP5.1: Phänomenologische Analyse von Nahfeldprozessen.

AP5.1.1: Identifikation wichtiger Nahfeldprozesse. Anhand existierender Studien und gestützt auf Erkenntnisse aus den Unterprojekten 1 bis 4 werden bedeutsame Prozesse identifiziert und in phänomenologische Modelle umgesetzt. Die GRS befasst sich dabei mit abgebrannten Brennelementen in Stahlbehältern in Ton- und Salzformationen.

AP5.1.2: Massenbilanzen und Massenströme. Für Massenbilanzen und Massenströme von Substanzen, die aus den Bestandteilen der Abfälle und Versatzstoffe gelöst werden, werden Rechenschemata erarbeitet und auf existierende Studien angewandt. Anhand der Resultate wird die Bedeutung des wechselseitigen Einflusses zwischen geochemischen und Transportprozessen bewertet.

AP5.1.3: Teilnahme an Projektworkshops.

AP5.2: Zusammenführung und Auswertung der Ergebnisse aller Unterprojekte.

Die GRS trägt zum Arbeitspaket durch Teilnahme an Diskussionen und Mitarbeit an der Dokumentation bei.

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

In der Komponente 5 des Gesamtprojekts lag der Schwerpunkt der Arbeiten im Berichtszeitraum auf dem Arbeitspaket 5.2, also der Synthese der Gesamtarbeiten aus der Sicht der Sicherheitsanalyse. Es wurde ein Synthesis Report erstellt, in dem sämtliche Arbeiten dargestellt und in den Gesamtzusammenhang eingeordnet werden. Die Aufgabe der GRS lag dabei vorrangig in der Zusammenstellung und Bewertung der Arbeiten zum Wirtsgestein Salz, die in den Komponenten 3 (THM processes in the EBS) und 4 (EDZ characterization and evolution) durchgeführt worden sind sowie der Arbeiten zur Lauge-Bentonit-Wechselwirkung aus Komponente 2 (Chemical evolution of the EBS).

Es wurde ein Abschlussbericht über die von GRS durchgeführten Arbeiten erstellt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine

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

L. Johnson et al.: NF-PRO RTDC-5 Synthesis Report (in Vorbereitung)

R.-P. Hirsekorn, D.-A. Becker: Modelling of Corrosion-Induced Processes in Emplacement Boreholes and Drifts. GRS-Bericht (in Vorbereitung)

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9854</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2004 bis 31.01.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.799.659,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Filbert	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

„Phase 1“ des Vorhabens:

AP1: Grundlagenermittlung: Die Grundlagen und Randbedingungen für die technischen Komponenten des Einlagerungssystems werden im Rahmen der Kooperation 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.

„Phase 2“ des Vorhabens:

AP4: Ausführungsplanung: Das in der Entwurfsplanung entwickelte und ausgewählte Gesamtsystem zur Einlagerung von Brennstabkockillen 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: Im Arbeitspaket erfolgt die Versuchsauswertung und die Erstellung des Abschlussberichtes.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP4: Die Ausführungsplanung für den Plateauwagen zum Transport des internen Transferbehälters und der Einlagerungsvorrichtung wurde abgeschlossen. Die Vorgaben der Entwurfsplanung, Länge über Puffer 6.150 mm, Breite 2.200 mm konnten eingehalten werden. Die Gesamtmasse erhöhte sich auf 10 t. Die Gesamthöhe des Plateauwagens beträgt 1.400 mm. Unter der Belastung des Transferbehälters (52 t) verringert sich die Höhe auf 1.380 mm. Die Auslegung erfolgte auf eine maximale Nutzlast von 70 t zum Transport der Einlagerungsvorrichtung. Die Ausführungsplanungen für den internen Transferbehälter und die Bohrlochschleuse wurden abgeschlossen.

Ausführungsplanung und Bau des Versuchsstandes wurden ausgeschrieben und vergeben. Die Ausführungsplanung ergab, dass zur Realisierung des Versuchsortes ca. 100 t Stahl erforderlich sind. Als Versuchsort wurde die Turbinentischebene (+ 10,0 m) im Block 3 des E.ON Kraftwerkes Robert Frank in Landesbergen bei Nienburg angemietet. Durch seine bauliche Lage erlaubt es dieser Versuchsort, alle erforderlichen Abläufe des Antransportes und des Einlagerungsvorganges im Maßstab 1:1 zu demonstrieren.

AP5: Die Überprüfung der sicherheits- und strahlenschutztechnischen Eignung von Transferbehälter, Bohrlochschleuse und Abschirmhaube wurde dem TÜV-Süd Industrieservice GmbH in Auftrag gegeben. Mit der Eignungsprüfung der Komponenten zum Einsatz in einem Bergwerk sowie der Vorprüfung der Herstellungsunterlagen für den Plateauwagen und die Einlagerungsvorrichtung und den Abnahmeprüfungen der Einlagerungsvorrichtung wurde die DMT GmbH beauftragt. Erste Ergebnisse bestätigen die Einsatzfähigkeit der Komponenten in einem Bergwerk.

Die Stahlbauteile der Einlagerungsvorrichtung wurden gefertigt und zur Werksmontage an den Lieferanten versandt. Mit der Werksmontage wurde begonnen. Die Fertigung der Plateauwagenbauteile Oberwagen und Drehschemel sind abgeschlossen. Mit der Endmontage ist begonnen worden. Der Gusskörper des internen Transferbehälters wurde bearbeitet und die erste Behälterschleuse fertig gestellt. Für die beiden Behälterschleusen und die Bohrschleuse wurden die Schieber gefertigt. Die Fertigung von Einzelteilen des Versuchstandes wurde aufgenommen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Erstellung des Statusberichtes „Ausführungsplanung“ - Januar 2008
- Erstellung des Statusberichtes „Bau“ - Juni 2008
- Assemblierung des internen Transferbehälters
- Endbearbeitung des Bohrlochschleusenkörpers
- Assemblierung der Bohrlochschleuse
- Montage des Versuchsortes
- Anlieferung und Montage der Komponenten Batterielokomotive und Einlagerungsvorrichtung am Versuchsort
- Anlieferung interner Transferbehälter, Plateauwagen und BSK 3 Dummy
- Beginn des Versuchsprogramms

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstraße 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 9874</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung der komplexen mechanischen und hydraulischen Eigenschaften von Tongesteinen unter besonderer Berücksichtigung der Foliation		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2004 bis 31.12.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 81.058,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Popp	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Tongesteine stellen aufgrund ihrer Barrierewirkung ein potenzielles Wirtsgestein für Endlagerkonzepte basierend auf einem dichten Einschluss dar. Aus Sicht der Langzeitsicherheit sind aber die vorliegenden Ergebnisse für Endlager in Ton- oder Tonformationen nicht ausreichend. Ziel des Vorhabens ist die Gewinnung hinreichender Laborparameter zur Entwicklung geeigneter Stoffgesetze, die über eine numerische Simulation des mechanischen und hydraulischen Verhaltens eine Vorhersage der ALZ für das umgebende Gebirge beim Betrieb eines Endlagers erlauben.

Unter Berücksichtigung der schichtgebundenen Gefügeanisotropie sollen richtungsabhängige gesteinsmechanische Parameter bestimmt werden. Die Untersuchungen umfassen sowohl Triaxialexperimente mit simultaner Bestimmung von Dilatanz und Messung von  $V_p$  und  $V_s$ , als auch die Bestimmung der Scherfestigkeit von Schichtflächen im direkten Scherexperiment unter Berücksichtigung von Porendruckeffekten.

Davon ausgehend können vorhandene Stoffansätze modifiziert und entsprechend der Problematik an Tongesteine angepasst werden.

Das Vorhaben wird im Rahmen des internationalen 6. EU-Rahmenprogramms (Key-Processes in the Near-Field) durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Koordination der experimentellen Arbeiten und Probenahme.
- AP2: Darstellung des aktuellen Kenntnisstandes zum gesteinsmechanischen Verhalten von Tongesteinen.
- AP3: Mineralogisch-petrographische und gesteinsphysikalische Charakterisierung des vorliegenden Probenmaterials.
- AP4: Umbau und Erweiterung der bestehenden Prüfeinrichtungen auf die Anforderungen von Tongesteinen.
- AP5: Untersuchungen in der Triaxialapparatur bei erhöhten Manteldrücken.
- AP6: Verformungsversuche im direkten Schergerät zur Bestimmung der Mohr-Coulomb Scherparameter.
- AP7: Umsetzung der gebirgsmechanischen Parameter in Modellrechnungen.
- AP8: Zusammenstellung der Ergebnisse und Berichtserstellung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP7: Auf Basis des im Rahmen des Vorhabens entwickelten Stoffansatzes zur Beschreibung der mechanischen Eigenschaften folierter Tongesteine konnte ausgehend von den mittels triaxialer Festigkeits- und Scheruntersuchungen bestimmten Stoffparametern die durch die Hohlraumerstellung induzierte Auflockerungszone für eine spezifische In-situ-Situation im Felslabor Mont Terri mit UDEC rechenstechnisch simuliert werden.  
Im Ergebnis wurde nachgewiesen, dass der neue Stoffansatz geeignet ist, das in-situ beobachtete Materialverhalten mit charakteristischen Riss- und Bruchstrukturen zu beschreiben, dass aber die Einbeziehung von Porendruck- sowie Feuchtigkeitsinduzierten Effekten noch weitere experimentelle und Modellierungsarbeiten erfordert.
- AP8: Der Abschlussbericht für die NF-Pro-Aktivitäten wurde fristgerecht fertig gestellt. Die wichtigsten Ergebnisse wurden im Rahmen des 4. NF-PRO Workshops in Brüssel 15. - 17.10.07 mittels eines Posters präsentiert. Darüber hinaus fand vom 04. - 05.12.07 in Nancy das 4. RTDC 4 Coordination Meeting statt, in dessen Rahmen der Synthesebericht für die RTDC 5 diskutiert wurde.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

#### *Deliverables (2005 - 2007)*

- D4.2.2 (IfG, 2005a): Interims Report 1: State of the art report / Test plan for shear testing (2005-01-15).  
D4.2.6 (IfG, 2005b): Interims Report 2: First results of shear tests (laboratory tests) (2005-01-15).  
D4.2.8 (IfG, 2006): Interims Report 3. Summary of results on shear tests / Triaxial compression tests (2006-02-10).  
D4.2.15 (IfG, 2007): Final report (2007-10-01).

#### *Contributions NF-PRO Workshops*

- Popp, T. & K. Salzer, 2006. Investigation of the influence of bedding planes to coupled HM properties of the damaged rock. 3th NFPRO-Workshop, El Escorial, Spain, Nov 14-16 2006. Poster.  
Popp, T. 2006. Current understanding of the gas-frac scenario in salt. WP4.4 Long term evolution/ RS 4 SF / steel canister / salt. Plenary Sessions on cross-cutting topics and issues. 3th NFPRO-Workshop, El Escorial, Spain, Nov 14-16 2006. Talk.  
Popp, T. & K. Salzer, 2007. Investigation of the influence of bedding planes to coupled HM properties of the damaged rock. 4th NFPRO-Workshop, Brussels, 15-17 October 2007. Poster.

#### *Conferences and Conference Proceedings*

- Popp, T. & K. Salzer, 2005. Anisotropy of seismic and mechanical properties of Opalinus clay during triaxial and shear deformation. 2nd International meeting "Clays in Natural & Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement", Tours, 14-18 March 2005, P/THMN/03, Poster.  
Popp, T. & K. Salzer, 2007. Anisotropy of seismic and mechanical properties of Opalinus clay during triaxial deformation in a multi-anvil apparatus. Physics and Chemistry of the Earth, 32, 879-888.  
Popp, T., K. Salzer & Minkley, W., 2007. Influence of bedding planes to EDZ-evolution and the coupled HM properties of Opalinus clay. 3rd International meeting "Clays in Natural & Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement", Lille, 17-20 September 2007, P/EDZ/01, Poster.  
Popp, T., K. Salzer & Minkley, W., subm. Influence of bedding planes to EDZ-evolution and the coupled HM properties of Opalinus clay. Physics and Chemistry of the Earth (subm.).

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9884</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitwechselwirkungen von Tonen und Zementen in Ton- und Salzformationen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2004 bis 31.12.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 532.835,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Meyer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Verwendung von kompaktierten Bentoniten in Endlagern in Salz, Ton- und Granitformationen, mit und ohne Betonwiderlager, setzt die Kenntnisse der Wechselwirkungen mit zutretenden Lösungen voraus. Für Langzeitsicherheitsanalysen müssen die möglichen Veränderungen der Bentonite, die ihre Dichtwirkung beeinträchtigen können, quantifizierbar sein. In diesem Vorhaben sind Langzeituntersuchungen mit charakteristischen Lösungen aus Salz-, Ton- und Granitformationen sowie mit Betonkorrosionslösungen vorgesehen. Es werden die Entwicklung der Lösungszusammensetzung und des Mineralphasenbestandes auf dem Reaktionspfad betrachtet sowie die zeitabhängige Veränderung der Dichtwirkung der reagierten Bentonite mittels Quelldruckmessungen bestimmt. Durch Vergleich der chemischen Umsetzungsprozesse mit den veränderten hydraulischen Eigenschaften der umgewandelten Materialien werden Aussagen über das Langzeitverhalten der untersuchten Materialien erhalten.

Die BENKOR-Arbeiten sind gleichzeitig auch integraler Bestandteil des NF-PRO-Vorhabens FIW-CT-2003-02389 „Understanding and physical and numerical modelling of the key processes in the near-field, and their coupling, for different host rocks and repository strategies. In NF-PRO finden sich die BENKOR-Arbeiten im RTD Component 2: “Chemical evolution of the EBS“ in den Arbeitspaketen WP 2.2: “Evolution of pore water chemistry and effect of salt in the bentonite buffer during saturation“ und WP 2.4: “Effects of concrete degradation (high salinity) on bentonite and geochemical condition in the near field“.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Untersuchungsprogramme von BENKOR und NF-PRO sind deckungsgleich. In den Experimenten werden ein Bentonit (MX-80) im Kontakt mit einer Opalinuston-Lösung, einer Granit-Lösung aus dem Versuchslabor Äspö und einer jungen Zementporenlösung mit hohem pH-Wert (pH 13), zwei für Salzformationen charakteristische Lösungen (NaCl-Lösung und IP21-Lösung), sowie Lösungen, die durch die Korrosion von Salzbeton mit den zwei Salzlösungen entstehen, untersucht. In Batchversuchen reagiert viel Lösung mit wenig Bentonit. In Kompaktionsversuchen reagiert wenig Lösung mit viel Bentonit, im Porenraum des auf 1,60 g/cm<sup>3</sup> kompaktierten Bentonits. Nach einer Reaktionszeit von 7 Tagen, ein, zwei und drei Jahren wird der reagierte Bentonit gewaschen, getrocknet und gemahlen, auf 1,6 g/cm<sup>3</sup> kompaktiert und sein Quelldruck mit der Lösung gemessen, mit der er zuvor reagiert hat. Gemessen werden die Lösungszusammensetzung nach der Reaktion und die aufgetretenen mineralogischen Veränderungen. Die Ergebnisse werden

mit den Ergebnissen der Quelldruckmessungen korreliert. Es wird weiterhin versucht werden, die experimentell beobachteten Änderungen im Lösungsschemismus und im Mineralbestand des MX-80 mittels EQ3/6 nachzumodellieren.

Das Arbeitspaket AP1 im Projekt BENKOR (02 E 9884) entspricht im Vorhaben NF-PRO dem workpackage WP 2.2. AP2 entspricht WP2.4.

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

Die Versuche wurden wie geplant beendet. Die Messungen an den 3-Jahresproben wurden abgeschlossen und ausgewertet. Eine zusammenfassende Darstellung aller Ergebnisse wurde für den NF-PRO-Abschlussbericht fertig gestellt. Diese Ergebnisse wurden auf dem "3rd International Meeting on Clays in Natural & Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement", Lille, September 17-20, 2007 und dem „Workshop on Long-term performance of smectitic clays embedding canisters with highly radioactive waste“, Lund, Sweden, November 26-28, 2007“ vorgestellt. Sie zeigen, dass unterschiedliche Lösungen den Bentonit sehr unterschiedlich beeinflussen. Die auftretenden mineralogischen Veränderungen sind deutlich ausgeprägt. Zwischen Batch- und Kompaktionsversuchen gibt es deutliche Unterschiede. Die Kompaktionsversuche mit den geringen Lösungsmengen im Porenraum spiegeln die Bedingungen in einem Endlager (geschlossenen System) wieder, die Batchversuche, mit verhältnismäßig viel Lösung repräsentieren das offene geologische System. Die beobachteten Veränderungen der Quelldrucke mit fortschreitender Reaktionszeit waren klein, jedoch signifikant. Die durch diskontinuierliche Kurzzeitquelldruckmessungen beobachteten Trends konnten durch kontinuierliche Langzeitquelldruckmessungen bestätigt werden. Es haben sich deutliche Korrelationen zwischen Mineraländerungen und resultierenden Quelldrucken herausgestellt. Die Mineraländerungen sind am Ionenaustausch in den Zwischenschichten und an der Substitution von Mg durch Al in den Oktaederschichten besonders deutlich festzumachen. Dadurch ändert sich die Schichtladung der Partikel über die Zeit zu geringeren Werten, ebenso wie die gemessenen Quelldrucke.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine

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

Herbert, H.-J., Kasbohm, J and Sprenger, H. (2007): Summary of GRS results in NF-PRO RTDC2, WP2.2 and 2.4, Deliverables D2.2.13 and D2.4.8 – Final Activity Report: Alteration of Montmorillonites in Saline Solutions, Braunschweig, December 2007 – NF-PRO portal, 60 p.

Herbert, H.-J., Kasbohm, J., H. Sprenger, H., Reichelt, Ch. and Fernandez, A. M. (2007): Swelling pressures of MX-80 bentonite in solutions of different ionic strength – Paper presented at the Conference 3rd International Meeting on Clays in Natural & Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Lille, September 17.-20. 2007. Paper submitted for publishing in Applied Clay Technology.

Kasbohm, J. and Herbert, H.-J. (2007): Mechanisms for mineralogical alteration of dioctahedral montmorillonite in saline solutions – a TEM study. – Reprints of the contributions to the workshop on Long-term performance of smectitic clays embedding canisters with highly radioactive waste, Lund, Sweden, November 26-28, 2007, 70-80.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9894</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor - Hauptprojekt			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2004 bis 31.12.2008		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.400.305,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Rothfuchs	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im SB-Experiment soll untersucht werden, ob sich Permeabilitäten von Ton/Mineral-Gemischen so optimieren lassen, dass der sich in einem abgeschlossenen Endlagerbereich einstellende Gasdruck bei kontrollierter Abströmung der Gase über das Verschlussystem stets kleiner als die kleinste Hauptspannung bleibt, so dass im Gebirge keine unkontrollierten Risse generiert werden.

Für die Optimierung der Verschlusskörper werden das Aufsättigungsverhalten, die sich einstellenden Quelldrücke, die Gasdurchbruchdrücke sowie die Gas- und Wasserpermeabilitäten von verschiedenen Ton/Mineral-Gemischen im Labor ermittelt. Im Technikum werden die geplanten In-situ-Einbautechniken und die Messtechnik überprüft. Im Untertagelabor Mont Terri werden in einem Versuchsfeld die in situ erreichbaren Einbaudichten, Wassersättigungen in Wechselwirkung mit dem umgebenden Gebirge, die resultierenden Quelldrücke sowie die Ein- und Zweiphasenflussparameter bestimmt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Abschließende Laboruntersuchungen zur Materialauswahl, Bestimmung von Materialparametern, Ermittlung geeigneter Einbautechniken für das Dichtmaterial sowie Auslegungs- und Modellrechnungen.

AP2: Technikums- und In-situ-Untersuchungen: Im Mt. Terri Untertagelabor werden in 4 bis 6 instrumentierten Bohrlöchern an den ausgewählten Ton/Mineral-Gemischen die Einbringtechnik, die Gas- und Wasserpermeabilitäten, die Gasdurchbruchdrücke im wassergesättigten Zustand und die Zweiphasenflussparameter in Wechselwirkung mit dem umgebenden Gebirge untersucht. Zum Test der Einbring- und Verdichttechniken werden in einem Technikum in Braunschweig entsprechende Vorversuche durchgeführt.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Beim Technikumsversuch 2 (Ton/Sand-Mischung 35/65) ist der Wasserdurchbruch nach ca. 900 Tagen Aufsättigungsdauer am 07.09.2007 eingetreten. Die aktuelle Injektionsrate beläuft sich auf ca. 9 ml/Tag und liegt noch geringfügig über der Wasserfließrate am Probenausgang, was auf eine noch anhaltende Aufsättigung hindeutet. Eine erste Abschätzung der Wasserpermeabilität ergibt einen Wert von ca.  $10\text{-}18\text{ m}^2$ , der die zuvor an kleinen Proben gemessenen Werte sehr gut bestätigt. Der Gesamtdruck (Porenwasserdruck + Quelldruck) im Dichtungsmaterial unterhalb des Packers beträgt z. Zt. ca. 0,24 MPa.

Die Aufsättigung der In-situ-Versuche BSB1 (35/65 Ton-Sand, Dichtungslänge 1 m), BSB2 (35/65 Ton-Sand, Dichtungslänge 1 m), BSB13 (Nagra-Material, gebrochene Tonpellets) Dichtungslänge 0,5 m) und BSB15 (50/50 Ton-Sand, Dichtungslänge 0,5 m) dauern an.

Beim Versuch BSB2 wurden bisher 75,7 l injiziert, was auf einen Wasserverlust in das umliegende, offensichtlich nicht voll gesättigte Gebirge hinweist. Der Injektionsdruck beträgt aktuell 0,36 MPa und die Injektionsrate ca. 55 ml/Tag. Der im oberen Bereich der Dichtung unterhalb des Packers registrierte Gesamtdruck weist einen noch ansteigenden Verlauf auf und beträgt z. Zt. 0,16 MPa. Dieser Wert liegt nur geringfügig unter dem nach der gleichen Aufsättigungsdauer im Technikumsversuch gemessenen Wert, was auf einen vergleichbaren Versuchsverlauf mit ähnlichem Aufsättigungsverhalten hindeutet.

Bei der Bohrung BSB1 wurden bisher ca. 38,5 l Wasser (Injektionsrate ca. 48 ml/Tag) eingebracht. Nach Erhöhung des Injektionsdrucks von 0,14 MPa auf 0,38 MPa stieg der Gesamtdruck an den Druckmessstellen unterhalb des Packers von 0,16 MPa auf 0,41 MPa an und zeigt einen relativ konstanten Verlauf. Wie bei der Bohrung BSB1 war auch bei der Bohrung BSB15 ein Anstieg des Gesamtdruckes nach Erhöhung des Injektionsdrucks von 0,12 MPa auf 0,37 MPa festzustellen. Der gemessene Wert beträgt 0,4 bzw. 0,42 MPa und entspricht in etwa dem der Bohrung BSB1. Die insgesamt injizierte Wassermenge beträgt ca. 42,6 l (Injektionsrate ca. 101 ml/Tag). Diese deutliche Erhöhung des Druckwertes am oberen Ende der Dichtung unterhalb des Packers bei den im südlichen teil der Testnische gelegenen Bohrungen BSB1 und BSB15 ist vermutlich auf Überlagerung des eigentlichen Quelldrucks durch den Injektionsdruck infolge einer Umläufigkeit entlang der Auflockerungszone (ALZ) am Bohrlochrand zurück zu führen und führt u. U. je nach Ausbildung der EDZ zu einer Wasserzuführung auch über den Bohrlochrand.

Bei dem in der Bohrung BSB13 eingebauten Nagra-Material nahm der Druck im oberen Dichtungsbereich von Versuchsbeginn an kontinuierlich zu. Der aktuelle Wert beträgt ca. 1,8 MPa. Die bei einem Injektionsdruck von 0,41 MPa eingepresste Wassermenge beträgt 16,2 l (Injektionsrate ca. 15,6 ml/Tag).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung des Technikumsversuchs mit Bestimmung des Gaseintrittsdruckes und verbleibender Gaspermeabilität
- Weiterführung der Aufsättigung der In-situ-Versuche und Ermittlung der Wasserpermeabilität
- Nachuntersuchung der erreichten Sättigung in allen Versuchen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Rothfuchs, T., Mieke, R., Jockwer, N., Zhang, C.-L., 2007: Selfsealing Barriers of Clay/Mineral Mixtures - The SB Project at the Mont Terri Rock Laboratory, Proc. 2<sup>nd</sup> Int. Conf. Mechanics of Unsaturated Soils, (ed. T. Schanz), Springer Proceedings in Physics 112, p.453-460.

<b>Auftragnehmer:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstraße 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 9904</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung des mechanischen Verhaltens von kompaktiertem Salzgrus im Kontakt mit dem Wirtsgestein		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2004 bis 31.12.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 98.531,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Salzer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Aus Sicht der Langzeitsicherheit sind die bisher vorliegenden Forschungsergebnisse zu hochkompaktiertem Salzgrus nicht ausreichend. Die Zielsetzung dieses Vorhabens besteht deshalb in einer Verbesserung der gesteinsmechanischen und hydraulischen Charakterisierung von Salzgrus, der bis in den Bereich niedriger Porositäten vorkompaktiert wurde.

Die dazu durch gesteinsmechanische Laborversuche zu gewinnenden gebirgsmechanischen und hydraulischen Parameter sind die Basis für die Entwicklung bzw. Anpassung eines geeigneten Stoffansatzes für hochkompaktierten Salzgrus und seine Kontaktflächeneigenschaften zur Modellierung des Langzeitverhaltens einer entsprechenden geotechnischen Barriere. Schwerpunktmäßig soll dabei die Entwicklung von Porosität, Permeabilität sowie die mechanische Festigkeit untersucht werden. Dazu gehört insbesondere auch der Einfluss einer Einwirkung von gesättigten Salzlösungen. Hierfür ist die Nutzung neuer Untersuchungsverfahren notwendig.

Mit den geplanten Untersuchungen werden die genannten Defizite abgebaut, so dass eine zuverlässige Prognose des Verhaltens dieses Materials möglich wird. Dies hat vor allem Konsequenzen für den Betrieb eines Endlagers.

Das Vorhaben wird im Rahmen des internationalen 6. EU-Rahmenprogramms (Key-Processes in the Near-Field) durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Darstellung des aktuellen Kenntnisstandes zum Verhalten von hochkompaktierten Salzgrus.

AP2: Untersuchungen in der Triaxialapparatur bei erhöhtem Manteldruck.

AP3: Untersuchungen mit dem Schergerät zur Bestimmung der Scherparameter an Kontaktflächen zwischen Formsteinen aus hochkompaktiertem Salzgrus.

AP4: Untersuchungen mit dem Schergerät zur Bestimmung der Scherparameter an Kontaktflächen zwischen Formsteinen aus hochkompaktiertem Salzgrus und einer Steinsalzoberfläche.

AP5: Durchführung von Langzeit-Kriechversuchen mit verschiedenen Manteldrücken.

AP6: Umsetzung der gewonnenen Materialparameter in ein geeignetes Stoffmodell und Validierung durch Nachrechnung der Laborversuche.

AP7: Durchführung von Modellrechnungen zur Bewertung von Verfüllmaßnahmen.

AP8: Zusammenstellung der Ergebnisse und Berichterstellung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP6: Im Stoffmodellvergleich zur Beschreibung des Kompaktionsverhaltens der Salzgrusbriketts am Beispiel der Langzeit-Kriechversuche zeigt das Stoffmodell nach ZANG die beste Übereinstimmung mit den Laborversuchen, wobei zukünftig eine Implementierung eines allseits anerkannten Stoffmodells in einen allgemein zugänglichen Modellierungscode erforderlich ist.

Auf Basis der Laboruntersuchungen wurden die Parameter für das MINKLEY-Scher-Modells zur Beschreibung des mechanischen Verhaltens der Kontaktflächen zwischen vor-kompaktierten Salzgrusbriketts bestimmt. Abschließend sind zusätzliche Arbeiten zur Erfassung auch des hydraulischen Verhaltens dieser Kontaktflächen erforderlich.

AP8: Der Abschlussbericht für die NF-PRO-Aktivitäten wurde fristgerecht fertig gestellt. Die wichtigsten Ergebnisse wurden im Rahmen des 4. NF-PRO Workshops in Brüssel 15. – 17.10.07 mittels eines Posters präsentiert.

Darüber hinaus wurden Teilkapitel für den von der RTDC 5 als Abschluss des NF-PRO-Vorhabens zu erstellenden Synthesebericht zugearbeitet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Keine

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

#### *Deliverables (2004 - 2007)*

D3.5.3 (IfG, 2004): Report on triaxial compression and permeability tests (2004-10-31).

D3.5.3 (IfG, 2004): Report on triaxial compression and permeability tests (2004-10-31).

D3.5.4 (IfG, 2005): Report on shear-test (2004-12-31).

D3.5.5 (IfG, 2006): Report on long-term creep test (2006-02-28).

D3.5.6 (IfG, 2007): Final Activity Report: Report on adaptation of the material laws to the laboratory results - Note, the 3 independent parts:

- Report an adaptation of material laws to laboratory results
- Report an adaptation of material laws to laboratory results – shear test and shear model
- Final Activity Report

#### *Contributions NF-PRO Workshops*

Salzer, K., T. Popp & H. Böhnel (2006): Mechanical and permeability properties of highly pre-compacted granular salt bricks. 3th NF-PRO-Workshop, El Escorial, Spain, Nov 14-16 2006. Poster.

Salzer, K., T. Popp & H. Böhnel (2007): Mechanical and permeability properties of highly pre-compacted granular salt bricks. 4th NF-PRO-Workshop, Brussels, 15-17 October 2007. Poster.

#### *Conferences and Conference Proceedings*

Salzer, K., T. Popp & H. Böhnel, (2007): Mechanical and permeability properties of highly pre-compacted granular salt bricks. In K.-H. Lux, W. Minkley, M. Wallner, & H.R. Hardy, Jr. (eds.), Basic and Applied Salt Mechanics; Proc. of the Sixth Conf. on the Mech. Behavior of Salt. Hannover 2007. Lisse: Francis & Taylor (Balkema). 239 – 248.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9914</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Goelektrische Untersuchung der Entsättigung des Opalinuston im Ventilationsversuch im Mt. Terri Untertagelabor Phase 2; Kurzzeitentwicklung der EDZ		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2004 bis 31.12.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 152.676,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Rothfuchs	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Seit Anfang 2003 wird in Mt. Terri ein Ventilationsversuch zur Ermittlung des Entsättigungsverhaltens des Opalinuston infolge der Bewetterung von Endlagerstrecken durchgeführt. Die nach dem Einbau von Streckenverschlüssen erfolgende Wiederaufsättigung ist für die Langzeit-Dichtwirkung des Verbundes Barriere/Gebirge von besonderem Interesse.

Zur Bearbeitung spezieller Fragen bzgl. der Charakterisierung und Kurzzeitentwicklung der EDZ soll der Versuch mit einer weiteren Ent- und Wiederaufsättigungsphase weitergeführt werden.

Folgende Fragestellungen sollen von den Projektpartnern im Rahmen des EU-Projektes NF-PRO bearbeitet werden:

- Bestimmung der effektiven hydraulischen Leitfähigkeit (Keff) in der EDZ,
- Abschätzung des Selbstheilungsprozesses infolge natürlicher Wiederaufsättigung,
- Bestimmung des Einflusses chemischer Änderungen infolge der Ventilation auf die hydraulisch-mechanischen Eigenschaften sowie
- Bestimmung der EDZ-Eigenschaften bzgl. Feuchtetransporteigenschaften und Vergleich mit entsprechenden Daten im ungestörten und natürlich geklüfteten Gebirge („main fault“).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die GRS soll im Projekt folgende Arbeiten übernehmen:

- geoelektrische Messungen zur Ermittlung und Verfolgung der zeitlichen und räumlichen Entwicklung der Feuchteverteilung im Gebirge in den verschiedenen Ventilationsphasen
- unterstützende Untersuchungen an großkalibrigen Bohrkernen zur Quantifizierung der o. g. Effekte unter besonders gut kontrollierten Bedingungen im Labor.

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

*Weiterführung der geoelektrischen Feldmessungen:* Seit dem Ende der Ventilation (21.12.2006) wurde die Wiederaufsättigung des Gebirges beobachtet. Am Ende des Berichtszeitraumes war noch keine Vollsättigung in der Streckenrandzone erreicht. Aus den bisherigen Ergebnissen ist abzulesen, dass bis zur Vollsättigung noch mindestens ein weiteres Jahr vergehen wird.

Nach Beendigung der Auswertung aller Laboruntersuchungen, der Modellrechnungen sowie der In-situ-Messungen bis Mitte 2007 wurden der Final Activity Report der GRS zum NF-PRO WP4.3 sowie der Beitrag zum zusammenfassenden Abschlussbericht der Komponente RTDC4 verfasst und dem Koordinator übersandt.

Für den Projektabschlussbericht wird der Final Activity Report noch um die Ergebnisse der Feldmessungen des zweiten Halbjahres 2007 ergänzt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fertigstellung des Abschlussberichtes.

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

Rothfuchs, T., K. Wieczorek: Monitoring of Solution Content by Geoelectric Tomography in the Mont Terri Ventilation Test. Poster presentation at the 4th NF-PRO Workshop, Brussels, October 15-17, 2007.

Zhang, C.-L., T. Rothfuchs: Laboratory Investigations on Ventilation Effects on the Opalinus Clay. Poster presentation at the 4th NF-PRO Workshop, Brussels, October 15-17, 2007.

Zhang, C.-L., K. Wieczorek, T. Rothfuchs: Effects of Ventilation on Consolidated Clay: Laboratory Tests and In-situ Monitoring of Saturation Changes. Deliverable 4.3.20 – GRS final activity report for WP4.3: EDZ Short-Term Evolution of NF-PRO RTD Component 4, December 2007.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9924</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Migration von Actiniden im System Ton, Huminstoff, Aquifer - Spektroskopische Bestimmung von thermodynamischen und kinetischen Kenngrößen zur Beschreibung der Huminstoff-Metall-Komplexierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2004 bis 31.10.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.10.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 211.563,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Löhmannsröben	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Erweiterung und Absicherung der thermodynamischen Datenbasis für Actiniden und der Einfluss der Kinetik stehen im Vordergrund des Forschungsvorhabens. Es werden die mechanistischen Aspekte der Wechselwirkung von Metallionen mit Huminstoffen sowie die Kinetik und Thermodynamik der Reaktionen durch zeitaufgelöste Lumineszenzspektroskopie untersucht. Dazu werden die konditionellen Stabilitätskonstanten bestimmt (AP1), Abstandsverteilungen von Metall-Bindungsstellen in Huminstoffen ermittelt (AP2), die Assoziationskinetik von HS untersucht (AP3) und die Konformationsdynamik von HS analysiert (AP4). Die zu erwartenden Ergebnisse des Forschungsvorhabens zielen auf eine Erweiterung der Methodik zum Langzeitsicherheitsnachweis für potenzielle Endlagerstätten. Daraus werden Beiträge für differenzierte Transportmodelle, die vor allem dem milieuhängigen Verteilungsverhalten von Schwermetallspezies in DOC-haltigen Systemen Rechnung tragen, erhalten. Das Verständnis der zugrunde liegenden Teilprozesse ist eine elementare Voraussetzung für die verlässliche Modellierung konkreter Szenarien.

Das Projekt 02E9924 ist Teil des Verbundes „Migration von Actiniden im System Ton, Huminstoff, Aquifer“. Insbesondere mit den Projekten 02E9673, 02E9763, 02E9693 und 02E9683 bestehen thematische Verknüpfungen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bestimmung von konditionellen Komplexbildungskonstanten und thermodynamischen Daten
- AP2: Ermittlung der mittleren Abstände  $r$  von Metallbindungsstellen in Huminstoffen
- AP3: Untersuchung der Kinetik der Huminstoff-Metall-Assoziation
- AP4: Konformationsdynamik in Huminstoff-Metall-Komplexen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In den verbleibenden Monaten der Projektlaufzeit (bis 31.10.2007) wurden in den Arbeitspaketen AP1 bis AP4 die abschließenden Arbeiten durchgeführt. Ein Hauptgegenstand der Arbeiten war die Erstellung des Abschlussberichtes.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Es wird der Abschlussbericht erstellt. In diesem Zusammenhang werden Manuskripte zur Veröffentlichung der wissenschaftlichen Ergebnisse in internationalen Journalen vorbereitet.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Bettina Marmodée, Joost de Klerk, Michael U. Kumke, Freek Ariese and Cees Gooijer: *Spectroscopic investigations of complexes between Eu(III) and aromatic carboxylic ligands*. J. Alloys Comp. (2007), DOI: 10.1016/j.jallcom.2007.04.150.

N. Kolokassidou, F. Lushtinetz, S. Eidner, M.U. Kumke, I. Pashalidis: *Effect of Metal Ion Complexation on Humic Acid Conformation*, Proceedings 2nd Annual Workshop FUNMIG, Stockholm, Schweden.

M.U. Kumke, S. Eidner: *Fluorescence and energy transfer processes of humic substances and related model compounds in terbium complexes* in: Humic substances: molecular details and applications in land and water conservation, E.A. Ghabbour and G. Davies (eds), Taylor and Francis, Inc., 2005, 131-152.

M.U. Kumke, S. Eidner, T. Krüger: *Fluorescence quenching and luminescence sensitisation in complexes of Tb(III) and Eu(III) with humic substances*, Environmental Science & TECHNOLOGY 39(24), 9528-9533 (2005).

Bettina Marmodée, Michael U. Kumke, Joost de Klerk, Freek Ariese and Cees Gooijer: *High-resolution lanthanide ion probe spectroscopy (HR-LIPS) of complexes between Eu(III) and humic substances*, J. Luminesc. (2006) submitted.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9934</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Modellierung des großräumigen Schadstofftransports (Kurztitel: MOST)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2004 bis 31.01.2008		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 816.300,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Fein	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit der Fertigstellung der in den Jahren 1995-2003 unter BMBF- bzw. BMWi-Förderung entwickelten Programmpakete d<sup>3</sup>f und r<sup>3</sup>t stehen Werkzeuge zur Verfügung, die es erlauben, Grundwasserbewegungen unter Berücksichtigung der Salinität und Schadstofftransporte unter dem Einfluss von Sorption, Löslichkeitsgrenzen und radioaktivem Zerfall für großräumige, hydrogeologisch komplexe Gebiete über lange Zeiträume zu berechnen.

Ziel dieses Projektes ist die umfassende Erprobung der Programmpakete mit allen enthaltenen Möglichkeiten der Modellierung und unter Ausschöpfung der Hard- und Softwaregrenzen. Damit soll das Vertrauen in die Modellierung von Dichteströmung und Radionuklidtransport erhöht werden.

Modelliert werden Strömungen mit und ohne Salzeinfluss und der Transport von natürlichen und anthropogenen Wasserinhaltsstoffen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens sollen folgende Testfälle bearbeitet werden:

AS1: Transport von Chlorid und Kalium im Gebiet der Insel Langeoog

AS2: Transport von Radionukliden im Grundwassermessfeld Krauthausen

AS3: Transport von Uran, Nickel und Eisen im ehemaligen ostthüringischen Uranbergbaugebiet Ronneburg

AS4: Transport von Zink im Bereich Cape Cod, Massachusetts

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

Die Arbeiten zum Testfall „Langeoog“ wurden auf der TIAC '07, III. International Symposium on Technology of Seawater Intrusion into Coastal Aquifers in Almería, Spanien vorgebracht. Der eingereichte Bericht diente als Grundlage für das entsprechende Kapitel des Abschlussberichts, das inzwischen abgeschlossen wurde.

Mit den Daten des Instituts für Agrosphäre ICG-4 des Forschungszentrums Jülich zur Beschreibung des hydraulischen Durchlässigkeitsfeldes für das Testfeld Krauthausen wurden sowohl zwei- als auch dreidimensionale stochastische Modellierungen mit einer bzw. mit drei hydrogeologischen Schichten durchgeführt. Bei der Transportmodellierung für Uranin, Lithium und Bromid stellte sich heraus, dass die mittlere Transportgeschwindigkeit mit den vom FZ Jülich erhaltenen Parametern nicht reproduziert werden kann. Überdies wurden bei dem genaueren Studium der Literatur Inkonsistenzen bemerkt. Die aus Messungen gewonnenen Daten für die Permeabilitäten stimmen nicht mit den zur Simulation benutzten überein. Insgesamt kann festgestellt werden, dass mit keinem Datensatz eine Übereinstimmung zu erzielen ist. Deshalb wurden für die Rechnungen eigene Daten bestimmt.

Für den Testfall Borden wurde ein zweidimensionales Strömungsmodell aufgebaut. Um die Transportrechnungen durchzuführen, wurde  $r^3t$  so modifiziert, dass die Zerfallskonstanten nicht mehr konstant wie beim radioaktiven Zerfall sind, sondern eine einfache Funktion eines anderen ebenfalls transportierten Stoffes sind. In unserem Fall gilt, dass der biologische Abbau von Benzol in der Anwesenheit von Ethanol unterdrückt wird.

Die Erstellung des Abschlussberichtes wurde fortgesetzt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

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

Schneider, A.; Fein, E.: Modelling fresh water lenses using  $d^3f$  and  $r^3t$ . TIAC '07. III. International Symposium on Technology of Seawater Intrusion into Coastal Aquifers. Almería, 16.-19. Oktober 2007.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9944</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Goelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2004 bis 31.12.2008		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 304.832,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Wieczorek	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des von SKB durchgeführten Projektes "Prototype-Repository" wird die Endlagerung bestrahlter Brennelemente in vertikalen Bohrlöchern im Hartgestein durch elektrische Erhitzer simuliert. Die Versuchsstrecke und die Resthohlräume in den Einlagerungsbohrlöchern im Granit sind mit Ton-Splitt-Lockermaterial bzw. mit hoch kompaktierten Bentonit-Formteilen verfüllt. GRS überwacht in diesem Projekt seit 2001 den räumlichen und zeitlichen Verlauf der Aufsättigung der Bentonitbarrieren mit Hilfe geoelektrischer Widerstandsmessungen. Aus der Verteilung des spezifischen elektrischen Widerstandes im Bereich verschiedener Elektrodenarrays wird die Wassergehaltsverteilung an Hand bereits durchgeführter Labormessungen ermittelt. Zur Absicherung der Ergebnisse und zur Erprobung neuer Auswerteverfahren soll ein Aufsättigungsversuch mit geoelektrischer Überwachung im Labormaßstab durchgeführt werden. Die experimentellen Messergebnisse stellen eine wichtige Datenbasis zur Überprüfung der numerischen Simulation des Aufsättigungsverhaltens von Tonbarrieren in Langzeitsicherheitsanalysen dar. Der Erfolg des Vorhabens wird durch die Qualität der bisher erzielten Ergebnisse abgesichert.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: In-situ-Ermittlung der räumlichen und zeitlichen Wasserverteilung in Gebirge, Bohrloch-Buffer und Streckenversatz
- AP2: Laborversuche zur Überprüfung der Korrelation inhomogener Wasserverteilungen in tonhaltigem Versatz mit gemessenen Resistivitätsverteilung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die Messungen im Streckenversatz in Sektion I und II wurden weitergeführt. In Sektion I ist die Resistivitätsverteilung inzwischen sehr homogen und hat sich im letzten Halbjahr nicht weiter erniedrigt. Bei Werten unter  $2 \Omega\text{m}$  (entspricht einem Wassergehalt von über 25 %) ist Vollsättigung erreicht. In Sektion II setzte sich der bisherige Trend (Resistivitätserniedrigung und Vergleichmäßigung durch Wasseraufnahme aus dem Gebirge) weiterhin fort. Die Bereiche leicht erhöhter Resistivität verkleinern sich stetig. Im Zentrum von Sektion II ist die Resistivität noch etwas höher (unter  $5 \Omega\text{m}$ ), entspricht aber mindestens 18 % Wassergehalt.

Bei den Messungen im Buffer ist wegen des Ausfalls mehrerer Elektroden Ende 2005 eine tomografische Auswertung der Messungen nicht mehr möglich. Die Gründe für den Elektrodenausfall sind unbekannt, möglicherweise handelt es sich um Korrosionseffekte. Eine Klärung wird erst im Rahmen von Nachuntersuchungen möglich; allerdings will SKB das Prototype Repository in der jetzigen Konfiguration noch bis Anfang 2009 weiter betreiben.

Die Resistivitätsverteilungen entlang der Messketten im Gebirge ähneln einander sehr und änderten sich bis Mitte 2006 kaum. Die Gebirgsresistivität zeigt charakteristische Werte zwischen 2000 und  $7000 \Omega\text{m}$  (gesättigtes Gebirge). Allerdings deutet sich seit Mitte 2006 eine Widerstandserhöhung entlang der Messkette nahe dem Lagerbohrloch 5 an. Hier ist die Resistivität entlang der Messkette inzwischen weitgehend auf Werte oberhalb  $1200 \Omega\text{m}$  gestiegen, was sich möglicherweise durch eine Austrocknung des Betons zur Ankopplung der Elektroden und des umgebenden Gebirges erklären lässt.

AP2: Zur Simulation der Versatzaufsättigung mit begleitender Geoelektrik wurde bereits Ende 2006 ein Versuch mit verdichtetem Versatz in einem mit Elektroden bestückten Plexiglasrohr durchgeführt. Der Versatz wurde von unten her mit Äspö-Wasser teilweise geflutet und die Resistivitätsverteilung vor und nach der Flutung gemessen. Die inhomogene Wasserverteilung wurde durch die Resistivität gut reproduziert. Allerdings zeigte die Auswertung, dass der ursprüngliche Wassergehalt des Versatzmaterials erheblich niedriger war als beim In-situ-Versuch. Deshalb wird ein weiterer Versuch mit dem vorhandenen Aufbau, aber realistischem Anfangswassergehalt durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung der In-situ-Messungen

AP2: Weiterer Aufsättigungsversuch mit Äspö-Versatzmaterial

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, Klaus: Geoelectric Monitoring, in: Goudarzi, Reza, Johannesson, Lars-Erik: Äspö Hard Rock Laboratory – Prototype Repository – Sensors data report (Period 010917-070601), Report No:17, International Progress Report IPR-07-19, Svensk Kärnbränslehantering AB, 2007.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9954</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2004 bis 31.07.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.422.492,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

#### TA 1: 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.

#### TA 2: 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

#### TA 1:

- Teilnahme am jährlichen IGSC-Meeting und Workshop zur INTESC-Initiative in Paris.
- Der NEA Bericht „Timing of high-level waste geological disposal“ ist fertig gestellt und wird derzeit von den zuständigen Gremien abgestimmt und freigegeben.
- Teilnahme am dritten Projekttreffen des Actinidenverbands in Saarbrücken mit einem Vortrag zur Relevanz von Rückhalteprozessen bei einer Langzeitsicherheitsanalyse für Ton.

- Teilnahme am Workshop der Natural Analogue Working Group (NAWG) in München mit einem Übersichtsvortrag und einem Paper über deutsche NA-Studien.
- Erstellung von Berichtsentwürfen zum Workshop „Gase im Endlager im Salz“ und zur methodischen Vorgehensweise bei einem Safety Case.
- Zusammenstellung und Bewertung der Berücksichtigung von Human Intrusion Szenarien in Langzeitsicherheitsanalysen anderer Länder.
- Weiterführung von deterministischen Modellrechnungen und Ermittlung von Sicherheits- und Performanceindikatoren für Endlager in Salz- und Tonformationen. Erarbeitung von Referenzwerten für geeignete Sicherheitsindikatoren.

#### TA 2:

- Modellrechnungen zur Radionuklid Ausbreitung im Deckgebirge und Ermittlung von Dosis-konversionsfaktoren für unterschiedliche Klimazustände. Vorstellung der Arbeiten auf der REPOSAFE.
- Erstellung eines Berichtsentwurfs zur Verifizierung der Datenbasis für die Actiniden anhand von Vergleichsrechnungen. Beginn der geochemischen Modellrechnungen zur Auswirkung der Unsicherheiten relevanter Parameter auf die Elementlöslichkeiten.
- Teilnahme am Treffen der Task Force EBS in Stockholm und am Workshop „Long-term performance of smectite clays“ in Lund. Erstellung eines Berichtsentwurfs für das nicht-isotherme Bentonit-Dampfaufsättigungsmodell.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### TA 1:

- Teilnahme am jährlichen RWMC-Meeting und am AMIGO-Workshop der IGSC.
- Teilnahme an der Sitzung des Arbeitskreises Szenarientwicklung.
- Fertigstellung des Berichts zum Safety Case für ein HLW-Endlager in Steinsalz.
- Erstellung des Abschlussberichts über Sicherheits- und Performanceindikatoren für Endlager in Salz- und Tonformationen.
- Erarbeitung eines konzeptuellen Modells zur Berücksichtigung der Auflockerungszone im Rahmen eines Langzeitsicherheitsnachweises für ein Endlager im Tonstein.

#### TA 2:

- Fertigstellung des Abschlussberichts zur Berücksichtigung der Auswirkung klimatischer Veränderungen in einer Langzeitsicherheitsanalyse für ein Endlager in Steinsalz.
- Durchführung der Rechnungen zur Auswirkung der Unsicherheiten chemischer Effekte und zur Auswirkung neuer Quellterme in einer integrierten Langzeitsicherheitsanalyse für ein Endlager im Steinsalz und Erstellung des Abschlussberichts.
- Teilnahme am Treffen der Task Force EBS in Äspö. Anpassung des Codes VIPER für 1D-radialsymmetrische Probleme. Modellierung des Testfalls Task 2.2 der Task Force EBS.
- Erstellung des zusammenfassenden Projektabschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Noseck, U.; Müller-Lyda, I.; Steininger, W.: Overview on natural analogue studies in Germany. In: Proceedings of the NAWG Workshop, München, 24. - 25. August 2007.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9965</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Wirksamkeit des geologischen und geotechnischen Barriersystems im Hinblick auf die Standortauswahl in magmatischen Gesteinen - WIBASTA			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2005 bis 31.05.2008		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 460.416,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Krone	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel besteht darin, für ein HAW-Endlager im Granit ein klareres Verständnis über die Rolle der einzelnen Komponenten des geologischen und geotechnischen Barriersystems im Hinblick auf den Nachweis der Endlagersicherheit, respektive der Standortbewertung, und damit über die an sie zu stellenden Anforderungen hinsichtlich des Isolationspotenzials zu erlangen. Mögliche Einschränkungen des Isolationspotenzials der geologischen Barriere werden maßgeblich durch die vorhandenen Kluftsysteme bestimmt, deren Charakterisierung folglich einen wesentlichen Teil der Standorterkundung ausmacht. Es soll geklärt werden, was die zusätzlichen technischen Barrieren leisten müssen, damit der Nachweis der Einhaltung der Schutzziele geführt werden kann, ohne die Standorteignung in Frage zu stellen.

Auf der Grundlage der durchgeführten Sicherheitsbetrachtungen soll analysiert werden, in welchem Maße die einzelnen Komponenten des Mehrbarriersystems zum Nachweis bzw. zur Gewährleistung der Endlagersicherheit beitragen und wo für jede einzelne Barriere die praktischen Grenzen für das Isolationspotenzial liegen. Im Ergebnis dieser Auswertung sollen Schlussfolgerungen hinsichtlich der zweckmäßigerweise an die einzelnen Barrieren zu stellenden Anforderungen mit Blick auf die Standortauswahl abgeleitet werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Charakterisierung, Auslegung und Sicherheitsbewertung der technischen Barrieren

1. Projektmanagement
2. Untersuchungen zur Behälterkorrosion und der daraus resultierenden Gasbildung
3. Untersuchungen zu thermisch und Erdbeben-induzierten Scherverformungen
4. In-situ-Versuch zur Abdichtwirkung des Bentonits im geklüfteten Gestein
5. Berichtswesen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Bildung von Gasen stellt einen wichtigen Aspekt bei der sicherheitstechnischen Bewertung von untertägigen Endlagern dar. Eine Reihe von Untersuchungen beschreibt die Bildung und Ausbreitung von Gasen in verschiedenen Einlagerungskonzepten. Bisherige Untersuchungen zeigen, dass Gas, das z. B. durch Korrosion gebildet wird, solange von der Bentonit-Ummantelung eines Behälters zurückgehalten wird, bis ein kritischer Druck erreicht wird, der zu Rissen in der geotechnischen Barriere und damit zum Gasdurchbruch führt. Eine Quantifizierung des Einflusses der Gasbildung und damit eines entsprechenden Druckaufbaus wurde für die in Russland zur Einlagerung geplanten austenitischen Stahlbehälter durchgeführt. In diesem Zusammenhang wurde abgeschätzt, welche Bedingungen nötig sind, um für das erstellte Einlagerungskonzept einen kritische Gasdruck zu erzeugen, dessen Erreichen vermieden werden soll, um die Integrität der technischen Barriere nicht zu gefährden. Ferner wurde in diesem Zusammenhang untersucht, inwieweit durch Gasdiffusion der zu erwartende Druckaufbau verringert wird, bevor eine Gasbewegung durch erhöhte Permeabilität in der Auflockerungszone oder Rissbildung erfolgt. Die relevanten Ergebnisse dieser Studie können wie folgt zusammengefasst werden:

- Die Stärke der Gasbildung ist im Rahmen ihrer Schwankungsbreite wenig relevant für den Druckaufbau. Eine Ausnahme kann sich langfristig ergeben für sehr geringe Permeabilitäten des Bentonitbuffer sowie des Granits ( $<10^{-20} \text{ m}^2$ ).
- Die thermische Expansion ist kurzfristig (bis einige Monate) von Bedeutung. Rechnerisch ist in dieser Phase eine Überschreitung der minimalen Hauptspannung möglich. Wenn realistischere eine Restgassättigung ( $S_g > 0$ ) existiert, wird der Druck gedämpft auf tolerable Werte.
- Die Permeabilität des Bentonitbuffers ist der entscheidende Parameter für den Druckaufbau. Bei geringer Permeabilität ( $<10^{-20} \text{ m}^2$ ) kann ein schneller Druckaufbau den Bereich der Hydro-frac Bildung erreichen. Die Permeabilität ist prinzipiell durch die Auslegung einstellbar.
- Die Permeabilität des Granits rangiert mit ihrem Einfluss an 2. Stelle nach der Bentonitpermeabilität. Wegen der natürlichen Heterogenitäten des Wirtsgesteins und der erhöhten Permeabilität der ALZ werden, realistisch gesehen, keine Probleme erwartet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung und Abschluss der begonnenen petrographisch-mineralogische und strukturophysikalische Laboruntersuchung an Kernproben aus den Erkundungsbohrungen E1, E2, E3 (je 100 m) im Bereich „Jenisseyskiy“ und Vergleich der erhaltenen Daten mit den Materialien der Bereiche „Itatskiy“ (Bohrung 1I-500) und „Kamenniy“ (Bohrung 1K-700) des Nishnekansker granitoiden Massives.
- Entwicklung und Darstellung eines Sicherheitsnachweiskonzeptes für das vorliegende Einlagerungskonzept.
- Erstellung der Abschlussberichtes und Abschlusspräsentation auf einem Workshop mit russischen Experten in Moskau.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9975</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Wirksamkeit des geologischen und geotechnischen Barrierensystems im Hinblick auf die Standortauswahl in magmatischen Gesteinen - WIBASTA		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2005 bis 31.05.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 417.264,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Fein	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zielstellung des Vorhabens besteht in der Erlangung eines klareren Verständnisses über die Rolle der einzelnen Komponenten des geologischen und geotechnischen Barrierensystems für ein HAW-Endlager im Hartgestein. Dies soll im Hinblick auf den Nachweis der Endlager-sicherheit und damit auf die Anforderungen hinsichtlich des Isolationspotenzials geschehen.

Bei der Endlagerung im Hartgestein kann nicht von einem vollständigen Einschluss der Abfälle durch das Wirtsgestein ausgegangen werden. Mögliche Einschränkungen des Isolationspotenzials werden maßgeblich durch die vorhandenen Kluftsysteme bestimmt, deren Charakterisierung folglich einen wesentlichen Teil der Standorterkundung ausmacht. Durch die eingeschränkte Kenntnis über die vorliegenden Kluftsysteme stellt sich die Frage, was die zusätzlichen technischen Barrieren leisten müssen, damit der Nachweis der Einhaltung der Schutzziele geführt werden kann. Ferner ist zu klären, mit welchem Detaillierungsgrad und mit welchen Verfahren die Charakterisierung der geologischen Verhältnisse im Hartgestein zweckmäßigerweise betrieben werden sollte. Zur Untersuchung der Wechselwirkung zwischen beiden Aspekten ist die Durchführung integrierter Sicherheitsanalysen vorgesehen, die das gesamte Barrierensystem erfassen und die Auswirkungen von Parameteränderungen bewerten. Obwohl die Arbeiten weitgehend an Hand von Standortdaten, die von russischer Seite bereitgestellt werden, durchgeführt werden, sollen keine Aussagen zur Standorteignung abgeleitet werden.

Dieses Vorhaben wird gemeinsam mit der DBE Technology und der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) durchgeführt. Im Folgenden wird nur das von der GRS untersuchte Arbeitspaket beschrieben.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP3: Bewertung der Wirksamkeit des gesamten Barrierensystems  
 Erweiterung von Computerprogrammen  
 Hydrogeologisches Modell für den Standort Jennisseiskij  
 Deutsch-russische Benchmarks

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Ableitung von Behälterausfallfunktionen wurde ein Modell erstellt, welches das Eindringen des Grundwassers in einen Teilbereich des Endlagers über eine Trennfuge simuliert. Es wurden dafür zwei verschiedene Zuflussraten gewählt: Eine stammt aus der schweizerischen Studie Gewähr, eine weitere wurde russischen Unterlagen entnommen. Für beide Zuflussraten wurden sechs verschiedene Szenarien gerechnet, die sich in der Durchlässigkeit des Stollens und der Bohrlöcher unterscheiden. Als Ergebnis liegen die Geschwindigkeiten vor, mit der das Wasser in den technischen Endlagerbereich eindringt sowie die Zeitpunkte, an denen es die Behälter erreicht. Des Weiteren wurden zwei verschiedene Arten der Wasserauffüllung der technischen Bauwerke identifiziert. Die Dokumentation des Modells und der Ergebnisse wurden fertig gestellt.

Am 19. Juli trafen sich BGR und GRS zwecks Diskussion über Unstimmigkeiten zwischen den erhobenen Daten und ihrer Verwendung für die Modellierung im Gebiet Jenisseiskij. Dabei stellte sich heraus, dass einige, für die Modellrechnungen notwendige Eingabedaten von der BGR nicht geliefert werden können. Daher wurde eine weitere Datenrecherche seitens der GRS notwendig.

Das von der BGR aus geoelektrischen Messungen abgeleitete Modell wurde von der GRS genutzt, um mittels ArcView ein Profilschnitt zu erzeugen und erste Modellversionen der EMOS-Module Claypos, Chetmad, Exmas und Statist zu erstellen. Da das EMOS-Modul für geklüftete Gesteine (CHETMAD) bisher noch nicht in Zusammenhang mit statistischen Untersuchungen verwendet worden ist, waren kleinere Anpassungen an dem Programm notwendig.

Am 19. November fand ein Treffen mit der BGR und DBEtec statt, um sich über die jeweiligen Arbeiten des anderen zu informieren und das Vorgehen bei der Erstellung des Abschlussberichtes zu besprechen.

Teilnahme am NEA-Workshop „Stability and Buffering Capacity for Long-term Isolation of Radioactive Waste; Application to Crystalline Rock“

Von der Abteilung Geotechnik wurden zusätzliche Untersuchungen an drei russischen Bohrkernen durchgeführt. Dabei wurden Gas- und Wasserpermeabilitäten, Korndichten, Gesamtporositäten, dynamische E-Module und dynamische Querzahlen bestimmt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt. Der Schwerpunkt liegt in der Durchführung einer Modellstudie im Gebiet Jenisseiskij. Es ist geplant die Arbeiten im Mai dieses Jahres abzuschließen und die Ergebnisse während eines Workshops in Moskau vorzustellen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9985</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Mobilisierung von Actiniden durch mikrobiell produzierte Liganden unter Berücksichtigung der Endlagerung von radioaktivem Abfall		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2005 bis 30.06.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 282.060,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

- Fortsetzung der FTIR Untersuchungen zur Charakterisierung der Anbindung des U(VI) an die Pyoverdine
- Abschluss der Untersuchungen mit Cm(III) und Peptidoglykan (PGN)
- Zweite Messkampagne XAS-Strukturuntersuchungen der U(VI) Komplexe mit ausgewählten Modellen (SHA, BHA, NAP, LPS, PGN) und den Pyoverdinen an ROBL in Grenoble (Aufenthalt von M. Glorius)

- Besuch von Anna Moritz und Jonas Wiebke am 6./7.8.07 bei uns; Kolloquium am 6.8. Thema: DFT-Studie zur Modellierung der Uran(VI)-Koordination durch ausgewählte Bioliganden; Manuskript: *Complexation of uranium(VI) with aromatic acids in aqueous solution - A combined computational and experimental study* bei Inorganic Chemistry eingereicht
- Beginn der spektroskopischen Untersuchungen zur Cm(III) Komplexierung mit SHA, BHA und NAP
- Beginn der absorptionsspektroskopischen Untersuchungen zur Np(V) Komplexierung mit SHA und NAP
- Teilnahme an der internationalen Konferenz Migration'07 (26.8.-31.8.2007) mit drei Beiträgen (1 Vortrag und 2 Poster)
- Fortsetzung Literaturstudium zu relevanten Bioliganden und deren Wechselwirkung mit Actiniden

#### Ergebnisse, Teilziel 2 (AP2-AP4):

- U(VI) + PGN:  $pK_a$  und Konzentration der funktionellen Gruppen des PGN aus Titrations: -COOH:  $pK_{a1}$  4.2-4.8 (0.61 mmol/gPGN) und  $pK_{a2}$  6.0-6.4 (0.71 mmol/gPGN); -OH:  $pK_{a3}$  9.7-10.1 (2.55 mmol/gPGN); Komplexbildungskonstanten: Bedingungen [U(VI)] ( $1 \times 10^{-5}$  M) in Abhängigkeit vom pH-Wert (2.4-8.8) und [PGN] (0.01-0.2 g/l PGN): zwei U(VI)-PGN-Komplexe ( $\log\beta_{MabH}$  mit M=Metallion, a=Carboxyl, b=Hydroxyl, H=Proton);  $\log\beta_{1100} = 5.38$  (Rotverschiebung der Emissionsbanden, Lebensdauer: 224 ns) und  $\log\beta_{1110} = 13.0$  (keine Fluoreszenzemission)
- Cm(III), U(VI) + LPS: Manuskript: *A laser spectroscopic study to investigate the complex formation of curium(III) with lipopolysaccharide* von H. Moll et al. in Bearbeitung, Manuskript: *Interaction of uranium(VI) with lipopolysaccharide* von A. Barkleit et al. bei Dalton Transactions eingereicht
- Cm(III) + SHA und BHA: Manuskript *Complexation of Curium(III) with Hydroxamic Acids Investigated by Time-Resolved Laser-Induced Fluorescence Spectroscopy* von M. Glorius et al. bei Polyhedron eingereicht
- Cm(III), U(VI) + NAP: zwei U(VI)-NAP-Spezies mit fs-TRLFS charakterisiert (Löschung der NAP-Eigenfluoreszenz), Stabilitätskonstanten:  $\log\beta_{111} = 20.5$  und  $\log\beta_{112} = 29.9$ ; drei Cm(III)-NAP-Spezies bestimmt: A)  $\log\beta_{111} = 19.1$  (Emissionsmaximum: 599.7 nm und Fluoreszenzlebensdauer: 76  $\mu$ s), B)  $\log\beta_{101} = 12$  (606 nm und 90  $\mu$ s) und C)  $\log\beta_{102} = 19.8$  (609 nm und 101  $\mu$ s)
- XAS Messungen Run 1: Die Messungen der Testlösungen von U(VI) mit SHA, BHA, BA, DFB und SA bei relativ niedrigen [U(VI)] ( $5 \times 10^{-4}$ M bis 0.005M) ergaben gut auswertbare Fluoreszenzspektren. Generell sind Lösungen mit einer dominierenden Spezies wünschenswert. Dies ist aber infolge der Löslichkeit der Liganden nicht immer realisierbar (z. B. SHA, BHA). Besonders bei DFB und SA zeigen die Unterschiede der EXAFS-Oszillation in Amplitude und Frequenz im k-Raum zwischen 6 und 9  $\text{\AA}^{-1}$  im Vergleich zum unkomplexierten Uranyl-Ion eine Wechselwirkung der Liganden mit U(VI) an, d. h. niedrigere U-O<sub>eq</sub> Werte wurden gemessen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der Literaturrecherche und deren Auswertung
- Fortführung der FTIR-Untersuchungen zur Charakterisierung der U(VI)-Anbindung an die Pyoverdinin-Mischung
- Weitere Arbeiten zur Auswertung der Titrations im Lipopolysaccharid(LPS)-System
- Komplexierungsuntersuchungen mit Modellen unter Verwendung unterschiedlicher spektroskopischer Techniken: a) Cm(III) mit DFB; b) Np(V) mit DFB, LPS und PGN
- Auswertungen der Komplexierungsuntersuchungen im System Cm(III)-PGN
- Fortsetzung der XAS Messungen zur Struktur der U(VI) Komplexe mit ausgewählten Modellen und Pyoverdinen an ROBL/ESRF und Erstellung einer Zusammenfassung der erhaltenen Ergebnisse
- Erstellung der Beiträge zur internationalen Radiochemiekonferenz NRC-7 in Budapest, Ungarn (24.-28.8.2008)
- Beginn der Arbeiten am Projektabschlussbericht

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

H. Moll, G. Bernhard: *Complex formation of curium(III) with amino acids of different functionalities: L-Threonine and O-Phospho-L-Threonine*. Journal of Coordination Chemistry 60(2007)16, 1795-1807.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 9995</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Grundlegende Prozesse zum Radionuklidtransport im Fernfeld eines Endlagers im Salz – FUNMIG-RTDC-5			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2005 bis 31.05.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 169.825,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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  $\mu$ -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: Die Auswertung der in NA6 und NA12 durchgeführten Pumptests zeigen, dass der im Jahr 2006 beobachtete Anstieg der Eh-Werte in Grundwässern des Ton-Lignit-Horizonts im nördlichen Untersuchungsgebiet auf Eindringen von Sauerstoff zurückzuführen ist. Die Ergebnisse zeigen die Problematik der Kolloidprobenahme in gering leitenden Horizonten, die zum einen zur Erhaltung des Eh-Werts ein genügend langes Abpumpen zum anderen ungestörte (mechanische) Bedingungen erfordern.
- AS2: Durchführung der U(IV)/U(VI)-Trennung an weiteren Proben und Messung von Isotopenverhältnissen in den Fraktionen weiterer Proben. Die Ergebnisse bestätigen diejenigen aus vorangegangenen Messungen. Alle Ergebnisse zur Charakterisierung der immobilisierten Uranphasen wurden zusammengestellt und bewertet. Anhand der Ergebnisse konnten die wichtigsten Prozesse, die bei der sekundären Urananreicherung eine Rolle gespielt haben, identifiziert werden. Die Ergebnisse bestätigen auch das bisherige Bild zur geologischen Entwicklung des Standorts.
- AS3: Weiterführung der Arbeiten zur Untersuchung der Umsetzung sedimentären organischen Kohlenstoffs (SOC). Aus den <sup>34</sup>S-Isotopenuntersuchungen und den Sulfatgehalten in ausgewählten Bohrlöchern wurde ein Anreicherungsfaktor für die mikrobielle Sulfatreduktion ermittelt. Weitere Untersuchungen zeigen, dass neben der geringen Verfügbarkeit von Huminstoffen im SOC auch die Rückhaltung von Huminstoffen an Tonoberflächen die geringe DOC Konzentration am Standort bewirkt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AS1: Das Arbeitspaket ist abgeschlossen. Die Ergebnisse werden in einem wissenschaftlichen Journal veröffentlicht.
- AS2: Durchführung eines systematischen Vergleichs von sequentieller Extraktion und U(IV)/U(VI)-Trennung an homogenisierten Proben. Zusammenfassung und Dokumentation aller Ergebnisse aus Sorptionsuntersuchungen an Ruprechtov-Proben.
- AS3: Abschluss der geochemischen Modellierung. Weiterführung der Untersuchung zur Komplexbildung von Uran mit aus Ruprechtov-Proben extrahierten Huminstoffen. Durchführung eines Workshops in Helsinki zur Planung und Vorbereitung der Abschlussdokumentation.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Noseck U., Suksi J., Havlova V., Brassler Th.: Uranium enrichment at Ruprechtov site – Uranium Disequilibrium series and geological development. 3rd Annual Workshop Proceedings of the IP Project FUNMIG". Edinburgh 26.-29. November 2007.
- Havlova V., Noseck U., Cervinka R., Brassler, Th., Denecke M., Hercik M.: Uranium enrichment at Ruprechtov site – Characterisation of Key Processes. 3rd Annual Workshop Proceedings of the IP Project FUNMIG". Edinburgh 26.-29. November 2007.
- Denecke, M.A., Somogyi, A., Janssens, K., Simon, R., Dardenne, K., Noseck, U., (2007). Microanalysis (micro-XRF, micro-XANES and micro-XRD) of a Tertiary sediment using synchrotron radiation. *Microscopy Microanal.* 13(3), 165-172.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10015</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockerungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2005 bis 31.07.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 500.312,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Hampe	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Untersuchung und Quantifizierung der transportrelevanten Parameter in einem geologischen Endlager in Tongestein zur Beurteilung der Vorgänge in der Auflockerungszone nach deren Wiederaufsättigung und Gasbildung in den Einlagerungsräumen. 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

- Stationäre und instationäre Permeabilitätsmessungen an „bergfeuchten“ Tonproben. Die mit Gas ermittelten Permeabilitäten liegen um zwei - drei Größenordnungen über den mit Formationswasser gemessenen.
- Untersuchungen zur Bestimmung der zugänglichen Porosität über instationäre Permeabilitätsmessungen und Vergleich mit den Simulationsrechnungen.
- Stationäre Diffusionsmessungen zur Bestimmung effektiver Diffusionskoeffizienten in Abhängigkeit vom Gasdruck. Bis zum Erreichen des stationären Zustands sind Messzeiten von mehreren Wochen notwendig.
- Umbau einer Messkammer zur Durchführung von Durchlässigkeitsuntersuchungen bei einer Temperatur von 90 °C.
- Weiterführung der Untersuchungen zum Gasdurchbruch nach Probenaufsättigung und Wiederbeaufschlagung mit Gas. Aus dem gemessenen Gaseintrittsdruck, bei dem nach Aufsättigung der Tonproben wieder ein Volumenstrom detektierbar war, wurde der äquivalente Porenradius abgeschätzt. Hieraus konnte abgeleitet werden, dass die Verdrängung des Formationswassers primär im Bereich der Makroporen stattfindet.
- Permeations- und Diffusionsuntersuchungen zum Einfluss der Anisotropie an einer mit Gas orthogonal zur Schichtung durchströmten bergfeuchten Probe. Die Permeabilität ist bei vergleichbaren Überlagerungsdrücken um ein bis zwei Größenordnungen geringer als bei parallel zur Schichtung durchströmten bergfeuchten Proben.
- Einarbeitung neuer wissenschaftlicher Erkenntnisse zur präzisen Beschreibung des Stofftransports im Übergangsgebiet zwischen gleitender Strömung und freier Molekularströmung ( $10^{-1} < Kn < 10$ ) in porösen Medien in das bisher benutzte Advektions-Diffusions-Modell.
- Die Durchströmung einer Probe parallel zur Schichtung mit VE-Wasser und Messung des zeitlichen Konzentrationsverlaufs der Spezies  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$  und  $\text{Sr}^{2+}$  im Eluens mit Hilfe von AAS zeigt erwartetes, in Mittelung monoton fallendes Verhalten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der laufenden Untersuchungen zur Bestimmung der stationären Permeabilität.
- Fortführung der Untersuchungen zur Bestimmung der zugänglichen Porosität über instationäre Permeabilitätsmessungen und Vergleich mit den Simulationsrechnungen.
- Diffusionsmessungen zur Bestimmung binärer Diffusionskoeffizienten in Abhängigkeit vom absoluten Gasdruck und Ableitung der Porenradienverteilungen aus der Druckabhängigkeit der gemessenen Diffusionsströme.
- Weiterführung der Untersuchungen zum Gasdurchbruch nach Probenaufsättigung und Wiederbeaufschlagung mit Gas.
- Beginn der Durchlässigkeitsuntersuchungen bei Temperaturen von 90 °C.
- Fortführung der Untersuchungen zum Einfluss der Anisotropie auf Diffusion und Permeation.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10025</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Stabilität von Organotonen als Anionen-Adsorber unter Endlagerbedingungen – Experiment und Modellierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2005 bis 31.07.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 463.334,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Michel	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Übergreifendes Ziel dieses Vorhabens ist es, die Funktion und Langzeitstabilität von Organotonen nachzuweisen. Dazu sollen nach Einwirken simulierter Endlagerbedingungen (erhöhte Temperatur, ionisierende Strahlung, Einfluss von Mikroorganismen, Konkurrenz durch DOM) Untersuchung von Sorptionsfähigkeit und Mikrostruktur der Organotone sowie zur Verbesserung des Verständnisses der Tonstrukturveränderungen bei Sorptionsprozessen und bei Einwirkung der Nahfeldbedingungen Monte-Carlo Simulationen durchgeführt werden.

### 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 Zwischenschichttraum der OT
- AP7: Monte-Carlo Simulationen der Zwischenschichtstruktur der Organotone und der Sorptionsprozesse

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Da bei der Temperaturbehandlung von Organotonen der Einfluss der jeweils herrschenden Atmosphäre (Laborluft, N<sub>2</sub>) und der Packungsdichte Unterschiede in der anschließenden Iod-Sorptionsfähigkeit verursacht hatten, wurden diese Versuche weitergeführt und auf HDTMA ausgedehnt. Aus diesem Grund wird derzeit zusätzlich HDPy-Bentonit untersucht, der vor der Exposition zu Pellets mit einer Dichte von etwa 1,6 g cm<sup>-1</sup> gepresst wurde. Für die Exposition gegenüber ionisierender Strahlung befindet sich für die Erreichung hoher Gesamtdosen noch ein Probensatz mit teilbelegten Organotonen am Hahn-Meitner-Institut in Berlin und ist dort der Strahlung der Co-60-Quelle ausgesetzt.

AP3: HDPy- und BE-Bentonit zeigten bei einer Temperatur von 110 °C einen Rückgang der Iod-Sorptionsfähigkeit. Diese sank nach einer Behandlung von 100 Tagen auf Werte von 19 % (HDPy) bzw. 7,5 % (BE) der relativen Sorption. Der HDTMA-Bentonit hatte dagegen nach 300 Tagen Behandlungsdauer noch etwa 50 % der ursprünglichen Sorptionsfähigkeit des unbehandelten Tons. Die Exposition gegenüber Gammastrahlung wirkte sich bei den untersuchten OT unterschiedlich auf deren Sorptionsverhalten aus. Im Anschluss an eine Dosis von 2000 kGy blieb die Sorptionsfähigkeit des HDPy-Bentonits bei einer Konzentration von 10<sup>-3</sup> mol L<sup>-1</sup> (entspr. 2,5 g Iod pro kg OT in den Batchversuchen) praktisch unverändert. Die des HDTMA- und BE-Bentonits nahm um 10 bzw. 25 % ab, während die Sorptionsfähigkeit des TPP-Tons unter denselben Bedingungen um mehr als die Hälfte gegenüber dem Wert für nicht exponierte Proben zurückging.

AP4: Aus der Untersuchung der Oberflächenladung nach Temperaturvorbehandlung im Bereich bis 200 °C wird deutlich, dass bereits durch Tempern (Ordnungsreaktionen der organischen Kationen) strukturelle Änderungen erfolgen, die nach den Ergebnissen von AP2 in Zusammenhang mit einer Verringerung der Sorptionskapazität gesehen werden können. Für BE-Bentonit kommt es bereits bei 125 °C zu einer starken Verringerung der Oberflächenladung, die, für alle Organotone gleich, bei 175 °C im Bereich des Ladungsnullpunktes liegt. Daten der bei verschiedenen Temperaturen durchgeführten Strukturanalyse der Organotone wurden zur Validierung der Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen genutzt.

AP5: Die Veränderung der C-Gehalte in den Gleichgewichtslösungen nach dem Kontakt der Organotone mit gelöster organischer Substanz wurde mit einem TOC Gerät bestimmt. Photometrisch konnte eine Desorption von HDPy und BE festgestellt werden, während dies für TPP nicht der Fall ist. Der Rückgang der Oberflächenladung ist zum einen auf eine begrenzte Desorption der organischen Kationen, zum anderen auf die Sorption von DOM zurückzuführen. Die photometrische Quantifizierung der freigesetzten organischen Kationen wird zur Zeit bei verschiedenen Verdünnungsstufen durchgeführt.

AP6: Der Einfluss verschiedener Mengen sorbierter organischer Kationen an den äußeren Oberflächen auf den Stofftransport in Organotonen wurde in einer an der ATR-Einheit des FTIR-Spektrometers befestigten Zelle untersucht. Die Diffusionsversuche wurden bei unterschiedlicher Wassersättigung und Raumdichte durchgeführt. Mit zunehmender Belegung mit Organokationen und abnehmender Wassersättigung wurde eine Abnahme der Diffusionsgeschwindigkeit von Protonen beobachtet. Dies ist auf die verringerte Größe des Diffusionsquerschnittes zurückzuführen. Im Bereich starker Hydrophobie der Oberflächen (Kontaktwinkel >90 °), die für HDPy-Tone im Bereich des Ladungsnullpunktes festgestellt wurde, liegt bei Dichten von 1,95 – 2,3 g cm<sup>-3</sup> eine Zunahme des Diffusionskoeffizienten vor. Untersuchungen zur Mikrostruktur verschieden belegter Organotone wurden in einer Reflexionseinheit mit polarisiertem Licht am FTIR-Spektrometer durchgeführt.

AP7: Ergebnisse aus zwei erfolgreich abgeschlossen Reihen von Monte-Carlo-Simulationen der Zwischenschichtstruktur und des Schichtabstandes von TPP-modifizierten Montmorilloniten zeigten sehr gute Übereinstimmung zwischen den berechneten Schichtabständen und deren experimentellen Werten. Dies ermöglichte die Schlussfolgerung über die Anordnung von TPP-Ionen innerhalb einer molekularen Schicht sowie über ihre bevorzugte Orientierung im Schichtzwischenraum eines Montmorillonits. Die Modellierung der Langzeitwirkung erhöhter Temperaturen wurde erfolgreich abgeschlossen und hat die Langzeitprognose der Temperaturbeständigkeit von Anionensorption der HDPy-, BE- und TPP-Bentonite geliefert. Es wurde unter anderem gezeigt, dass TPP-Bentonite innerhalb von ca. 6000 Jahren am stabilsten gegenüber der Einwirkung von endlagerrelevanten Temperaturen unter sauerstoffreichen Bedingungen bleiben.

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

- Weiterführung der Batchversuche mit exponierten Proben
- Versuche zum Einfluss von Mikroorganismen
- Untersuchung der Mikrostruktur in der Reflexionseinheit am FTIR-Spektrometer
- Weiterführung systematischer Messreihen zur Diffusion in Organotonen in der ATR-Einheit des FTIR-Spektrometers. Versuche bei Sättigung und verschiedenen Raumdichten
- Quantifizierung des Gehalts organischer Kationen in DOM-Lösungen

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

Ergebnisse des Vorhabens wurden im Berichtszeitraum auf folgenden Tagungen vorgestellt. Zu allen Präsentationen sind Abstracts in Tagungsberichten erschienen:

EUROCLAY Conference, Aveiro (Portugal) 22.-26. Juli 2007 ; Goldschmidt Konferenz, 19.-24. Aug. 2007; MIGRATION 2007, München, 26.-31. August 2007; Jahrestagung der DBG in Dresden, Komm. I-Bodenphysik, 2.-9. Sept. 2007; ANDRA Tagung in Lille: 'Clays in natural engineered barriers for radioactive waste confinement' 17.-20. Sept. 2007

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10035</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wechselwirkungen von Actiniden mit Anorgano-Huminkolloiden		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2005 bis 30.06.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 389.880,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Türler	

## 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 beschreibt die weitergehenden Untersuchungen zur Bildung und Charakterisierung von Aktinid-Pseudokolloiden, insbesondere den Einfluss der Huminsäure (HA) auf die Bildung von Hydroxyl-Aluminosilikat (HAS)-Kolloid getragenen Aktiniden. In unserer vorangegangenen Arbeit wurde gezeigt, dass Cm, eingebaut in HAS-Huminkolloide, sowohl an der Huminsäure als auch an dem Silizium-Anteil der HAS-Kolloide gebunden ist, wobei eine einzigartige Mischstruktur und nicht eine Mischung von zwei Kolloidgetragenen Cm Spezies gebildet werden. Die Mischkolloide wurden in einer Wasserlösung mit  $10^{-4}$  mol/L Al,  $10^{-2}$  mol/L Si,  $10^{-7}$  mol/L Cm and 8 mg/L Huminsäure bei pH 8.5 hergestellt. Die gegenwärtige Studie untersucht den Einfluss der Huminsäure auf die Lösekinetik von HAS-Kolloiden, als Teil der Zielsetzung die Verteilung und Mobilität von Radionukliden in der Umwelt vorauszusagen.

Die Kolloidlösungen werden durch Titration einer sauren Lösung, die unterschiedliche Konzentrationen von Metallionen (Al(III), Eu(III), Am(III), Th(IV)) enthält, mit einer basischen Lösung mit Silikationen bis zum pH~9 hergestellt. Die entstehenden Suspensionen werden unterschiedliche Zeit gealtert und dann in Milli-Q-Wasser im Verhältnis 1:100 verdünnt. Ein kleines Aliquot der HA-Stammlösung wird unmittelbar nach der Verdünnung in die Kolloidlösung eingegeben, um schließlich eine HA-Konzentration im Bereich von 0 bis 10 ppm zu erreichen.

Die Stabilität der HAS-Kolloide wird bei Raumtemperatur durch die Bestimmung der monomeren Silika-Konzentration und der Kolloid getragenen Am oder Th Fraktion in Abhängigkeit von der Zeit verfolgt. Die Experimente sind noch nicht abgeschlossen, aber die vorläufigen Resultate zeigen, dass HA die Silika-Auflösungsrate indirekt beeinflusst, primär durch deren Komplexierung mit Aluminium und anderen Metallionen. Die Anfangsraten der Auflösung sind vielfach größer als die Raten nach ein oder zwei Tagen, abhängig von der Dauer der Gleichgewichtseinstellung vor der Verdünnung. Ein ähnlich schneller Zeitverlauf wurde schon früher in den ersten Phasen der mit EDTA durchgeführten Lösungsexperimente beobachtet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- die laufenden Experimente werden 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

#### *Veröffentlichungen:*

M.A. Kim, D.C. Breban, A. Priemyshev, A. Mansel, J.I. Kim: "Interaction of Actinides(IV) and Actinides(VI) with Aluminosilicate and Humic Colloids", Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects, in preparation.

A. N. Priemyshev: Trace metal-humate interactions. Effect of aging time and metal concentration on the kinetic dissociation of Th(IV) from humic colloids.

GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2007 Ulm, 16. – 19. September 2007

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10045</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2005 bis 30.09.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 828.660,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Rothfuchs

### 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

Zur Untersuchung der mechanischen Schädigung und Verheilung bzw. der Einwirkungen auf die Permeabilitätsänderungen im Tonstein wurde eine Reihe von triaxialen Druckversuchen an COX-Tonsteinproben durchgeführt. Insgesamt wurden 7 Proben bei Manteldrücken von 2 bis 10 MPa durch Erhöhung der Axialspannung bis zum Bruch geschädigt und wiederverdichtet. Dabei wurde die Gaspermeabilität in axialer Richtung gemessen. Die Ergebnisse zeigen, dass eine deutliche Permeabilitätserhöhung bei Überschreitung einer kritischen Spannung vor dem Bruch entsteht. Infolge der durch weitere Belastung induzierten Rissbildung bzw. Erweiterung vorhandener Fließwege steigt die Permeabilität von  $10^{-22} \text{ m}^2$  bis zu  $10^{-18} \text{ m}^2$  schnell an. Die durch die Schädigung erhöhten Permeabilitäten nehmen mit steigender Verdichtungsspannung stark ab. Nach Erreichen des im Untertagelabore Bure herrschenden Gebirgsdruckes ( $\sigma_H=15 \text{ MPa}$ ,  $\sigma_h=\sigma_v=12 \text{ MPa}$ ) wurden sehr niedrige Werte von  $10^{-20} \text{ m}^2$  beobachtet.

Die einaxialen Kriechversuche an 10 COX-Proben wurden bei unterschiedlichen Belastungen von 1 bis 10 MPa über eine gesamte Zeitdauer von 2 Jahr weitergeführt. Jede Belastungsstufe dauerte ca. 4 bis 12 Monate. Erst nach 3 bis 5 Monaten ist ein stationärer Kriechzustand mit konstanter Verformungsrate erreicht. Außerdem wurde ein Triaxialkriechversuch an einem Opalinustonkern beendet. Nach Konsolidierung bei einer hydrostatischen Spannung von 40 MPa erfolgten 3 weitere Kriechphasen bei einer reduzierten Axialspannung von 15 MPa und unterschiedlichen Manteldrücken von 12, 9 und 6 MPa, die über ca. 8 Monate vorgenommen wurden. Die ermittelten stationären Kriechraten liegen im Bereich zwischen  $1,1 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1}$  und  $1,7 \cdot 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ . Ein deutlicher Zusammenhang zwischen Kriechrate und Spannung war nicht festzustellen.

Zur Vorbereitung auf einen vorgesehenen Aufheizversuch an einen gelochten Großtonkern wurden insgesamt fünf große Tonkerne aus dem Untertagelabor Bure entnommen und ein Heizpacker von der Firma SOLEXPERS hergestellt.

Weitere Laboruntersuchungen wurden an Versatzmaterial aus dem Auffahrungsrückstand vorgenommen. Der Schwerpunkt lag auf der Ermittlung der mechanischen und hydraulischen Modellparameter. Die Gaspermeabilitätsmessungen wurden an Tonversatzproben bei unterschiedlichen Belastungen von bis zu 15 MPa durchgeführt. Die gemessenen Gaspermeabilitäten lagen zwischen  $1,5 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$  bei Porosität von 53 % und  $2,1 \cdot 10^{-15} \text{ m}^2$  bei Porosität von 6 %. Darüber hinaus wurden die Wasseraufnahme und die Quellung des verdichteten Tonversatzes bei einer Durchströmung mit 100 % wassergesättigtem Gas bestimmt. Hierbei wurde ein deutlicher Quelldruckaufbau bis zu 0,8 MPa registriert. Die anderen Messungen an verdichteten Tonversatzproben unter konstanten Spannungen von 5 bis 15 MPa zeigten eine große Volumenzunahme bis zu 11 %.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der einaxialen Kriechversuche
- Weiterführung der triaxialen THM-Versuche
- Starten und Durchführung des vorgesehenen großen Aufheizversuchs
- Bestimmung von Materialparametern für Modellrechnungen
- Modellierung des In-situ-Experiments TER und des Laboraufheizversuchs

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zhang, C.-L., Rothfuchs, T. (2007): Damage and Sealing of Clay Rocks Detected by Permeability Measurements, Poster presentation on the 3<sup>rd</sup> International Meeting „Clays in natural and engineered barriers for radioactive waste confinement“, Sept. 17-20, 2007, Lille, France.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10055</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 31.12.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 384.330,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Buhmann	

## 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.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erstellung eines Referenzkonzeptes
  - AP2: Bewertung der Betriebssicherheit
  - AP3: FEP-Generierung und Szenarientwicklung
  - AP4: Integritätsnachweis geologischer Barrieren
  - AP5: Nachweiskonzept zur Integrität der einschlusswirksamen technischen Barrieren
  - AP6: Ermittlung und Bewertung nicht auszuschließender Freisetzungsszenarien
  - AP7: Nachweiskonzepte für die Einhaltung der nicht radiologischen Schutzziele in der Nachbetriebsphase
  - AP8: Empfehlungen für zukünftig erforderliche FuE-Arbeiten
  - AP9: Projektleitung und Dokumentation
- GRS ist federführend für das Arbeitspaket 6. Dieses gliedert sich in die Unteraufgaben:
- AP6.0: Ermittlung der repräsentativen Freisetzungsszenarien
  - AP6.1: Konzept- und Modellentwicklung
  - AP6.2: Konsequenzenanalyse

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

Gespräche:

Es fanden mehrere Projektgespräche statt zur Diskussion der einzelnen Kapitel des Abschlussberichts, zu den Einzelbeschreibungen von FEPs und zum FEP-Katalog (vier Gespräche zum Review der Einzelberichte und 14 Gespräche zur Absprache des FEP-Kataloges). In einer dreitägigen Klausur wurde der Entwurf des FEP-Katalogs im Detail abgestimmt.

Die Einzelkapitel des Abschlussberichts wurden von den Projektpartnern erstellt und jeweils durchgesprochen; sie liegen als abgestimmte Entwürfe vor. Insbesondere der in den einzelnen Arbeitspaketen identifizierte FuE-Bedarf wurde dokumentiert. Nach einer Endredaktion wird der Gesamtbericht Anfang 2008 fertig gestellt.

Für den FEP-Katalog wurde eine Beziehungsmatrix erstellt, in welcher die Abhängigkeiten aller relevanten FEP untereinander eingetragen sind. Diese Matrix wurde intensiv diskutiert und abgestimmt.

Die Präambel des FEP-Katalogs wurde erstellt, diskutiert und einem externen Review unterzogen. Der FEP-Katalog liegt in einer abgestimmten Version vor und wird Anfang 2008 in gedruckter Form vorgelegt.

Alle geplanten Arbeiten sind erledigt und wurden in Berichten dokumentiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine. Das Vorhaben ist beendet.

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

In Vorbereitung: Abschlussbericht, Anhänge des Abschlussberichtes (=Einzelberichte zu den Arbeitspaketen) und FEP-Katalog.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10065</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 31.12.2007		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 662.528,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Krone	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das wesentliche Ziel des Vorhabens liegt in einer wissenschaftlich fundierten Überprüfung und Bewertung des erreichten Standes von Wissenschaft und Technik im Hinblick auf die Qualität und Vollständigkeit des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW in Salzformationen.

Auf der Grundlage der vorliegenden Kenntnisse sowie unter Heranziehen international bewährter Konzepte für Sicherheitsanalysen zu HAW-Endlagern wird zunächst ein Sicherheitsnachweis- und Referenzkonzept für ein HAW-Endlager entworfen. Dabei hat eine gesamtheitliche Betrachtung des Endlagersystems sowohl hinsichtlich seiner technischen Realisierbarkeit als auch bezüglich der Einhaltung der Sicherheitsanforderungen unter Einbeziehung aller seiner maßgeblichen Komponenten zu erfolgen.

Es sind Vorgaben zum geologischen Referenzmodell und zum Planungskonzept zu erarbeiten. Neben der Bewertung von Fragen der Betriebssicherheit ist vor allem die FEP-Generierung und damit das Gebiet Szenarienentwicklung wesentlich. Ergänzend zu den Aspekten, die die Erstellung eines Nachweiskonzeptes zur Integrität der geologischen und der technischen Barriere zum Gegenstand haben, ist im Hinblick auf die Langzeitsicherheit die Bewertung möglicher Freisetzungsszenarien von Bedeutung. Damit kann ein Forderungskatalog zu den erforderlichen Instrumentarien erstellt werden, an Hand dessen geprüft werden kann, inwieweit adäquate Instrumentarien bereits zur Verfügung stehen und wie deren Anwendbarkeit auf der Grundlage vorliegender FuE-Ergebnisse zu bewerten ist.

Im Ergebnis einer Defizitanalyse werden Schwerpunkte und Zielstellungen für zukünftige ergänzende FuE-Arbeiten formuliert, so dass eine systematische Ausrichtung zukünftiger FuE-Arbeiten auf die Erfordernisse der Endlagersicherheitsforschung abgebildet werden kann.

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Erstellung eines Referenzkonzeptes

AP2: Bewertung der Betriebssicherheit

AP3: FEP-Generierung und Szenarienentwicklung - BGR

- AP3a: Erarbeitung einer umfassenden konsolidierten FEP-Zusammenstellung
- AP4: Integritätsnachweis geologischer Barrieren - BGR
- AP5: Nachweiskonzept zur Integrität der einschlusswirksamen technischen Barrieren
- AP6: Ermittlung und Bewertung nicht auszuschließender Freisetzungsszenarien - GRS
- AP7: Nachweiskonzepte für die Einhaltung der nicht-radiologischen Schutzziele in der Nachbetriebsphase
- AP8: Empfehlungen für zukünftig erforderliche FuE-Arbeiten
- AP9: Projektleitung und Dokumentation

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

- AP1: Der Bericht über die Erstellung des Referenzendlagerkonzeptes wurde fertig gestellt und die Inhalte mit den Ergebnissen der anderen Arbeitspakete abgeglichen. Damit liegt eine Beschreibung eines repräsentativen Abfallinventars, die Beschreibung der erforderlichen Komponenten und Techniken zum Transport und zur Einlagerung der Endlagerbehälter sowie die konzeptionelle Auslegung eines Grubengebäudes und die Beschreibung von Funktionen, Anforderungen und technischem Konzept von technischen Barrieren vor. Das geologische Standortmodell für einen Referenzendlager wurde von BGR in einem separaten Bericht zusammengestellt.
- AP2: Die Nachweiskonzepte zur betrieblichen und radiologischen Sicherheit eines Endlagers wurden in einem Bericht abschließend zusammengefasst.
- AP3a: Es wurde eine umfassende konsolidierte FEP-Zusammenstellung anhand einer gemeinsamen FEP-Liste erarbeitet. Grundlage waren die NEA-Liste und die als relevant für die Szenarienentwicklung identifizierten FEPs. Die FEP-Beschreibungen wurden zum Teil neu erstellt und in zahlreichen Fachgesprächen im Detail abgestimmt.
- AP5: Die Arbeiten zum Integritätsnachweis für die technischen Barrieren wurden abgeschlossen. Es wurden für die technischen Barrieren Behälter, Bohrlochverschluss und Versatz die funktionalen Anforderungen zusammengestellt, mit vorhandenen Designs abgeglichen und hinsichtlich vorhandener Nachweiskonzepte überprüft. Ein zusammenfassender AP-Bericht wurde dazu erstellt.
- AP8: Aufbauend auf den Ergebnissen insbesondere zum AP3a (neu) und zum AP5 wurde empfohlen, weiterführende Arbeiten zur Vervollständigung der Sicherheitsnachweise für ein HAW-Endlager zu initiieren.
- AP9: Alle AP-Berichte wurden einem internen Review unterzogen und die Inhalte hinsichtlich Vollständigkeit und Konsistenz überprüft.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die abschließende Zusammenstellung der Ergebnisse aller Arbeitspakete zu einem zusammenfassenden Abschlussbericht wird fertig gestellt.

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10075</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 30.09.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 620.157,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Moog	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel ist die Ermittlung von thermodynamischen Daten, die die geochemische Modellierung der Eisen(II)-Chemie bei Temperaturen zwischen 25 und 90 °C ermöglichen.

Ein weiteres Ziel ist die Erweiterung des bestehenden Parametersatzes für basische Fe(II)-Lösungen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

1. Literaturstudie
2. Dampfdruckmessungen
3. Löslichkeitsmessungen
4. Untersuchung fester Lösungen
5. Untersuchung metallischer Korrosionsprodukte in quinären, hochsalinaren Lösungen
6. Auswertung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### Dampfdruckmessungen:

Eine zweite Apparatur zur Durchführung isopiesticer Messungen bei höheren Temperaturen wurde getestet. Sie erwies sich jedoch aufgrund schlechter Handhabbarkeit und schnell undicht werdender Ventile als ungeeignet. Deshalb wurde ein isopiesticer Topf, der bei 25 °C bereits erfolgreich eingesetzt wurde, für höhere Temperaturen modifiziert. Momentan laufen erste Tests zur Funktionsfähigkeit bei höheren Temperaturen.

#### Literaturstudie:

Die Literaturrecherche für  $\text{Fe(II)SO}_4$  wurde fast vollständig ausgewertet.

#### Löslichkeitsversuche:

Im Berichtszeitraum wurden die Untersuchungen zur Löslichkeit im System  $\text{Fe(II)-SO}_4\text{-H}_2\text{O}$  zwischen 58 - 63 °C fortgesetzt. Damit konnten die Löslichkeitsuntersuchungen für das Tetrahydrat in diesem System abgeschlossen werden. Für das Monohydrat des gleichen Systems, das sich bei Temperaturen über 65 °C bildet, wurde am 07.08.2007 ein neuer Ansatz hergestellt. Bisher wurde jedoch aufgrund einer fehlenden Gleichgewichtseinstellung von einer Beprobung abgesehen. Um die Arbeiten schneller voranzubringen wurde deshalb ein neuer Thermostat bestellt und ein neuer Ansatz des Monohydrats bei 90 °C hergestellt.

Des Weiteren wird momentan eine Methode zur Darstellung von  $\text{Fe(II)(OH)}_2$  erprobt.

#### Korrosionsversuche:

Die Versuche in hochsalinaren Lösungen bei 25 und 83 °C wurden beprob. Die Korrosionsprodukte wurden an der Uni Greifswald mit einer Co-Röhre röntgendiffraktometrisch vermessen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### Dampfdruckmessungen:

Erprobung der Funktionsfähigkeit des isopiesticen Topfes bei höheren Temperaturen und Validierung anhand von Messungen im System  $\text{NaCl-H}_2\text{O}$ ; Ermittlung der Versuchsdauer anhand von Messungen im System  $\text{MgSO}_4\text{-H}_2\text{O}$  bei unterschiedlichen Temperaturen; Beginn der Messungen im System  $\text{Fe(II)-Cl-H}_2\text{O}$ .

#### Literaturstudie:

Beendigung der Auswertung der Literaturrecherche für  $\text{Fe(II)SO}_4$  im System der ozeanischen Salze sowie Auswertung der Recherche bezüglich  $\text{Fe(II)(OH)-H}_2\text{O}$ .

#### Löslichkeitsversuche:

Weiterführung der Untersuchung des Systems  $\text{Fe(II)-SO}_4\text{-H}_2\text{O}$  im Monohydratfeld (66-90 °C). Beginn der Untersuchung des Systems  $\text{Fe(II)(OH)-H}_2\text{O}$  bei höheren Temperaturen.

#### Korrosionsversuche:

Eventuell nochmalige röntgendiffraktometrische Vermessung der Korrosionsprodukte mit einer Fe-Röhre.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10086</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Auswirkung einer Temperaturerhöhung in Tonformationen in Deutschland im Hinblick auf die bautechnische Machbarkeit eines Endlagers und irreversible Veränderungen der potenziellen Wirtsformation -TemTon-		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2006 bis 31.07.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 820.158,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Wesentliche Veränderungen einer potenziellen Endlagerformation entstehen durch die bergtechnische Auffahrung der untertägigen Hohlräume und durch die Einbringung einer großen Wärmemenge von den 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. Es soll geprüft werden, ob in den aussichtsreichen Tonformationen in Deutschland Mineralassoziationen vorkommen, die nicht in einem langfristigen Gleichgewichtszustand auftreten können. Diese Daten 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 / Bohrlochstabilität
- AP3: Veränderung organischer Bestandteile
- AP4: Veränderung anorganischer Bestandteile

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Im Rahmen der Laborversuche zur Untersuchung der thermischen Eigenschaften von Bentonit-Additiv-Gemischen wurden zunächst Versuche mit Quarzsand als Additiv durchgeführt. Es wurden Presslinge hergestellt mit einem Quarzsandanteil im Bereich von 5-50 %. Gemessen wurde die Wärme- und Temperaturleitfähigkeit als Funktion der Temperatur. Es zeigte sich eine deutliche Abhängigkeit vom Quarzanteil bei einer geringen Temperaturabhängigkeit. Nachfolgend wurden Versuche mit Presslingen durchgeführt, die Graphit als Additiv enthielten mit Graphitanteilen von 5-95 %. Auch hier wurden sowohl die Wärme- als auch die Temperaturleitfähigkeit als Funktion der Temperatur gemessen. Ein Ziel war es, zu prüfen, bei welchen Additivanteilen die Wärmeleitfähigkeit des Gemisches soweit erhöht wird, dass die Wärmeleitfähigkeit des Wirtsgesteins erreicht wird. Es zeigte sich, dass eine Zugabe von Quarzsand nicht ausreicht, wohingegen durch eine 15 %-tige Zugabe von Graphit die Wärmeleitfähigkeit des Tonsteins erreicht wird.
- AP2: Im Untertagelabor in Bure läuft der Erhitzerversuch „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. Es zeigten sich signifikante Unterschiede bei der Parameter-Identifikation im Rahmen der Vorwärtsrechnung einzelner Aufheizphasen, deren Ursachen derzeit noch untersucht werden. Auch konnte statistisch unter Anwendung der Methode der kleinsten Fehlerquadrate festgestellt werden, dass die mittels „Back-Analysis“ berechneten Wärmeleitfähigkeit sich signifikant unterscheidet, je nach dem, ob man erhitzernahe oder erhitzerferne Temperatursensoren als Datengrundlage verwendet. Unter Berücksichtigung dieser Unsicherheiten lässt sich die Wärmeleitfähigkeit des Tonsteins derzeit nur mit einer Genauigkeit von +/- 10 % aus der „Back-Analysis“ ermitteln.
- AP3: Es wurden Berechnungen durchgeführt, um zu prüfen, inwieweit sich Vitritreflexionen (und damit der Reifegrad) des Tonsteins aufgrund des Wärmeimpulses eines HAW-Endlagers verändern. Es konnte festgestellt werden, dass der Einfluss äußerst gering und damit vernachlässigbar ist. Daraus wird geschlussfolgert, dass eine bedeutsame chemische Umwandlung von organischem Material zu Erdöl bzw. Erdgas aufgrund des Wärmeeintrags der wärmeentwickelnden Abfälle eines Endlagers ausgeschlossen werden kann. Die Temperaturänderung aufgrund des Wärmeeintrags ist zu gering und die Zeitdauer des Wärmeeintrags bei Weitem zu kurz.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Durchführung weitere Untersuchungen im Hinblick auf Abhängigkeiten vom Wassergehalt und vom Kompaktionsgrad an ausgewählten Referenzproben.
- AP2: Fortführung der versuchsbegleitenden Modellierung der Erhitzerphasen im TER-Versuch in Bure zur Verbesserung der Parameter-Identifikation.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10096</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2006 bis 30.04.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 447.400,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Wechselwirkungen 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, 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:** Stabilität von Tonkolloiden, Kolloidbildung in der Tonporenwasser/Grundwassermischzone, Wechselwirkung von Modellkolloiden mit Gesteinsoberflächen.

**Thema:** Bentonitkolloidstabilität in Grundwasser und Kolloidbildung in der Tonporenwasser/Grundwassermischzone sowie an der Bentonit-Grundwassergrenzfläche:

Die in Experimenten beobachtete unerwartete pH-Abhängigkeit der Febex-Bentonitkolloidstabilität ähnelt der von Tonkolloiden (SWy-2 Montmorillonit), denen amorphes Silica beigemischt wurde. Die beobachtete erhöhte

Febex-Kolloidstabilität bei pH~7-8 wird vermutlich durch einen stabilisierenden Silicaeffekt verursacht und taucht bei gereinigten Tonkolloiden nicht auf. Ultrafiltrationsexperimente und TRLFS Studien mit Cm(III) als fluoreszierendem Actinidion mit Lösungen bestehend aus variierenden Mischungen aus Grimsel-Grundwasser und synthetischem Febex-Porenwasser zeigen, dass Th(IV) und Eu(III)/Cm(III) in allen Lösungen zu großen Teilen kolloidal vorliegen. Insbesondere bei niedrigen Volumenanteilen von Porenwasser in den Lösungen treten kolloidale Cm(III)-spezies auf, deren spektroskopische Signatur auf polysilikatgebundene Spezies hinweisen. Erste Versuche wurden mit einem Aufbau für Kolloidgenerationsexperimente mit kompaktiertem Bentonit im Kontakt mit Grimselgrundwasser und on-line LIBD Kolloidmessung durchgeführt. Eine ansteigende Tonkolloidfreisetzung bis zu mg/mL Konzentrationen wurden beobachtet.

**Thema:** Kolloidwechselwirkung mit Mineraloberflächen:

Die Sorptionsexperimente mit fluoreszenzmarkierten carboxylierten Polystyrolkolloiden und Grimsel-Granodiorit bzw. seinen Einzelmineralen wurden (vorerst) beendet. Die Sorption auf den Schichtsilikaten (Biotit/Muskovit) wurde i. allg. von den Mineralkanten dominiert; die Anwesenheit von Eu(III) erhöhte die Sorption an den Mineralkanten zusätzlich und führte auch zur Kolloidsorption an Basalflächen durch Brückenbildung. Die Experimente mit Grimsel-Granodiorit zeigten, dass die Kolloidsorption hauptsächlich an Apatit, Illit, Titanit, Biotit (pH 2-6) und Orthoklas (pH 2-4) stattfindet. Keine Sorption konnte bei pH Werten 8-10 beobachtet werden. Desorptionsexperimente zeigen eine nur partielle Kolloiddesorption von der Granodioritoberfläche bei pH=10 nach 8 bis 28 Tagen. Experimente mit der AFM „colloidal probe technique“ wurden durchgeführt, um die für Kolloidwechselwirkung mit Muskovit und Biotit verantwortlichen Kräfte zu quantifizieren. Eu(III) ( $c=10^{-6}$  M) verstärkt die Adhäsionskräfte bei pH= 4 – 6, während  $UO_2^{2+}$  ( $c=10^{-6}$  M) keinen messbaren Effekt hervorruft.

**AP2.5** Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen:

In der ersten Phase des CFM-Projekts wurden verschiedene In-situ-Experimente mit Uranin als konservativem Tracer durchgeführt. Ziel der Versuche ist es, grundlegendes Verständnis über die hydrogeologischen Vorgänge und Transportprozesse in die Scherzone zu verbessern und die Tracerexperimente unter kontrollierten Bedingungen zur Kalibrierung der vorhandenen numerischen Modelle zu nutzen. Die Simulation von zwei neuen Tracerversuchen in der Kluftzone am CFM - Versuchsort wurde mit ADINA-F durchgeführt (Darcy-Gesetz für die Grundwasserströmung und advektiv-dispersiver Tracertransport). Um die komplexe Fließfeldgeometrie in dem Scherzonenbereich besser simulieren zu können, wurde ein neues zweidimensionales Modell erstellt. Die räumliche Diskretisierung des Modells erfasst die abgedichtete Strecke durch den Flächenpacker sowie die beiden Versuchsbohrungen. Mit diesem Modell konnten die Uranin-Durchbruchskurven der Experimente zufrieden stellend reproduziert werden. Weiterhin wurden notwendige Kennwerte des porösen Kluftmaterials für spätere numerische Simulationen der Kolloid-Migrationsexperimente bestimmt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

**AP1:** Kolloidgenerationsexperimente mit kompaktiertem Bentonit werden mit Lösungen unterschiedlicher Zusammensetzung fortgeführt. Migrationsexperimente werden mit Bohrkernen im Labor durchgeführt. Ein in-situ Experiment im Grimsel-Felslabor mit Radionuklidhomologen und Bentonitkolloiden ist in Vorbereitung und für Februar 2008 geplant. Experimente mit der AFM – ‚colloidal probe‘ Technik werden fortgesetzt und insbesondere an Mineraloberflächen mit Ladungsheterogenitäten durchgeführt.

**AP2.5:** Weiterentwicklung des 2D-Modells in dem Scherzonenbereich in der Umgebung des geplanten CFM-Versuchs zur Untersuchung der komplexen Grundwasserströmung und die Durchführung einer Parameterstudie ( Auswirkungen von hydraulischen Kennwerten und Randbedingungen auf das Strömungsfeld). Modellierung der Bohrkernexperimente. (Parametervariation zur Charakterisierung der Transporteigenschaften)

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

D. Breban, H. Seher, A. Filby, J. Rothe, K. Dardenne, M. A. Denecke, M.A. Kim, J.I. Kim, P.J. Panak, M. Bouby, H. Geckeis, Th. Schäfer, Colloid formation and stability in Institute for Nuclear waste disposal – Annual report 2006, FZKA 7360, 16-21

U. Noseck, S.Keesmann, H. Geckeis, T. Schäfer, P. Kunze, H. Seher, Impact of kinetic effects on colloid facilitated radionuclide transport at Grimsel, MIGRATION 2007

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, submitted to *J. Contam. Hydrol.*

A. Filby, M. Plaschke, H. Geckeis, Th. Fanghänel, Interaction of carboxylated latex colloids with mineral surfaces, submitted to *J. Contam. Hydrol.*

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10106</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2006 bis 30.04.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 271.750,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Hauptziel des Vorhabens ist es, ein verbessertes Verständnis der Wechselwirkung zwischen Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen sowie der 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: Fertigstellung der Implementierung der Ansätze zum kolloidgetragenen Schadstofftransport mit kinetisch gesteuerter Sorption in das Rechenprogramm  $r^3t$ . Durchführung und Dokumentation von Verifikationsrechnungen des weiter entwickelten Rechenprogramms  $r^3t-col$  mit TRAPIC-1D zu den einzelnen Sorptionsreaktionen für quasi 1D-Testfälle zur Überprüfung aller neu implementierten Prozesse. Die Ergebnisse zeigen eine sehr gute Übereinstimmung beider Programme für alle untersuchten Testfälle.  
Formulierung der benötigten Datensätze für das CFM-Experiment. Erstellung eines ersten hydrogeologischen Modells für die GRIMSEL-Kluft, Beginn von Strömungsrechnungen und erster Transportrechnungen für den idealen Tracer.
- AP3: Auf der Konferenz Migration 2007 wurden die bisher erzielten Ergebnisse in einer gemeinsamen Posterpräsentation mit FZK-INE vorgestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Weiterführung der Modellrechnungen zum kolloidgetragenen Radionuklidtransport von Uran und Cäsium. Ableitung aktualisierter Sorptionsparameter aus den neuen Batch-Experimenten, die von FZK-INE durchgeführt wurden, und Anpassung der Transportrechnungen.  
Teilnahme am „3<sup>rd</sup> CFM (Colloid Formation and Migration) modelling group meeting“ im Februar in Interlaken. Präsentation der geplanten Modellrechnungen für CFM und erster Ergebnisse. Abstimmung aller Rand- und Anfangsbedingungen sowie sonstiger Eingangsdaten mit den jeweiligen Experimentatoren.  
Weiterführung der Strömungsrechnungen für die GRIMSEL-Kluft, die für das CFM-Experiment vorgesehen ist. Ggf. Modifikation des geometrischen Modells und Anpassung von Eingangsdaten. Simulation des kolloidgetragenen Transports mit  $r^3t-col$  für die aus dem CFM-Projekt vorgegebenen Randbedingungen für ausgewählte Radionuklide als Voraussage für ein CFM-Experiment.
- AP3: Das nächste Projekttreffen GRS/INE soll im April in Karlsruhe stattfinden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10116</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Barriereintegrität des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs in Tonformationen (BET)	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 709.575,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Miehe

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Die im Februar 2007 durchgeführten Wasserinjektionstests zur Permeabilitätsbestimmung wurden im August 2007 mit genauerer Aufnahme der jeweils injizierten Wassermenge wiederholt. Es zeigten sich leichte Abweichungen von den ersten Messergebnissen; insgesamt liegen die Messwerte im Bereich  $2 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2$  bis  $5 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2$ . Eine Ausnahme stellt die Messstelle BET1 dar, bei der eine deutlich höhere Permeabilität von  $2 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2$  gemessen wurde. Diese Messstelle zeigt auch eine Druckkorrespondenz mit der Tunnelatmosphäre.

Ende November 2007 wurden die ersten Gasinjektionstests an den Messintervallen BET2 und BET5 durchgeführt. Der Druck wurde jeweils stufenweise erhöht. Bei ca. 18.6 bzw. 24.3 bar wurde in den Intervallen ein erhöhter Gasfluss festgestellt. Dabei legt die Form der Druckkurve insbesondere bei BET5 (Bohrloch senkrecht zur Schichtung) nahe, dass es sich nicht um die Bildung eines diskreten Risses, sondern um die allmähliche Aufweitung von Fließwegen handelt. Eine genauere Auswertung der Tests wird zurzeit durchgeführt.

AP2: Im vorherigen Zwischenbericht wurden Gaspermeabilitätsmessungen vorgestellt. Durch eine Kontrollmessung hat sich gezeigt, dass die hier bestimmten Gasfließraten im sandgefüllten Ringraum zwischen Probe und Gummijacket, durch eine versuchs-technisch bedingte Gasentlösung aus dem für den Aufbau des Einspanndrucks verwendeten Hydrauliköl durch das Gummijacket, verfälscht wurden. Da bereits in den vorhergehenden Untersuchungen praktisch keine Abhängigkeit vom Einspanndruck zu beobachten war, wurden die Messungen aus Zeitgründen für den höchsten Einspanndruck von 8 MPa wiederholt und sichergestellt, dass kein zusätzlicher Gasfluss in den Ringraum zwischen Probe und Gummijacket auftreten konnte. Die so bestimmten Gaspermeabilitäten lagen in den Größenordnungen von  $10^{-20}$  bis  $10^{-22} \text{ m}^2$ . Im Anschluss an diese Messungen wurde mit den Schädigungsversuchen zunächst bei einem Einspanndruck von 3 MPa begonnen. Der Injektionsdruck wurde über die Zentralbohrung aufgebracht und langsam erhöht. Bei einem Gasdruck von 1.2 MPa war bei einer Probe innerhalb von ca., 3.4 h ein relativ schneller Druckabfall, der auf ein Öffnen von Fließwegen schließen lässt, zu beobachten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Wiederholung der Wasserinjektionstests zur Absicherung der bisherigen Ergebnisse  
Beginn der Gasinjektionstests mit stufenweiser Erhöhung des Gasdrucks bis zum Frac

AP2: Fortsetzung der Untersuchungen zur gasdruckinduzierten Schädigung  
Untersuchungen zur Wiederverheilung

AP3: wird bearbeitet, sobald hinreichende Ergebnisse der übrigen APs vorliegen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., C. Zhang, N. Jockwer, T. Rothfuchs: Investigation of the Hydraulic-Mechanical Behaviour and the Gas Migration Issue in the Opalinus Clay at the Mont Terri URL. Vortrag bei der Reposafe-Konferenz in Braunschweig, 06.-08.11 2007.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10126</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 298.298,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marquardt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Es wird eine einheitliche, umfassende und konsistente thermodynamische Referenzdatenbasis für ausgewählte Radionuklide für eine Temperatur von 25 °C entwickelt, die zur geochemischen Modellierung von Nah- und Fernfeldprozesse eines Endlagers für radioaktiven Abfall eingesetzt werden soll. Es werden bereits bestehende, qualitativ hochwertige Datenbasen für Radionuklide zusammengeführt, auf Konsistenz geprüft, validiert und die Behandlung und Bewertung sorgfältig dokumentiert. Parallel dazu wird eine Datenbank entwickelt, in der die Daten integriert werden. Dieses Projekt läuft in Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), dem Institut für Radiochemie des Forschungszentrum Dresden-Rossendorf (FZD), der TU Bergakademie Freiberg und der Colenco Power Engineering.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Für die Datenbasis, welche in die Datenbank integriert wird, wurden die Einlese-Listen in Excel erstellt für Radionuklide, 71 Festphasen (Phase), 229 Spezies (PCON), Liste der Elementzusammensetzungen der Spezies und Festphasen (Über 1000 Eintragungen), Speziesliste für ionische Spezies (Metallionen und ihre Komplexe), Festphasen, die dazugehörige Literatur- und Autorenliste.

Ferner wurde ein umfassendes und belastbares thermodynamisches Modell zur Modellierung von An(III) in verdünnter bis konzentrierter NaCl, MgCl<sub>2</sub> und CaCl<sub>2</sub> Lösung entwickelt. Dieses Modell umfasst insbesondere auch Modellparameter zur Beschreibung bisher unbekannter ternärer Ca-An(III)-OH Komplexe, die nach neuesten FuE Arbeiten des FZK-INE die Speziation in alkalischen konzentrierten CaCl<sub>2</sub> Lösungen dominieren. Für diese Spezies wurden erstmalig sowohl Komplexbildungskonstanten, als auch SIT- bzw. Pitzer-Parameter abgeleitet und in geochemische Modellierungs-codes (EQ3/3, GWB) integriert.

Für entsprechende ternäre Komplexe tetravalenter Actiniden (Th(IV)) bzw. inaktiver Analoga (Zr(IV)) konnten ebenfalls Komplexbildungskonstanten und SIT-Koeffizienten ermittelt werden.

Auf einer der letzten THEREDA-Projektbesprechungen wurde die Notwendigkeit, das Gesamtprojekt THEREDA einer möglichst breiten Fachöffentlichkeit in vorzustellen, herausgearbeitet. Im Berichtszeitraum konnte ein Manuskript mit dem Titel „*THEREDA – Ein Beitrag zur Langzeitsicherheit von Endlagern nuklearer und nichtnuklearer Abfälle*“ zur Publikation in dem Journal ATW - Internationale Zeitschrift für Kernenergie, vorbereitet und Ende 2007 eingereicht werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Fortlaufende inhaltliche und konzeptionelle Ausdifferenzierung des THEREDA-Handbuches. Für verschiedene bisher prinzipiell nur unzureichend verstandene Probleme (thermodynamische Beschreibung polymerer (kolloidaler) Hydrolysespezies, korrekte Modellierung reversibler/irreversibler Redoxreaktionen, Bewertung unterschiedlicher Ansätze zur Modellierung von Actiniden in Chloridlösung) sollen im Rahmen von THEREDA eindeutige und transparent begründete Evaluierungsrichtlinien erarbeitet werden.

Die Eingabe-Listen für die Datenbank werden erweitert, Liste der Reaktion, Liste der thermodynamischen Daten, Liste der Datenkategorisierung (Datenklasse, Datenquelle, Qualitätsstufen).

Einarbeitung bisher nicht in das THEREDA-Projekt integrierter INE-Mitarbeiter in die anstehenden Arbeiten, insbesondere im Bereich der Ableitung von Pitzer Parametern.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10136</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 91.185,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brendler	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt THEREDA (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Köln und Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe) entwickelt eine umfassende thermodynamische Datenbasis zur geochemischen Modellierung der Schadstofffreisetzung aus Endlagerprojekten. Hierzu bilden die beteiligten Projektpartner einen Kreis von Experten, der vorhandene thermodynamische Stoffgrößen sammelt, nach einheitlich vorher festgesetzten Kriterien bewertet und in einer Datenbank zusammenfasst. Besonderer Wert wird auf eine lückenlose Dokumentation und Rückverfolgbarkeit von Datenbankeinträgen gelegt. Es ist vorgesehen, den bereits in anderen 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  
(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

- Projekttreffen in Braunschweig
- Überführung der Intranetseiten (Passwort-geschützt) in die THEREDA-Internet-präsenz [www.thereda.de](http://www.thereda.de), Pflege und Aktualisierung der Intranet-Seite zur internen Dokumentation, Kommunikation, Archivierung

AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation

- Verbesserter Entwurf für das Anwenderhandbuch in enger Zusammenarbeit mit Colenco Power Engineering AG (Baden/CH)
- Erstellung erster Kapitel zum Handbuch (THEREDA-Hintergrund, Richtlinien zur Datenauswahl, Technische Grundlagen)

AP3: Datenbasis für die Radionuklide

- Erfassung von Festphasen des Urans, zugehöriger thermodynamischer Daten und Wechselwirkungsparameter (in Abstimmung mit FZK-INE)
- Recherche zum Radium

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1:

- Pflege und Erweiterung der Intranetseite

AP2:

- Erstellung weiterer Kapitel zum Handbuch (Dateneingabe, Datenausgabe)

AP3:

- Datenbewertung- und -eingabe zum Uran
- Zusammenstellung der Radium-Daten

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10146</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 77.452,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Meyer	

## 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**

- Im Berichtszeitraum erfolgte die Organisation und Durchführung zweier Projektmeetings, die der Koordination der Arbeiten im Bereich Radionuklide dienen.
- Außerdem erfolgte Mitarbeit bei der Erstellung von Qualitätsdokumenten.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Im kommenden Projektzeitraum beginnt die Sichtung, Erfassung und Bewertung von Daten zu Silizium und Aluminium.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10156</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 517.504,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Bernhard	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- Die Komplexierung von U(IV) durch Citronensäure wurde mittels UV/Vis-Spektroskopie als Funktion des pH-Wertes (1 M, 0.5 M, 0.1 M  $[H^+]$ ) untersucht. Es wurde die Bildung von 1:1 und 1:2 U(IV)-Citrat-Komplexen vom Typ  $M_pH_qL_r$  nachgewiesen. Die Stabilitätskonstanten wurden mit  $\log \beta_{101} = 13.5 \pm 0.2$  und  $\log \beta_{102} = 25.1 \pm 0.2$  bestimmt.
- Die Komplexierung von U(VI) durch Citronensäure und Oxalsäure wurde mittels TRLFS und UV/Vis-Spektroskopie untersucht. Die gebildeten U(VI)-Citrat-Spezies ( $UO_2cit^-$  und  $(UO_2)_2(cit)_2^{2-}$ ) und U(VI)-Oxalat-Spezies ( $UO_2ox(aq)$  und  $UO_2(ox)_2^{2-}$ ) fluoreszieren unter den gegebenen experimentellen Bedingungen nicht. Die Absorptionseigenschaften dieser Komplexe unterscheiden sich durch Wellenlängenverschiebung der Absorptionsbanden und höheren molaren Absorptionskoeffizienten deutlich von denen des freien Uranylkatons. Für das U(VI)-Citrat-System wurden die Stabilitätskonstanten  $\log \beta_{101} = 7.43 \pm 0.06$  und  $\log \beta_{202} = 18.88 \pm 0.05$  über UV/Vis-Daten bestimmt. Diese sind mit Literaturdaten gut vergleichbar.
- Die U(VI)-Komplexierung durch Hydroxybenzolsulfonsäure und Benzolsulfonsäure, als Modellliganden für schwefelhaltige Huminsäuren, wurde untersucht. Die Untersuchung der U(VI)-Komplexierung durch Hydroxybenzolsulfonsäure erfolgte bei pH 3.8, 2.5 und 2 mittels TRLFS. Die Stabilitätskonstante wurde mit  $\log K = 3.90 \pm 0.03$  ermittelt. Die Untersuchung der U(VI)-Komplexierung durch Benzolsulfonsäure erfolgte bei pH 3.8 mittels UV/Vis-Spektroskopie und TRLFS. Die Stabilitätskonstante wurde mit  $\log K = 3.53 \pm 0.04$  ermittelt.
- Weiterhin wurde mit den Untersuchungen zur U(VI)-Komplexierung durch Nicotinsäure und den stickstoffhaltigen Modellliganden Anthranilsäure begonnen. Für Nicotinsäure wurden mittels potentiometrischer Titration zwei pKs-Werte bestimmt ( $pK_{s1} = 2.91 \pm 0.02$  und  $pK_{s2} = 4.63 \pm 0.01$ ). Die U(VI)-Nicotinsäure-Komplexierung wurde mittels UV/Vis-Spektroskopie und TRLFS untersucht und Stabilitätskonstanten ermittelt, die derzeit durch weitere Messungen verifiziert werden.
- Neues Zubehör an der HPLC-Anlage wurde installiert und die erweiterte Anlage getestet.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Spektroskopische Untersuchung der U(IV)-Komplexierung durch Citronensäure bei höheren pH-Werten und Untersuchung der U(IV)-Komplexierung durch weitere Modellliganden.
- Fortführung der spektroskopischen Untersuchungen der U(VI)-Komplexierung durch Nicotin- und Anthranilsäure. Bestimmung der Stabilitätskonstanten.
- Laserspektroskopische Untersuchungen zur Konzentrationsabhängigkeit der U(VI)-Huminsäure-Komplexierung.
- Untersuchung der U(VI)-Sorption an Opalinus-Ton unter aeroben Bedingungen (Aufnahme von Adsorptionsisothermen, Untersuchung der Sorptionskinetik).
- Charakterisierung schwefelhaltiger Huminsäure-Modellverbindungen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Křepelová, A., Brendler, V., Sachs, S., Baumann, N., Bernhard, G.: U(VI)-Kaolinite Surface Complexation in Absence and Presence of Humic Acid Studied by TRLFS. *Environ. Sci. Technol.* 41 (17), 6142-6147 (2007).

Křepelová, A., Reich, T., Sachs, S., Drebert, J., Bernhard, G.: Structural Characterization of U(VI) Surface Complexes on Kaolinite in the Presence of Humic Acid Using EXAFS Spectroscopy. *J. Colloid Interface Sci.* 319 (1), 40-47 (2008).

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55099 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10166</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 631.950,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Reich

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Batchexperimente mit Np/Pu-Tongestein und Einfluss von Huminstoffen;
- 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 Arbeiten zur Verbesserung der Nachweisgrenze (NWG) bei der Speziation von Pu mit Hilfe der CE-ICP-MS durch die Verwendung des neuen Zerstäubers „MiraMist“ (5-10 µl/min) wurden begonnen. Es wurden Versuche zur Optimierung der Elektrolyt- und Makeup-Flüssigkeiten der CE unter Verwendung verschiedener Sprühkammersysteme für die ICP-MS durchgeführt. Die erreichte NWG für die vier Oxidationsstufen des Pu beträgt 1 ppb. Mit Hilfe der CE-ICP-MS wurde die Redoxstabilität einer Mischung aus verschiedenen Oxidationszuständen des Pu in Porenwasser untersucht. Erste Ergebnisse deuten darauf hin, dass Pu(III) in kurzer Zeit in höhere Oxidationsstufen überführt wird. Diese Untersuchungen zeigten außerdem, dass die elektrolytischen Eigenschaften des synthetischen Porenwassers zu einer sehr guten Trennung der verschiedenen Pu-Spezies mittels CE führen und damit empfindliche Untersuchungen der Speziation von Pu mit der CE-ICP-MS und CE-RIMS ermöglichen.

Zur Bestimmung der  $K_d$ -Werte für die Sorption von Pu an Opalinuston in Gegenwart von Porenwasser (pH 7,6) wurden Batchexperimente durchgeführt. Neben Pu(III) und Pu(IV) wurden die redoxstabilen Analoga Am(III) und Th(IV) in die Sorptionsexperimente zum Vergleich einbezogen. Bis auf Pu(III), dessen Oxidationszustand unter Argonatmosphäre und Zugabe von  $\text{HONH}_3\text{Cl}$  stabilisiert werden sollte, erfolgten die Versuche an Luft. Bei konstant gehaltener Gesamtkonzentration des jeweiligen Actinids (Pu  $\sim 10^{-7}$  mol/l; Th, Am  $\sim 10^{-8}$  mol/l) wurde die Tonmenge im Porenwasser von 0,5 – 10 g/l variiert. Beim Th(IV) und Pu(III) können noch keine konkreten  $K_d$ -Werte angegeben werden; hier sind noch weitere Versuche erforderlich. Für Pu(IV) und Am(III) betragen die  $K_d$ -Werte 48 bzw. 30  $\text{m}^3/\text{kg}$ . Wie erwartet, sorbieren die drei- und vierwertigen Actiniden an dem Opalinuston viel stärker als die fünf- und sechswertigen Actiniden, deren  $K_d$ -Werte bereits früher bestimmt wurden (Np(V)  $K_d = 0,02\text{-}0,03 \text{ m}^3/\text{kg}$ ; U(VI)  $K_d = 0,03 \text{ m}^3/\text{kg}$ ).

Ein Prototyp der Diffusionszelle wurde nach den technischen Angaben des Paul Scherrer Instituts (PSI) gefertigt. Zuvor war die Gruppe Van Loon am PSI besucht worden, um ihren Versuchsaufbau für die Untersuchung der Diffusion von Radionukliden in Opalinuston zu besichtigen und Details der experimentellen Vorgehensweise zu besprechen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten zur Steigerung der Empfindlichkeit der CE-ICP-MS für die Speziation von Pu sollen fortgeführt werden. Als weitere apparative Entwicklung ist die Bestimmung der NWG für Pu mit Hilfe der CE-RIMS geplant. Mit Hilfe der CE-ICP-MS soll die Redoxstabilität einzelner Oxidationsstufen des Pu in Porenwasser weiter untersucht werden. Einige Experimente zur Sorption von Th(IV) und Pu(III) an Opalinuston in Porenwasser sollen wiederholt werden, um die Datenbasis ( $K_d$ -Werte) zu verbessern. Die Diffusionszelle soll im Februar 2008 am Institut für Nukleare Entsorgung des Forschungszentrums Karlsruhe mit einem Tonkern bestückt werden. Anschließend wird die Diffusionszelle charakterisiert werden, indem die Diffusionskoeffizienten von HTO und  $^{22}\text{Na}^+$  gemessen und mit den am PSI erhaltenen Werten verglichen werden. Danach sind Diffusionsversuche mit  $^{237}\text{Np(V)}$  beabsichtigt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstraße 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10176</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Beiträge zur Modellierung des Actinidentransports in potentiellen Wirtsgesteinsformationen; Teilthema 1: Mobilitätsbestimmende Elementarprozess; Teilthema 2: Einfluss heterogener Strukturen auf den Lösungs-Kolloidtransport		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 836.371,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Lippold	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Humatkomplexbildung von [ $^{160}\text{Tb}$ ]Tb(III) als Analogtracer dreiwertiger Actiniden wurde pH-abhängig in Kationenaustausch-Experimenten untersucht. Dabei wurden auch Konkurrenzeffekte erfasst, die infolge von Auflösungsprozessen an Tonmaterialien (Opalinuston, Montmorillonit, Illit) auftreten und die Metallverteilung in Adsorptionssystemen beeinflussen. Komplexbildungsdaten, die nach Kationen- und Anionenaustausch-Methode mit und ohne Berücksichtigung von Matrixauflösung erhalten wurden, unterscheiden sich erheblich. Eine quantitative Rekonstruktion ternärer Systeme (Metall / Huminstoff / Ton) durch direkte Verknüpfung von Gleichgewichtsdaten für binäre Randsysteme gelingt mit keinem der Datensätze. Offenbar können die Teilprozesse nicht unabhängig voneinander betrachtet werden. Prinzipiell wirkt Huminstoffpräsenz in Tonmatrices einer Mobilisierung von Metallen bei pH-Wert-Abnahme entgegen.

Mit dem neu installierten MiniPET wurden über mehrere Tage Messungen an einer homogenen Tonprobe (Kaolinit) durchgeführt, die mit 0,01 M [ $^{124}\text{I}$ ]KI bei geringer Fließrate (0,005 ml/min) durchströmt wurde. Es ergab sich eine homogene, eindimensionale Durchströmung, ohne Hinweis auf Sorptionsprozesse. An deutlichen Artefakten zeigte sich aber, dass die Korrekturen der PET-Messungen noch besser an das dichte Material angepasst werden müssen. Trotzdem ließen sich die Messergebnisse zufrieden stellend an ein 1D-Advektions-Diffusionsmodell (CXTFIT) anpassen. Testmessungen an Grimsel-Granit verliefen ebenfalls erfolgreich und werden derzeit ausgewertet.

Ein Messplatz für Untersuchungen des Strömungspotentials bei gleichzeitiger autoradiographischer Beobachtung wurde konzipiert und das notwendige Zubehör beschafft.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Untersuchung des Adsorptionsverhaltens von Huminstoff an Tonmaterialien in Gegenwart höherwertiger Metalle
- Untersuchung der Octanol-Wasser-Verteilung von Huminstoff in Gegenwart höherwertiger Metalle
- Potentiometrische Langzeitmessungen an Fe(III)- und Al(III)-Huminstoff-Systemen zur Charakterisierung möglicher metastabiler Zustände
- Untersuchung des Lösungstransportes und des Kolloidtransportes in homogenisierten Tonproben mit unterschiedlicher Zusammensetzung (Kaolinit und Opalinuston) und an Granitproben (Febex)
- Ableitung relevanter 3D-Transportparameter anhand räumlich-zeitlicher Konzentrationsverteilungen aus PET-Untersuchungen
- Aufbau des Messplatzes für die Beobachtung elektrokinetischer Vorgänge

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Kulenkampff, M. Gründig, M. Richter, F. Enzmann: Evaluation of Positron-Emission-Tomography for Visualisation of Migration Processes in Geomaterials. Migration 2007, München. Eingereicht für *Physics and Chemistry of the Earth*.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10186</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexierung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheits Gesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 538.240,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Rösch	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

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

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 Solvationsmodelle 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

- AP1.1: Ternäre Komplexe  
 AP1.2: Uranyl-Bicarboxylate  
 AP1.3: Uranylkomplexe mit N-Donorliganden  
 AP2.2, 2.3, 2.5: Kaolinit: Oberflächen und Sorption.

Im Zusammenhang mit der Modellierung ternärer Uranylkomplexe wurde die Untersuchung von Uranyl-Monohydroxid erweitert. Es konnten 6 Strukturisomere in einem Energiebereich von weniger als 15 kJ/mol bestimmt werden, die sich in der Orientierung der Wasserliganden und Wasserstoffbrückenbindungen unterscheiden. Spezies mit vier- und fünffacher Koordination des Uranyls sind nahezu entartet. Die Rechnungen wurden mit LDA- und GGA-Funktionalen durchgeführt, um eine bekannte Überschätzung nichtbindender Wechselwirkungen durch LDA als Ursache auszuschließen.

Rechnungen zu Biacetatkomplexen von Uranyl als Modell für die Komplexierung durch mehrere funktionelle Gruppen von Huminstoffe wurden fortgeführt (AP1.2). Bisherige Modellierungen in der Gasphase wurden um Solvatisierungseffekte und teilweise bereits auch durch Berechnung thermodynamischer Korrekturen ergänzt. Für zweifach bidentate sowie gemischt mono- und bidentate Koordination ist eine sechsfache Koordination des Uranyls in Lösung bevorzugt. Wie beim Monoacetat ist eine monodentate Koordination energetisch stabiler, Entropiebeiträge stabilisieren aber bidentat koordinierte Liganden. Der mittlere Abstand  $U-O_{eq}$  der Ligandensauerstoffatome zu Uran ist unabhängig von der Koordinationsart und variiert nur mit der Koordinationszahl. Damit kann dieser für Monocarboxylate nachgewiesene Befund verallgemeinert werden. Diese Arbeiten werden derzeit durch Rechnungen zu Vibrationsfrequenzen ergänzt und in nächster Zeit abgeschlossen.

Die Arbeiten zur Modellierung der Sorption an Kaolinit wurden weitergeführt (AP2.2, 2.3, 2.5). Anhand von Modellen, die eine einzige Kaolinit-Schicht umfassen, wurden Silanolgruppen zur Ladungskompensierung von geladenen Adsorbatkomplexen eingeführt und im Vergleich mit anderen Modellvarianten erfolgreich erprobt. Für neutrale Modellkomplexe ergaben sich nur geringe energetische Unterschiede zwischen Modellen mit und ohne Silanolgruppen sowie in Abhängigkeit von der Position der Silanolgruppen. Mit Hilfe dieses Modells wurden Sorptionskomplexe von Uranyl auf der Al-terminierten Oktaederfläche des Kaolinit erstmals systematisch rechnerisch untersucht. Bei niedrigen pH-Werten sind demnach „inner-sphere“ Komplexe bevorzugt, während auf der weniger reaktiven Si-terminierten Tetraederoberfläche „outer-sphere“ Koordination energetisch günstiger ist. Unterschiede für verschiedene Adsorptionsplätze bei gleichem Deprotonierungsgrad betragen für eine gegebene Koordinationsform (mono- oder bidentat, inner- oder außersphärisch) in den meisten Fällen nur wenige kJ/mol. Erste Modellierungen der Kantenfläche (010) unter einer plausiblen Annahme über deren Terminierung und Struktur bestätigen die Hypothese, dass diese die reaktivste ist. Aluminolgruppen sind als Adsorptionsplätze leicht bevorzugt. Derzeit wird sowohl mit empirischen Modellen als auch mit Rechnungen die Stabilität verschiedener Terminierungen dieser Oberfläche untersucht, um dann deren Struktur in Kontakt mit Wasser zu bestimmen. Mit den so gewonnenen Modellen wird dann die Uranylkomplexierung auf den wichtigen Kantenflächen genauer studiert.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1.1: Abschluss der Arbeiten zu Uranylmonohydroxid
- AP1.2: Fortführung der Berechnungen zu Bicarboxylaten
- AP1.3: Uranyl-Komplexierung durch Aminosäuregruppen
- AP2.2, 2.3, 2.5: Fortführung der Arbeiten zur Sorption auf Kaolinit. Kantenflächen.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität des Saarlandes, Campus Saarbrücken, 66123 Saarbrücken		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10196</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Untersuchungen zur Migration von Lanthaniden und Uran in natürlichen Tonformationen im Übergang von verdünnten Mineral-Suspensionen zu kompakten Tonen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 502.243,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Beck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im o. a. Forschungsprojekt wird das geochemische Verhalten von Actiniden (Uran) sowie Lanthaniden (Europium, Terbium und Gadolinium) als deren Vertreter im natürlichen Tongestein auch unter dem Einfluss von Organika (Huminstoffe, Tonorganika) untersucht.

Basierend auf den Ergebnissen vorangegangener Projekte werden im ersten Teil des neuen Projektes die Untersuchungen, die bislang nur an dem Modellton Kaolinit durchgeführt wurden, auf natürliche Tongesteine (beispielsweise Opalinuston) übertragen. Im zweiten Teilabschnitt des Projektes soll mit Hilfe von Säulenversuchen auf Basis einer Miniaturisierung in Analogie zur Flüssigchromatographie das Ausbreitungsverhalten von Lanthaniden (Eu, Gd, Tb) und Radionuklid (U) und verschiedener Organika in kompaktem Tonstein untersucht werden.

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 FZR; 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 Radionuklid (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: Aufklärung der räumlichen Verteilung (Porenstruktur, Kanalbildung) sowie des Ausbreitungsverhaltens der Schwermetalle und Tonorganika unter dem Einfluss von grundwasserrelevanten Parametern durch eine orts aufgelöste 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

In der zweiten Hälfte des Jahres 2007 wurde mit Hilfe von Batch-Versuchen das binäre System Metall/Opalinuston genauer untersucht. Dabei wurde der Opalinuston nicht nur in 10 mM NaClO<sub>4</sub>-Lösung suspensiert, sondern zum Vergleich noch mit synthetisch hergestelltem Porenwasser. Das synthetische Porenwasser ist dabei dem natürlich vorkommenden Porenwasser nachempfunden und dient zum besseren Verständnis der Prozesse in der natürlichen Umgebung. Im Vordergrund der Untersuchungen standen vor allem Adsorptions- und Desorptionsexperimente bei pH 7 und pH 5. Dabei wurde festgestellt, dass im Arbeitsbereich der Adsorption von 100 ppt bis 500 ppm keine feste Sorptionsgrenze erreicht wird. Teilweise ist dies auf die Bildung von Carbonaten und Hydroxiden ab einem pH von 6 zurück zu führen, die durch die Zentrifugation abgetrennt werden. Wie erwartet war die Sorption der Proben mit NaClO<sub>4</sub> höher als die mit Porenwasser, da die hohe Konzentration der Konkurrenzionen im Porenwasser eine große Rolle spielt. Bei den Desorptionsexperimenten konnte festgestellt werden, dass der Einfluss des Porenwassers nicht so groß war wie erwartet. Hier zeigte sich nur eine geringfügig erhöhte Desorption im Vergleich zu den Proben mit NaClO<sub>4</sub>. Der Einfluss des pH-Werts auf die Sorptionsprozesse kann als sehr gering beschrieben werden. Bei pH-Reihen von pH 2 bis pH 10 konnte man erst unterhalb von pH 3 eine sprunghafte Abnahme der Sorption beobachten. Im Vergleich zu Kaolinit weist der Opalinuston eine deutlich höhere Sorptionsfähigkeit auf.

Mit Hilfe von CE-ICP-MS-Analytik konnten im System Ln<sup>3+</sup>/Opalinuston negativ geladene Metallspezies nachgewiesen werden. Dies lässt auf einen Einfluss der enthaltenen Tonorganika auf das Sorptionsverhalten schließen. In ersten Versuchen zeigte sich, dass analog zum bereits gut untersuchten System Ln<sup>3+</sup>/Kaolinit/Aldrich-Huminsäure bei erhöhten Konkurrenzmetallkonzentrationen eine verstärkte Sorption von Metallhumaten stattfindet.

Aktuell werden Messungen im System Lanthanoid/Opalinuston in Gegenwart von Huminsäure in Form von Batch-Versuchen durchgeführt. Daneben werden Versuche zu den bevorstehenden Säulenexperimenten durchgeführt und der Aufbau des Fluoreszenz-Imaging-Systems zur ortsauflösenden Analytik konnte weitestgehend abgeschlossen werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im weiteren Verlauf der Forschungsarbeiten werden die im AP2 und AP3 angegebenen Batch-Versuche zur Bestimmung der Einflüsse geochemischer Parameter auf die Sorption bzw. Desorption von Lanthaniden (Eu, Gd bzw. Tb) im ternären System Lanthanoid/Opalinuston/Huminsäure in Angriff genommen. Zusätzlich werden Versuche zur Optimierung des miniaturisierten Säulenversuchs (AP4) sowie des Fluoreszenz-Imaging-Systems (AP5) weitergeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Kautenburger R. & H.P. Beck (2007, in press): Complexation studies with lanthanides and humic acids analysed by ultrafiltration and capillary electrophoresis - inductively coupled plasma mass spectrometry. *Journal of Chromatography A* 1159, 75-80.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10206</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 813.235,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marquardt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Untersucht wird das Migrationsverhalten von Actiniden in der natürlichen Tonbarriere. Hierbei sollen die relevanten Prozesse auf molekularer Ebene aufgeklärt und verstanden werden. Neben der eingehenden Charakterisierung von Tonmineralien und der darin enthaltenen Tonorganika werden deren Wechselwirkungen mit Actinidionen untersucht. Notwendige Grundlagenuntersuchungen werden parallel durchgeführt, hinsichtlich Komplexierung der Actiniden mit Tonorganika und Huminstoffen. Das natürliche tonorganische System wird aus reinen Komponenten nachgebaut um ihre Entstehung, ihre Eigenschaften sowie ihren Einfluss auf die Actinidenmigration nachvollziehen zu können. Zusammenarbeiten laufen mit dem Forschungszentrum Dresden, der Universität Mainz, Potsdam, Heidelberg, Universität des Saarlandes, IIF Leipzig sowie der TU München. Außerdem werden Zuarbeiten von der TU Graz, Inst. für Analytische Chemie und Radiochemie geleistet.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Charakterisierung relevanter Tongesteinsproben. Hierzu gehören die Aufklärung der räumlichen Verteilung chemisch/mineralogischer Phasen sowie die über geologische Zeiträume entstandene Verteilung natürlicher Actiniden und deren Analoga. Hieraus ergeben sich Erkenntnisse über die vernetzte Porosität des Tongesteins und potentieller Transportwege.
- 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. Zu diesem Zweck werden spektroskopische Methoden eingesetzt, insbesondere TRLFS und LIBD sowie konventionelle Methoden (z. B. Extraktion und Kapillarelektrophorese).
- AP4: Speziation der Actiniden im Ton. Bestimmt wird die räumliche Verteilung der Actiniden in der Tonmatrix nach Diffusionsversuchen. Es wird versucht eine Trennung und Speziation in verschiedenen Ton-Phasen durchzuführen. Das Ganze wird begleitet von Grundlagenuntersuchungen zur Actiniden-Tonorganika / Humat-Komplexierung.
- AP5: Synthese des natürlichen Systems aus reinen Komponenten. Das natürliche System wird simuliert, indem organische Stoffe an gereinigten Tonmineralien mit verschiedenen Kationenaustausch-Belegungen polymerisiert werden, um die natürlichen Tonorganika mit ihren charakteristischen Eigenschaften und Bindungszuständen nachzubauen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die natürliche organische Substanz (Kerogen) des Opalinustons (Festgesteinsproben vom Mont Terri URL, gebohrt im Rahmen des IP FUNMIG Projekts) wurde im INE Labor unter Inertgas-Bedingungen extrahiert. Das in der Erdöl-Gemeinschaft etablierte Protokoll besteht aus einer Sequenz von Säureextraktionen bei 60-70 °C. Da der Anteil an natürlicher Organik in den diskutierten Wirtsgesteinsformationen für ein potentielltes Endlager gering im Vergleich zu Erdöllagerstätten ist, ist es äußerst schwierig, organische Extrakte ohne residuale anorganische Phasen (i.e. Silikate, Pyrit) zu erhalten. Diese Verunreinigungen können die späteren Untersuchungen des Actiniden-Komplexierungsverhaltens von Kerogen signifikant stören, da sie einen nur geringen Anteil an komplexierenden funktionellen Gruppen erwarten lassen. Daher wurde die Isolationsmethode in unserem Hause verbessert. Trotzdem zeigen die Extrakte an anorganischen Verunreinigungen einen Anteil von 18.3 Gew. % (Al, Si, Fe, S), der allerdings im Vergleich zu Literaturdaten von 19.6-37.7 Gew. % S und 14.3-30.1 Gew. % Fe in isolierten Kerogen-Proben deutlich reduziert wurde.

Die ersten zwei Diffusionsversuche von Pu-238 im Opalinuston wurden bei zwei pH-Werten (pH 8.4 und 7.9) durchgeführt und beendet. Der kontinuierliche „in-line“ gemessene Eh-Wert betrug 440 mV für das Probenzellen-Autoklaven-System 1 (SCAS 1) und 392 mV für SCAS 2. Nach dem Diffusionsversuch wurde der Tonkern in Epoxy-Harz eingebettet und anschließend in zwei Teile geschnitten. Ein Teil wurde mittels Autoradiographie untersucht, der andere Teil wurde zur Bestimmung des Diffusionsprofil von Pu-238 mittels der hochauflösenden abrasiven Peeling-Methode eingesetzt. 40 % des eingesetzten Pu blieb an den Oberflächen des SCAS hängen; im Tonkern zeigt das Pu keinen bevorzugten Transportweg, ist aber in zwei Spots konzentriert. SEM-EDAX-Analysen zeigten aber keine spezielle Elementzusammensetzung oder eine spezielle Mineralphase in diesen Spots. Im Porenwasser wurde Pu(V) als dominante Oxidationsstufe bestimmt. Begleitend zum Diffusionsversuch wurde die Sorption in Batch-Experimenten von pH 4.8 bis 10 untersucht. Hier wurde ein Maximum der Sorption bei pH 7.2 festgestellt.

Die Polymerisation niedermolekularer organischer Substanzen (LMWC) in Anwesenheit von Tonmineralien wurde fortgesetzt. Die Kerogen-Synthese aus diesen C, O, H, N-LMWC hat den großen Vorteil, den Quenchproblemen bei Fluoreszenzstudien durch Verunreinigungen zu entgehen und gleichzeitig Erkenntnisse über den Reaktionspfad und den möglichen katalytischen Effekt von Mineralphasen zu erfahren. Eine Reihe von geschlossenen Pyrolyse-Experimenten wurden an Produkten von Glucose/Glycine nach Maillard Reaktion in Anwesenheit von Ca-Smektit durchgeführt. Die Zeit-Temperatur-Parameter der Pyrolyse wurden mit 160 °, 180 °, 200 ° und 250 °C während 24 Stunden in Übereinstimmung mit Untersuchungen aus CO<sub>x</sub> Gesteinen gewählt. C1s STXM-Messungen der Reaktionsprodukte weisen im Bereich der Aromaten (~285.2 eV) eine gute Übereinstimmung zu Smektit assoziiertem natürlichem Kerogen im CO<sub>x</sub> auf und zeigen nur einen leicht erhöhten Anteil im Bereich der Karboxylgruppen (~288.4 eV). Das aus der Kombination Maillardreaktion und Pyrolyse hergestellte polymerisierte organische Material stellt ein besseres Homologes zum natürlichen Kerogen dar als das organische Material aus der Maillardreaktion (synthetische Huminstoffe).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Start der Untersuchungen zum Actiniden-Komplexierungsverhalten von Kerogen
- Das extrahierte OPA-Kerogenmaterial wird charakterisiert (SEM, STXM, Rock-Eval 6, Py GC-MS and IR).
- Diffusionsexperimente mit Neptunium werden durchgeführt.
- Grundlagenuntersuchungen zur Wechselwirkung von Actiniden und Huminstoffen werden fortgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10216</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Spektroskopische Untersuchungen zum erweiterten Prozessverständnis in binären und ternären Huminstoff-Tongestein - Lanthanoid Systemen: Thermodynamische und kinetische Kenngrößen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 275.839,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kumke	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Interlanthanoid-Energietransfer in binären und ternären Systemen

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

AP3: Anisotropie von Huminstoffen in binären und ternären Systemen

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Salicylsäure und Glykolsäure wurden als Modellliganden in Eu(III)-Komplexen mittels zeitaufgelöster laser-induzierter Fluoreszenz (LIF) hinsichtlich ihres Energietransferverhaltens in H<sub>2</sub>O und D<sub>2</sub>O untersucht. Dabei wurde der Effekt einer zur Carboxylgruppe benachbarten Hydroxygruppe sowie Unterschiede bedingt durch zum Ln(III)-Ion benachbarte aromatische Molekülgruppen untersucht. Auf Oberfläche und in Kavitäten sorbiertes Eu(III) wurde mittels LIF untersucht. Durch TRANES-Analyse wurden aus den (zeitlich und spektral!) hochaufgelösten Emissionsspektren unterschiedliche Spezies (z. B. Komplexierung durch Oberflächengruppierungen bzw. vollständige Hydratation) diskriminiert.

AP2: Untersuchung der transienten Absorption von Modellliganden in An- und Abwesenheit von Eu(III) werden z. Z. durchgeführt.

AP4: Modellpolymere sowie Referenz-HS verschiedener Ursprungsorte wurden mit Hinblick auf den Einfluss der Metallkomplexierung auf die Konformation von Makromolekülen untersucht.

AP5: Ausweitung der Konkurrenzexperimente auf weitere HS sowie weitere Metallionen (z. B. Mg(II)). Mit Hilfe der TRES wurde die Konkurrenz zwischen Eu(III)- und Mg(II)-Ionen bzw. zwischen Eu(III)- und Cu(II)-Ionen in Bezug auf Komplexierung durch HS untersucht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die geplanten Weiterarbeiten folgen den im Antrag formulierten Ablaufplan. Als nächste Arbeiten sind folgende geplant:

AP1: Im Weiteren werden weitere Modellliganden und Modellpolymere mittels TRLFS in Verbindung mit Eu(III) und Tb(III) untersucht werden. Die Untersuchungen werden dabei in homogener Lösung wie auch in heterogenen Systemen durchgeführt.

AP2: Messungen von Triplett-Zuständen bekannter Systeme und Untersuchungen an Modellliganden (einschließlich Modellpolymere) werden fortgesetzt. Erste Messungen mit HS werden vorbereitet.

AP3: Zur Ableitung von Konformationsänderungen werden Rotationskorrelationszeiten von Modellpolymeren und HS vor und nach Metallkomplexierung gemessen.

AP4: Fortsetzung von *stopped-flow* Untersuchungen an HA und FA und qualitative bzw. quantitative Auswertung der schnellen bzw. langsamen Kinetik der Metallkomplexierung der Huminstofffraktionen.

AP5: Die Arbeiten zur Metall-Konkurrenz bei der Komplexierung durch HS werden mit den zusätzlichen Metall-Paaren neben Eu(III)/Cu(II) und Eu(III)/Ca(II) und verschiedenen Modellpolymeren sowie HS verschiedener Ursprungsorte fortgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Stefanie Kuke: Deaktivierung elektronisch-angeregter Zustände ausgewählter Lanthanide mit aliphatischen und aromatischen Hydroxycarbonsäuren. (Diplomarbeit, Universität Potsdam 2008).

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 H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O. Manuskript in Vorbereitung.

Bettina Marmodée, Joost de Klerk, Freek Ariese, Michael U. Kumke: Site-selective time-resolved excitation spectroscopy of Eu(III) complexes. Manuskript in Vorbereitung.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10226</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Gasmigration im Opalinus Ton in Abhängigkeit vom Gasinjektionsdruck (unterhalb des Fracdruckes) Kurztitel: HG-C			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2008		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 562.553,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Jockwer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Opalinus-Ton des Mont Terri soll in Abhängigkeit vom Gasdruck für unterschiedliche Gase die Migration ermittelt werden. Es soll damit in Abhängigkeit vom Injektionsdruck erfasst werden, ob verschiedene Gaskomponenten mit unterschiedlichem Molekulargewicht und unterschiedlicher Löslichkeit im Wasser ein unterschiedliches Migrationsverhalten haben.

Dicht verschlossene Bohrungen parallel und senkrecht zur Schichtung werden mit einem Tracergasgemisch beaufschlagt. Der Injektionsdruck wird beginnend bei Atmosphärendruck stufenweise bis über den Formationswasserdruck (3 MPa) erhöht. Ist die jeweilige Druckstufe eingestellt, wird im Messvolumen der Druckverlauf aufgezeichnet. Die Beobachtungszeit jeder Druckstufe wird voraussichtlich zwei Monate dauern. Am Ende jeder Druckstufe werden die Komponenten des Tracergases in verschiedenen Messintervallen bestimmt.

Die Messtechnik ist in anderen Vorhaben bereits erprobt worden. Die Auswertung der Ergebnisse kann mit vorhandenen Verfahren durchgeführt werden. Die Daten sind für Auslegung von Endlagern in Tonformationen von Bedeutung.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Vorhaben untergliedert sich in:

- Injektion von Tracergasen unter Atmosphärendruck zur Bestimmung der Gasdiffusion
- Injektion von Tracergasen unterhalb des Formationswasserdruckes zur Bestimmung des Einphasenflusses im ungesättigten Porenraum
- Injektion von Tracergasen oberhalb des Formationswasserdruckes aber unterhalb des Fracdruckes zur Bestimmung des Zweiphasenflusses

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

In den Testintervallen wurden die Injektionsdrucke mit dem Tracergasgemisch weiter erhöht (oberhalb von 2,0 MPa). Bei 2,3 MPa gab es in einem Intervall mit der Ausrichtung parallel zur Schichtung einen Gasdurchbruch mit plötzlichem Gasfluss bei Aufrechterhaltung des Gasdruckes verbunden mit einem Gasdruckanstieg im 0,5 m entfernten parallelen Intervall in der gleichen Schicht.

In den anderen untersuchten Intervallen kam es nicht zu einem derartig plötzlichen Gasfluss. Hier zeigten sich bei den Injektionsdrucken zwischen 2,3 und 3,2 MPa von 1 bis 10 l/h der proportional zum Injektionsdruck zunahm. Bei konstantem Gasdruck von 3,1 MPa und konstantem Gasfluss von 11 l/h ergab sich nach 12 Tagen ein plötzlicher Gasdurchbruch verbunden mit einem Druckanstieg in den 0,5 m entfernten parallelen Intervallen in der gleichen Schicht.

Aus den bisherigen Messungen hat sich ergeben, dass bereits ein Gasfluss in das weitestgehend wassergesättigte Gebirge unterhalb des großräumigen Formationswasserdruckes existiert. Mögliche Mechanismen für diesen Gasfluss sind:

- Einlösen der Gase ins Formationswasser mit anschließendem diffusiven Fluss im Formationswasser
- Advektiver Fluss der Gase im kleinräumig nicht vollständig wassergesättigten Porenraum
- Verdrängung des Formationswasser bei kleinräumig niedrigeren Formationswasserdruck (Zweiphasenfluss)

Eine eindeutige Erklärung für den Gasfluss im weitestgehend ungestörten Gebirge konnte bisher nicht gegeben werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Weiterführung der Gasinjektion im Bereich von 2,0 bis 3,5 MPa in denen bisher kein Gasdurchbruch erfolgt ist.
- Abrüsten des Versuchsfeldes.
- Erstellung des Abschlussberichtes.

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10236</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2006 bis 31.10.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 197.000,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Wieczorek	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Das Deliverable D5 (Report on compilation of existing or recently generated experimental field or laboratory data on EDZ evolution in rock salt) wurde fertig gestellt. Es fasst die vorhandenen Stoffmodelle zur Beschreibung des THM-Verhaltens der Auflockerungszone und insbesondere ihres Langzeitverhaltens zusammen und stellt die für Kalibrierung der Modelle als geeignet angesehenen Messdaten dar.
- AP3: Zur Bestimmung der Modellparameter wurde ein Schädigungs-Verheilungs-Versuch an einer Steinsalzprobe von der 511-m-Sohle des Bergwerks Asse durchgeführt. Dabei wurde die Gaspermeabilität unter unterschiedlichen Spannungen gemessen. Die Ergebnisse zeigen eine starke Reduzierung der Permeabilität von 10-18 m<sup>2</sup> auf 10-22 m<sup>2</sup> mit der Zunahme der hydrostatischen Beanspruchung von 2 bis zu 20 MPa. Während der deviatorischen Belastung wurde erst beim Erreichen der Bruchfestigkeit eine deutliche Erhöhung der Permeabilität beobachtet. Diese Erscheinung widerspricht dem Dilatanzkonzept für Salz. Zur Erklärung bzw. Absicherung der Daten wird ein Vergleichstestprogramm zwischen GRS und BGR entwickelt und Anfang 2008 durchgeführt. Die so abgesicherten Modellparameter werden anschließend in CODE\_BRIGHT integriert.
- AP4: Die Vorbereitungen auf den Referenzversuch (Schädigungs-Verheilungs-Versuch) an einem Großsalzkern mit einem Zentralbohrloch dauern an.

Bisherige Ergebnisse und Stand des Projektes wurden beim Plenary Meeting am 20./21. November 2007 in Stockholm vorgestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Durchführung ergänzender Laborversuche zur Vervollständigung und Absicherung der Eingabedaten für Code\_Bright
- Prüfung der im Code\_Bright implementierten Stoffansätze mit den aus vorhandenen und zusätzlichen Laborexperimenten ermittelten mechanischen und hydraulischen Parameter
- Durchführung des Benchmark-Versuchs

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

"Compilation of existing constitutive models and experimental field or laboratory data for the thermal-hydraulic-mechanical (THM) modelling of the excavation disturbed zone (EDZ) in rock salt", THERESA Project, Work Package 3, Deliverable 5.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10246</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2006 bis 31.10.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 74.878,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Lerch	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zu den einzelnen Arbeitspaketen wurden bei DBE Technology im Berichtszeitraum folgende Arbeiten durchgeführt:

- AP1: Im 2. HJ 2007 wurden in diesem AP planmäßig keine weiteren Arbeiten durchgeführt.
- AP2: Die Literaturrecherche zu Laborversuchen mit dem Ziel, die Entwicklung der Auflockerungszone sowie den Zusammenhang zwischen Dilatanz und Permeabilität zu beschreiben, wurde abgeschlossen. In Anpassung an diese Daten wurden die Materialdaten für die in FLAC3D zur Verfügung stehenden Stoffmodelle zusammengestellt und in der Zuarbeit zum Bericht (Deliverable D5) dokumentiert. In einer weiteren Zuarbeit ist das für FLAC3D zu verwendende Stoffgesetz in detaillierter Form beschrieben worden. Die Ergebnisse wurden anlässlich des Project Plenary Meetings den Projektteilnehmern vorgestellt.
- AP3: Es wurde damit begonnen, die modifizierten Stoffmodelle in das Berechnungsprogramm FLAC3D zu implementieren.
- AP4-AP6: keine

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Aktualisierung der Issue Evaluation Table (im 1. Quartal 2008)
- AP2: abgeschlossen
- AP3: Weiterführung der Code-Implementierung sowie Weiterführung der Kalibrierungsrechnungen in FLAC3D
- AP4: Zuarbeit zur technischen Beschreibung des Versuchs, Prognoseberechnung des geplanten Versuchs
- AP5: Keine
- AP6: Keine

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zuarbeit zu Deliverable 5.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstraße 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10256</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2006 bis 31.10.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 62.389,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kamlot	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde der Zwischenbericht D5 „Compilation of existing constitutive models and experimental field or laboratory data for the thermal-hydraulic-mechanical modeling of the excavation disturbed zone in rock salt“ fertig gestellt, die Kalibrierung der Stoffgesetze weitergeführt und die Ergebnisse am 20. und 21. November 2007 in Stockholm anlässlich des Project Plenary Meetings vorgestellt.

Weiterhin erfolgte eine Zuarbeit zum WP5 „Technical Auditing of computer codes and constitutive models“.

Folgende Ergebnisse liegen vor:

#### Zwischenbericht D5

- Erläuterung der Stoffgesetze Günther/Salzer und Minkley mit Zielstellung auf die Bildung und Verheilung einer EDZ
- Kalibrierung der Stoffparameter des Asse-Steinsalzes  $\text{Na}_2\text{S}$  anhand von Festigkeits- und Kriechversuchen
- Zusammenstellung aller Stoffparameter für die Anwendung im Projekt THERESA

#### THERESA Project Plenary Meeting

- Präsentation der Arbeitsschwerpunkte von D5: Erläuterung der Stoffgesetze Günther/Salzer und Minkley sowie der Kalibrierung der Stoffparameter des Steinsalzes Asse anhand von Festigkeits- und Kriechversuchen

#### Zuarbeit zum WP5 „Technical Auditing of computer codes and constitutive models“

- Darstellung der Basisgleichungen für das Rechenprogramm FLAC (Bewegungsgleichungen, Gleichgewichtsbedingungen)
- Beschreibung der Stoffgesetze
- Beschreibung der Interaktion mit dem Fluid-Strömungsprozess und der Temperaturentwicklung
- Zusammenstellung aller Stoffparameter für Steinsalz Asse für beide Stoffgesetze

### 4. Geplante Weiterarbeiten

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

- Stoffgesetzkalibrierung und Integration notwendiger Parameter für gekoppelte Berechnungen
- Hydraulisch-mechanisch gekoppelte Berechnung und Untersuchung der Anwendbarkeit beider Stoffansätze hinsichtlich der Aufgabenstellung

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Zuarbeit zu Deliverable 5 des WP3 und WP5.

<b>Auftragnehmer:</b> Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec) GmbH, Forschungsge- lände, 85748 Garching		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10266</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Numerische Modellierung der Dilatanz-induzierten, perkolativen Permeation in Salzgestein		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 31.07.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.07.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 101.350,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Alkan	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Forschungsvorhabens ist die Entwicklung eines numerischen Modells für die Dilatanz-induzierte perkolative Permeationserhöhung im Steinsalz. Ein Perkolationsmodell für das Dilatanz-Permeabilitätsverhalten von Steinsalz wird basierend auf den vorliegenden Messdaten und Korrelationsanalysen entwickelt. Die Erklärung der dreistufigen Permeabilitätsänderung induziert durch Dilatanz bzw. deviatorische Spannungszustände in Steinsalz mit der Perkolations-theorie ist plausibel und bildet daher den Ausgangspunkt. Das Perkolationsmodell wird basierend auf den experimentellen Ergebnissen validiert. Die numerischen Daten werden mit experimentellen Ergebnissen verglichen und ihre Gültigkeit getestet.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### AP1: Literatur und Korrelationsanalyse

Die vorliegenden experimentellen Ergebnisse über Dilatanz-Permeabilitätsverhalten für Steinsalz werden durchgearbeitet und im Hinblick auf das Perkolationsverhalten sowie das Verhalten diesseits und jenseits der Dilatanzgrenze mit relevanten Prozessparametern korreliert.

### AP2: Triaxiale Experimente

Die Modellierung der kritischen Permeabilitätsentwicklung bzw. der Perkolation soll auch mit Mikrorissnetz-Parametern korrelierbar sein. Um diese Vorstellungen abzusichern und in der Modellentwicklung und Validierung berücksichtigen zu können, sind vier Deformations-/Kompressionsexperimente geplant. Steinsalzkerne mit möglichst unterschiedlicher Struktur werden unter triaxialen Spannungsbedingungen für die Entwicklung der Porosität und Permeabilität verwendet. Die Mikrorisseigenschaften dieser Kerne werden vor und nach den Experimenten gemessen und visualisiert.

### AP3: Modellentwicklung

Ein Perkolationsmodell für das Dilatanz-Permeabilitätsverhalten von Steinsalz wird basierend auf den vorliegenden Messdaten und Korrelationsanalysen entwickelt.

**AP4: Modellvalidierung und Parameterstudien**

Das Perkulationsmodell wird basierend auf den experimentellen Ergebnissen validiert. Die numerischen Daten werden mit experimentellen Ergebnissen verglichen und ihre Gültigkeit getestet.

**AP5: Dokumentation**

Die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden schriftlich dokumentiert.

**3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse**

Die geplanten Arbeiten für alle Arbeitspakete sind durchgeführt und abgeschlossen. Untersuchungen wurden gemäß den im AP2 spezifizierten Arbeiten durchgeführt. Die ausgelieferten Kerne aus der Triaxial Experimente (Dr.-Ing U. Düsterloh, TU Clausthal) sind nach deren Risseigenschaften bzw. Rissdichte und -geometrie visuell analysiert und die Ergebnisse wurden mit stereologischen und statistischen Methoden ausgewertet. Die Perkulationseigenschaften der belasteten Kerne wurden basierend auf dem Konzept „Excluded Volume“ bestimmt. Die gewonnenen Ergebnisse wurden für die Analyse der Netzwerk-Konvektivität verwendet.

Ein Perkulationsmodell für das Dilatanz-Permeabilitätsverhalten von Steinsalz wurde basierend auf den Korrelationsanalysen entwickelt. Für die Bestimmung der Perkulationsschwelle wurde die Dilatanzgrenze als Basis genommen und die Permeabilitätsentwicklung als Funktion des deviatorischen Stresses und repräsentativer halb-empirischer Parameter modelliert. Die Kalibrierung, Validierung und Verwendbarkeit des Perkulationsmodells wurde anhand des vorigen BMBF Projekts 02C0598 und der in dessen Rahmen durchgeführten Experimente (TU Clausthal) getestet. Eine akzeptable bis sehr gute Übereinstimmung der Modellergebnisse mit den experimentellen Daten wurde festgestellt. Eine Sensitivitätsanalyse der relevanten Parameter wurde mit dem repräsentativsten Ansatz durchgeführt und die Ergebnisse wurden diskutiert.

**4. Geplante Weiterarbeiten**

Das Projekt ist abgeschlossen.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

Der Projektbericht liegt vor.

Das entwickelte Perkulationsmodell und seine Anwendungsansätze werden in Tagungen vorgestellt und in Fachzeitschriften veröffentlicht.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10276</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM-		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 778.575,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Rübel	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

Im ersten Arbeitspaket wird ein umfassender Überblick über den internationalen Stand der Methoden und Ansätze bei der Langzeitsicherheitsanalyse und beim Safety Case erarbeitet. Dabei werden auch die Defizite methodischer Natur, bei den eingesetzten Werkzeugen und der Qualität der benötigten Daten identifiziert.

Im zweiten Arbeitspaket erfolgt eine Weiterentwicklung von Methoden für probabilistische Modellrechnungen, wobei vor allem die Methoden zur Bestimmung von Verteilungsfunktionen und neue mathematische Methoden zur Sensitivitätsanalyse untersucht werden.

Im dritten Arbeitspaket werden die Bedeutung von Sicherheitsfunktionen bei der Ableitung von Szenarien und vor allem die Nutzung von Sicherheits- und Funktionsindikatoren für Endlager in Salz- und Tonformationen betrachtet.

Im vierten Arbeitspaket wird die Bedeutung von komplexen Modellansätzen in integrierten Sicherheitsanalysen untersucht. Dies geschieht mit Hilfe vergleichender Rechnungen verschiedener Organisationen und Rechenprogramme. Dabei sollen Einzeleffekte in einem Endlager im Salz betrachtet sowie der Einfluss der Komplexität der Fernfeldmodelle betrachtet werden.

In einigen Punkten geht die Bearbeitungstiefe in WESAM über die von PAMINA hinaus. Dies betrifft die Arbeiten zu den Unsicherheiten, die Sicherheitsindikatoren und die Modellierung mit Hilfe komplexer Modellansätze.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Erstellung von Beiträgen mit der Beschreibung der nationalen Arbeiten für den Review zu den Themengebieten „Sicherheits- und Performanceindikatoren“ und „Unsicherheitsmanagement und -analyse“. Das Themengebiet zu den Sicherheitsindikatoren wird leitend von der GRS betreut und die Beiträge aller Partner zu diesem Thema wurden für einen Workshop in Paris aufgearbeitet.
- AP2: Für die Durchführung von probabilistischen Rechnungen nach der FAST Methode wurde mit der Programmierung eines Preprozessors zur Erstellung von Stichproben und eines Postprozessors zur Auswertung der EMOS Rechnungen mittels SIMLAB und MATLAB begonnen. Der Aufwand dieser Programmieraufgaben erweist sich als deutlich höher als erwartet, da auf Grund der großen Datenmengen eine neuere Version von SIMLAB als geplant verwendet werden musste, die eine Einbindung über MATLAB erfordert.  
Es wurden erste probabilistische Testrechnungen nach der FAST Methode für ein Endlagermodell im Salz durchgeführt, für welches bereits probabilistische Rechnungen nach der herkömmlichen Methode existieren.
- AP3: Es erfolgte eine Klärung und Abstimmung zwischen den in PAMINA beteiligten internationalen Partnern was unter den im Zusammenhang mit Sicherheitsindikatoren genannten Begriffen verstanden wird. Diese Übereinkunft wurde im Projekt PAMINA dokumentiert.  
Es erfolgte eine erste Definition der Testfälle für die Berechnung der Sicherheits- und Performanceindikatoren im Salz und im Ton. Ein erster Vorschlag für die zu berechnenden Indikatoren wurde erarbeitet.
- AP4: Die Modellierung des Konvergenzprozesses wurde für alle fünf definierten Testfälle durchgeführt. In allen Fällen zeigten sich zufrieden stellende Übereinstimmungen mit den gebirgsmechanischen Rechnungen der DBE. Der Testfall für die Modellierung des Laugenzutritts in eine verfüllte Strecke wurde definiert. Für das vereinfachte Modell der Modellierung des Schadstofftransports im Deckgebirge wurden Testrechnungen mit den Programmpaketen d<sup>3</sup>f/r<sup>3</sup>t und EMOS/CHET durchgeführt und ein erster Vergleich der Ergebnisse vorgenommen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Erstellung des zusammenfassenden Topic Reports mit den Beiträgen aller Projektpartner zum Themengebiet „Sicherheits- und Performanceindikatoren“. Die GRS betreut von dem zweiten Satz der Themengebiete das Thema „Sensitivitätsanalyse“. Zu diesem Thema werden koordinierende Aufgaben wahrgenommen und ein eigener Beitrag erstellt. Ein Treffen zur Koordination der Beiträge findet im April statt.
- AP2: Es wird ein erster Vorschlag für Kriterien zur Wahl von Verteilungsfunktionen erstellt. Die Programmierarbeiten und probabilistischen Rechnungen zur Anwendung der FAST Methode werden fortgeführt.
- AP3: Es wird eine Festlegung der im Projekt PAMINA zu berechnenden Sicherheits- und Performanceindikatoren erfolgen. Zu diesem Zweck ist im Februar ein Arbeitstreffen der an dieser Komponente beteiligten Partner geplant. Die Testrechnungen zur Bestimmung der Indikatoren für ein Endlager im Salz und im Ton werden begonnen.
- AP4: Die Ergebnisse der Modellierung des Konvergenzprozesses werden dokumentiert und mit jenen von NRG verglichen, sobald diese vorliegen. Die Modellrechnungen zum Laugenzutritt in eine verfüllte Strecke mit EMOS und einem komplexen Rechencode werden begonnen. Für die Modellierung des Schadstofftransports im Deckgebirge werden die Arbeiten am vereinfachten Modell fortgeführt und das komplexe Modell definiert.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31201 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10286</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Referenzkonzept für ein Endlager für radioaktive Abfälle in Tongestein (ERATO)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 524.906,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 aufgefahrenem 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

AP2:

Die Recherche und Zusammenstellung der Verfahren zur Herstellung von Grubenbauen im Tongestein wurde abgeschlossen und ein Berichtsentwurf erstellt. Danach kann das Abteufen der Schächte vorbehaltlich einer genauen Erkundung konventionell erfolgen. Bei zu erwartenden Wasserzutritten aus dem Deckgebirge stehen Verfahren zur Verfügung (Zementier- ggf. auch Gefrierverfahren). Als Ausbau wird ein gebirgsverbundener geschlossener Gleitabau vorgesehen. Die untertägige Streckenauffahrung erfolgt gebirgsschonend mit Teilschnittmaschinen. Im Hinblick auf das als stark gebräch eingestufte Gebirge (Tongestein) sind alle Strecken auszubauen (Anker-Spritzbeton-Verbundabau für die kurzlebigen Einlagerungsstrecken und zusätzlich ein Stahlbogenausbau mit Betonhinterfüllung für die langlebigen Querschläge und Richtstrecken). Aufgrund der geringen Teufenlage und geringer zu erwartender Konvergenz ist ein Sohlenschluss nicht erforderlich. Für die Herstellung der ca. 50 m tiefen Einlagerungsbohrlöcher mit Durchmessern von bis zu ca. 1,5 m sind Bohrverfahren vorhanden, die jedoch hinsichtlich der Bohrlöcherdurchmesser angepasst werden müssen. Für den Bohrkleinaustrag kommen entweder Luftspülung oder eine toninhibierende Polymerspülung in Frage. Die Bohrlöcher sind mit einem Liner auszubauen.

AP3:

Im Rahmen dieses Vorhabens werden für die Endlagerung ausgedienter Brennelemente 2 Hauptvarianten betrachtet:

- Streckenlagerung von POLLUX-3 (3 BE) und
- Bohrlochlagerung von BSK3 (3 BE) in vertikalen Bohrlöchern (Tiefe ca. 50 m)

Für beide Hauptvarianten ergeben sich hinsichtlich der Transport- und Einlagerungssysteme verschiedenen Untervarianten. Diese wurden bewertet und die jeweiligen Vorzugsvarianten festgelegt.

Basierend auf dem vorgesehenen Zuschnitt der Einlagerungsfelder (3-Streckensystem) sowie den thermischen Auslegungsrechnungen im Vorhaben GENESIS (Behälter- und Streckenabstände) sowie weiterer Randbedingungen wurde eine vorläufige Planung des Grubengebäudes für beide Hauptvarianten vorgenommen. Darauf aufbauend sowie auf Basis weiterer Kriterien wurde damit begonnen, die beiden Vorzugsvarianten gegenüber zu stellen, um die dem weiteren Verlauf der Bearbeitung zugrunde zulegende Variante zu ermitteln.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Fortführung der Arbeiten ist in Übereinstimmung mit der Vorhabensplanung vorgesehen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Regina-Pacis-Weg 3, 53113 Bonn		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10296</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Visualisierung und Datenanalyse		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 82.938,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Rumpf	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Diese Visualisierung soll hierarchisch konzipiert werden. D. h. in der interaktiven Exploration werden grobe Repräsentationen der Daten bereitgestellt, die 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 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), Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Freiberg (Prof. Kröner) und der Uni Heidelberg (Prof. Wittum) durchgeführt. Zusätzlich ist auch das Steinbeis-Forschungszentrum (Dr. Heisig) über einen Unterauftrag eingebunden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete 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. Bearbeitet wurde das Projekt in enger Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Kröner in Freiburg von Frau Dipl. Math. Nadine Olischläger eingearbeitet.

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

Das Visualisierungswerkzeug für freie Oberflächen wurde weiterentwickelt und ein erster Prototyp für Levelset-beschriebene Oberflächen in GRAPE implementiert. Das entsprechende Werkzeug ist kombinierbar mit anderen Visualisierungsmethoden.

Es wurde eine Darstellungsmethode für „stochastische“ Inputdaten wie zum Beispiel Permeabilität realisiert. Hier kommen nun Hardware-unterstützte Texturierungsmethoden zum Einsatz. Die Methode wurde an Daten der Arbeitsgruppe erprobt. Auf den Schnittflächen, auf denen die Permeabilität dargestellt wird, können prinzipiell nun auch andere Daten dargestellt werden. Dies soll nun weitergehend getestet werden.

Eine Weiterentwicklung der Bilanzierungswerkzeuge (Massen- und Volumenströme) wurde fortgeführt.

Im *Kontext der Multiskalenmethoden* wurde ein Cluster-Verfahren basierend auf dem Mumford-Shah-Ansatz aus der Bildverarbeitung entwickelt. Hierbei wird ein Strömungsfeld in Bereiche unterteilt, welche lokal durch affine Vektorfeldprofile beschrieben werden, die dann im Fortgang Strukturen wie Wirbel, Staupunkt, Scherströmung, laminare Strömung beschreiben sollen. Dieser Ansatz wird zur Zeit weiterentwickelt, im Hinblick auf den Einsatz auf Vektorfelder aus Simulationsrechnungen.

Algorithmisch wurde diese Methode bereits umgesetzt werden mit Hilfe des von Chan und Vese 2001 vorgeschlagenen Niveauflächenverfahrens. In einem Vorbereitungsschritt wurde an dieses Problem angepasstes Mumford-Shah-Verfahren in  $2^n$  Bereiche implementiert.

Nach dem Statusgespräch im Oktober fand eine ausführliche Abstimmung mit Dr. E. Fein und Frau A. Schneider zur weiteren Planung statt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise weitergeführt.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fahnenbergplatz, 79098 Freiburg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10306</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d <sup>3</sup> f und r <sup>3</sup> t - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 94.760,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kröner	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit der Entwicklung der Programmpakete d<sup>3</sup>f und r<sup>3</sup>t stehen Werkzeuge zur Modellierung der salzgetriebenen Dichteströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien zur Verfügung. Ziel des Projektes ist die Weiterentwicklung der in diesem Rahmen entstandenen Visualisierungswerkzeuge. Im Vordergrund steht dabei die Anpassung an die neuen Fragestellungen, die im Zusammenhang mit Kluftgeometrien und freien Oberflächen entstehen.

Dabei soll bei der Visualisierung ein hierarchisches Konzept verfolgt werden, das sowohl die interaktive Exploration grober Repräsentationen der Daten ermöglicht, als auch den vollen Detailreichtum der Simulationen widerspiegeln kann.

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.

Die im Projekt r<sup>3</sup>t entwickelten Multiskalen-Bildverarbeitungstechniken, um die Strömungsfelder und den Transport von Schadstoffen visuell angemessen aufzubereiten, sollen nun vor allem in Hinblick auf dreidimensionale Strömungen mit Schadstofftransport weiterentwickelt werden.

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der GRS (Dr. E. Fein), Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Bonn (Prof. Rumpf) und der Uni Heidelberg (Prof. Wittum) durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

AP9: Visualisierung und Datenanalyse (Arbeitsgruppe Kröner)

AP10: Visualisierung und Datenanalyse (Arbeitsgruppe Kröner)

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

Die Visualisierungsplattform GRAPE wurde im Kontext von ersten neuen Datenformaten weiterentwickelt. Bearbeitet wurde das Projekt in enger Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Kröner in Freiburg von Frau Dipl. Math. Nadine Olischläger.

Im Zusammenhang mit den Visualisierungswerkzeugen wurden folgende Arbeiten durchgeführt:

- Das Visualisierungswerkzeug für freie Oberflächen wurde weiterentwickelt und ein erster Prototyp für Levelset-beschriebene Oberflächen in GRAPE implementiert. Das entsprechende Werkzeug ist kombinierbar mit anderen Visualisierungsmethoden.
- Es wurde eine Darstellungsmethode für „stochastische“ Inputdaten wie zum Beispiel Permeabilität realisiert. Hier kommen nun Hardware-unterstützte Texturierungsmethoden zum Einsatz. Die Methode wurde an Daten der Arbeitsgruppe erprobt. Auf den Schnittflächen, auf denen die Permeabilität dargestellt wird, können prinzipiell nun auch andere Daten visualisiert werden. Dies soll nun weitergehend getestet werden.
- Eine Weiterentwicklung der Bilanzierungswerkzeuge (Massen- und Volumenströme) wurde fortgeführt.
- Des Weiteren wurde mit der Implementierung von Darstellungsmethoden von Quellen und Senken begonnen. Diese werden in einem kommenden Arbeitstreffen mit Frau Olischläger fertig gestellt und getestet.
- Nach dem Statusgespräch im Oktober fand eine ausführliche Abstimmung mit Dr. E. Fein und Frau A. Schneider zur weiteren Planung statt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise weitergeführt.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Friedrich-Schiller-Universität Jena, Fürstengraben 1, 07743 Jena		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10316</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Skalierung von halinen und thermohalinen Strömungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 82.404,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Attinger	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Die Untersuchungen werden in Zusammenarbeit mit der Uni Jena (Prof. Attinger), der Uni Freiberg (Prof. Kröner), der Uni Bonn (Prof. Rumpf) und der Uni Heidelberg (Prof. Wittum) durchgeführt. Zusätzlich ist auch das Steinbeis-Forschungszentrum (Dr. Heisig) über einen Unterauftrag eingebunden. 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. Herr Jude Musuuza, der seit 15.08.2007 in dem Projekt arbeitet, hat sich mit d<sup>3</sup>f vertraut gemacht. Ein Testproblem (aus Schincariol and Schwarz, WRR 26 (1990)) wurde implementiert und die Ergebnissen mit anderen Arbeiten verglichen, um die Richtigkeit der Implementierung zu überprüfen.

Die lineare Stabilitätsanalyse für haline Strömungen, die von Held, Attinger and Kinzelbach (WRR 41, 2005) entwickelt wurde, wurde nun erweitert. Die Analyse basiert auf Techniken von Mehrskalenerwicklung und Perturbationtheorie. Ein neues Stabilitätskriterium wurde mathematisch formuliert für den Fall homogener Strömungen. Das Kriterium berücksichtigt Parameter wie Dichte, Viskosität und Strömungsgeschwindigkeit.

Das Kriterium wurde dann numerisch getestet. Als Referenzproblem diente das Problem von Schincariol. Die Parameter wurden einzeln variiert, um die Effekte zu entkoppeln.

Ergebnisse:

Eine gute Übereinstimmung von theoretischen und praktischen Untersuchungen wurde für die homogenen Strömungen beobachtet.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

Zunächst ist geplant:

- Die oben skizzierten theoretischen Ergebnisse nun auf den Fall, Strömungen in heterogenen geologischen Medien, zu erweitern.
- Die Implementierung zwei anderer Testprobleme, um das theoretische Stabilitätskriterium gründlicher zu untersuchen.

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

A stability criterion for density driven flows: the homogeneous case  
by S. Attinger, J. Musuuza and F.A. Radu, wird demnächst bei Advances in Water Resources eingereicht.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10326</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 654.710,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Wittum	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Projekts ist 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 neuartige unstetige 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.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP6: Modellierung des Wärmetransports

- Aufstellen und Einkoppeln der Energiegleichung : Boussinesq-Approximation
- Aufstellen und Einkoppeln der Energiegleichung : volles Modell
- Diskretisierung: Finite Volumen
- Diskretisierung: Unstetiges Galerkin-Verfahren, Ordnungadaptivität

- Löser: Geometrisches Mehrgitter
- Löser: FAMG
- Validierung und Tests

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

- Formulierung des Problems der freien Oberfläche
- Diskretisierungsverfahren
- Löser
- Validierung und Tests

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

Die folgenden Arbeiten wurden vom Lehrstuhl für Technische Simulation im Berichtszeitraum durchgeführt.

AP6: Modellierung des Wärmetransports

- Aufstellen und Einkoppeln der Energiegleichung: Boussinesq-Approximation
- Untersuchung zu Diskretisierungsverfahren: Finite Volumen höherer Ordnung
- Untersuchung zu Lösungsverfahren: Geometrisches Mehrgitter

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

- Formulierung des Problems der freien Oberfläche
- Untersuchung zu Verfahren für freie Oberflächen: Level-Set-Methoden
- Untersuchung zu Diskretisierungsverfahren

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Auftrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10336</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme d <sup>3</sup> f und r <sup>3</sup> t		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 31.03.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.288.348,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Fein	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Verbundvorhabens werden folgende Arbeitspakete von der 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

Um zukünftige Lizenzvergaben von  $d^3f$  und  $r^3t$  an Dritte juristisch einwandfrei durchführen zu können, sind einige Verträge bzw. Erneuerungen von Verträgen nötig. So wurde ein Vertrag zwischen PTKA-WTE und GRS entworfen, der eine Vergabe von unentgeltlichen Lizenzen für  $d^3f$  und  $r^3t$  durch die GRS erlaubt. Bei der Nutzung der beiden Programme werden auch die Computersoftware UG (Universität Heidelberg), GRAPE (Universität Bonn) und NETGEN (Universität Linz) benötigt. Die Verträge über Nutzung und Weitergabe müssen erweitert und erneuert werden. Die Vertragsentwürfe befinden sich zurzeit bei den Vertragspartnern zur Abstimmung. Auf der Grundlage der oben geschilderten Verträge wurde ein Vertrag für die zukünftige Lizenzvergabe von  $d^3f$  und  $r^3t$  entworfen.

Klüfte werden mathematisch als Hyperflächen dargestellt, besitzen also eine niedrigere Dimensionalität als die Gesteinsmatrix. Dabei muss das Gitter an die Klüfte angepasst werden. Deshalb soll der Gittergenerator ARTE verwendet werden. Die Finite-Volumen-Geometrie der niedrigeren Dimensionalität wurde in UG problemunabhängig implementiert und kann deshalb sowohl von  $d^3f$  als auch von  $r^3t$  verwendet werden.

Am 22. und 23. Oktober 2007 fand in Braunschweig das 2. Statusgespräch mit anschließendem Besuch des Erkundungsbergwerks Gorleben statt. Die einzelnen Arbeitsgruppen berichteten über den Stand ihrer Arbeiten und ihre für das nächste Halbjahr geplanten Arbeiten.

Die Detailplanung und die Beschreibung der Anforderungen an die Entwicklung der Benutzeroberfläche für die Erweiterung der Rechenprogramme wurden fortgesetzt. Dazu fand am 24. Oktober ein Treffen mit Mitarbeitern von Prof. Rumpf und Prof. Kröner in Braunschweig statt. Dabei wurden die Arbeiten zur Dokumentation des Postprozessors besprochen und Aufgaben festgelegt.

Es wurde eine vorläufige Gliederung der Detailplanung „Enhancement of the Computer Codes  $d^3f$  and  $r^3t$  (E-DuR); Elaborated Technical Concept“ festgelegt und mit der Erarbeitung begonnen.

Inzwischen wurde die Homepage für das Projekt E-DuR erstellt und in Betrieb genommen ([www.e-dur.org](http://www.e-dur.org)).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31201 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10346</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung und Umsetzung von technischen Konzepten für tiefe geologische Endlager in allen Wirtsgesteinen (EUGENIA)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2007 bis 31.12.2008		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 359.280,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Bollingerfehr	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das vorliegende Vorhaben wird 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

Die Ergebnisse der Recherche für die Arbeitspakete 1 „Zusammenstellung internationaler Konzepte zur Endlagerung in tiefen Gesteinsformationen“ und 2 „Sicherheitskonzepte für Endlager in ...“ wurden in einem internen Arbeitsbericht zusammengestellt. Darin werden alle Kernenergie betreibenden Nationen tabellarisch aufgeführt und - soweit Informationen veröffentlicht - deren Stand bei der Planung und Realisierung von HAW-Endlagern. Für die Länder mit fortgeschrittenem Entsorgungsprogramm wurde eine kurze zusammenfassende Beschreibung des Endlagerkonzeption und des zugrunde liegenden Sicherheitskonzepts erstellt. Der Bericht, der die Ergebnisse beider Arbeitspakete zusammenfasst, wurde projektintern revidiert und abgeschlossen.

Mit der Bearbeitung des Arbeitspaketes 5 „Technische Endlagerkonzepte“ wurde begonnen. Für die Länder mit fortgeschrittenem Entsorgungsprogramm für hochradioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente (Belgien, Deutschland, Finnland, Frankreich, Schweden, Schweiz, und USA) werden detaillierter die endzulagernden Abfälle, das Sicherheitskonzept, das Endlagerdesign, die Herrichtung des Grubengebäudes, die Transport- und Einlagerungstechnologie sowie das Verfüll- und Verschlusskonzept beschrieben.

Die Bearbeitung des Arbeitspaketes 6 „Bau- und Instandhaltung von Endlagerbergwerken“ sowie des Arbeitspaketes 7 „Verfüll- und Verschlussmaßnahmen“ wird Anfang 2008 aufgenommen. Mit der Bearbeitung des Arbeitspaketes 9 „Genehmigungstechnische Aspekte“ wurde vorzeitig Ende 2007 begonnen. Hier wurden die jeweils national und übergeordnet geltenden gesetzlichen Regelwerke (Bergrecht, kerntechnisches Regelwerk,...) zusammengestellt und vergleichend betrachtet. Darüber hinaus wurde auch die Struktur der zuständigen Behörden recherchiert und beschrieben. Die bisherigen Ergebnisse dazu wurden in einem Berichtsentwurf zusammengestellt.

In regelmäßigen Projektgesprächen wurde der jeweils aktuelle Stand der Bearbeitung der Arbeitspakete vorgestellt, diskutiert und die Dokumentation der Ergebnisse mit dem Partner BGR abgestimmt. In diesem Zusammenhang wurden BMWi und der Projektträger PTKA in einem gesonderten Gespräch von BGR und DBE TECHNOLOGY GmbH über den Fortschritt der Arbeiten informiert. Im 2. Halbjahr 2007 fanden 2 Projektgespräche statt.

- 4. Projektgespräch am 13.09.2007
- 5. Projektgespräch am 06.12.2007

Zur Vorbereitung auf den Ende 2008 geplanten Abschlussbericht wurde dazu ein erster Entwurf einer Gliederung erstellt und innerhalb des Projektes zur Diskussion verteilt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Bearbeitung der Arbeitspakete gemäß abgestimmten Bearbeitungskonzepten und Zeitplan.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Str., 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10357</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2007 bis 31.03.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 798.105,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Curtius	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die 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 verlaufen ähnlich. Nach 6 Monaten Laufzeit ist eine vollständige Korrosion noch nicht erreicht.
- AP2: Nach 100 Tagen korrodierten in Salzlauge beide **unbestrahlten** FR-BE-Typen vollständig. In den Korrosionsprodukten (sekundäre Phasen) konnten kristalline Bestandteile (Mg-Al-Hydrotalkit und Lesukit) identifiziert werden. Die Matrixelemente U, Si und Al liegen quantitativ in den sekundären Phasen vor
- AP3: Sorptionsuntersuchungen mit Selenit in Tonporenwasser und in Salzlauge zeigten, dass sowohl der Mg-Al-LDH als auch ein Mg-Al-Eu-LDH /1/ diese endlagerrelevante Spezies sorbieren. /2/.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die Auslaugversuche mit bestrahlten FR-BE unterschiedlicher Zusammensetzung werden in den schwächer mineralisierten Wässern (Tonporenwasser und Wasser aus kristallinem Gestein) fortgeführt.
- AP2: Die Auslaugversuche mit unbestrahlten FR-BE-Typen in Tonporenwasser werden bis zur vollständigen Korrosion fortgeführt. Alsdann soll der Verbleib der Matrixelemente geklärt werden. Zudem sind weitere Untersuchungen zur Identifizierung der kristallinen Bestandteile der sekundären Phasen geplant.
- AP3: Weitere Sorptionsuntersuchungen mit Iodid und Pertechnetat sind geplant. Zudem soll versucht werden, ob es möglich ist ein vierwertiges Element in die LDH Struktur einzubauen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Hilde Curtius ; Kristian Ufer: *Eu incorporation behaviour of a Mg-Al-Cl layered double hydroxide*, Clays and Clay Minerals, **55** (4), 354 - 360 , 2007

H. Curtius, Z. Paparigas, G. Kaiser: *Sorption of selenium on Mg-Al and Mg-Al-Eu layered double hydroxides*, Transactions, p. 66, 11<sup>th</sup> International Conference on the Chemistry and Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere, Migration 2007, 26 to 31 August 2007 in München, Germany

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10367</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2007 bis 31.12.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.415.200,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Becker

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Arbeitsprogramm gliedert sich in fünf Arbeitspakete:

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

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

AP2: Erarbeitung eines neuen Programmkonzepts.

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

AP3: Codeumstellung und -entwicklung.

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

AP4: Steuerung des Programmablaufs und Anbindung an externe Programme.

Die einzelnen unabhängigen Programmmodule werden in drei Arbeitsschritten miteinander sowie mit externen Programmen verknüpft. Im ersten Schritt werden die globale Programmablaufsteuerung und der Datentransfer zwischen den Modulen neu organi-

siert. Die weiteren Arbeitsschritte dienen dem Anschluss an externe Programme zur statistischen Analyse und zur grafischen Visualisierung von Ergebnissen.

AP5: Test und Dokumentation.

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

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

Die Arbeiten zur Code-Analyse wurden fortgesetzt. Dabei lag der Schwerpunkt zunächst auf der Erfassung bestehender und bekannter Probleme und Fehler der existierenden Module. Einige Programmierarbeiten zur zunächst provisorischen Behebung solcher Probleme wurden durchgeführt. Die verschiedenen projektspezifischen Parallelversionen des Moduls LOPOS wurden zu einer universellen Version zusammengeführt, die als Grundlage für eine Überarbeitung des Programmcodes herangezogen werden kann. Zur Verifizierung wurden mit der vereinheitlichten Version mehrere frühere Studien nachgerechnet.

Zum Zweck des Know-how-Transfers wurde eine interne Seminarreihe veranstaltet, bei der Aufbau und Funktionsweise des Moduls LOPOS detailliert dargestellt und jüngeren Mitarbeitern erläutert wurden.

Im Rahmen zahlreicher interner Gespräche wurden mögliche Konzeptionen für den zukünftigen Aufbau des Gesamtpakets EMOS erarbeitet und diskutiert. Dabei wurden zunächst insbesondere Möglichkeiten zur Fehlervermeidung und -verfolgung sowie die Anbindung an ein Datenbanksystem diskutiert. Zur letztgenannten Thematik in Verbindung mit der Realisierung einer Bedienungsoberfläche wurde ein Unterauftrag vorbereitet.

Umfangreiche Arbeiten wurden auch zur Anbindung des Probabilistik-Werkzeugs SIMLAB durchgeführt. Die Schnittstelle wurde zunächst in einer MATLAB-Umgebung realisiert. Es wurden mehrere Testrechnungen durchgeführt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten zur Code-Analyse werden fortgeführt. Erkannte Fehler werden in den existierenden Modulen behoben, Optimierungsmöglichkeiten werden umgesetzt. Der Statistikrahmen wird ebenfalls auf Basis der vorhandenen Version überarbeitet. Damit sollen mangelbereinigte Abschlussversionen aller Module auf Grundlage des alten Programmkonzepts geschaffen werden.

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10377</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2007 bis 31.12.2011	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.784.515,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Zhang

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

Mine-By-Test:

Es wurden insgesamt 7 Minipackersonden zur Porenwasserdruckmessung installiert, die zusätzlich mit Widerstandsthermometern versehen sind. Vier Sonden wurden in selbst erstellten Bohrlöchern zwischen 24 und 38 m Länge (BMB1-4) installiert, die teilweise in den neu aufzufahrenden Tunnel reichen. Drei weitere Sonden sind in kurzen Bohrlöchern im Bereich der Ortsbrust der existierenden Gallery 04 installiert (BEZ-G6-8), an die der neue Tunnel anschließen wird. Die Messungen wurden im Oktober bzw. November 2007 aufgenommen. Inzwischen hat sich der gemessene Druck weitgehend stabilisiert und liegt um 9 bar (BMB) bzw. um 15 bar (BEZ-G); zwei Messstellen zeigen niedrigere Drücke an. An allen Messstellen wurden Wasserinjektionstests zur Permeabilitätsbestimmung durchgeführt.

Die folgende Labormodernisierungsarbeit wurde durchgeführt:

- Installation eines neuen Reglers in der großen MTS-Prüfanlage für Durchführung gekoppelter THM-Simulationsversuche an großen Tonkernen
- Installation eines Ultraschallmesssystems in einer Triaxialprüfanlage zur Bestimmung der Schädigung bzw. Verheilung von Tonstein
- Herstellung einer Prototype-Quelldruckzelle für die Messung des Quelldrucks und Quellverformung von Tonstein
- Umrüstung eines Kriechversuchsstands mit kontrollierter Luftfeuchtigkeit
- Entwicklung triaxialer Druckzelle für die Messung von Langzeitverformung unter triaxialen Druckspannungen und erhöhten Temperaturen.

### **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 Labormodernisierung und entsprechende Kalibrierung bzw. Testen der umgerüsteten Prüfanlagen

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10387</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2007 bis 30.04.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 205.565,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 (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**

Es wurden Inventardaten, besonders für die Massengüter in Endlagern d. h. für Baustoffe und Versatzmaterialien ermittelt. Daten zu solchen Materialien, die in der Asse und im ERAM zum Einsatz kommen, wurden gesichtet. Auf die Freigabe dieser Daten wird noch gewartet.

Die physikalisch-chemischen Modelle, die als Grundlage für Konzentrationsprognosen dienen und der Kenntnisstand zur chemischen Thermodynamik relevanter chemischer Stoffe wurde auf dem Statusgespräch, am 25.09.2007, präsentiert.

Es wurden Ausbreitungsszenarien in den Wirtsgesteinen Salz und Ton entwickelt und mit den Projektpartnern abgestimmt. Unter den Projektpartnern besteht Einigkeit darüber, dass die Modellrechnungen allein der Demonstration der geochemischen Modellierungswerkzeuge und der thermodynamischen Daten dienen und keinen Langzeitsicherheitsnachweis darstellen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der aktuelle Zeitplan sieht für das erste Halbjahr 2008 folgende Arbeiten vor:

- Abschluss der Arbeitspakete APII - ASII.4 im Februar 2008
- Abschluss des Arbeitspaketes APIII im Mai 2008
- Beginn der Bearbeitung der Arbeitspakete IV und V im März 2008
- ein Projektgespräch und ca. 1 - 2 Arbeitsgespräche nach Erfordernis

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> Öko-Institut e.V. - Institut für angewandte Ökologie, Merzhauser Straße 173, 79100 Freiburg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10397</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von In- strumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2007 bis 30.04.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 248.572,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 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 2007 fanden folgende Gespräche statt:

- 06.07.2007 Arbeitsgespräch zum AP1
- 17.09.2007 Projektgespräch zur Klärung der Schnittstellen zwischen AP2 und AP3 sowie zu den Bearbeitungsständen in den AP1 und AP2
- 25.09.2007 Statusgespräch zur Unterrichtung des Projektträgers über die erreichten Ergebnisse, die aktuellen Diskussionspunkte und das geplante weitere Vorgehen

Die Bearbeitung der Arbeitspakete AP1, AP2 und AP3 wurde im 2. Halbjahr 2007 fortgesetzt.

Wesentliche Ergebnisse sind:

AP1: Nationale und internationale Regularien wurden auf ihre Relevanz und ihre Übertragbarkeit im Hinblick auf die Genehmigung eines radioaktiven Endlagers mit chemotoxischen Inhaltsstoffen geprüft. Für verschiedene Anwendungsfälle aus den Bereichen Speicherung, Deponierung, Versatz und Verwahrung, jeweils in tiefen geologischen Formationen sowie für Endlager im In- und Ausland wurden die technischen und rechtlichen Randbedingungen ermittelt, unter denen chemotoxische Stoffe in den Anwendungsfeldern betrachtet werden.

AP2: Die für ein HAW-Endlager relevanten Abfallmaterialien, Verpackungen, Versatzstoffe und sonstigen Baumaterialien wurden auf ihr chemotoxisches Potential hin überprüft. Dabei wurden verschiedene Endlagerkonzepte und Wirtsgesteine berücksichtigt. Die Ergebnisse wurden unter den Projektbeteiligten diskutiert.

AP3: Die Voraussetzungen und die Herangehensweise für die zweidimensionalen Szenarienrechnungen wurden festgelegt. Die Schnittstellen zwischen AP2 und AP3 werden im weiteren Projektverlauf abgestimmt.

Die Bearbeitung erfolgte planmäßig.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Gemäß dem aktuellen Zeitplan ist für das erste Halbjahr 2008 geplant:

- Abschluss der Arbeitspakete AP1 und AP2 im Februar 2008
- Abschluss des Arbeitspaketes AP3 im Mai 2008
- Beginn der Bearbeitung der Arbeitspakete 4 und 5 im März 2008
- ein Projektgespräch und ca. 1 - 2 Arbeitsgespräche nach Erfordernis

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10407</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2007 bis 30.04.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 192.707,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 2007 fanden folgende Gespräche statt:

- 06.07.2007 Arbeitsgespräch zum AP1
- 17.09.2007 Projektgespräch zur Klärung der Schnittstellen zwischen AP2 und AP3 sowie zu den Bearbeitungsständen in den AP1 und 2
- 25.09.2007 Statusgespräch zur Unterrichtung des Projektträgers über die erreichten Ergebnisse, die aktuellen Diskussionspunkte und das geplante weitere Vorgehen

Die Bearbeitung der Arbeitspakete AP1, AP2 und AP3 wurde im 2. Halbjahr 2007 fortgesetzt.

Im AP1 wurde die regulatorische Situation dahingehend analysiert, ob Ausführungsbestimmungen erlassen worden sind, in denen die Vorgehensweise zum Nachweis der Einhaltung des Schutzziels des Wasserhaushaltsgesetzes (WHG) festgelegt ist. Weiterhin wurde untersucht, ob es für die Bewertung von Beeinträchtigungen des Grundwassers insbesondere im Hinblick auf die Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen unmittelbar geltende verbindliche Grenz- oder Richtwerte gibt. Nach einer rechtssystematischen Einordnung erfolgte die Beschreibung der Anforderungen aus den Fachrechten „Atomrecht“, „Wasserrecht“, „Abfallrecht“ und „Bergrecht“. Anhand einzelner Anwendungsfälle aus den Bereichen Speicherung, Deponierung, Versatz und Verwahrung, jeweils in tiefen geologischen Formationen sowie für Endlager im In- und Ausland wurde die Genehmigungspraxis dargestellt.

Im AP2 wurde das Inventar chemischer und chemotoxischer Stoffe eines HAW-Endlagers in Salz und Ton ermittelt. Dabei wurden neben Abfall- und Behältermaterialien der hochradioaktiven und wärmeentwickelnden radioaktiven Abfälle auch weitere im Zusammenhang mit der Endlagerung einzubringende Materialien, wie Ausbaumaterialien sowie Versatz- und Barrierematerialien aus Verfüll- und Verschlussmaßnahmen, berücksichtigt.

Im AP3 wurden die Voraussetzungen und die Herangehensweise für die zweidimensionalen Szenarienrechnungen festgelegt. Die Schnittstellen zwischen AP2 und AP3 werden im weiteren Projektverlauf abgestimmt.

Die Bearbeitung erfolgte planmäßig.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Gemäß dem aktuellen Zeitplan ist für das erste Halbjahr 2008 geplant:

- Abschluss der Arbeitspakete AP1 und AP2 im Februar 2008
- Abschluss des Arbeitspaketes AP3 im Mai 2008
- Beginn der Bearbeitung der Arbeitspakete 4 und 5 im März 2008
- ein Projektgespräch und ca. 1 - 2 Arbeitsgespräche nach Erfordernis

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10417</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Komplexbildung und Sorption dreiwertiger Actinide Am(III), Pu(III) im System Actinid-NOM-natürliches Tongestein-Aquifer		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2007 bis 30.04.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 293.420,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Bernhard	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Optimierung der Absorptionsspektroskopie mit einer Long-Path-Flow-Cell  
Etablierung und Optimierung dieser Methode für den Nachweis kleinster Am(III)-Konzentrationen ( $< 10^{-7}$  mol/l)
- AP2: Untersuchungen der Komplexreaktionen im System Am(III)-NOM und Am(III)-Modellligand  
Bestimmung der Komplexbildungskonstanten von Am(III) mit sauerstoffhaltigen Huminstoff-Modellliganden, mit verschiedenen Huminsäuren, mit Tonorganika unter Standardbedingungen ( $I = 0.1$  mol/l NaClO<sub>4</sub>, Temperaturen von 20 °C > T > 80 °C, pH von 2 > 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

Zur Durchführung der geplanten absorptionspektrometrischen Untersuchungen mit kleinen Konzentrationsbereichen wurde aus den beantragten Projektmitteln das faseroptische Absorptionsspektrometer (MCS601, Fa. Carl Zeiss, Jena) und die Long-Path-Flow Zelle beschafft und in Betrieb genommen, ebenso die beantragte Inertgasbox (Fa M. Braun).

Erste Untersuchungen zur Verifizierung des Spektrometers und der erforderlichen experimentellen Prozeduren erfolgten mit der Bestimmung der Nachweisgrenze von Eu(III) als inaktives Analogon zu Am(III) (exp. Bedingungen:  $\text{pH} = 4.0$ ,  $I = 0.1 \text{ mol/l}$ ,  $c: 1e-4$  bis  $1e-7 \text{ mol/l}$ , Pfadlänge: 2 m). Die Optimierung der experimentellen Prozedur zur Handhabung der Long-Path-Flow Zelle umfasste:

- Optimierung hinsichtlich kleiner Probenvolumina (benötigtes Probenvolumen ca. 1 ml)
- Vorbehandlung der Proben (Filtration mittels Zentrifugalfilter und Behandlung im Ultraschallbad zur Vermeidung des Eintrages von Partikeln und Luftblasen in die Long-Path-Flow Zelle)

Es wurde eine Nachweisgrenze für Eu(III) von  $\sim 5.0e-7 \text{ mol/l}$  bestimmt (zum Vergleich: mit einer 1 cm Küvette liegt die Nachweisgrenze bei  $\sim 1e-4 \text{ mol/l}$ ). Übertragen auf Am(III) mit einem ca. 100fachen höheren Extinktionskoeffizienten gegenüber Eu(III) wäre hier eine Nachweisgrenze von  $\sim 5.0e-9 \text{ mol/l}$  zu erwarten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im 1. HJ 2008 sollen die experimentellen Arbeiten zur Optimierung der Prozeduren zur Absorptionsspektrometrie von Actiniden mit einer Long Path Flow Zelle beendet werden. Diese Arbeiten beinhalten temperaturabhängige absorptionspektroskopische Untersuchungen zur Komplexierung von Eu(III) mit HS-Modellliganden (laufende Arbeiten derzeit mit Salicylsäure) und HS unter Standardbedingungen. Analoge Arbeiten werden dann mit Am(III) durchgeführt. Ergänzende Untersuchungen werden mit TRLFS am FZ Dresden-Rossendorf, Institut für Radiochemie durchgeführt. Die entsprechenden thermodynamischen Daten der Komplexreaktionen (Gleichgewichtskonstanten, Enthalpie, Entropie) sollen berechnet werden.

Die temperaturabhängigen (Langzeit)Batchsorptionsversuche von Am(III) mit dem Opalinuston unter verschiedenen Bedingungen sollen begonnen werden. Hierzu werden die Prozeduren zur Bestimmung der Am(III)speziation mittels Absorptionsspektrometrie mit der Long Path Flow Zelle anhand analoger Untersuchungen mit inaktiven Eu(III) getestet und optimiert.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> TU Clausthal, Adolpf-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10427</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 586.331,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Überlegungen innerhalb der Bundesregierung, neben Salzgestein auch Tongestein als mögliches Endlager- Wirts- und Barrierengestein in Betracht zu ziehen und vergleichende Untersuchungen zu sicherheitlichen Vor- und Nachteilen zumindest auf generischer Ebene vorzunehmen, erfordern eine intensive wissenschaftliche Auseinandersetzung mit den endlagerrelevanten Eigenschaften der Tongesteine und ihrer Reaktion auf den technologischen Eingriff mit Auffahrungen, Abfallablagerung und Stilllegungsmaßnahmen. Vor diesem Hintergrund ist in dem Vorhaben 02E9632 vom Unterzeichnenden der Übertragbarkeit von etablierten Stoffmodellen aus dem Salinarbereich auf das Tongestein nachgegangen worden. 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, sodass 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, erste orientierende Aufarbeitung der zur Verfügung gestellten Daten und Einarbeitung in bestehende Unterlagen Tournemire.
- 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.
- 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.
- AP4: Aufarbeitung vorhandener laborativer Erkenntnisse aus der verfügbaren Literatur; Zusammenstellung von Materialdaten vor dem Hintergrund der geplanten numerischen 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; Planung weiterer Versuchsreihen zur Identifizierung von grundsätzlichen Alterungsaspekten im Rahmen des Verformungs- und Kurzzeitfestigkeitsverhaltens.
- AP7: Aufbau eines eines 3-dimensionalen (3D) Berechnungsmodells zur Simulation des Gebirgstragverhaltens am Beispiel des alten Tunnels aus dem Jahre 1881.
- AP8: Durchführung erster orientierender numerischer Simulationen zum Gebirgstragverhalten mit Materialdaten aus AP4.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weitere Aufarbeitung der zur Verfügung gestellten Daten und Unterlagen Tournemire; Dokumentation und Erarbeitung von Datendefiziten vor dem Hintergrund geplanter numerischer Simulationen im Rahmen der Aufgabenstellung.
- AP2: Planung einer weiteren Bohrkernbeschaffungskampagne im 2. Hj. 2008 am Standort Tournemire in Absprache mit IRSN.
- AP3: Optimierung der Arbeiten, Durchführung weiterer Messungen.
- AP4: Dokumentation, Erarbeitung von Defiziten.
- AP5: Planung und Durchführung von weiteren Versuchsserien 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 Zwischenlagerbehältern; Porendruckmessung während der Versuche.
- AP6: Ableitung eigener Materialkennwerte.
- AP7: 3D-Berechnungen haben sich als sehr zeitaufwendig herausgestellt; ergänzend sind 2D-Modelle erarbeitet worden mit den zunächst Parameter- und Sensitivitätsanalysen durchgeführt werden; Aufbau weiterer 2D und 3D-Berechnungsmodelle entsprechend den vorhandenen Auffahrungen (Querstellen).
- AP8: Herausarbeitung grundsätzlicher numerischer Erfahrungen im Tonsteingebirge durch Stoffmodell- / Parametervariation an Referenzmodellen aus AP7 im Tonsteingebirge mit dem FDM-Programmsystem FLAC3D.
- AP9: Gegenüberstellung der Ergebnisse aus AP8 mit Arbeiten aus AP1.
- AP10: Diskussion der Ergebnisse im internationalen Rahmen.
- AP11: Dokumentation der Forschungsarbeiten, Generalisierung der Befunde, Erarbeitung eines Abschlussberichtes.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bauhaus-Universität Weimar, Geschwister-Scholl-Str. 8, 99423 Weimar		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10437</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2007 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 290.316,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schanz	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

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

- Die Auslieferung der experimentellen Versuchsgeräte hat sich signifikant verzögert und ist im Berichtszeitraum noch nicht erfolgt.
- Es erfolgte eine Einarbeitung in die theoretische Modellierung der Permeabilität von quellfähigen Tonen (Stand der Forschung).

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Validierung und Kalibrierung der experimentellen Ausrüstung/Versuchszellen.
- Berücksichtigung von physico-chemischen Kräften in den theoretischen Modellen der Permeabilität.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IBeWA Ingenieurpartnerschaft für Bergbau, Wasser- und Depo- nietechnik Wilsnack & Partner, Lessingstr. 46, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10447</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilitätsmessung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von In- strumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2007 bis 30.09.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 180.978,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Wilsnack

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Entwicklung einer Versuchsmethodik und -apparatur zur Ermittlung der oberflächennahen Permeabilität von Gesteinsformationen und/oder Bauwerken.

Die Entwicklung des Verfahrens ist die Grundlage für die Ermittlung der Permeabilität an der Kontur von Gebirgsformationen. Die damit ermittelbaren Parameter bilden eine wesentliche Grundlage für die Konzipierung und Dimensionierung von hydraulischen Querschnittsabdichtungen für untertägige Hohlräume.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Erstellung eines Lastenheftes

AP2: Entwicklung eines Konzeptes für die Versuchsausrüstung und die Versuchsdurchführung

AP3: Konstruktion, Planung und Bau der Versuchsausrüstung

AP4: Entwicklung Auswertesoftware

AP5: Test und Korrektur der Versuchsausrüstung

AP6: Berichtslegung

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

Im Berichtszeitraum wurden Teilleistungen zu den Arbeitspaketen 1 und 2 realisiert.

Formulierung des Lastenheftes und der Anforderungen an den Aufbau der Messapparaturen, die Konfiguration der Messung und die Datenerfassung:

- Durchführung von orientierenden Simulationsrechnungen mit dem Programmsystem TwoPhase (keine Auswertungssoftware; Programmsystem zur Simulation der 3-dimensionalen Mehrphasenströmung in porösen Materialien) zur Beurteilung der Zusammenhänge zwischen Permeabilität und u. a. erforderlichen Abmaßen des Oberflächenpackers, Konfiguration der Prüf- und ggf. Kontrollräume, Messtakt, Positionierung der Drucksensoren und Messgenauigkeit für die Druckmessungen
- Formulierung von grundsätzlichen Anforderungen an die Materialauswahl für die Dichtung, den Grundkörper des Oberflächenpackers (bezüglich der Dichtungsmaterialien wurde Kontakt zu unterschiedlichen Anbietern von Ring- und Flächendichtungen hergestellt) und die Bereitstellung von Materialmustern vereinbart.
- Recherchen zu Konzepten der Fixierung des Oberflächenpackers (Recherche zu den unterschiedlichen Systemen der Gebirgsankerung und den Möglichkeiten der Aufnahme von Zuglasten durch entsprechende Ankerungen; Recherche Hydraulikstempeln).

Projektkoordinierung/Organisation:

- Abstimmung Arbeitsprogramme mit RCS-Technik Rössel
- Abstimmung Angebot TU Bergakademie Freiberg / Vertragsvorbereitung

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fortsetzung des Projektes entsprechend Arbeitsprogramm (Abschnitt 2) mit den Arbeitspaketen 1 und 2.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> TU Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10457</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2007 bis 31.03.2010		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.11.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 652.391,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Konietzky

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Vorarbeiten zur automatischen Generierung der Geometrie heterogener Systeme (AP3.2 mit AP1.1, AP2.1). Zuschlagsstoff, Bindemittel, Poren im Korngrößenbereich werden als einzelne Elemente abgebildet, entweder als Kugeln (PFC3D) oder als Polyeder (3DEC).

Darstellungen der heterogenen Systeme als Kugelpackungen mittels HCSS-Algorithmus und Force-biased Algorithmus generiert. HCSS-Programm wurde für Packungen beliebiger Form und Größe (quader- oder zylinderförmig) modifiziert. Damit erzielbare Packungsdichte ist gut geeignet zur Erzeugung von Kugelpackungen als Vorstufe für Polyederpackungen.

Zur Erzeugung von Polyeder- aus Kugelpackungen wurde der Algorithmus Voronoi-Radical angepasst: im Weiteren sind wesentlich größere Datenmengen (mehr als 100000 Kugeln) generierbar, Modul zur Wandlung der programminternen Darstellung der Polyederpackungen in Inputdaten für Simulationsprogramm 3DEC entwickelt, Bereitstellung geometrischer Zusatzinformationen ( z. B. Seitenflächenanzahl pro Polyeder). Die Routinen wurden ausgetestet, Kugel- und Polyederpackungen für verschiedene Korngrößenverteilungen berechnet.

Problematisch (Rechenzeit, Speicherplatz) ist die hohe Zahl von Feinkorn-Elementen, deshalb Zuschlag nur ab gewisser Korngröße diskret abbildbar, Rest zum modifizierten Bindemittel.

Vorläufiger Versuchsplan für MgO-Beton (AP1.4) aufgestellt, Messmethodiken festgelegt, Materialbeschaffung organisiert.

Geometrische Analyse der Zuschlagsstoffe ist sehr komplexes Problem (AP1.1, AP2.1), mit Testmessung am CPA-Gerät begonnen.

Konzeptentwicklung zur Aufrüstung der technischen Einrichtungen gemäß Versuchsplan in Angriff genommen: Automatisierung der Dauerlast-Versuchsstände, Beschaffung Bruchfähigkeitsmessplatz.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Weiterführung Strukturanalyse/Modellentwicklung Asphalt, Umsetzungskonzept

AP2: Weiterführung Strukturanalyse/Modellentwicklung MgO-Beton, Umsetzungskonzept

AP3: Weiterführung Routinen zur Mikrostrukturerzeugung

AP4: Planung und Beginn der Experimente für Asphalt

AP5: Experimente zum MgO-Beton laut vorläufigem Versuchsplan, CPA-Analyse des Zuschlags (Kornform, Korngrößenverteilung)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> Institut für Sicherheitstechnologie (ISTec) GmbH, Forschungsge- lände, 85748 Garching b. München		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 10467</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von In- strumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2007 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 407.850,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Alkan	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### *AP1: Erweiterung der thermodynamischen Datenbasis*

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

### *AP2: Numerische Implementation*

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

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

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

Das ECO2N Zustandsgleichungsmodul des TOUGHREACT wird weiter für eine bessere  
Modellierung der CO<sub>2</sub>- und CH<sub>4</sub>-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**

Eine Literaturstudie über die letzten Entwicklungen im Bereich reaktiver Strömungen und ihrer Modellierung wurde durchgeführt. Die Arbeiten für die numerische Implementation sind gestartet. Die letzte Version des Codes TOUGHREACT mit gekoppeltem Pitzer Modell wurde nach Rücksprache mit Herrn Zhang von Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, USA ausgeliefert. Die Installation, Einarbeitung und Validierung wurden durchgeführt. Testfälle wurden konzipiert und angewendet. Die Koppelung des Kompaktionsverhaltens wurde, basierend auf früheren vergleichbaren Arbeiten von ISTec für TOUGH2, in TOUGHREACT realisiert. Die Tests und Validierung dauern noch an.

**4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Projektarbeiten werden wie geplant mit den Arbeitspunkten AP1 „Erweiterung der thermodynamischen Datenbasis“ und AP2 „Numerische Implementation“ fortgesetzt.

**5. Berichte, Veröffentlichungen**

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10477</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2007 bis 30.09.2008		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 153.625,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Kröhn	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

Es wird ermittelt, welche Prozessabläufe hinsichtlich des vollständigen Einschlusses eine besondere Signifikanz besitzen, 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**

Die Bestandsaufnahme zu AP1 wurde in Form einer formalisierten Datenblattsammlung durchgeführt. Kriterien für die Relevanz der Daten und Informationen im Hinblick auf die Projektziele wurden erarbeitet. Eine Zusammenstellung der relevanten Ergebnisse ist zurzeit in Arbeit.

Es wurde begonnen, für die orientierenden Modellrechnungen in AP2 die zugrunde zu legenden Szenarien festzulegen.

Während des Berichtszeitraums fanden zwei Treffen mit den Mitgliedern des Verbundprojektes statt. Erste Diskussionen zu AP4 über die Auslegung eines In-situ-Experiments fanden dabei statt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 10487</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2007 bis 30.09.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 149.212,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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. Die mit Kursivdruck hervorgehobenen AP's werden von der DBE Technology anteilig oder federführend (AP4) übernommen.

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 langzeitlich erreichbaren Restporosität und –permeabilität*  
(Bearbeiter: BGR, DBE TEC, GRS)

AP5: *Auswertung und Berichterstellung*  
(Bearbeiter: BGR, DBE TEC, GRS)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum fanden folgende Gespräche statt:

- 13.11.2007 Projektgespräch REPOPERM, Abstimmung und Koordination geplanter Arbeiten (2. Halbjahr 2007)
- 11.12.2007 Projektgespräch zum Stand der Datenrecherche, Erarbeiten von Bewertungskriterien zur Eignung erhobener Datenquellen und –sätze.

AP1: Eine umfassende Recherche und Zusammenstellung national und international verfügbarer Stoffdaten wurde hinsichtlich der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung und des Kompaktionsverhaltens von Salzgrus durchgeführt. Die resultierende Datensammlung wurde in einem ersten Durchlauf unter Berücksichtigung gemeinsam erarbeiteter Kriterien zur Übertragbarkeit bewertet.

AP4: Erste orientierende Berechnungen zur Auslegung des für Phase II des Projektes geplanten In-situ-Versuches wurden durchgeführt. Anhand dieser modelltheoretischen Untersuchungen konnten versuchsrelevante thermische Randbedingungen variiert (Wärmefreisetzung der Einlagerungsbehälter) bzw. verifiziert (Prognose des Temperaturfeldes im Bereich des Bohrlochverschlusses) werden.

AP5: Planmäßig wurden in diesem AP innerhalb des Berichtszeitraumes keine Arbeiten durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Fortführung der Arbeiten ist in Übereinstimmung mit der Vorhabensplanung vorgesehen. Gemäß dem aktuellen Zeitplan ist für das erste Halbjahr 2008 geplant:

- Abschluss des Arbeitspaketes AP1 und Erstellen eines Zwischenberichtes,
- Zusammenstellung der für die orientierenden Simulationen der AP2 bis AP4 notwendigen Modell- und Stoffparameter,
- Fortführung der Prognoseberechnungen zur Auslegung des In-situ-Versuches,
- Ausführungsplanung eines In-situ-Versuches,
- Erstellen eines Messkonzeptes für den Großversuch sowie
- Projektgespräche und Arbeitsgespräche nach Erfordernis.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine



## **2.2 C-Vorhaben**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Karlsruhe (TH), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 0922</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verschlussystem mit Äquipotenzialsegmenten für die untertägige Entsorgung (UTD und ELA) gefährlicher Abfälle zur Sicherstellung der homogenen Befeuchtung der Dichtelemente und zur Verbesserung der Langzeitstabilität		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2002 bis 28.02.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.226.844,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Schumann	

### 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

Kalk-Kaolin Ratio: Der Steigversuch zum Kalk-Kaolin-Verhältnis in destilliertem Wasser ist rückgebaut. Offensichtlich wirkt der Kalk als Beschleuniger. Das Verhältnis 10 % Kaolin, 20 % Kalk und 70 % Feinsand (M103) erwies sich als sehr geeignet (hohe Kapillarität, geringe Setzungen bei Befeuchtung). Die Feuchteverteilung spiegelt die Steighöhen/Steiggeschwindigkeit wieder.

Arginotec und FS700: Es wurden schluffige Materialien (Arginotec und FS700, ein Quarz-Feldspat-Gemisch, QF) in die Säulentests aufgenommen. Der Kaolinanteil wurde auf 5 % reduziert und durch die neuen Materialien ersetzt. Versuche mit Salzwasser und „Dest“ wurden parallel gestartet.

Tatsächlich bewirkt der Schluff eine zusätzliche Stabilität durch die höhere Einbaudichte. Die Wasserfront ist ausreichend schnell, wobei QF grundsätzlich schneller laufen. Alle Säulen haben unter destilliertem Wasser die 3 m Marke erreicht. Die Setzung ist noch geringer. In 2 weiteren Säulen wurde auf zusätzlichen Kaolin verzichtet. Mit der Mischung 60 % N45, 20 % Kalk und 20 % QF wurde in einem halben Jahr 317 cm erreicht. Auch mit Lauge ist diese Mischung hinreichend schnell.

Synthetisches Gelblehm und Rheinweißmaterial: Es wurde Gelblehm und Rheinweiß synthetisch mit Arginotec, FS700 und BMK Kalk nachgebildet. Diese 2 synthetischen Mischungen wurden mit „Dest“ und Lauge gestartet. Der synthetische Gelblehm zeigt sehr gutes Steigverhalten (besser als der natürliche), jedoch deutliche Setzungen. Der synthetische Rheinweiß entspricht in der Geschwindigkeit dem natürlichen, auch hier sind starke Setzungen zu erkennen. Diesen Materialien fehlen offensichtlich das Gerüst bzw. stabile Aggregate. Diese Setzungen führen zu Abrissen und daher teilweise unterbrochenen Wasserbewegungen. Diese Mischungen sind als ÄS ungeeignet.

Mischung 1000: Auf Basis der vorangegangenen Erkenntnisse wurde ein optimiertes Material aus 30 % N45 als Gerüst, 20 % Kalk wie beim M103 und 40 % FS700 sowie 10 % Arginotec designed. Dieser Ver-

such läuft mit Lauge und destilliertem Wasser parallel. Bereits nach 120 Tagen ist er bei 300 cm angekommen und ist dabei sehr stabil hinsichtlich Setzungen. Das Verhalten bestätigt sich auch in Lauge. Diese Mischung wurde im HTV-3 verwendet.

Turmversuch: Mit den neuen Materialien wurde ein Turmversuch aufgebaut und mit Vordruck gestartet. Binnen 2 Tagen wurde 24 Liter Lauge zugeführt, dann aber wegen Undichtigkeit druckfrei angeboten. Die verschiedenen Materialien zeigen das erwartete Verhalten hinsichtlich kapillarem Steigen und Setzungen. Der Versuch wurde abgebrochen, da eine weitere Zufuhr von Lauge teilweise aus dem undichten System austrat und so keine quantitative Bilanzierung mehr möglich wurde.

Umwandlung Calcigel in Na-Form zur Quantifizierung der Umwandlung des Bentonits in den HTV Versuchen: Die niedrigen KAK-Werte nach der Salzdurchströmung konnten noch nicht geklärt werden. Dafür konnten die austauschbaren Kationen trotz der hohen NaCl-Konzentration in der Matrix gemessen werden. Im DS2 des HTV-1 beobachteten wir kinetische Effekte. So konnten wir über den Sandlinsen im Bentonit eine starke Umwandlung des Ca/Mg-reichen Bentonits in die Na-Form nachweisen, während der Bentonit auf der ungestörten Seite im DS2 noch nahezu in seiner natürlichen Belegung vorlag. Die gestörte Seite war ca. 4-5 Monate länger der Salzlauge ausgesetzt. Die ausgewählte Ebene zeigte im Wassergehalt und Chloridgehalt eine völlig homogene Verteilung.

#### **AP3: Numerische Simulation**

Das Arbeitsprogramm wurde mit der Bauhaus-Universität Weimar erarbeitet und abgestimmt. Es soll der HTV-1 nachmodelliert werden und abschließend ein Realbeispiel (evtl. Heilbronn) berechnet werden. Die vertraglichen Voraussetzungen dazu wurden geschaffen.

#### **AP4: Versuche im halbtechnischen Maßstab**

Der in der Technikumshalle in der Bergakademie der TU Freiberg aufgebaute Halbtechnische Versuch (HTV2) in waagrechter Ausrichtung als Streckenverschluss wurde im August 2007 beendet und rückgebaut. Die ersten Ergebnisse wurden in der September-Sitzung vorgestellt (siehe Protokoll unter [www.untertageverschluss.de](http://www.untertageverschluss.de)): die positiven Ergebnisse aus dem HTV-1 haben sich bestätigt, mehr noch, der Verschluss ist auch schichtweise geometrisch stabil geblieben. Die Funktionsfähigkeit der Folge ÄS/DS wurde belegt. Die vorlaufende Feuchtefront im Sohlenbereich führte nicht dazu, trotz Schwächung der DS in diesem Bereich, dass die DS durchbrechen. Auch die Randzonen zeigen sich stabil und dicht (Firste).

Der HTV-3 wurde mit veränderter Geometrie, wie vorgestellt, im November 2007 gestartet. Schon nach 40 Tagen wurde die Druckbeaufschlagung auf über 90 bar gefahren. Die anfänglichen Druckstöße wurden, trotz leichter Wegigkeiten entlang der Sensoren, vom Verschluss-System aufgenommen und gepuffert. Der Einfluss der Kontaktzeit Lauge-Bentonit auf die Umwandlung des Bentonits soll parallel quantifiziert werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Derzeit werden einige Versuche rückgebaut um einem Variogramm mit dem M1000 Platz zu geben. Es sollen 5 Säulen mit M1000 mit dest. parallel gestartet werden, wobei 3 Säulen wie bisher von oben in der Apparatur befüllt werden und 2 erst nach Befüllen unter Schräglage in die Apparatur eingebaut werden. Dies soll mögliche Entmischungen beim Befüllen aufdecken. Dazu sollen 2 Säulen mit Lauge beaufschlagt werden. Eine weitere wird mit natürlichem Gelblehm bestückt, der zusätzlich mit Sand stabilisiert wurde.

Der HTV-3 wird weiter geführt, um möglichst lange Kontaktzeiten Bentonit/Lauge sicherzustellen und die Funktion der geometrisch reduzierten Systemelemente zu belegen.

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

Der Projektstand wurde im Januar 2008 per Protokoll mitgeteilt. Auf der Homepage ([www.untertageverschluss.de](http://www.untertageverschluss.de)) ist ein ausführlicherer Sachstandsbericht dazu eingestellt.

Publikationen: 2 Publikationen zur Veröffentlichung in Engineering Geology und in Vadose Zone Journal sind mittlerweile reviewed und resubmitted/in press.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> TU-Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2 A, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 0952</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Modellentwicklung zur Gaspermeation aus unterirdischen Hohlräumen im Salzgebirge		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2002 bis 31.03.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 900.398,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Pusch	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Für die Standortbewertung von unterirdischen Deponien zur Einlagerung von Abfällen sind sicherheitstechnische Untersuchungen und Modellrechnungen zur Schadstoffausbreitung ein wesentlicher Bestandteil der Analysen. Durch Laboruntersuchungen und In-situ-Messungen sollen belastbare Grundlagen über das mechanische und hydraulische Stoffverhalten des Salzes gegenüber einer Gasphase und über die Prozessformen, die dieses Verhalten steuern erarbeitet werden.

Im experimentellen Programm werden laborative Messungen der Gaspermeation an ungestörten Salzkernen und Untersuchungen der Kapillar- und Gassperrdrücke an Salzpresslingen und Sandsteinreferenzmaterial zur Korrelation der Prozessabläufe mit dilatant aufgelockerten Salzkernen in Anwesenheit einer Restlauge durchgeführt werden. In-situ-Gasinfiltation- und Gasfrac-Versuche zur Bestimmung des Druckaufbaus (Sperr- bzw. Fracdruck und Messungen des Gastransports bei gleichzeitiger räumlicher Lokalisierung des gebildeten Rissystems durch Schallemissions- und Durchschallungsmessungen) bilden das Feldexperimentprogramm.

Die aus den Untersuchungen abgeleiteten Ergebnisse sollen eine sichere Basis für die Prozesssimulation der Gasausbreitung aus einem unterirdischen Grubenbau in das Wirtsgestein bilden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Vorhaben umfasst folgende Arbeitspunkte:

AP1.1: Kapillar- und Gassperrdruckmessungen

1.2: Gaspermeationstests

1.3: Triaxuntersuchungen

1.4: Gasfrac-Untersuchungen

AP2.1: Gasinfiltationstests in der Grube Bernburg

2.2: Gasfrac-Versuche in der Grube Bernburg

2.3: Akustische Messungen

AP3.1: Modellierung der Permeationstests

3.2: Modellierung des gesteinsmechanischen und pneumatischen Zustandes

AP4: Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Triaxialversuche, bei denen Hexan, und nachfolgend Stickstoff und Salzlösung als strömendes Medium verwendet wird, um die hydraulischen Eigenschaften von deviatorisch belasteten Salzkernen beim Einsatz unterschiedlicher Fluide zu bestimmen und somit einen direkten Vergleich der Fluid- - Matrixwechselwirkungen zu ermöglichen.
- Gasdruckerhöhung in Stufen im in-situ Versuch Bernburg mit anschließendem Frac bei 14 MPa Gasdruck, Bestimmung der Permeabilität aus dem Abströmverhalten
- Refracversuch durch Erhöhung des Gasdruckes auf 12 MPa beim in-situ Langzeitdrucktest in der Grube Bernburg.
- Wechsel des Mediums von Stickstoff auf Salzlösung mit anschließender Druckerhöhung in Stufen.
- Fortführung der akustischen Emissionsmessungen in der Grube Bernburg.

Die Messungen mit Hexan, Stickstoff und Salzlösung als Strömungsmedien zeigen, dass keine markanten Unterschiede beim Fluidtransport zwischen einem Gas und einer dem Salz gegenüber inerten Flüssigkeit bestehen und deuten auch darauf hin, dass ein im Prinzip reaktives Strömungsmedium wie Salzlösung sich in der Anfangsphase ähnlich verhält. Längerfristig kommt es bei Salzlösung jedoch meistens zu einer signifikanten Änderung der Permeabilität. Hierbei gibt es zwei gegensätzliche Effekte, Auflösungserscheinungen und vermutlich aufgrund von Ausfällungen Verstopfungen, die die Durchlässigkeit um über drei Größenordnungen ändern können. Eine Vorhersage, welcher der beiden Mechanismen unter welchen Bedingungen der dominierende ist, kann bisher noch nicht getätigt werden.

Beim in-situ Versuch in Bernburg ist es durch die stufenweise Erhöhung des Gasdruckes bis 14 MPa jeweils zu einem druckbedingten Anstieg der Abströmraten gekommen. Nach kurzer Standzeit bei 14 MPa Gasdruck hat ein diskontinuierliches Abströmen des Gases über die Formation stattgefunden, wobei sich der Gasdruck auf einem Druckniveau von ca. 10,5 MPa wieder stabilisiert hat, d. h. die ursprüngliche Dichtheit vor dem Gasdurchbruch hat sich fast vollständig wieder hergestellt. Der gemessene Gasaufreißdruck liegt mit 14 MPa deutlich über der mit Hydrofrac bestimmten Gebirgsspannung von 13 MPa, ohne dass es während des Gasdurchbruches Hinweise auf einen singulären Riss im Sinne eines Gasfracszenario, z. B. durch eine erhöhte mikro-seismische Aktivität, gegeben hat. Diese hohe pneumatische Zugfestigkeit wird im Labor nicht beobachtet und die Effekte der Permeabilitätszunahme sind mit kleiner als vier Dekaden deutlich geringer als nach dem Ergebnis der Laboruntersuchungen zu erwarten wäre. Als Mechanismus für das aufgetretene Ereignis wird eine integrale Permeation infolge druckinduzierter Aufweitung vorhandener Fließwege in Richtung geologischer Inhomogenitäten angesehen. Die Ausdehnung der gasdruckbeeinflussten Zone beim Gasdurchbruch liegt infolge des begrenzten Gasvolumens der Untersuchungsbohrung im Meterbereich, wobei die bisher zur Berechnung der integralen Permeabilität verwendeten rotationssymmetrischen Transportmodelle die realen Abströmverhältnisse mit inhomogener Gasausbreitung unzureichend beschreiben.

Nach der Entspannung des Bohrloches auf 1 MPa, wurde kein Rückströmen von Gas beobachtet. Bei der erneuten stufenweisen Gasdruckbelastung sind die gemessenen Abströmraten geringer als im 1. Zyklus, mutmaßlich als Folge der bereits im Gebirge vorliegenden Gasdruckbelastung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden programmgemäß weitergeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 0983</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Komplettierung der Datenbasis zur Modellierung der Schwermetallmobilisierung in salinaren Systemen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponienkonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2003 bis 30.09.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 30.09.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 682.290,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hagemann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In Ergänzung und Fortführung abgeschlossener FuE-Vorhaben Erstellung einer konsistenten thermodynamische Datenbasis zur Modellierung umweltrelevanter geochemisch-aquatischer Prozesse der Elemente Quecksilber, Arsen, Kupfer, Chrom, Nickel, Mangan und Kobalt. Grundlage sind eine kritische Literaturlauswertungen und ergänzende experimentelle Untersuchungen.

Zugänglichmachung der Datenbasis durch Publikation in Fachzeitschriften durch Bereitstellung über das Internet. Entwicklung einer interaktiven Datenbankstruktur, die die Erzeugung und Anwendung qualitätsgesicherter, konsistenter und ausreichend dokumentierter und anwendungsprogrammspezifischer Parametersätze erlaubt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Vervollständigung der Parametersätze für Kupfer(II), Nickel(II), Chrom(III) und Chrom(VI)
- Erstellung einer thermodynamischen Datenbasis für Kobalt(II), Mangan(II) und Kupfer(I)
- Erstellung einer thermodynamischen Datenbasis Arsen(III) und Arsen(V)
- Physikalisch-chemische Eigenschaften von Quecksilber(II) in salinaren Lösungen
- Dokumentation und Publikation der Datenbasis, internetbasierter Zugriff

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die Titration arsenithaltigen Lösungen wurde abgeschlossen.
- Die isopiestic Messungen an arsenathaltigen Lösungen wurden abgeschlossen. In allen untersuchten Systemen –  $\text{NaCl-Na}_2\text{HAsO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{NaCl-NaHAsO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{KCl-K}_2\text{HAsO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{KCl-KH}_2\text{AsO}_4\text{-H}_2\text{O}$  wurde ein nichtideales Verhalten angetroffen. Das bedeutet, dass ternäre Wechselwirkungen in allen drei Fällen einen wesentlichen Einfluss auf die Aktivitätskoeffizienten der beteiligten Ionen haben.
- Es wurden Löslichkeitsversuche in den Systemen  $\text{NiSO}_4\text{-CaSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{CuSO}_4\text{-CaSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ ,  $\text{CoSO}_4\text{-CaSO}_4\text{-H}_2\text{O}$  und  $\text{MnSO}_4\text{-CaSO}_4\text{-H}_2\text{O}$  durchgeführt. In allen Fällen werden ähnliche Entwicklungen beobachtet: Mit zunehmender Metallsulfatkonzentration nimmt die Löslichkeit von Gips zunächst ab, steigt dann an und beginnt anschließend oberhalb einer Konzentration von 1 mol/kg wieder kontinuierlich abzunehmen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Anfertigung des Abschlussberichtes.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 0993</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Geochemische Modellierung des Langzeitverhaltens von silikatischen und alumosilikatischen Materialien im Temperaturbereich 30 °C bis 90 °C		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponienkonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2003 bis 31.12.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 580.968,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

Die Versuche zur Bestimmung von Löslichkeiten amorpher Kieselsäure bei Temperatur zwischen 30 °C und 90 °C konnten abgeschlossen werden. Es finden z. Z. nur noch Nachmessungen einzelner Systeme statt. Bei den Löslichkeitsmessungen der Kieselsäure wurden die folgenden binären Systeme betrachtet:

- NaCl-H<sub>2</sub>O-H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub>, KCl-H<sub>2</sub>O-H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub>, CaCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O-H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub>, K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O-H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub>

Bei den ternären Systemen handelte es sich um:

- NaCl-KCl-H<sub>2</sub>O-H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub>, KCl-CaCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O-H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub>, NaCl-CaCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O-H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub>

In dem vergangenen Berichtszeitraum wurde mit den isopiesticen Versuchen der Al-Systeme begonnen. Die Versuche bei 45 °C werden in einem Wasserbecken, entsprechend den Versuchen bei 25 °C, durchgeführt. Es handelt sich um die Systeme:

- Al-Na-Cl-H<sub>2</sub>O, Al-K-Cl-H<sub>2</sub>O, Al-Ca-Cl-H<sub>2</sub>O,
- Al-Na-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O, Al-K-SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O

Des Weiteren wurde im vergangenen Berichtszeitraum eine Methode zur Bestimmung von Pitzer-Koeffizienten mittels Isopiestic für Temperaturen oberhalb von 50 °C entwickelt. Wesentliche Veränderung des Aufbaus bestehen im sofortigen Verschluss der einzelnen Tiegel nach Öffnen der Versuchsapparatur, so dass der Wassergehalt in jedem Topf fixiert ist. Nach dem Abkühlen der Gefäße können die Konzentrationen mittels Gravimetrie ermittelt werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Eine Darstellung der Ergebnisse der Literaturrecherche erfolgt im Abschlussbericht.
- AP2: In dem kommenden Zeitraum sollen die Arbeiten bezüglich Al(OH)<sub>3</sub>/AlCl<sub>3</sub> im pH-Bereich >9 in den Systemen NaCl-H<sub>2</sub>O, KCl-H<sub>2</sub>O, CaCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O und K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O zu Ende geführt werden.
- AP3: Die Löslichkeitsversuche an ausgewählten Silikaten, Aluminaten und Alumosilikaten werden in verschiedenen Salzlösungen bei unterschiedlichen Temperaturen (bis 90 °C) bis zum Ende der Projektlaufzeit fortgeführt.
- AP4: 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 und zusätzlich in elektronischer Form zur Verfügung gestellt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Materialforschungs- und prüfanstalt an der Bauhaus-Universität Weimar, Coudraystraße 9, 99423 Weimar		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1064</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Weiterentwicklung eines TDR-Messverfahrens zur Quantifizierung von Feuchte- und Dichteverteilungen in Bentonitversuchsbauwerken		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponienkonzeptionen unter Sicherheits Gesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2004 bis 28.02.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 603.656,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Carnallit (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 Untertageinsatz 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

AP7: Die halbtechnischen Versuche am Institut für Bergbau und Spezialtiefbau der Bergakademie Freiberg sind abgeschlossen und ausgewertet (s. Bericht Freiberg). Ziel der Untersuchungen war die Erprobung des TDR-Messsystems für den Einsatz in Bentonit- bzw. MgO-Abschlussbauwerken im Hartgestein und im Salinar. Dabei wurden bisher nicht erprobte praktische Anwendungsfälle bzw. Szenarien berücksichtigt: Flüssigkeitsausbreitung in einem Bentonitdichteelement bei Veränderung der Lösungszusammensetzung (Einsatzfall oberes Dichteelement in einem Schachtverschluss eines Salzbergwerkes: a) zuerst Zutritt von Süßwasser, danach von Salzlösung und b) umgekehrt). Die Erprobung des TDR-Feuchtemesssystems erfolgt im Rahmen halbtechnischer Ver-

suche in Stahlrohrapparaturen (300 mm Durchmesser) unter realistischen Flüssigkeitsdruckbelastungen. Die Messergebnisse dieser Versuche zeigten, dass sich das TDR-Messsystem zur Lokalisierung von Feuchten in Verschlussbauwerken eignet.

AP10: Die Entwicklung und Erprobung des Messgerätesystems zur qualitativen Bestimmung von Feuchteprofilen in einem Verschlussbauwerk sind abgeschlossen. 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. Schwierigkeiten bereiten bei der Rekonstruktion der orts aufgelösten Feuchteverteilung entlang der Messleitung der Einfluss der Ionenleitfähigkeit des umgebenden Materials auf die Impulsantwort des TDR-Signals. Gerade die sehr hohe Ionenleitfähigkeit von Salzgestein dämpft das TDR-Signal am Ende einer langen Leitung so stark, dass aus diesen TDR-Messwerten nur eine fehlerhafte Feuchtequantifizierung erfolgen kann. Das neu konzipierte Messkabel, das eine Messung von beiden Seiten gestattet, entspannt das Problem am Kabelende, verlagert es aber auf die Kabelmitte. Messungen im Carnallit (Teutschenthal) ergaben, dass die TDR-Messleitung (PE-Flachbandkabel) nicht länger als vier Meter sein sollte.

AP11: Die Messgerätesysteme für die Versuche KV1, GV1 und GV2 im Projekt CARLA wurden aufgebaut und erprobt sowie die für die Versuche benötigten TDR-Messleitungen konfiguriert, getestet und auf Laugen-dichtheit bis 40 bar überprüft. Vor dem Einbau der Messsysteme in die Großversuche GV1 und GV2 wurde auf Vorschlag des Projektkonsortiums in einem zusätzlichen Kleinversuch (KV1/MFPA-Versuch) in der Grube Teutschenthal das TDR-Messgerätesystem einschließlich der Datenfernübertragung und der TDR-Messleitungen in einem laugenbeaufschlagten Verschlusselement getestet. Beim Bau des Verschlusselementes aus MgO-Beton wurde keinerlei Wert auf die Dichtheit zum Gebirge gelegt. An der Kontur sollte mit den eingebauten TDR-Sensoren überprüft werden, ob bei Druckbeaufschlagung die Undichtheit auch detektiert werden kann. Nach der Betonage und einer dreimonatigen Standzeit des MgO-Verschlusselementes konnte der Austrocknungsprozess von den TDR-Sensoren kontinuierlich aufgezeichnet werden. Danach erfolgte eine erste Druckbeaufschlagung mit Lauge. Die Fließwege der Lauge innerhalb des Bauwerkes konnten mit dem TDR-Messsystem aufgezeichnet und die langsame Feuchteänderung entlang der Fließwege orts aufgelöst registriert werden. Eine zweite Druckbeaufschlagung erfolgte zwei Monate später. Auch hier konnten die Laugenzutritte innerhalb des Bauwerkes detektiert und mit den sichtbaren Austrittsstellen der Lauge an der Luftseite des Bauwerkes in Korrelation gebracht werden. Im GV1 wurden in der 13. Scheibe an der Kontur Verschlussbauwerk-Salinar vier TDR-Messleitungen mit jeweils vier Meter Länge ringförmig überlappend angebracht. Seit der Betonage dieser Scheibe werden alle 12 Stunden TDR-Messungen durchgeführt. Die Injektion von 2K-Bitumen zur Abdichtung der Kontur konnte mit den Messleitungen lokalisiert werden. Eine Laugenverpressung findet erst im 1. Halbjahr 2008 statt.

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

- Fortführung der theoretischen Betrachtungen zum dielektrischen Verhalten von Stoffgemischen (verlustbehaftetes 3-Stoffe-Modell) längs der TDR-Messleitung (Schichtenmodell) für die Erstellung praxisrelevanter Rekonstruktionsalgorithmen von Feuchte- und Dichteprofilen, insbesondere unter Berücksichtigung der hohen Ionenleitfähigkeit im Salinar (AP10).
- Einbau des Messgerätesystems mit 8 TDR-Messleitungen im Großversuch GV2 und Auswertung der Messergebnisse (AP11).
- Auswertung der Messergebnisse vom Großversuch GV1 (AP11).

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

Wagner, N., Kupfer, K., Trinks, E.: Numerische und experimentelle Untersuchungen zur Sensitivitätscharakteristik des TDR-Flachbandkabelsensors in verlustbehafteten und dispersiven Böden. Tagungsband, 67. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft in Aachen (2007)

Wagner, N., Kupfer, K., Trinks, E.: Electromagnetic material properties of moist soil determined by broadband dielectric spectroscopy, Berichtsband zum Workshop 2007, Innovative Feuchtemessung in Forschung und Praxis, 37-45, Karlsruhe (2007)

Hofmann, M., Gassner, W., Gruner, M., Glaubach, U.: TDR-Messsystem zur Überwachung von Bentonitabschlussbauwerken – Eignungstest und halbtechnische Versuche. Abschlussbericht, Institut für Bergbau und Spezialtiefbau, TU Bergakademie Freiberg (2007)

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1074</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Weiterentwicklung der räumlichen Auswertung von richtungssensitiven EMR-Bohrlochmessdaten		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2004 bis 30.06.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 443.185,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 (Send- 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

Der Schwerpunkt der Arbeiten in diesem Zeitraum lag in der Erweiterung der Aussagemöglichkeiten von EMR-Messungen. Hierbei wird versucht die einzelnen Reflexionen zu charakterisieren um eine belastbarere geologische Zuordnung vornehmen zu können.

Es war vorgesehen den Neuronalen Netzwerksimulator der Uni Stuttgart (SNNS) zur Untersuchung von Signalmustern in Radardaten zu verwenden. Der Simulator liegt inzwischen in einer Java Variante (JNNS) vor und wird verwendet, da er eine bessere Bedienoberfläche bei gleicher Funktionalität bietet. Die zur Untersuchung ausgewählten Radardaten wurden in ein für den Simulator einlesbares Format gewandelt (Pattern Datei). Dafür ist für jedes zu untersuchende Attribut ein separater Datensatz herzustellen.

Für eine Betrachtung realisiert wurden bisher die Attribute:

- Amplitude
- Phase
- Mittenfrequenz
- Gradient der Mittenfrequenz
- Einhüllende
- Gradient der Einhüllenden
- Verhältnis von Amplituden aufeinander folgender Wellenzüge
- Verhältnis von Zeiten aufeinander folgender Wellenzüge
- Gleitendes Spektrum über die Zeit.

Die Attribute der Reflexionen werden parametrisiert und über die bekannte Geometrie mit den geologischen Strukturen verknüpft. Dazu werden zu jedem Parameter Trainings- und Validierungsmuster erstellt. Das Maß welcher Parameter in welcher Kombination und Bewichtung zur Mustererkennung beiträgt wird durch Lernen von einem Neuronalen Netz realisiert. Für das Lernen des Netzes wurde das Backpropagation und das Resilient Propagation Verfahren genutzt. Als Aktivierungsfunktion zwischen den Neuronen wurde die Logistic Funktion angewendet. Bereits allein aus dem Attribut Amplitude lassen sich mit diesem Netz bereits geologische Strukturen von Reflexionen durch Streckenauffahrungen separieren.

Der Auswertesoftware wurde hinsichtlich dieser Erfolge mit den neuronalen Netzwerksimulator im Modul „Komplexe Spuranalyse“ die neuen Attribute „Einhüllende“ sowie „1. Ableitung der Einhüllenden“ hinzugefügt. Damit stehen weitere Attribute zur Verfügung, welche als Eingangsdaten für Neuronale Netze verwendet werden können.

Umfangreiche Arbeiten am Quellcode wurden durchgeführt. Diese hatten zum Ziel, den Speicherverbrauch während des Programmablaufs und die Performance zu optimieren.

Der Umfang und die Funktionalität der Software zur Sondensteuerung konnten anhand der Verbindung über das Telefonnetz (zwischen der Universität Wuppertal und der BGR) parallel zur Entwicklung on-line getestet und überprüft werden. Damit ist eine kontinuierliche Überprüfung der Software wie auch der Hardware gewährleistet, was eine effiziente Entwicklung der einzelnen Software- wie Hardwaremodule wesentlich verbesserte.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Umsetzung des Auswertesystems mit der Qt Bibliothek.
- Ausarbeitung der Struktur der Steuer- und Datenerfassung (einhergehend mit der Hardwareentwicklung).
- Untersuchungen hinsichtlich der Anwendbarkeit zusätzlicher Attribute zur Charakterisierung von Radarsignalen.
- Der nächste untertägige (im ungestörten Umfeld) Test der Sondenkomponenten und Kommunikation ist im März 2008 geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bergische Universität Wuppertal, Gaußstraße 20, 42119 Wuppertal		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1084</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung eines aktiven richtungssensitiven Bohrlochantennensystems		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2004 bis 30.06.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 679.189,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 I „Entwicklung eines aktiven richtungssensitiven Bohrlochantennensystems“ umfassten im Berichtszeitraum die Arbeitspakete:

- „Bau und Test des HF-Teils, Demonstrator“ im Bereich „Höchstfrequenztechnik“ (HFT),
- „Bau und Test Analog- und Digitalelektronik“
- „Erstellung einer Messsoftware“ im Bereich „Elektrische Messtechnik“ (EMT)
- „Theoretische Elektrotechnik“ (TET).

Der Punkt „Feld- und Labortests sowie Optimierung der HF-Komponenten“ wurde in Kooperation zwischen den Gruppen bearbeitet.

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

Die Bohrlochradarsonde wurde in insgesamt drei weiteren Feldtests in dem Forschungsbergwerk Asse und in einem Salzbergwerk der Firma K+S überprüft. Diese Tests haben gezeigt, dass der eingesetzte verbesserte Wellenleiter funktioniert und die Richtcharakteristik der Antennen korrekt ist. Messwerte der Antennenadaptivität wurden aufgenommen. Es hat sich herausgestellt, dass es in der Handhabung der Sonde weiterhin Optimierungsbedarf gibt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Kommunikationskanal der Sonde muss optimiert werden, um die Messzeit zu reduzieren. Außerdem sind Charakterisierungen und Auswertungen weiterer Testmessungen geplant, wobei unter anderem die Antennenadaptivität verbessert und untersucht werden wird. Die Handhabung der Sonde wird durch veränderte Überwachungsfunktionen verbessert, damit keine falschen Messwerte aufgrund von zu schwachen Batterien aufgenommen werden.

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

Es wurde eine Veröffentlichung bei Elsevier für die Zeitschrift „Journal of Applied Geophysics“ (Spezialausgabe "Advanced Applications, Systems and Modeling for GPR" - APP-GEO1278) eingereicht.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> DMT GmbH, Am Technologiepark 1, 45307 Essen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1094</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung und Bau der Steuer- und Digitalisierungseinheit, der mechanischen Komponenten und der Datenerfassungseinheit		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2004 bis 30.06.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 487.347,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

#### Drehantrieb

Die vergangenen Testmessungen zeigten, dass es zur sauberen Ermittlung eines Richtdiagramms erforderlich ist die Sonde in möglichst exakten Winkelschritten zu rotieren. Von „Hand“ ist das nur eingeschränkt möglich. Aus diesem Grund wurde jetzt diese Aufgabe durch einen elektrischen Drehantrieb gelöst. Antriebselement ist ein 150 W DC-Motor, gekoppelt mit einem Stirnradgetriebe 1:732. Ausgangsseitig steht ein Drehmoment von ca. 30 Nm zur Verfügung, was ausreichend ist die Sondenreibung im Bohrloch zu überwinden. Der Antrieb wird über eine nur wenig elastische Kupplung mit den Schubgestängerrohren adaptiert.

Die Steuerung des Antriebs erfolgt über eine Steuerung, die vom Konzept an den Windenkontroller angelehnt ist. Um den Aufwand zu minimieren wird der DC-Motor nur ein- und ausgeschaltet. Eine Regelung erfolgt nicht. Die Sonde darf wegen der Elastizität im Sondenstrang nicht zurückgedreht werden. Die Drehbewegung wird an der Motorachse induktiv an einem aufgesteckten Zahnrad abgegriffen und von einem Mikrokontroller ausgewertet. Die Einstellung der Steuerung erfolgt über zwei Tasten und ein LC Display. Die Schrittweite kann in 5 ° Stufen bis 45 ° eingestellt werden. Ein Motornachlauf wird bei jedem Schritt berücksichtigt und von Punkt zu Punkt neu berechnet.

Der gesamte Antrieb ist auf einer Montageeinheit befestigt die eine Justage in allen drei Achsen zulässt. Die komplette Montageeinheit wiederum wird mit vier 16 mm starken Gebirgsankern und Abstandselementen am Stoß verschraubt.

#### Empfangsmodul

Das Empfangsmodul wurde im Hinblick auf die anstehende Fertigungsphase überarbeitet. Die Einbauten des Empfangsmoduls konnten durch ein Redesign der Senderansteuerung um 100 mm verkürzt werden. Die Senderansteuerung ist jetzt auf einer kreisförmigen Platine direkt stirnseitig an der Aufnahme des Orientierungsmoduls montiert. Der Platinenträger konnte somit komplett entfallen. Die Aufnahme und Adaption des Orientierungssensors ist ebenfalls umgestaltet worden, so dass jetzt immer eine exakte Ausrichtung der Antennenebenen zum Orientierungssensor gegeben ist.

#### Sondenkupplungen/ Sondengehäuse

Das Sondengehäuse befindet sich zur Zeit noch in der Konstruktion, wobei hier jetzt fertigungstechnische Aspekte untersucht werden. Die ausgewählten GFK (FRP) Druckrohre werden als 9 m Rohr mit fertigen API Gewinden (spez. Gewindenorm) geliefert. Es handelt sich hier um Rohre, welche die geforderten Spezifikationen einhalten und als „Standard“ Produkt hauptsächlich für die Ölindustrie vertrieben werden. Diese Rohre haben einen Glasanteil von ca. 80 %, einen Kollapsdruck von ca. 120 Bar, einen Berstdruck von ca. 100 Bar bei einer Zugbelastbarkeit von ca. 50000 N. Die konischen Gewindeansätze werden abgetrennt. Nachdem die 9 m Fertigungslängen für die Sondengehäuse zugesägt sind, werden die einzelnen Gehäusesegmente an beiden Enden innen bearbeitet, da die Rohre fertigungsbedingt im inneren konisch sind und keine korrekte Abdichtung mit O-Ringen zulassen. Zur Zeit werden Methoden zur Herstellung zylindrischer Dichtflächen an den Rohrenden untersucht. Eine rein drehtechnische Bearbeitung führte zu keinem reproduzierbar guten Ergebnis.

Zunächst wird das Rohrinne an den Enden aufgeraut und anschließend mit einer speziellen Epoxid/ Keramik Mischung unter Verwendung einer Matrice, beschichtet. Gelingt es nun direkt eine Dichtfläche in der benötigten Qualität herzustellen, wäre das fertigungstechnisch optimal. Ist die Qualität nicht ausreichend, so kann die Epoxid Beschichtung drehtechnisch nachbearbeitet werden. Die Oberflächenqualität einer solchen Bearbeitung der ausgehärteten Beschichtung ist in Vorversuchen bereits überprüft worden.

#### Vorbereitung der Testmessung

Wie bereits erwähnt ist für die durchgeführte Testmessung ein Drehantrieb nebst Steuerung hergestellt worden. Die exakte Aufnahme der Richtdiagramme erfordert außerdem einen genau bekannten Signalsprung. Um das zu erreichen wurde der Sender von den restlichen Sondenmodulen abgetrennt und in einem zweiten Bohrloch betrieben, dessen räumliche Lage genau bekannt ist. Um diese Trennung zu ermöglichen, wurden verschiedene Adapter gefertigt, die ein Rückführen der optischen Triggerleitung durch den Sondenstrang zulassen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Vor der Fertigung der Druckrohe wird ein ca. 300 mm langer Prüfkörper hergestellt und eine Dichtigkeitsprüfung der Verschlussstopfen durchgeführt. Des weiteren werden die Gewinde auf Zugfestigkeit exemplarisch geprüft. Bei positivem Ausgang dieser Tests wird unmittelbar mit der Komponentenfertigung begonnen.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bauhaus-Universität Weimar, Geschwister-Scholl-Straße 8, 99423 Weimar		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1104</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2004 bis 31.12.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 343.086,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Versuche zum Quellpotential bei 80 °C durchgeführt. Die Versuche wurden so durchgeführt, dass die einzelnen Versuchskörper unter unterschiedlichen einaxialen Lasten sich „frei“ verformen konnten. Als Vertikalspannung wurde 50 und 100 kPa benutzt. Die Proben die untersucht wurden bestanden aus einer hoch verdichteten Mischung von 50 % Bentonit (Calcigel) und 50 % Sand (Quarz Sand), der initiale Wassergehalt betrug 9 % und die initiale Trockendichte betrug 2 Mg/m<sup>3</sup>. Die Versuche wurden in einer modifizierten UPC Barcelona Oedometerzelle durchgeführt. Für diese Untersuchungen unter erhöhter Temperatur wurde die Standardzelle wie folgt modifiziert. Die Versuchszelle wurde mit einem flexiblen Heizer ummantelt. Sowohl an der Probe als auch im Bereich des Heizers wurden Miniaturtemperatursensoren angeordnet. Heizer als auch die Sensoren wurden über einen Temperaturkontrolller gesteuert. Die Abstrahlung des Heizers von der Versuchszelle weg, wurde durch eine der Versuchszelle übergestülpte Isolation aus Fiberglas und Aluminium erfolgreich reduziert. Die Probe wurde zu Beginn entsprechend dem oben genannten initialen Zustand bei 20 °C in die Versuchszelle eingebaut. Danach wurde die Vertikallast in der oben genannten Größe mechanisch aufgebracht. Mit einer sehr geringen Rate von 1 °C pro Stunde wurde anschließend die Probentemperatur von Raumtemperatur auf 80 °C gesteigert. Das der Probe zugeführte Wasser zur Hydratation wurde darüber hinaus auf 86 °C aufgeheizt. Damit wurden die unvermeidlichen Wärmeverluste kompensiert und die Probe letztendlich mit ca. 80 °C warmen Wasser hydraulisch beaufschlagt. Das warme Wasser wurde der Probe mit einem geringen aufwärts gerichteten Gradienten annähernd drucklos durch den oberen und den unteren Filterstein zugeführt. Nach Erreichen des Gleichgewichtszustands der Probe bei 80 °C, d. h. einer Volumenkonstanz, wurde der Heizer ausgeschaltet und die Probe & die Versuchszelle wieder auf Raumtemperatur abgekühlt.

Das Quellpotential unter Last wurde durch die in die Zelle implementierte vertikale Verformungsmesseinrichtung aufgezeichnet und mit den Ergebnisse bezüglich der Versuchsdurchführung und des initialen Zustands vergleichbarer Proben, welche bei 20 °C untersucht wurden, verglichen:

Die durchgeführten Untersuchungen zeigen, dass das Quellpotential bei 80 °C geringer ist als bei 20 °C. Hingegen ist die Verformungsrate, d. h. die Änderung der quellenden Probenhöhe mit der Zeit bei 80 °C deutlich größer als bei 20 °C.

Diese Ergebnisse unterstützen unsere früheren Aussagen zum Einfluss der Temperatur auf den Quelldruck bei Volumenkonstanz: eine Erhöhung der Temperatur führt zu einer Abnahme der Hydratationskräfte und damit schlussendlich zu einer Abnahme des Quelldrucks und des Quellpotentials. Durch die höhere Viskosität des Wassers bei 80 °C im Vergleich zu 20 °C kommt es zu einer Beschleunigung des Aufbaus des Quellpotentials bzw. des Hydratation - Prozesses. Werden an den abgekühlten Proben wiederum Quellpotentialversuche durchgeführt, so stellen wir fest, dass das Quellpotential geringer ist, als von Proben, die original d. h. erstmalig bei 20 °C untersucht wurden. Die Versuche zeigen auch, dass der Temperatureinfluss auf das Quellpotential bei zunehmender Vertikalspannung deutlich abnimmt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der noch ausstehenden laufenden experimentellen Arbeiten und Erstellung des Schlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

1 weiterer Konferenzbeitrag, Details über [tom.schanz@bauing.uni-weimar.de](mailto:tom.schanz@bauing.uni-weimar.de)

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Eberhard-Karls-Universität Tübingen, Wilhelmstr. 7, 72074 Tübingen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1114</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2005 bis 31.12.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 319.906,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Arbeiten wurden im Berichtszeitraum durchgeführt:

- WP-T1 Hydraulik: Nicht-isothermes Mehrphasen-Modell (Wasser, Dampf, Gas) (Wang et al. 2007b)
- WP-T2/3 Hydro-Mechanische Prozesse: Anwendung von HM Modellen zur Berücksichtigung spannungsabhängiger Gesteinspermeabilitäten im Kristallin, Bedeutung von Scherspannungen für Permeabilitätsänderungen (Wang et al. 2007b, Wang und Kolditz 2008),

- WP-T2/3 Hydro-Mechanische Prozesse: Betrachtung von HM gekoppelten kontaktmechanischen Prozessen in klüftigen Gesteinen (Walsh et al. 2008), Erweiterung für thermo-elastische Effekte im Rahmen der Dissertation von Walsh (2007),
- WP-T3 Mechanische Prozesse: Anwendung des THM Modells für die Prozessanalyse im Salzgestein (insbesondere unter Verwendung der Spannungs-Porositäts-Beziehung von Stührenberg (2004) für Salzgrus) (Wang et al. 2007a),
- WP-T4 Chemische Prozesse: siehe Zwischenbericht zum Vorhaben C1295,
- WP-T5 Numerische Verfahren: Abschluss der Arbeiten im DECOVALEX-IV Projekt, erfolgreiche Verifizierung von GeoSys/RockFlow im Vergleich zu TOUGH-FLAC und THAMES (Wang et al. 2007b, Rutqvist et al. 2008),
- WP-T7 Höchstleistungsrechnen: 3-D THM Simulationen auf verschiedenen Plattformen ( z. B. CRAY-XT, 50fache Beschleunigung erzielt durch Parallelisierung) (Wang et al. 2008).

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

In der abschließenden Projektphase (bis Ende 2008) sollen experimentelle Daten der Projektpartner in Weimar (Prof. Schanz) mit dem THM Modell GeoSys/RockFlow ausgewertet werden. Es hat sich gezeigt, dass hierfür gewisse Erweiterungen im mechanischen Modell für teilgesättigte Bedingungen notwendig sind. In der nächsten Projektphase sind folgende Arbeitsschritte geplant:

- Numerische Auswertung experimenteller Daten von Quelldrücken in kompaktierten Bentoniten bei verschiedenen Temperaturniveaus.
- Numerische Modellierung nicht-isothermer Prozesse bei Quelldruckversuchen (nicht-isotherme Prozessführung).

Ferner soll die Recheneffizienz von THM Modellen durch Parallel Computing weiter verbessert werden (Implementierung auf einem 256-Knoten-Cluster am UFZ).

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Rutqvist J., Barr D., Birkholzer J.T., Chijimatsu M., Kolditz O., Liu Q, Oda Y, Wang, W. and Zhang C. International Simulation Study on Coupled Thermal, Hydrological, and Mechanical (THM) Processes near Geological Nuclear Waste Repositories. J Nuclear Technology, in print.

Walsh R., McDermott C. and Kolditz O. (2008): Modeling stress-permeability coupling in fractures: a finite element approach with realistic discrete fractures, J Hydrogeology, in print.

Walsh R. (2007): Numerical Modeling of THM Coupled Processes in Fractured Porous Media, PhD thesis, Center of Applied Geosciences, University of Tübingen.

Wang W., Walsh R., Shao H., Xie M. and Kolditz O. (2007a): Simulation of long-term thermal, hydraulic and mechanical interaction between buffer and salt rock. 6th Conference on the Mechanical Behavior of Salt: Understanding of the THMC Processes in Salt Rocks, Hannover, 22.-25.05.2007.

Wang W., McDermott C.I., Blum Ph., Walsh R., Kolditz O. (2007b): DECOVALEX - Task D – THM simulations, Final Report, ENVIN-Report [2007-12].

Wang W. and Kolditz O. (2008): Numerical analysis of strong discontinuity propagation in dilatant media: Enhanced strain finite elements and tracking strategy, Applied Mathematics and Mechanics, submitted.

Wang W., Kosakowski G., Kolditz O. (2008): A parallel finite element scheme for thermo-hydro-mechanical (THM) coupled problems in porous media. Computers & Geosciences, submitted.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademie- straße 6, 09599 Freiberg	<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1124</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Diversitäre und redundante Dichtelemente für langzeitstabile Verschlussbauwerke	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2004 bis 31.03.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 642.644,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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: Untersuchung des autogenen Schwindens und des Austrocknungsschwindens von Salzbeton in einer Schwindrinne mit nachfolgender numerischer Analyse von Dünnschliffproben zur Darstellung der Mikrostruktur zeigten keine gerichtete Rissbildung. Die meisten Risse waren ungerichtet und eher zufällig über den Querschnitt angeordnet. Vereinzelt treten aber typische Spannungsrisse auf. Entscheidend ist, ob mit der Zeit die Schwindspannung die Zugfestigkeit übersteigt. Numerische Untersuchungen in der Mikroebene (Rissbild im Dünnschliff) und der Makroebene (Probekörper aus der Schwindrinne) haben gezeigt, dass sehr kleine Belastungen, wie sie beim autogenen Schwinden vorherrschen, kaum zu sichtbaren Spannungen führen.
- AP5: Durch Variation des Bindemittelgehaltes zwischen 13,5 % und 18,5 % kann das rheologische Verhalten des Asphalttes grundlegend – vom festkörperähnlichem bis zu flüssigkeitsähnlichem Verhalten – gesteuert werden. Asphalt mit 15,6 % Bindemittel liegt im Übergangsbereich. Das zeitabhängige Verformungsverhalten bestimmt die Geschwindigkeit der Übertragung des Quelldruckes eines vorangeschalteten Bentonitdichtelementes bei Flüssigkeitszutritt.
- AP6: Die Asphaltabdichtung des In-situ-Bohrlochversuch in der Grube Teutschenthal (D = 300 mm) wurde durch Überbohren (D = 400 mm) rückgebaut. Die Asphaltabdichtung aus Formsteinen war vollständig monolithisiert. Der Kontakt zum umliegenden Gebirge war dicht.
- AP7: Der Einbau von Asphaltmastix in ein Schotterbett (32/63 mm, Porenraum 48,8 %) ist praktisch nicht möglich. Die maximale Eindringtiefe betrug 8 – 10 mm, eine Abdichtung konnte nicht erreicht werden. Für den Großversuch 3 in der Grube Teutschenthal wurden 100 Asphaltformsteine in Serie produziert. Die Formstabilität und Maßhaltigkeit entsprach den gestellten Anforderungen. Vorversuche zur technischen Erprobung eines Druckbeaufschlagungs- und Temperaturerhöhungssystems zur Monolithisierung einer Asphaltabdichtung aus Formsteinen verliefen erfolgreich.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Spannungsanalyse auf Grundlage eines für Salzbeton repräsentativen Schliffbildes, welches durch das am National Institute of Standards and Technology (NIST) entwickelte Programm „OOF2“ in ein FEM-Basiertes Programmsystem eingelesen wird. Abschluss der Untersuchungen.
- AP5: Abschlussbericht.
- AP6: Abschlussbericht.
- AP7: Halbtechnischen Versuche. Abschlussbericht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Straße 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1134</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Untersuchungen an Calciumsulfat-Steinsalz-Baustoffen für Dammbauwerke in Untertage-Deponien und Endlagern		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2004 bis 30.06.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 449.188,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 und 5 durchgeführt, d. h. es stand die Datenerfassung und die Auswertung der Versuchsergebnisse im Vordergrund. Dabei wurde eine weitere Abtrocknung des Bauwerks festgestellt. Die Temperaturen liegen im Bereich der aktuellen Gebirgstemperatur.

Begleitend wurden Versuche zur Kalibrierung der Ergebnisse der Feuchtemessung durchgeführt.

Aufgrund der Schließung der Schachanlage Asse, die zurzeit durchgeführt wird, musste der installierte Versuchsdamm vor Abschluss des geplanten Beobachtungszeitraums zurückgebaut werden. Es wurden mehrere Bohrkerne aus dem Damm entnommen und zur weiteren Lagerung und Untersuchung ans Institut für Bergbau verbracht. Der Damm wurde dann mit Hilfe einer Teilschnittmaschine zerstört und das Material abtransportiert, so dass eine weitere Untersuchung des Dammbauwerks nicht mehr möglich ist. Die installierte Versuchstechnik musste komplett abgebaut werden. Die Arbeiten im Rahmen dieses Projekts auf der Schachanlage Asse sind damit beendet.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Aufgrund der Tatsache, dass der Versuchsdamm auf der Schachanlage demontiert wurde, werden im nächsten Berichtszeitraum abschließende Arbeiten am Institut für Bergbau durchgeführt.

Die aus dem Versuchsdamm entnommenen Kerne sollen auf Festigkeit und Zusammensetzung untersucht werden, um eventuelle transportbedingte Veränderungen in der Kornzusammensetzung zu identifizieren.

Begleitend sollen am Institut für Bergbau Versuche zur Kalibrierung der Ergebnisse der Feuchtemessung weitergeführt werden. Es sollen Untersuchungen zum Quellverhalten des Baustoffs unter isobaren und isochoren Bedingungen durchgeführt werden. Des Weiteren sind Messungen bezüglich der Wärmeleitfähigkeit des Baustoffs vorgesehen.

Im Weiteren sind noch Überlegungen zur weiteren Verbesserung der Anlagentechnik insbesondere der Benetzungsdüse vorgesehen und die Ermittlung theoretischer Baustoffkennwerte für eine optimale Auslegung der pneumatischen Anlagentechnik im Bezug auf die Druckabnahme über die Rohrleitungslänge.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1144</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-FZD)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2004 bis 30.04.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 197.205,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brendler	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist es, Voraussetzungen für zuverlässigere Prognosen zur räumlichen und zeitlichen Ausbreitung von chemisch-toxischen Kontaminanten und Radionukliden zu schaffen, welche wiederum Basis für Risikoanalysen unter Berücksichtigung verschiedener möglicher Szenarien sind. Im Vordergrund des Vorhabens steht die Zusammenführung und Weiterentwicklung bestehender Sorptionsdatenbanken (SODA [GRS] und RES<sup>3</sup>T [FZD]) zu einem Datenbank-Tool mit umfassenden geochemischen Informationen zur Charakterisierung des Schadstoffrückhaltevermögens von Gesteinen im Deck- und Umgebungsgebirge von untertägigen Entsorgungsmaßnahmen.

Ausgehend von der gegenwärtigen Datensituation in den Datenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T werden außerdem wesentliche Datenlücken identifiziert und exemplarisch im Rahmen eines experimentellen Untersuchungsprogramms mittels Batch- und ausgewählter Säulenversuche geschlossen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Zusammenführung der beiden Sorptionsdatenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T (Konvergenz von Tabellenstruktur und internen Beziehungen von SODA und RES<sup>3</sup>T, begrenzte Erweiterung der Funktionalität)
- AP2: Programmierung und Gestaltung eines Web-Interfaces zur weltweiten Nutzung und Aktualisierung der Datenbank (inkl. Einführung eines Autorisierungsschemas), Erarbeitung eines Online-Manuals
- AP3: Erweiterung des Datenbestandes (kontinuierliche Sichtung vorhandener Literatur zur Sorption von Kontaminanten und Matrixelementen) mit Auswertung und Dokumentation
- AP4: Exemplarische Schließung von Datenlücken durch eigene Experimente (Datenauswertung und Spezifizierung von Experimenten, Säulen- und Batchexperimente zu definierten Systemen)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Zusammenführung der Datenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T  
 - Überführung der kompletten RES<sup>3</sup>T-Datensätze in die neue Tabellenstruktur
- AP2: Zugriffs-Autorisierung  
 - Erstellung eines Prototyps für die Zugriffsautorisierung des WWW-Interfaces
- AP3: Erweiterung des Datenbestandes  
 - Kontinuierliche Recherche neuer Literatur und Einpflegen der Daten in die Datenbank
- AP4: Experimentelle Schließung von Datenlücken  
 - Weitere Batchversuche zur Sorption von Uran an Muskovit: pH-Abhängigkeit  
 - Sorptionsmodellierung der Uransorption an natürlichem und künstlichen Feinsand: gute Übereinstimmung von Sorptionsvorhersage und Modellierung  
 - Sorptionsmodellierung der Bleisorption an Quarz: Unterschiede zwischen Modellierung (wenig SCM-Daten in der Literatur) und Experiment  
 - Durchführung eines Säulenversuches mit Quarzsand  
 - Bestimmung der Porosität mit Tritium, Sorptionsversuch mit Uran

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Verbesserung Nutzerinterface, Erarbeitung des Online-Manuals
- AP3: Kontinuierliche Erfassung, Auswertung und Dokumentation neuer Literatur
- AP4: Weitere Modellierung der Bleisorption an Quarz  
 Auswertung des Säulenversuches: Uransorption am Quarzsand  
 Verfassen des Abschlussberichtes

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Uranium(VI)-Sorption an natürlichem und synthetischem Sandstein, Nebelung, C.; Brendler, V.; Richter, A.; Bernhard, G., Vortrag: Wissenschaftsforum Chemie 2007, 16.-19.09.2007, Ulm, Proceeding: Energie Materialien Synthese, Frankfurt am Main: Gesellschaft Deutscher Chemiker, 3-936028-47-8
- U(VI) sorption on sandstone: Experiments and modeling, Richter, A.; Nebelung, C.; Brendler, V., Vortrag: Goldschmidt 2007, 19.-24.08.2007, Köln, Proceeding: Geochimica et Cosmochimica Acta 71(2007), A838
- Architektur und Administration einer webbasierten chemischen Stoffdatenbank. Konzept und Prototyp, A. Ihlau, Diplomarbeit, HTW Dresden, 2007

<b>Zuwendungsempfänger:</b> DMT GmbH, Am Technologiepark 1, 45307 Essen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1154</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-DMT)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2004 bis 30.04.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 88.492,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Klinger	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist es, Voraussetzungen für zuverlässigere Prognosen zur räumlichen und zeitlichen Ausbreitung von chemisch-toxischen Kontaminanten und Radionukliden zu schaffen, welche wiederum Basis für Risikoanalysen unter Berücksichtigung verschiedener möglicher Szenarien sind. Im Vordergrund des Vorhabens steht die Zusammenführung und Weiterentwicklung bestehender Sorptionsdatenbanken SODA [GRS] und RES<sup>3</sup>T [FZD] zu einem Datenbank-Tool mit umfassenden geochemischen Informationen zur Charakterisierung des Schadstoffrückhaltevermögens von Gesteinen im Deck- und Umgebungsgebirge von untertägigen Entsorgungsmaßnahmen.

Ausgehend von der gegenwärtigen Datensituation in den Datenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T werden außerdem wesentliche Datenlücken identifiziert und exemplarisch im Rahmen eines experimentellen Untersuchungsprogramms mittels Batch- und ausgewählter Säulenversuche geschlossen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Zusammenführung der beiden Sorptionsdatenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T (Konvergenz von Tabellenstruktur und internen Beziehungen von SODA und RES<sup>3</sup>T, begrenzte Erweiterung der Funktionalität)
- AP2: Programmierung und Gestaltung eines Web-Interfaces zur weltweiten Nutzung und Aktualisierung der Datenbank (incl. Einführung eines Autorisierungsschemas), Erarbeitung eines Online-Manuals
- AP3: Erweiterung des Datenbestandes (kontinuierliche Sichtung vorhandener Literatur zur Sorption von Kontaminanten und Matrixelementen) mit Auswertung und Dokumentation
- AP4: Exemplarische Schließung von Datenlücken durch eigene Experimente (Datenauswertung und Spezifizierung von Experimenten, Säulen- und Batchexperimente zu definierten Systemen)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Zusammenführung der Datenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T
- Anpassung und Korrektur der ISDA-Parameterlisten
  - Umstellung der Einheiten
  - Erstellung von Erläuterungen zu den verwendeten Parametern
  - Test der ISDA-Datenbankstruktur bei der Dateneingabe
  - Verifizierung der aus SODA und RES<sup>3</sup>T stammenden Datenbankinhalte auf Vollständigkeit der Datensätze, Übertragungsfehler sowie verwendete Einheiten anhand der Originaldaten
- AP3: Erweiterung des Datenbestandes
- Prüfung des Literaturbestandes auf verwendete Parameter und Einheiten als Basis für den Datenbankaufbau

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Zusammenführung der Datenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T
- Abschließende Überprüfung der Datenbankinhalte nach Neueinspielung der Daten
- AP3: Erweiterung des Datenbestandes
- Dateneingabe in die ISDA-Datenbankstruktur
  - Datenauswertung der ergänzenden Versuche zur Schließung von Datenlücken durch eigene Experimente

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1164</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-GRS)			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2004 bis 30.04.2008		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 316.057,50 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Brassler	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist es, Voraussetzungen für zuverlässigere Prognosen zur räumlichen und zeitlichen Ausbreitung von chemisch-toxischen Kontaminanten und Radionukliden zu schaffen, welche wiederum Basis für Risikoanalysen unter Berücksichtigung verschiedener möglicher Szenarien sind. Im Vordergrund des Vorhabens steht die Zusammenführung und Weiterentwicklung bestehender Sorptionsdatenbanken (SODA [GRS] und RES<sup>3</sup>T [FZD]) zu einem Datenbank-Tool mit umfassenden geochemischen Informationen zur Charakterisierung des Schadstoffrückhaltevermögens von Gesteinen im Deck- und Umgebungsgebirge von untertägigen Entsorgungsmaßnahmen.

Ausgehend von der gegenwärtigen Datensituation in den Datenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T werden außerdem wesentliche Datenlücken identifiziert und exemplarisch im Rahmen eines experimentellen Untersuchungsprogramms mittels Batch- und ausgewählter Säulenversuche geschlossen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Zusammenführung der beiden Sorptionsdatenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T (Konvergenz von Tabellenstruktur und internen Beziehungen von SODA und RES<sup>3</sup>T, begrenzte Erweiterung der Funktionalität)
- AP2: Programmierung und Gestaltung eines Web-Interfaces zur weltweiten Nutzung und Aktualisierung der Datenbank (incl. Einführung eines Autorisierungsschemas), Erarbeitung eines Online-Manuals
- AP3: Erweiterung des Datenbestandes (kontinuierliche Sichtung vorhandener Literatur zur Sorption von Kontaminanten und Matrixelementen) mit Auswertung und Dokumentation
- AP4: Exemplarische Schließung von Datenlücken durch eigene Experimente (Datenauswertung und Spezifizierung von Experimenten, Säulen- und Batchexperimente zu definierten Systemen)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Zusammenführung der Datenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T

- Weitere Anpassung und Korrektur der ISDA-Parameterlisten
- „Internationalisierung“ der Datenbank durch Übersetzung der Parameter und Austausch hinterlegter, D-spezifischer, Auswahllisten durch international gebräuchliche
- Überarbeitung des Abfragekonzeptes zur Datenrecherche

AP3: Erweiterung des Datenbestandes

- Fortführung und Aktualisierung der bisherigen Literaturrecherchen, Beschaffung fehlender Publikationen
- Auswertung sämtlicher Rechercheergebnisse hinsichtlich Vorhabensrelevanz, Kontaminanten und Gesteins-/Mineralmatrices
- Überarbeitung, Anpassung und Einbindung des JNC-SDB-Literaturdatenbestandes in ISDA zur Erweiterung des Funktionsumfangs
- Literatúrauszug und ISDA-konforme Aufbereitung weiterer Datensätzen zur Übernahme in die Datenbank

AP4: Experimentelle Schließung von Datenlücken

- Weiterführung vergleichender Laborexperimente an natürlichen und synthetischen Gesteinssystemen mit synthetischen Schadstofflösungen
- Vorbereitung und Beginn eines Säulenversuchs (mit FZD)

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Fortlaufende Anpassungsarbeiten zur Verbesserung der Anwenderfreundlichkeit

AP3: Kontinuierliche Erfassung, Auswertung und Dokumentation vorhandener und neuer Literatur sowie deren datenbankmäßige Erfassung (Literatur und Daten)

AP4: Abschluss der Batch- und Säulenversuche  
Aufbereitung der Labordaten für deren DB-mäßige Erfassung

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Dr. Veerhoff & Scherschel GbR erd_sicht, Staffelfgasse 15, 53347 Alfter		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1174</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-EnviCon)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2004 bis 30.04.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 231.985,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Veerhoff	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist es, Voraussetzungen für zuverlässigere Prognosen zur räumlichen und zeitlichen Ausbreitung von chemisch-toxischen Kontaminanten und Radionukliden zu schaffen, welche wiederum Basis für Risikoanalysen unter Berücksichtigung verschiedener möglicher Szenarien sind. Im Vordergrund des Vorhabens steht die Zusammenführung und Weiterentwicklung bestehender Sorptionsdatenbanken (SODA [GRS] und RES<sup>3</sup>T [FZD]) zu einem Datenbank-Tool mit umfassenden geochemischen Informationen zur Charakterisierung des Schadstoffrückhaltevermögens von Gesteinen im Deck- und Umgebungsgebirge von untertägigen Entsorgungsmaßnahmen.

Ausgehend von der gegenwärtigen Datensituation in den Datenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T werden außerdem wesentliche Datenlücken identifiziert und exemplarisch im Rahmen eines experimentellen Untersuchungsprogramms mittels Batch- und ausgewählter Säulenversuche geschlossen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Zusammenführung der beiden Sorptionsdatenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T (Konvergenz von Tabellenstruktur und internen Beziehungen von SODA und RES<sup>3</sup>T, begrenzte Erweiterung der Funktionalität)
- AP2: Programmierung und Gestaltung eines Web-Interfaces zur weltweiten Nutzung und Aktualisierung der Datenbank (incl. Einführung eines Autorisierungsschemas), Erarbeitung eines Online-Manuals
- AP3: Erweiterung des Datenbestandes (kontinuierliche Sichtung vorhandener Literatur zur Sorption von Kontaminanten und Matrixelementen) mit Auswertung und Dokumentation
- AP4: Exemplarische Schließung von Datenlücken durch eigene Experimente (Datenauswertung und Spezifizierung von Experimenten, Säulen- und Batchexperimente zu definierten Systemen)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Zusammenführung der Datenbanken SODA und RES<sup>3</sup>T

- Planung einer alternativen Werte-Speicherung auf Basis von XML. Insbesondere zu Aufnahme von numerischen Wertangaben mit Min, Max, Mittelwert, Median und/oder Standardabweichung.
- Speicherung des Datensatz-erstellenden Benutzers zusätzlich zum Änderungsprotokoll.
- Einführung eines Temporärstatus für neue Datensätze zur Vermeidung von Datensatzfragmenten durch abgebrochene Sessions.
- Einführung einer Tabelle chemicals für in ISDA betrachtete chemische Komponenten. Die Tabelle löst die bisherige Verwaltung dieser Einträge als Optionen ab.

AP2: Programmierung und Gestaltung eines Web-Interfaces

- Das als Mockup entstandene Frontend wurde vollständig überarbeitet. Serverseitig wurden die Templates (Seitenvorlagen) vereinheitlicht und mit homogenen Aufrufparametern versehen. Vereinfachung der Benutzerführung durch neue Navigation und AJAX-basierte Interaktionen.
- Entwicklung der Templates für den Thermodynamik-Zweig der Datenbank.
- Exponentialdarstellung von Zahlwerten.
- Kontrollfunktion für die Verwendung von Eigenschaften.
- Optionswerte sind nun auch bei Zahlfeldern möglich. Sie dienen dort als Vorschlagswerte für typische Größenordnungen ( z. B. Korngrößen).

AP3: Erweiterung des Datenbestandes

- Abgleich und Überarbeitung der Parameter- und Optionslisten. Anpassung der Eigenschaften an die strukturellen Anforderungen der ISDA.
- Übersetzung der Parameter- und Optionslisten in angelsächsische Fachbegriffe.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Entwicklung von Import- und Exportfunktionen für Listen und Datensätze
- Umsetzung der geplanten Alternative zur Speicherung von Werte-Tupeln in Datenbank und Frontend
- Fehlerbereinigung der Parameterlisten, Plausibilitäts- und Konsistenzprüfung der nach ISDA konvergierten Datensätze

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V. (FhG), Hansastraße 27c, 80686 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1184</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines Messsystems zur hochauflösenden zerstörungsfreien Erkundung von Gesteinsnahbereichen mittels Sonar		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2004 bis 31.05.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 469.877,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kühnicke	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Erkundung und Bewertung der Auflockerungszonen um bereits existierende Hohlräume in bergmännisch genutzten Grubengebäuden sind vor allem bei der Vorbereitung des Einbaus von Verschlussbauwerken wichtige Voraussetzungen für detaillierte Planungen und qualifizierte Langzeitsicherheitsnachweise von Endlagern und Untertagedeponien.

Das Verbundvorhaben hat die Entwicklung und den In-situ-Test eines Messsystems aus aktiven akustischen und elektromagnetischen Verfahren zur hochauflösenden zerstörungsfreien Strukturerkundung und Kennwertermittlung in Saumzonen um Bergbauhohlräume zum Ziel. Dabei liegt der Schwerpunkt auf einer Detailerkundung der ersten Meter um einen Hohlraum herum, mit dem Ziel einer hohen räumlichen Auflösung. Das Vorhaben wird im Verbund mit der TU Ilmenau, Fachgebiet elektronische Messtechnik, durchgeführt, die den Einsatz eines Vielkanal-Breitband-Radarsystems für diese Aufgabe übernimmt (Förderkennzeichen: 02C1194).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Modellrechnungen zur Ausbreitung akustischer Wellen in der gradienten Saumzone
- AP2: Vorversuche im Labor und im Bergwerk zur Anpassung und Weiterentwicklung der Hardware und Auswahl der am besten geeigneten Messkonfiguration
- AP3: Kombination der aktiven akustischen und elektromagnetischen Verfahren zur Charakterisierung des Auflockerungszustandes in der Saumzone, Datenverarbeitung und Entwicklung gemeinsamer Interpretationstechniken
- AP4: Validierung der Messergebnisse des Verfahrenskomplexes an den Daten von Permeabilitäts- und Verformungsmessungen
- AP5: Anwendung der aktiven Wellenverfahren zur Langzeitüberwachung bergbauinduzierter Auflockerung und Verformung des Gebirges
- AP6: Auswertung und Abschlussbericht

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

- AP1: Im Berichtszeitraum keine Aktivitäten.
- AP2: Die Aussagesicherheit der Sonar-Rückstreuungsmessungen bezüglich des Einflusses der an der freien Oberfläche geführten P- und Rayleigh-Wellen wurde durch Messungen mit mehreren Sensoroffsets verbessert.
- AP3: Die Interpretationstechniken zur Datenverarbeitung von Sonar- und Radardaten wurden weiterentwickelt und auf die in den Jahren 2005 bis 2007 in Maschinenstrecken der Gruben Sondershausen und Bernburg gewonnenen Daten angewandt. Mit den geschaffenen Bearbeitungstechniken können kleinräumige Inhomogenitäten in der bergbauinduzierten Auflockerungszone sicher nachgewiesen werden.
- AP4: In der Grube Bernburg erfolgten insgesamt drei Messkampagnen, um die Struktur der bergbauinduzierten Auflockerungszone über den gesamten Streckenquerschnitt zu erfassen. Die Messergebnisse des Verfahrenscomplexes konnten an dieser Messlokation an Daten von Durchlässigkeitsversuchen mit Gas und von Fracversuchen mit Öl und Gas kalibriert werden, die das Institut für Bohrtechnik und Fluidbergbau der TU BAF durchgeführt hat (Abschlussbericht 02 C 0527 6, April 2001).
- AP5-6: Im Berichtszeitraum keine Aktivitäten.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

In einer letzten Phase der In-situ-Untersuchungen sollen unmittelbar nach dem maschinellen Auffahren einer Kammer im Steinsalz über einen längeren Zeitraum Wiederholungsmessungen erfolgen, um den Einfluss der Konvergenz auf den Auflockerungszustand des Gebirges zu ermitteln. Gleichzeitig wird die Entwicklung methodenübergreifender Interpretationstechniken zur sicheren Charakterisierung des Auflockerungszustandes in der Saumzone fortgesetzt.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Ilmenau, Ehrenbergstraße 29, 98693 Ilmenau		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1194</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines Messsystems zur hochauflösenden zerstörungsfreien Erkundung von Gesteinsnahbereichen mittels Höchsthfrequenz-Radar		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2004 bis 31.05.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 294.886,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Sachs	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel besteht darin, durch zerstörungsfreie und kontinuierlich arbeitende Untersuchungsmethoden Aussagen über den Auflockerungszustand oberflächennaher Salzgesteinschichten zu erhalten. Zur Sondierung werden sehr breitbandige elektromagnetische Wellen (Radar) eingesetzt, um eine hohe räumliche Auflösung und Detektierbarkeit von Gesteinsstörungen zu gewährleisten. Ausgangspunkt der Forschungs- und Entwicklungsarbeiten ist ein neuartiges Radarprinzip, dessen bisher schon hohe Bandbreite noch weiter vergrößert werden soll. Darüber hinaus sind geeignete Antennenanordnungen und Auswertelgorithmen zu finden, mit denen die gesuchten Gesteinsdefekte optimal detektiert werden können. Durch eine enge Kooperation mit einem Schwesterprojekt (IFZP Dresden) zur Ultraschallsondierung von Gesteinen und späterer Fusion der Akustik- mit den Radardaten soll die Aussagekraft und Zuverlässigkeit der Messungen erhöht werden. Die angestrebte Messmethode ermöglicht eine hochauflösende Beurteilung von Auflockerungen, für die zurzeit auch international noch keine erschöpfenden Lösungen existieren. Daraus resultiert ein hohes Marktpotenzial des Radarsystems sowohl für bergbauliche Aufgaben als auch für den Hoch- und Tiefbau.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Theoretische und experimentelle Analyse der Ausbreitungseffekte elektromagnetischer Wellen in der Saumzone von Hohlräumen im Salinar sowie dünnen Schichten in Luft
- Entwicklung, Bau und Test der Sensorelektronik
- Entwicklung, Bau und Test des Scanners und der Sensorelemente
- Messdatenverarbeitung und Parameterextraktion
- Validierung der Messergebnisse
- Langzeitüberwachung bergbauinduzierter Auflockerungen und Verformungen des Gebirges
- Auswertung und Abschlussbericht

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

- Weiterentwicklung Steuersoftware für neuen Radarkopf und für neue Experimentierabläufe
- Auswertung der Flächenmessung aus Sondershausen
- Bau und Test Antennenmodul für neuen Radarkopf mit angepassten Hornantennen (2-18 GHz)
- Tests im Labor: Stabilität des neuen Radarkopfes (Langzeitstabilität)
- Erweiterung Scanner zur automatisierten Verschiebung des Hunts in Sondershausen
- Wiederholung Flächenmessung Sondershausen mit neuem Radar und Antennenarray

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Auswertung der neuen Messdaten Flächenmessung Sondershausen
- Aufbau eines kleineren geschirmten Antennenarrays mit neuen Antennen
- Verlagerung Kalibriermodul in das neue Array
- Durchführung einer Messung in Bernburg (neues Radar) zum Vergleich mit Ultraschall (IZFP)
- Durchführung einer Sondermesskampagne in Borth mit frisch aufgefahretem Tunnelabschnitt
- Radar-Datenverarbeitung
  - Vorverarbeitung / Datenaufbereitung, Kalibrierung
  - Integration von statistischen Verfahren in Ablauf
  - Erarbeitung geeigneter Visualisierung des Auflockerungszustandes in den Daten
- Vergleich der Messdaten aus Bernburg mit den Ergebnissen der Ultraschallmessungen des IZFP

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

„Recent Advances and Applications of M-Sequence based Ultra-Wideband Sensors“, wiss. Paper zur IEEE International Conference on Ultra-WideBand 2007 (ICUWB 2007), inkl. Präsentation während Konferenz in Singapur

<b>Zuwendungsempfänger:</b> GTS Grube Teutschenthal Sicherungs GmbH & Co. KG, Straße der Einheit 9, 06179 Teutschenthal		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1204</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines Grundkonzeptes für langzeitstabile Streckendämme im leichtlöslichen Salzgestein (Carnallit); Teil 2: Erprobung von Funktionselementen in situ		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2004 bis 31.12.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 4.434.956,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Knoll	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: abgeschlossen
- AP2: abgeschlossen.
- AP3: Das Messkonzept für den ersten Großversuch GV1 wurde fertig gestellt; die Messelemente sind eingebaut und der Funktionstest nach Einbau ist erfolgt. Die Konzepte für die Großversuche GV2 und GV3 wurden erarbeitet; für den so genannten Kleinversuch KV1 wurden die Messelemente ebenfalls eingebaut; die Messungen während des Versuches laufen.
- AP4: Die Untersuchungen zur Kontaktzone und des unmittelbar daran anschließenden Gebirges im Bereich der Einbauorte der 3 Großversuche wurden fortgesetzt. Insbesondere für den Großversuch GV2 wurden zusätzlich neue Konzepte entwickelt und mit der Erprobung wurde begonnen.
- AP5: Zusätzlich zu den in der Vorhabensbeschreibung vorgesehenen Konzepten wurden vollkommen neu Prinzipien gefunden, getestet und mit der Realisierung in den Großversuchen GV2 und GV3 wurde begonnen.
- AP6: Die numerischen geomechanischen Modellberechnungen wurden für den GV1 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 rechteckigen Querschnitt des Dammelementes präzisieren. Berechnungen der Widerlagergestaltung zum GV3 sind in der Realisierung.
- AP7: Der Aufbau des Dammkörpers für den GV1 ist abgeschlossen. Derzeit erfolgt die Phase der Ausbildung eines Gleichgewichtes als Voraussetzung für die Lastaufgabe. Die Vorversuche für die Errichtung des Dammkörpers des GV3 konnten erfolgreich abgeschlossen werden; der Aufbau des Dammelementes steht unmittelbar bevor. Das Widerlagerelement für den KV1 ist errichtet und wurde bereits im Versuch erprobt. Das Dammelement für den GV2 erfolgt im Anschluss an den GV3.
- 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.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Errichtung des Dammelementes für den GV3 unter Einschluss der innovativen Asphalt Verbundschicht (in Kooperation mit dem Vorhaben 02C124) steht nach erfolgreichen Vorversuchen und der Erprobung der erforderlichen Schlitz-Herstellungstechnologien unmittelbar bevor. Beim GV1 wird die Konsolidierungsphase messtechnisch verfolgt und in Abhängigkeit von dieser Phase mit der Druckbeaufschlagung begonnen. Für den GV2 werden die technologischen Untersuchungen für die Herstellung großer MgO-Spritzbetonkörper fortgeführt, um nach Abschluss des GV3 sofort mit dem GV2 beginnen zu können. Die Untersuchungen zum geochemischen Vorbauelement befinden sich 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 veruchstechnischen 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.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Kali-Umwelttechnik GmbH vorm. Kaliforschungsinstitut, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1214</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlusselement im Salinar - Hauptprojekt		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2005 bis 31.07.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.07.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 494.772,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Krauke	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Weiterentwicklung eines Barriersystems zu einem leistungsfähigen Verschlusselement im Salinar mit folgenden Zielsetzungen:

- Begrenzung des Kompaktionsvermögens des Baustoffs
- Verringerung der Permeabilität
- Untersuchungen zum Quellverhalten und einer gezielten Beeinflussung
- Untersuchungen zur Reduzierung der Abbinde temperatur
- Untersuchungen zu Druckfestigkeitsverlusten im In-situ-Versuch

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

- Kali-Umwelttechnik GmbH Sondershausen
- Bauhausuniversität Weimar
- Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das FuE-Projekt ist in 7 Arbeitsschritte gegliedert, die durch die Verbundpartner eigenständig zu bearbeiten sind:

AP1: Weiterentwicklung des lastabtragenden Systems	K-UTEC
AP2: Untersuchungen zur Beeinflussung des Quellverhaltens	K-UTEC
AP3: Modellhafte Untersuchungen	Bauhaus-Uni
AP4: Strukturuntersuchungen	Bauhaus-Uni
AP5: Untersuchungen der mechanischen Anforderungen und Eigenschaften eines Dichteelements	IfG Leipzig
AP6: Erprobung optimierter Systeme in einer kleintechnischen Versuchsanlage	K-UTEC
AP7: Versuchsauswertung, Abschlussbericht	alle Verbundpartner

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der kleintechnische Versuch mit dem Dammbaumörtel DBM 3 wurde nach verlängerter Laufzeit im Juli abgeschlossen. Es wurden in vertikaler und horizontaler Ebene Kernbohrungen gestoßen und die notwendigen Materialparameter bestimmt. Zusätzlich zum Untersuchungsumfang wurden Gaspermeabilitätsuntersuchungen im Kernbereich beider kleintechnischer Versuchskörper durchgeführt.

Im Ergebnis der Untersuchungen an den Dammbaumörtelsystemen DBM 2 und DBM 3 sind folgende Feststellungen zu treffen:

- Die rheologischen Vorgaben einschließlich des Ausbreitungsverhaltens konnten auch im kleintechnischen Versuch bestätigt werden.
- Die Hauptzielstellung – ein möglichst steifes Material mit einem Ersatzkompaktionsmodul im Bereich von 1 GPa bis 2 GPa zu entwickeln, wurde mit dem Dammbaumörtelsystem DBM 2 erreicht. Das Dammbaumörtelsystem DBM 3 erreichte im Technikumsversuch geringere Werte als die Zielvorgaben. An diesem System (steinsalzgestützt) sind noch weitere Entwicklungsarbeiten erforderlich.
- Die einaxialen Druckfestigkeiten liegen im Bereich von 30 MPa (DBM 3) bis nahezu 60 MPa (DBM 2).
- Die ermittelten Scher- und Zugfestigkeitsparameter sind höher als die in Verschlussbauwerken im Salinar zu erwartenden Beanspruchungszustände.
- Die Anbindung der Dammbaumörtel an Steinsalz und Carnallit wird als gut ausgewiesen.
- Die gemessenen Gaspermeabilitäten lagen für den Dammbaumörtel DBM 2 im Bereich von  $2 \text{ E-}19 \text{ m}^2$  und für den DBM 3 bei etwa  $3 \text{ E-}18 \text{ m}^2$ .  
Die Lösungspemeabilitätszielstellungen ( $\leq \text{E-}18 \text{ m}^2$ ) werden mit  $< 5 \text{ E-}19 \text{ m}^2$  erfüllt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Alle Partner arbeiten an der Abschlussdokumentation. Der Abschlussbericht wird zum 29.02.2008 vorgelegt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bauhaus-Universität Weimar, Geschwister-Scholl-Str. 8, 99423 Weimar		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1224</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlusselement im Salinar. Teilprojekt Bauhaus-Uni: Experimentelle Untersuchungen zur Struktur, dem Anbindeverhalten, der Kompressibilität und den volumetrischen Eigenschaften		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2005 bis 31.07.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.07.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 159.788,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schanz	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben wird auf der Basis der Zusammenarbeit (siehe FKZ 02C1214) durch folgende Institutionen bearbeitet:

- Kali-Umwelttechnik GmbH, Sondershausen
- Bauhaus-Universität Weimar
- Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig

Die folgenden Ausführungen beziehen sich ausschließlich auf die Arbeitspakete 3 und 4. Im Rahmen der Materialoptimierung der von der K-UTECH hergestellten Magnesiabinder bildet die Untersuchung der Materialeigenschaften (AP3) im Zusammenhang mit der Untersuchung der damit verbundenen Strukturen bzw. deren Änderungen (AP4) einen entscheidenden Beitrag zum Verständnis des komplexen konstitutiven Verhaltens (THMC-Kopplung).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### *Meilenstein 3: Modellhafte Untersuchungen.*

1. Entwicklung des Versuchskonzeptes
2. Modellhafte Untersuchungen zur Volumendehnung unter Berücksichtigung der thermischen Dehnung durch exotherme Abbindereaktionen und zeitlich versetzter Quellung (Schwellung)
3. Bestimmung des Quelldruckes
4. Porositäts- und Permeabilitätsuntersuchungen (Gas- und Lösungspermeabilität)

### *Meilenstein 4: Strukturuntersuchungen.*

1. REM- und Mikrosondenuntersuchungen an den Ausgangsstoffen, insbesondere MgO (Gitterparameter)
2. SEM- und Mikrosondenuntersuchungen zur Aufklärung der Volumendehnung
3. Untersuchungen zum Phänomen der Nachquellung bei Lösungszutritt

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

Die Durchführung der im Versuchsprogramm geplanten Versuche wurde abgeschlossen. Im Berichtszeitraum wurden die Permeabilitätsversuche, Kompressionsversuche bei behinderter Seitendehnung sowie die volumenkonstanten Quelldruckversuche durchgeführt. Zum Teil sind Versuche, die aufgrund der Versuchsrandbedingungen lange Zeit dauern (3 - 6 Monate Lager- bzw. Versuchsdauer) und die im ersten Halbjahr 2007 begonnen wurden, im Berichtszeitraum (2. Halbjahr 2007) abgeschlossen worden. Dazu zählen die Messungen der Saugspannungen sowie die Quelldehnungsversuche.

Gleichzeitig wurde mit der Erstellung des Abschlussberichtes begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1234</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlusselement im Salinar. Teilprojekt IfG: Untersuchungen der mechanischen Anforderungen und Eigenschaften		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2005 bis 31.07.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.07.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 183.188,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Salzer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Weiterentwicklung eines Barriersystems zu einem leistungsfähigen Verschlusselement im Salinar mit folgenden Zielsetzungen:

- Begrenzung des Kompaktionsvermögens des Baustoffs
- Verringerung der Permeabilität
- Untersuchungen zum Quellverhalten und einer gezielten Beeinflussung
- Untersuchungen zur Reduzierung der Abbinde temperatur
- Untersuchungen zu Druckfestigkeitsverlusten im In-situ-Versuch

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das FuE-Projekt ist in 7 Arbeitspakete gegliedert, die durch die Vertragspartner eigenständig zu bearbeiten sind:

- AP1: Weiterentwicklung des lastabtragenden Systems (K-U TEC)
- AP2: Untersuchungen zur Beeinflussung des Quellverhaltens (K-U TEC)
- AP3: Modellhafte Untersuchungen (Bauhausuniversität)
- AP4: Strukturuntersuchungen (Bauhausuniversität)
- AP5: Untersuchungen der mechanischen Anforderungen und Eigenschaften eines Dichtele-  
ments (**IfG**)
- AP6: Erprobung optimierter Systeme in einer kleintechnischen Versuchseinrichtung  
(K-U TEC)
- AP7: Versuchsauswertung, Abschlussbericht (alle Verbundpartner)

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

Zu AP5 / AP7: Untersuchungen der mechanischen Anforderungen und Eigenschaften eines Dichtelements auf der Basis eines Magnesiabindersystems

Die Untersuchungen der mechanischen Anforderungen und Eigenschaften eines Dichtelementes im Rahmen des BMBF-FuE-Verbundvorhabens „Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlussbauwerk im Salinar“ umfassen folgende Aufgabenschwerpunkte:

1. Ableitung der geomechanischen Entwicklungszielstellung für ein Dichtelement im Salinar (Wirtsgesteine: Steinsalz und Carnallit),
2. Beleguntersuchungen an den ca. 2 - 3 modifizierten Rezepturen,
3. Bereitstellen der Datenbasis für weitergehende Modellrechnungen.

Nachdem die Aufgabenschwerpunkte 1 bis 3 in den Jahren 2005 bis 2007 fachlich bearbeitet wurden, konzentrierten sich die Arbeiten im Berichtszeitraum auf die Zusammenstellung der Ergebnisse und die Erstellung des Abschlussberichtes zum Teilprojekt “Untersuchung der mechanischen Anforderungen und Eigenschaften eines Dichtelements auf Basis eines Magnesiabindersystems“.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine

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

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1244</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2005 bis 31.03.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 748.135,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hagemann

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde bei der Bestimmung des Zusammenhanges zwischen „scheinbarem pH-Wert“ und der tatsächlichen Wasserstoffionenkonzentration die Untersuchung der sulfatischen Systeme abgeschlossen. Die Messungen wurden im sauren pH-Bereich ausgeführt und die sich jeweils einstellende Hydrogensulfatkonzentration mittels geochemischer Modellierung berechnet. Bei sulfathaltigen Lösungen ist der Konzentrationseinfluss auf das Messsignal wesentlich geringer als bei den vorher untersuchten chloridischen Lösungen.

Anschließend wurde mit der Bestimmung der Abhängigkeit der Messspannung von der Hintergrundsalkonzentration bei ternären chloridischen Systemen begonnen. Bei den Systemen NaCl-KCl-H<sub>2</sub>O, NaCl-MgCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O und KCl-MgCl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O wurde jeweils ein weitgehend linearer Zusammenhang zwischen dem Molenbruch der gelösten Salze und der Differenz aus scheinbarem pH-Wert und logarithmierter Wasserstoffkonzentration gefunden.

Bezüglich der verlässlichen Redoxmessung in salinaren Systemen wurde zunächst eine Methode entwickelt, um mit der Standard Pt-Elektrode reproduzierbare und driftfreie Redoxwerte in konzentrierten Salzlösungen zu erhalten. Inzwischen liegen erste Messreihen bei einer konstanten Fe-Gesamtkonzentration und konstantem Fe(II)/Fe(III)-Verhältnis sowie konstantem pH aber bei variierender NaCl-Konzentration vor. Ähnlich wie bei der pH-Messung führt eine steigende NaCl-Konzentration zu einer Senkung der Messspannung. Hierfür ist sicherlich zum einen die Referenzelektrode verantwortlich, zum anderen aber auch eine veränderte Speziation des gelösten Eisen(II) und Eisen(III). Dies muss noch näher analysiert werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Abschluss der Untersuchung der Abhängigkeit der Messspannung von pH-Einstabelektroden von der Hintergrundsalkonzentration bei chloridischen, sulfatischen und komplexen Mischlösungen mehrerer Salze. Weiterführung der Redoxmessungen in salinaren Lösungen.

Entwicklung eines Verfahrens zur Messung von Fe(II)- und Fe(III)-Konzentrationen im Subnanomolar-Bereich mit der Kapillar-UV-Spektrometrie. Bestimmung der Hydroxokomplexbildung mittels UV-Spektroskopie von Fe(III) in salinaren Lösungen im pH-Bereich 1 bis 13.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1254</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Geochemische Barriereeffizienz im anaeroben Deponienahfeld einer UTD		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2005 bis 31.03.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 664.920,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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

AP2: Detailuntersuchungen ausgewählter Systeme mit Analyse von Reaktionsmechanismen

- Abschließende Auswertung der Screening-Analysen (AP1)
- Auswahl und Festlegung von sechs unterschiedlichen Abfällen zur weiteren Bearbeitung
- Zusammenstellung von Probenaufbereitungsmethoden für die Detailuntersuchungen mittels Laserablation Methodik für Detailuntersuchungen ausgewählter Abfälle incl. der Konzepte für die n-ICP-Massenspektroskopie (LA-ICP-MS)
- Test der geplanten Durchführung von Batchversuchen und speziesanalytische Bestimmung redoxsensitiver Elemente in Eluaten
- Konditionierung der Abfälle und einzusetzenden Lösungen für Detailuntersuchungen
- Analytik der ausgewählten Abfälle und vergleichende Auswertung mit den vorangegangenen Screening-Analysen
- Betreuung personeller Maßnahmen (Vertretungsregelung) im Rahmen der Unterauftragsvergabe an die TU-Braunschweig

AP3: Ableitung redoxpuffernder Zuschlagstoffe

- Weitere Literaturrecherchen zur Immobilisierung von Schwermetallen

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2:

- Weiterführung der Recherchen zu speziesanalytischen Verfahren für redoxsensitive Elemente (As, Cr, Fe, S, Sb, Cu, C, Hg, Sn) in Lösungen
- Batchversuche mit natürlichen und synthetischen Abfällen unter aeroben und anaeroben Versuchsbedingungen und unter Verwendung unterschiedlicher Kornfraktionen sowie der Originalabfälle
- Laserablationsanalytik an Originalabfällen und den Rückständen aus Batchversuchen (aerob/anaerob) unter Berücksichtigung unterschiedlicher Kornfraktionen
- Speziesanalytische Bestimmung redoxsensitiver Elemente in Eluaten, Oxidationszustände ausgewählter redoxsensitiver Elemente und Bindungsform von Schwermetallen in bestimmten Abfallphasen
- Analyse von Reaktionsmechanismen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1264</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Beweissicherungsprogramm zum geomechanischen Verhalten von Salinarbarrieren nach starker dynamischer Beanspruchung und Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie zum dauerhaften Einschluss		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2005 bis 31.12.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 627.883,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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**

- AP1: Mit der entwickelten nicht-lokalen Version des visko-elasto-plastischen Stoffmodells für ebene Modellgeometrien wurden weitere Testrechnungen durchgeführt. Die Abhängigkeit der Entfestigung von der Vernetzung, wie sie sich bei der lokalen Version des Stoffmodells zeigt, kann bei ausreichend feiner Vernetzung mit der nicht-lokalen Version weitgehend beseitigt werden. Durch Einbeziehung der Nachbarelemente in den Berechnungsablauf ist ein deutlicher Geschwindigkeitsverlust bei Berechnungen mit der nicht-lokalen Version des visko-elasto-plastischen Stoffmodells in Kauf zu nehmen.
- AP2: In der Wetterstrecke ca. 50 m über dem beim Gebirgsschlag 1996 in der Grube Teutschenthal kollabierten Ostfeld sind entlang eines Profils von 1800 m 19 Horizontalbohrungen im Leine-Steinsalz mit einer Bohrlochteufe von 15 m hergestellt worden. In den Bohrungen wurden im Bohrlochtiefsten insgesamt 32 Permeabilitäts-Tests mit zwei unterschiedlichen Verfahren durchgeführt. Erste Auswertungen geben keine Hinweise, dass sich die In-situ-Permeabilität der beim Gebirgsschlag dynamisch stark beanspruchten Steinsalzbarriere von Messungen in unbeanspruchten Bereichen unterscheidet.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP1: Testrechnungen mit der entwickelten nicht-lokalen Version des visko-elasto-plastischen Stoffmodells für ebene Modellgeometrien mit beliebigen Hohlräumen.
- AP2: Auswertung aller 32 In-situ-Permeabilitätstests und Diskussion der Messergebnisse.
- AP3: Gewinnung von Bohrkernproben im Leine-Steinsalz der dynamisch beanspruchten Salinarbarriere.
- AP4: Aufbau eines gebirgsmechanischen Strukturmodells für ein Endlager in der steilen Lagerung.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1275</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt TUC: Gekoppelte Modellierung des C:HM Verhaltens von selbstverheilendem Salzversatz		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2005 bis 31.03.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 257.176,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 axialgelochten 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

- AP1: Kurzzeitversuche an ausgehärteten SVV Vollprüfkörpern
- AP2: Kompressionsversuche unter isostatischen Dauerbelastungen
- AP3: Kriechversuche bei einem konstanten Manteldruck
- 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
- AP6: Implementierung des zu entwickelnden Stoffmodells für SVV ins FEM-Programm *FLAC3D*
- AP7: Implementierung der zu entwickelnden Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung für SVV ins FEM-Programm *FLAC*

- AP8: Implementierung der Schnittstelle zwischen *FLAC3D* und *CHEMAPP* über *EQLink* und Anpassung numerischer Verfahren für C:HM-Modelle  
 AP9: Überprüfung numerischer Modelle anhand von Versuchsergebnissen der GRS an Vollprüfkörpern und gelochten Großbohrkernen  
 AP10: Modellierung des von der GRS in ASS durchzuführenden SVV-In-Situ-Versuchs  
 AP11: Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Während und nach der vereinbarten Unterbrechung vom 01.11.2006 bis 30.09.2007 wurde im zweiten Halbjahr 2007 die Prüfkörperherstellung in Clausthal fortgesetzt, zunächst mit der neu gebauten SVV-Anlage nach GRS-Rezeptur. Mit diesen Prüfkörpern sind zunächst Kurzzeit – Festigkeitsversuche durchgeführt worden. Die Auswertung der Festigkeitsversuche an diesen durch Aufsättigung hergestellten Prüfkörper hat ergeben, dass die mechanischen Parameter eine beträchtliche Streuung aufweisen. Aus diesem Grund wurden zu Testzwecken Prüfkörper nach einem neu entwickelten Verfahren durch Vermischen von SVV und Salzlösung hergestellt. An zehn dieser Prüfkörper wurden Festigkeitsversuche mit variiertem Manteldruck durchgeführt. Ein Vergleich mit den Messwerten der aufgesättigten Prüfkörper zeigt eine deutlich geringere Streuung der Parameter.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im weiteren Verlauf wird entschieden, welche Herstellungsmethode, Aufsättigung oder Anmaischen, besser geeignet ist, um das Projektziel, auch im Hinblick auf die Simulationen, zu erreichen. Anschließend werden wie vorgesehen die AP1 bis AP3 weiter bearbeitet:

- AP1: Kurzzeitversuche an ausgehärteten SVV-Vollprüfkörpern
- AP2: Kompressionsversuche unter isostatischen Dauerbelastungen
- AP3: Kriechversuche bei einem konstanten Manteldruck

Parallel dazu beginnt die Einarbeitung in *GeoSys / RockFlow* und die Untersuchung der Möglichkeiten zur C:HM – Kopplung mit *GeoSys / RockFlow*, um bewerten zu können, wie leistungsfähig die Modellierung sein wird und ob bzw. wie die Ergebnisse verifiziert werden können.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Coupled modelling of the C: HM behaviour of self healing salt based backfill

F. Werunsky, Z. Hou\*

*Professorship for Waste Disposal and Geomechanics, Clausthal University of Technology, Clausthal-Zellerfeld, Germany*

*\*now with: Institute of Petroleum Engineering, Clausthal University of Technology, Clausthal-Zellerfeld, Germany*

H. C. Moog

*GRS - Gesellschaft für Anlagen - und Reaktorsicherheit mbH, Braunschweig, Germany*

Veröffentlicht in Form eines Posters und Papers auf der 6. Salzmechanikkonferenz in Hannover.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1285</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt GRS: Laborversuche und Geochemische Modellierung			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2005 bis 30.04.2008		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 508.179,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 GeoSys/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  $\text{Na} \leftrightarrow \text{Ca}$
- 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

AP1.2: Zur Untersuchung der Wirksamkeit des SVV-Versatzes zum Bohrlochverschluss wurden zwei gekoppelte Simulationsversuche an gelochten Großsalzkernen mit eingefülltem SVV-Material durchgeführt. Die Salzkern mit Durchmesser von 28 cm und Länge von ca. 70 cm wurden aus der 800-m-Sohle des Salzbergwerks Asse entnommen. Unter dem äußeren Manteldruck von ca. 15 MPa wurden die versetzten Bohrlöcher von 10 cm Durchmesser mit Salzlösung bei hohen Injektionsdrücke bis zu 3,7 MPa geflutet. Die chemisch-mineralogische Reaktionen zwischen SVV-Material und Salzlösung bewirkten eine schnelle Temperaturerhöhung bis zu 113 °C und einen Aufbau des Kristallisationsdrucks bis zu 1,5 MPa. Die gebildeten Kristalle schließen die Poren im SVV-Versatz, so dass die integralen SVV-Salz-Proben mit sehr niedrigen Gaspermeabilitäten von  $1\text{E-}19$  bis  $1\text{E-}21$   $\text{m}^2$  praktisch undurchlässig geworden sind.

AP2.1, 2.3: Fortführung.

AP2.4: Beginn in abweichender Form vom Angebot. Es wird mit  $\text{CaCl}_2$ -Lösung äquilibriert und anschließend auf  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ -Lösung umgeschaltet. Durch diese Versuchsführung wird die durch hohe pH-Werte induzierte Auflösung von Tonmineralstrukturen vermieden; es verbleiben die Effekte Ionenaustausch und Ausfällung im Porenraum.

AP3: Wurde im Berichtszeitraum nicht bearbeitet. Die für den zurückliegenden Berichtszeitraum vorgesehen Arbeiten werden im kommenden Halbjahr begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Fortführung von AP2.1, 2.3, 2.4.

AP3.1: Abgestimmte Änderungen an ROCKFLOW (ZAG) und EQLINK(GRS), die eine Entflechtung, Beschleunigung und Flexibilisierung der bestehenden Kopplung zum Ziel haben.

AP3.2: Fortsetzung der Arbeiten zur Einbindung von Ionenaustausch-Reaktionen in Rechnungen mit CHEMAPP.

AP3.3: Weitere Durchführung von Testrechnungen, u. a. bezgl. der Einbindung von Zerfallsketten von Radionukliden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Eberhard-Karls-Universität Tübingen, Wilhelmstr. 7, 72074 Tübingen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1295</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse. Teilprojekt Uni Tübingen: Validierung Numerischer Modelle für geochemische Prozesse in geotechnischen Dichteelementen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Verbesserung von Instrumentarien für die Sicherheitsbewertung von Endlagern und Untertagedeponien		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2005 bis 31.03.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 233.598,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kolditz	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Verbundvorhabens ist es, aktuell in der Entwicklung befindliche Programme für die Modellierung hydraulischer und mechanischer Prozesse in Salz-/Bentonit-Barrieren MISES III (TUC) und GeoSys/RockFlow (UFZ) 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 sowohl in kristallinen 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 EQLink/ChemApp und GeoSys/RockFlow (GS/RF) erfolgen. Alternativ wird eine Schnittstelle zum geochemischen Simulator GEMS (Paul-Scherrer-Institut, Schweiz) vorgeschlagen. Durch die Entwicklung dieser 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 der ersten Phase des Projekts wurde die programm-technische Umsetzung der Schnittstelle GS/RF+ChemApp zwischen GeoSys/RockFlow und dem geochemischen Simulator ChemApp realisiert (AP2) (Xie et al. 2007a) sowie die Verifizierung des gekoppelten Codes anhand ausgewählter Testbeispiele vorgenommen (AP3) (z. B. Magnesium-Sulfat als Verschlussmaterial im Salinar, Xie et al. 2007b). Durch den Wechsel der Arbeitsgruppe von Tübingen nach Leipzig kam es zu Verzögerungen in der Projektbearbeitung und eine kostenneutrale Verlängerung des Vorhabens bis 03/2009 wurde beantragt.

Fachlich eng verbunden mit dem Vorhaben sind folgende Aktivitäten:

- DECOVALEX-IV: Abschluss des internationalen Benchmark-Projektes für die Verifizierung von THC-Modellen insbesondere erfolgreicher Vergleich mit TOUGH-REACT (McDermott et al. 2007), Implementierung und Test des reaktiven Mehrphasenströmungsmodells (Beyer et al. 2007),
- GS/RF-GEMS: Implementierung und Test der Schnittstelle zwischen GeoSys/RockFlow und GEMS (Gibb-Energy-Minimization Selector) (Shao et al. 2008), das am Paul-Scherrer-Institut in der Schweiz entwickelt wird (Kulik et al. 2008).

*Kulik D.A., S.V. Dmytrieva, K.V. Chudnenko, and T. Thoenen. 2008. GEM-Selektor (GEMS-PSI) Research package for thermodynamic modelling of aquatic (geo)chemical systems by Gibbs Energy Minimization. Paul Scherrer Institut, <http://gems.web.psi.ch>.*

### 4. Geplante Weiterarbeiten

In der nächsten Projektphase sind folgende Arbeitsschritte geplant:

- Weitere Anwendung von GS/RF+ChemApp bzw. GS/RF+GEMS für Fragestellungen im Salinar, insbesondere die Modellierung von Magnesium-Sulfat als Verschlussmaterial,
- Mehrphaseneffekte: Durch die Kopplung mit dem Zweiphasenströmungsmodell können nun Mehrphaseneffekte bei geochemischen Reaktionen berücksichtigt werden,
- Kopplung zwischen chemischen und mechanischen Prozessen, Modellierung von Versuchen mit Steinsalz an der GRS,
- Parallelisierung von reaktiven Transportmodellen zur Verbesserung der Recheneffizienz (siehe auch Bericht zum Vorhaben 02C1114).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Xie M, Wang W, de Jonge J and Kolditz O (2007a): Numerical modelling of swelling pressure in unsaturated expansive elasto-plastic porous media. *Transport in Porous Media*, vol. 66 (3): 311-339, DOI 10.1007/s11242-006-0013-0.

Beyer C, McDermott C I, Bauer S and Kolditz O (2007): Reaktive Transportprozesse in ungesättigten porösen Medien - Modellvergleich zwischen Mod2Phase und GeoSys/RockFlow, Technical Report, University of Tübingen and Helmholtz-Center for Environmental Research Leipzig.

Xie M, Moog H, Wang W, Herbert H-J, Shao H and Kolditz O (2007b): Reactive transport modeling in salt material based on Gibbs energy minimization. 6th Conference on the Mechanical Behavior of Salt: Understanding of the THMC Processes in Salt Rocks, Hannover, 22-25.05.2007.

McDermott CI, Xie M, Shao H, Kolditz O (2007): DECOVALEX - Task D – THC simulations, Final Report, ENVIN-Report [2008-2].

Shao H, Dmytrieva SV, Kolditz O, Kulik DA, Pfingsten W, Kosakowski G (2008): GS/RF-GEM: A coupled code for reactive transport modeling, submitted to *Ground Water*.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Leipzig, Ritterstr. 26, 04109 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1305</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswerteeinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. Teilprojekt Uni Leipzig: Geologie, Geoelektrik, Seismik und Szenarienmodellierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2005 bis 31.05.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 579.486,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 Salinalgestein 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**

Am Referenzstandort Teutschenthal wurden im September 2007 geoelektrische Wiederholungsmessungen auf der Sohle sowie Messungen auf einem Profil am Stoß der Strecke durchgeführt. Die Ergebnisse der Stoßmessung, die weniger von der gutleitfähigen Sohle beeinflusst ist, zeigen längs der Strecke deutlich 3 Bereiche unterschiedlichen elektrischen Widerstandes, wobei die stärksten Inhomogenitäten im Bereich der Bruchfeldgrenze auftreten.

Die Wiederholungsmessungen auf der Sohle zeigen in den Widerstandskontrasten kaum Änderungen zu den vorherigen Messungen, die relativen Abweichungen sind jedoch deutlich. Die alleinige Ursache dafür liegt im Einfluss der dünnen leitfähigen Oberflächenschicht, deren Wassergehalt sich in Abhängigkeit von der saisonalen untertägigen Bewetterungssituation verändert. Analytische Modellrechnungen an Zweischicht-Modellen bestätigen diesen Offset-Effekt.

Die Labormessungen (Wassergehalts- und Dichtebestimmungen an Proben vom Stoß der Referenzstrecke in Teutschenthal) wurden weitergeführt.

Für die konkrete Messsituation am Referenzstandort Teutschenthal wurden zur Simulation von geoelektrischen Messungen Finite-Elemente-Modelle (2D und 3D) unter Einbeziehung der Ergebnisse der anderen geophysikalischen Verfahren (Georadar, Seismik, Sonar) erstellt. Damit können nun für die verschiedenen verwendeten Messkonfigurationen und verschiedene Parameterkonstellationen synthetische Datensätze berechnet werden. Durch deren Analyse kann die Mehrdeutigkeit der Interpretation der Messergebnisse eingeschränkt werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Weitere Auswertung der geoelektrischen und seismischen Messungen auf der Referenzmessstrecke in Teutschenthal-Angersdorf
- Ergänzungsmessungen am Stoß der Referenzmessstrecke in Teutschenthal-Angersdorf
- Weiterführung der Laboruntersuchungen an Gesteinsproben von den Referenzstandorten
- Fortsetzung der numerischen FEM-Modellierungen geoelektrischer Untertage-Messungen

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1315</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswerteeinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. Teilprojekt GGA: Elektromagnetik, Georadar und Quantitative Charakterisierung von Problemzonen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2005 bis 31.05.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 340.080,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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 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 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 Auswerteeinstrumentariums, Handlungsempfehlungen, Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Radargergebnisse vom Standort *Teutschenthal* wurden einer genaueren geologischen Interpretation unterzogen. Im Bereich der Bruchfeldgrenze deutet sich eine Zerrüttungszone an. Ein ansonsten kontinuierlicher Reflektor innerhalb des Steinsalzes ist unterbrochen und zeigt Diffraktionshyberbelen, die auf Bruchstrukturen hinweisen.

Eine spezielle Bearbeitung der an beiden Standorten gewonnenen Daten in Multi-Offset-Anordnung führt zu einer Verbesserung gegenüber standardmäßig verwendeten Constant-Offset-Messungen. Es wird eine deutliche Verringerung des Rauschniveaus und damit eine erhöhte Eindringtiefe erzielt. Durch das Multi-Offset-Verfahren können störende Signale von gesuchten Reflexionen differenziert werden. Es eignet so-

mit sich als Interpretationshilfe von Georadar-Untertagemessungen. Als Endergebnis erhält man ein verbessertes Abbild des untersuchten Untergrundes in dem störende Signale abgeschwächt werden.

Die im ersten Halbjahr 2007 entnommenen Gesteinsproben wurden am Rasterelektronenmikroskop und mit dem Verfahren Helium- (He) Pyknometrie auf Porosität analysiert. Die Rastermikroskopaufnahmen der Proben lieferten wichtige Zusatzinformationen zur Gesteinsphysik und -chemie im Untersuchungsraum. Mit der Präzisionsmethode He-Pyknometrie konnte keine sinnvolle Porosität bestimmt werden. Mit der gleichzeitig gemessenen Dichte sollen noch theoretische Porositäts-Obergrenzen ermittelt werden.

Zur quantitativen Charakterisierung von Problemzonen im Salinar wurde der methodische Ansatz mit dem Verfahren der Support-Vector-Machines (SVM) weiterverfolgt und mit der Anwendung neuronaler Netze ergänzt. Beide Methoden wurden an den neu aufgearbeiteten Daten aus der Kaligrube *Sigmundshall* (zweites Salinarprojekt) getestet. Aufgrund der großen Entfernung der Salzlösungszone (70-80 m) vom Messprofil wurde diese von der Geoelektrik nicht (erreichte Tiefe hier 30 m) und vom Sonarverfahren nicht ausreichend erfasst, so dass eine integrierte Bearbeitung mit Radar- und Seismikdaten nur bedingt möglich war.

Für die Detektion von Salzlösungen an den neuen Messlokalen der Bergwerke *Sollstedt* und *Teutschen-*thal** sind die zur Ableitung notwendiger Trainingsdaten aus Messdaten erforderlichen Bedingungen nicht gegeben (Bohrungen mit Salzlösungsanschnitt). Deshalb wurde der Arbeitsschwerpunkt auf die Modellierung mit plausiblen physikalischen Gesteinsparametern gelegt. Über die Charakteristiken von Wellenattributen, zunächst für das Radar, konnten mit den daraus abgeleiteten Trainingsdaten Gesteinsklassifizierungen aus den Messdaten erreicht werden. Salzlösungsbereiche zeichneten sich ebenfalls ab, jedoch nur mit bedingter Aussagesicherheit.

Um die Aussagesicherheit zu verbessern, wurden aus der Palette der Mustererkennungsmethoden verschiedene künstliche neuronale Netze angewandt. Die Resultate wiesen undeutliche, geologisch und geophysikalisch bisher nicht erklärbare Muster auf, die nur teilweise mit denen aus der SVM-Bearbeitung übereinstimmten.

Sowohl die SVM-Bearbeitung als auch die neuronalen Netze lieferten unterschiedliche Ergebnisse, je nachdem ob mit oder ohne Daten der Geoelektrik gerechnet wurde. Bei Einbeziehung der geoelektrischen Daten werden hauptsächlich diese in den Mustern wieder gefunden. Diese Tatsache und die bekannte Unsicherheit bei geoelektrischen Untertagemessungen auf einem Messprofil hinsichtlich der erfassten Untergrundbereiche weisen darauf hin, dass die Wellenverfahren im Vergleich zur Geoelektrik andere Bereiche im Gestein erfassen. Ein „Zusammenwerfen“ beider Datensätze birgt große Unsicherheiten. Dies sollte für die weitere Arbeit Berücksichtigung finden.

Mit dem hier entwickelten Mustererkennungsalgorithmus wurde im Bergwerk *Sollstedt* die Schichtgrenze zwischen Steinsalz und Anhydrit gefunden, deren Vorkommen bisher nur vermutet und deren Lage unbekannt war. Diese Trennung der Gesteinsschichten ist aus einem Radargramm allein nicht möglich. Salzlösungsbereiche zeichneten sich ebenfalls ab, jedoch nur mit bedingter Aussagesicherheit.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weitere Auswertung der gewonnenen Multioffset-Daten
- Geologische Interpretation der Reflexionen in Zusammenarbeit mit Dr. Schwandt
- Berechnung der Charakteristiken von Wellenattributen für die Seismik und Sonar aus Modellen verschiedener physikalischer Gesteinsparameter und daraus Ableitung der Trainingsdaten für die Mustererkennung
- Zusammenführende Datenintegration zur Anomalieerfassung
- Abschlussbericht
- Handlungsempfehlungen

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Uchtmann, S. (2007): Multi-Offset-Messungen im Salinar. 7. Rundtischgespräch „Georadar“, 04.-05.10.2007; Freiberg.

Ehret, B., Uchtmann, S. (2007): Verbundvorhaben Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswerteeinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar, GGA- Seminar, 8.5.07; Hannover.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Fraunhofer Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V. (FhG), Hansastr. 27 c, 80686 München		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1325</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswerteeinstrumentarium zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar. Teilprojekt FhG: Sonarverfahren		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2005 bis 31.05.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 477.455,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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: Für den Referenzstandort Sollstedt wird ein konkretisiertes geologisches Modell des Untersuchungsbereiches auf der Basis archivierter geologischer Kartierungen und Aufschlüsse erstellt.

AP2: Im Berichtszeitraum keine Aktivitäten.

AP3: Die Softwareentwicklung für das Testmuster des bergbautauglichen 16-kanaligen 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: Im Rahmen des Forschungsvorhabens konnte das SAFT-Inversionsverfahren für die in-situ gewonnenen Messwerte stetig weiterentwickelt werden. Im Anschluss an das Processing der an den Referenzstandorten Sigmundshall, Sollstedt und Teutschenthal gewonnenen Daten erfolgte deshalb eine Neubearbeitung der im Ausgangsvorhaben 1999/2000 in Bischofferode gewonnenen Sonardaten (Abschlussbericht Komplexes Mess- und Auswertesystem für die untertägige Erkundung von Problemzonen der geologischen Barriere von Endlagern und Untertagedeponien (UTD) im Salinar – Forschungsvorhaben 02C0568, Einbeziehung Sonarverfahren, Leipzig, März 2002). Die Modularität des geschaffenen Auswertesystems gestattet die Übergabe unterschiedlich prozessierter Sonardaten als Trainingsdaten für die bei der Komplexinterpretation eingesetzte Mustererkennung.

AP7: Im Berichtszeitraum keine Aktivitäten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Entwicklung des bergbautauglichen 16-kanaligen Sonar-Messsystems wird fortgesetzt. Der Schwerpunkt der weiteren Interpretation der Messdaten liegt auf der Datenfusion der unterschiedlichen Messverfahren.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Das bergbautaugliche Ultraschall-Messsystem wurde auf dem Kolloquium Schallemission des Fachausschusses Schallemissionsprüfverfahren der Deutschen Gesellschaft für Zerstörungsfreie Prüfung vorgestellt: Horst Kühnicke, Eberhard Schulze, Dirk Voigt, Verbesserte Lokalisation mittels Signalformanalyse, 16. Kolloquium Schallemission, Puchberg, September 2007

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1335</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Qualifizierung von Strömungsbarrieren in Salzformationen, Phase 1 bis Phase 4	
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2005 bis 28.02.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 945.114,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Herbert

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurde im Forschungsbergwerk Asse auf der 574 m-S im Trümmercarnallit ein Versuch in einem vertikalen Großbohrloch (1,00 m Durchmesser, 6 m Tiefe) durchgeführt, um die Dichtwirkung des SVV-Materials auch in Kalisalzen nachzuweisen. Aufgezeichnet wurden der Laugendruck während der Flutung und nach dem Abstellen des Pumpendrucks während der Reaktion, weiterhin der sich entwickelnde Kristallisationsdruck und die Temperaturentwicklung während der Flutungs- und der anschließenden Reaktionsphase. Durch die Kombination einer Kiesschüttung mit permeablem Beton wurde eine gleichmäßige Verteilung der injizierten  $MgCl_2$ - $CaCl_2$ -Lösung über den gesamten Bohrlochquerschnitt erzielt. Die schnellstmögliche Flutung und die Aufrechterhaltung eines maximalen Lösungsdrucks von 35 bar in dem 2,00 Meter hohen und auf  $1530 \text{ kg/m}^3$  verdichteten, aus reinem wasserfreiem  $MgSO_4$  bestehenden Versatzkörpers, wurde mittels pneumatischer Umsetzpumpe erreicht. Um einer durch Lösungsdruck und/oder durch Kristallisationsdruck des hydratisierten Magnesiumsulfats bedingten Verschiebung des Dichtkörpers entgegen zu wirken, wurde das Großbohrloch mit einem Stopfen von 2,88 Meter Höhe aus Sorelbeton Kl. A1 verschlossen. Zur Erfassung der aus der Reaktion resultierenden Kräfte wurden Kraftmessdosen installiert, welche über ein Widerlager aus HEB-Trägern fixiert wurden. Eine vorab Auswertung nach der Flutungsphase hat ergeben, dass die Reaktionstemperaturen und eingebrachten Lösungsmengen den Werten aus den Vorversuchen in den großkalibrigen Druckrohren entsprachen. Während der Flutung mit der  $MgCl_2$ - $CaCl_2$ -Lösung stiegen Temperaturen an vier der insgesamt 5 Fühler sehr schnell auf Werte zwischen  $65$  und  $75$  °C an, um nach wenigen Minuten genau so schnell wieder abzufallen. Am höchstgelegenen Fühler wurde für wenige Minuten  $98$  °C gemessen. Siedetemperaturen und Dampfbildung wurden damit erwartungsgemäß nicht erreicht. Durch die Flutung mit 35 bar Laugendruck wurde, wie erwartet, schnell das ganze SVV-Volumen mit Lauge gefüllt. Der Laugendruck konnte jedoch nicht länger als 8 Stunden aufrechterhalten werden, da sich in dem offenbar zerrütteten Gebirge Wegsamkeiten auftraten, über die die Lauge 8 m tiefer in der Wendel austrat. Darum wurde die Laugenpumpe abgestellt und die Reaktion im SVV-Körper ohne Laugendruck abgewartet. Erwartungsgemäß hörte der Laugenaustritt in der Wendel sofort auf und der Kristallisationsdruck im SVV-Körper fing langsam an zu steigen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Reaktion SVV/Lauge, die zum Aufbau des Kristallisationsdrucks führt, könnte theoretisch auch die nachgewiesenen Wegsamkeiten verschließen. Ob dieser Fall eintritt, wird eine weitere Beaufschlagung des SVV-Stopfens mit Laugendruck Ende Januar 2008 ergeben. In definierten Zeitabständen wird weitere  $MgCl_2$ - $CaCl_2$ -Lösung nachgeführt, bis sich der Kristallisationsdruck stabilisiert. Danach wird die Permeabilität des Gesamtsystems SVV-Stopfen/Auflockerungszone gemessen. Über Kernproben soll insbesondere die Kontaktzone zwischen dem sich bildenden Versatzkörpers und dem umgebenden Gebirge in Augenschein genommen werden und petrophysikalische Parameter (Porosität, Permeabilität) des Versatzkörpers zu ermittelt werden. Im ersten Halbjahr 2008 ist weiterhin geplant, Kernproben aus den vier großkalibrigen Druckrohren zu gewinnen, und die relevanten chemisch-mineralogischen, hydraulischen und geomechanischen Kennwerte zu ermitteln.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1355</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht permeables Barrieren-Gebirge (Salinar)		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2005 bis 31.12.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 581.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Infiltrationsversuche an Salzprüfkörpern mit unterschiedlichen Fluiden
- AP2: Infiltrationsversuche an Salzprüfkörpern aus verschiedenen Lokationen
- AP3: Anpassung / Erweiterung des vorhandenen Infiltrationsmodells (Infiltrationsraten- / Infiltrationsmengenmodell)
- AP4a: Implementierung des erweiterten Infiltrationsmodells und Kopplung an das FEM-Programm MISES3
- AP4b: Implementierung des erweiterten Infiltrationsmodells und Kopplung an das FDM-Programm FLAC3D
- AP5: Versuche an vollständig oder teilweise axial gelochten Prüfkörpern
- AP6: Validierung der rechnerischen Simulation des Infiltrationsprozesses anhand laborativer Untersuchungen an speziellen Prüfkörpern
- AP7: Demonstration der Wirkungsweise der Simulationssoftware INFIL anhand von exemplarischen Beispielen
- AP8: Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Versuche mit Tracer-Flüssigkeit und Lauge wurden und werden durchgeführt. Es hat sich gezeigt, dass Versuche mit Lauge nicht geeignet sind, die infiltrierten Bereiche zu identifizieren.
- AP2: Versuche sind bislang an Prüfkörpern aus Asse-Steinsalz sowie drei weiteren Lokationen durchgeführt worden. Darüber hinaus sind erste Infiltrationsversuche mit Tracer-Flüssigkeit bei einem signifikant höheren Druckniveau erfolgt. Unter diesen Bedingungen ist überraschend eine so deutliche Trennung zwischen Infiltrations- und Strömungsphase wie in den bisherigen Versuchen nicht zu erkennen.
- AP3: Das Infiltrationsmodell wird weiterhin für eine 3D-Berechnung modifiziert mit dem Ziel einer Berücksichtigung von Schichtungseinflüssen auf die Infiltrationsfrontentwicklung. Das Infiltrationsmodell wurde für eine Berechnung an einem rotationssymmetrischen Modell mit dem Ziel der Berücksichtigung von thermisch bedingtem Druckaufbau modifiziert. Des Weiteren wurde das Infiltrationsmodell mit dem Ziel der Berücksichtigung einer Querinfiltration modifiziert. Unter dem Aspekt versetzter Grubenräume mit dem Versatz als porösem Material sind Erweiterungen hinsichtlich der stofflichen Modellierung bei mechanisch-hydraulischer Kopplung vorgenommen worden (Versatzkompaktion und Fluidruckaufbau). Arbeiten zur modellhaften Berücksichtigung eines chemisch oder biologisch bedingten Gasdruckaufbaus in versetzten Grubenräumen sind aufgenommen worden. Anhand verschiedener Literaturquellen soll die Gasbildung in ihrem zeitlichen Verlauf quantifiziert werden. Hieraus erfolgt zusätzlich zur Grubenraumkonvergenz eine Vergrößerung des Gasdrucks in den versetzten Grubenräumen.
- AP4: Die weitere Implementierung und Verifikation der Kopplung des Infiltrationsmodells an das FDM-Programm FLAC3D sind Gegenstand der derzeitigen Arbeiten, um damit eine Berechnung von 3D-Modellen zu ermöglichen. Die Ergebnisse sind inzwischen zufrieden stellend, allerdings sind noch nicht alle Arbeiten zur effizienten Datenverwaltung abgeschlossen, d. h. das Programmsystem bietet noch erhebliche Möglichkeiten zur Verkürzung der Rechenzeiten.  
Die Gleichungen zur Berücksichtigung eines thermisch bedingten Druckaufbaus wurden zur Kopplung an das FEM-Programm MISES3 implementiert. Auch die Gleichungen zur Berücksichtigung der Querinfiltration sind zur Kopplung an das FEM-Programm MISES3 implementiert worden.  
Die Erweiterung zur Berücksichtigung eines porösen Versatzmaterials ist in das Programm INFIL-MISES3 implementiert und getestet worden.
- AP5: Die Versuche sind bislang an Vollprüfkörpern durchgeführt worden.
- AP6: Die Validierung des Infiltrationsmodells und die numerischen Simulationen werden parallel zur Weiterentwicklung der Simulationssoftware durchgeführt.
- AP7: Arbeiten an einem ersten Beispiel sind aufgenommen worden.
- AP8: Keine.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weitere Versuche mit unterschiedlichen Fluiden / Salzgesteinen / Belastungsrandbedingungen.
- AP2: Weitere Versuche mit geändertem Infiltrations-Druckniveau.
- AP3: Weitere theoretische Ansätze sind zurzeit nicht vorgesehen; schwerpunktmäßig wird an der Umsetzung / Implementierung / Verifizierung bzw. Validierung gearbeitet.
- AP4: Die Arbeiten zur Kopplung FLAC3D-INFIL werden fortgesetzt. Die Implementierung der 3D-Infiltration wird fortgesetzt. Schwerpunkte sind dabei zurzeit die Verbesserung der Datenverwaltung und somit auch der Rechenzeiten sowie 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, insbesondere nach Programmweiterungen und im Zusammenhang mit der Kopplung an FLAC3D vorgenommen.
- AP7: Weiterführung der Arbeiten an exemplarischen Beispielen (Bernburg-Kaverne, Bernburg-Bohrlochfracversuch mit Gas).
- AP8: Abschlussbericht

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

*Lux, K.-H. (2007): Long-term Behavior of Sealed Brine-filled Cavities in Rock Salt Mass – A new Approach for Physical Modelling and Numerical Simulation, Proceedings of the 6<sup>th</sup> Conference on the Mechanical Behavior of Salt in Hannover, Germany.*

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Kali-Umwelttechnik GmbH vorm. Kaliforschungsinstitut, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1395</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 31.12.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 615.337,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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
- Kali-Umwelttechnik GmbH (K-UITEC), Sondershausen

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Innerhalb der Arbeitspakete 2 und 3 wurden folgende Schwerpunkte bearbeitet:

- Variation der Versuchsbedingungen bei der Darstellung der Magnesiabindersysteme auf Sulfatbasis
- Untersuchungen zur Festigkeit der Systeme
- Röntgenografische und Strukturuntersuchungen an Magnesiabindersystemen auf Sulfatbasis

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Mit präferierten MgO-Typen (MgO-Gehalt < 90 %) im Aktivitätsbereich von 100 – 180 s wurde das System MgO-MgSO<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O weiter untersucht. Da die hergestellten Probekörper bisher nur ungenügende Druckfestigkeiten im Bereich von 2 – 12 MPa aufwiesen, wurde die Temperaturabhängigkeit der Oxisulfat-Phasenbildung untersucht. Die erhoffte Festigkeitserhöhung durch eine Temperaturerhöhung bei der Herstellung konnte nicht nachgewiesen werden. Es wurden ebenfalls Druckfestigkeiten (nach 7 Tagen) im Bereich von 2 – 13 MPa erreicht. Röntgenografische Untersuchungen zeigten, dass sich mit steigenden Temperaturen nicht mehr die 3-1-8-Phase (3·Mg(OH)<sub>2</sub>·MgSO<sub>4</sub>·8H<sub>2</sub>O) bildet, sondern zunehmend die 1-1-5-Phase (Mg(OH)<sub>2</sub>·MgSO<sub>4</sub>·5H<sub>2</sub>O) und beispielsweise Brucit (Mg(OH)<sub>2</sub>).

Durch ESEM-Untersuchungen zur Struktur der Oxisulfat-Phasen wurde festgestellt, dass die 3-1-8-Phase eine Blättchenstruktur aufweist, die sich nicht vernetzt und deshalb weder den

relativ hohen Wasseranteil, der mit der gesättigten  $\text{MgSO}_4$ -Lösung in das System eingetragen wird, strukturell einbindet noch hohe Festigkeiten erreichen kann.

Bei Versuchen mit einem Molverhältnis  $\text{MgO}:\text{MgSO}_4$  von 3:1 konnten durch die Röntgenanalysen die verschiedenen Oxisulfat-Phasen nachgewiesen werden. Bei einem höheren  $\text{MgO}$ -Anteil (entspr. höheres Molverhältnis) bildeten sich zunehmend mehr Brucit und Periklas. Damit einher geht zwar eine Festigkeitserhöhung; die Oxisulfat-Phasen, die hier untersucht werden sollen, wurden jedoch zurückgedrängt. Um das Molverhältnis  $\text{MgO}:\text{MgSO}_4$  von ca. 3:1 nicht zu verändern, aber insgesamt weniger Wasser in das System einzutragen, wurde zusätzlich zur gesättigten  $\text{MgSO}_4$ -Lösung wasserfreies  $\text{MgSO}_4$  zusammen mit dem  $\text{MgO}$  als Feststoff zugegeben. Damit konnten Druckfestigkeiten (nach 7 Tagen) im Bereich von 15 – 30 MPa erreicht werden. In diesen Fällen bildete sich überwiegend die 1-1-5-Phase ( $\text{Mg}(\text{OH})_2 \cdot \text{MgSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ) neben Brucit und in geringem Maße die 5-1-3-Phase ( $5 \cdot \text{Mg}(\text{OH})_2 \cdot \text{MgSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ).

Ein ausgewähltes Leimsystem im System  $\text{MgO}-\text{MgSO}_4-\text{H}_2\text{O}$  wurde eingehender untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse starken Schwankungen unterliegt, die möglicherweise mit der Alterung des  $\text{MgO}$  zusammenhängen. Dazu werden weitere Untersuchungen durchgeführt.

Auf der Grundlage dieser ausgewählten Leim-Rezeptur mit einem Molverhältnis  $\text{MgO}:\text{MgSO}_4$  von 3:1 und einer Druckfestigkeit (nach 7 Tagen) von ca. 15 – 20 MPa wurden Rezepturen für ein Baustoffsystem mit verschiedenen Zuschlagstoffen entwickelt und erste Untersuchungen durchgeführt. Es wurden inerte Zuschlagstoffe auf Quarzbasis (Quarzsand, Quarzmehl, Microsilica) in unterschiedlicher Körnung verwendet und Druckfestigkeiten von 25 – 28 MPa erreicht, die im Zielfeld für die 7-d-Druckfestigkeit liegen.

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

Die Baustoffrezepturen sollen im weiteren Verlauf optimiert werden, d. h. der Zusatz von inerten Zuschlagstoffen wird variiert, um die Verarbeitbarkeit und die Wärmeentwicklung in realistischen Bereichen zu fixieren. Verschiedene Zusätze zur Aussteuerung der Verarbeitungszeit und der rheologischen Parameter (Verflüssiger und Abbindeverzögerer) werden getestet in Bezug auf ihren Einfluss auf die Festkörpereigenschaften des Baustoffes.

Die Versuche in einer kleintechnischen Versuchsanlage im  $\text{m}^3$ -Maßstab mit einer optimierten Rezeptur werden vorbereitet.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1405</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 31.12.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 330.406,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Langefeld	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagenuntersuchung zur Optimierung der Magnesiabinder-Alkali-Phosphat-Baustoffe (INW)
- AP2: Grundlagenuntersuchung zu dem Magnesiabinder Oxysulfat-System (K-UTEC)
- 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-UTEC)
- AP6: Erprobung optimierter Systeme in einer kleintechnischen Versuchsanlage analog FuE-Projekt 02C1214 (K-UTEC)
- AP7: Versuchsauswertung, Abschlussberichte, Verwertungskonzept (alle Verbundpartner)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Während des Berichtszeitraumes wurden in der Triaxialzelle erste Untersuchungen mit Proben des Institutes für Nichtmetallische Werkstoffe (INW) durchgeführt. Dabei handelt es sich um Proben auf Phosphatbasis der Grundrezeptur 1. Getestet wurde bei einem axialen Druck von 15 MPa und einem Durchströmdruck von  $5 \times 10^5$  Pa. Nach Beendigung der Versuche konnte keine Verformung bzw. Durchströmung festgestellt werden. Im Anschluss wurden die Proben halbiert und für weitere Untersuchungen an das INW weitergeleitet. Am INW soll dokumentiert werden, ob es zu einer Gefügeveränderung durch z. B. Phasenneubildungen bzw. Lösungseffekte gekommen ist. Dazu wurden REM-Aufnahmen gemacht. Auf den Aufnahmen waren keine Veränderungen im Gefüge zu erkennen.

Die Eindringtiefe der bei den Versuchen verwendeten Lauge war nach Versuchsende nicht erkennbar. Um das Eindringverhalten der Lauge sichtbar zu machen, werden bei den weiteren Versuchen verschiedene Tracer zum Einsatz kommen. In einem ersten Versuch wurde eine Probe mit Methylenblau angefärbter Lauge durchströmt. Im Probeninneren konnte jedoch keine Verfärbung festgestellt werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im folgenden Berichtszeitraum sollen erste Proben der Firma K-UTEC auf Sulfatbasis in der Triaxialanlage geprüft werden. Parallel dazu werden auch weiterhin die Proben des Institutes für nichtmetallische Werkstoffe geprüft. Dabei handelt es sich um die optimierten Proben der Grundrezeptur. Die Optimierung erfolgt hinsichtlich der Lösungsoptimierung, des Phosphatgehaltes, der verschiedenen MgO-Reaktivitäten und Korngrößen, des Zuschlages und der Verarbeitbarkeit am Institut für Nichtmetallische Werkstoffe.

Es werden weiterhin Versuche unternommen die Proben mit einer markierten Lauge zu durchströmen, um ein eventuelles Eindringen sichtbar zu machen.

Außerdem sollen erste Untersuchungen hinsichtlich der Wärmeleitfähigkeit an den Proben auf Phosphatbasis stattfinden sowie die Bestimmung der Permeabilität dieser Proben.

Ein weiterer Untersuchungsschwerpunkt stellt das Anbindevermögen an das umgebende Salzgebirge dar. Dazu werden Salz-Bohrkerne in der Mitte aufgebohrt und mit den verschiedenen optimierten Baustoffmischungen gefüllt.

Anschließend sollen folgende Untersuchungen durchgeführt werden:

- REM-Aufnahmen,
- Beaufschlagung der Zylinderprobe mit diversen Salzlösungen in der Triaxialzelle,
- Bestimmung des Durchlässigkeitsbeiwertes sowie
- Bestimmung der Haftscherfestigkeit und Zugfestigkeit.

Ferner werden die Überlegungen zum Arbeitspaket 5: „Handhabungsversuche“ fortgeführt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1415</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2005 bis 31.12.2008	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 290.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Wolter	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

Weiterhin soll das Erhärungsverhalten 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

- Untersuchungen zum Erhärungsverhalten der entwickelten Rezeptur
- Rezepturoptimierung
- Phasenidentifikation

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im 2. Halbjahr 2007 sollte das Hauptaugenmerk auf den grundsätzlichen Untersuchungen des Erhärungsverhaltens der entwickelten Grundrezeptur liegen. Zuvor musste jedoch eine Schwierigkeit überwunden werden. Im Anfangsstadium der Erhärtung reagiert der Baustoff mit Metallen. Dieses äußerte sich durch starke Korrosion von Prismenformen aus Stahl sowie der jeweiligen Prüfmaschinen. Aus diesem Grund war es dringend notwendig, Normprismen aus Kunststoff fertigen zu lassen. Das IBB besitzt fünf Kunststoffformen, die für die Versuche verwendet wurden. Aufgrund der relativ langen Ausschulfristen von 5-7 Tagen, die notwendig waren, um die Formen zerstörungsfrei zu entschalen, konnten die Versuchsreihen nur in begrenztem Maße durchgeführt werden.

Es konnten folgende Tendenzen ermittelt werden:

- Bei gleich bleibenden Komponenten und steigendem Phosphatgehalt steigt die Druckfestigkeit.
- Bei allen durchgeführten Versuchen konnte ein Anstieg der Druckfestigkeiten über die Lagerungsdauer beobachtet werden.
- Bei einem Phosphatgehalt von ca. 40 % erreicht die Druckfestigkeit des Mörtels der untersuchten Rezeptur die Druckfestigkeit des Salzzuschlages.

Leider verliefen nicht alle Testreihen mit eindeutigen Ergebnissen. Bei vielen Rezepturvariationen traten starke Schwankungen in den Druckfestigkeitswerten auf, deren Ursachen noch nicht aufgeklärt sind.

Die festigkeitsbildenden Phasen konnten bisher nicht identifiziert werden.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführende Untersuchungen bezüglich des Erhärungsverhaltens dieses Systems
- Löslichkeitsuntersuchungen
- Optimierung der Grundrezeptur
  1. Lösungsoptimierung
  2. Optimierung des Phosphatgehaltes
  3. Optimierung der Zusammensetzung der verschiedenen Phosphate
  4. Optimierung der verschiedenen MgO-Reaktivitäten und Korngrößen
  5. Optimierung des Zuschlages
  6. Optimierung der Verarbeitbarkeit
- Kalorimeteruntersuchungen
- Temperaturmessungen während der Erhärtung des Mörtels

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1426</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS			
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2009		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 503.928,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> 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 Datenbanken 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 Datenbanken 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**

Im Berichtszeitraum wurde das Modul zur Erfassung von Definitionen und Daten weitgehend fertig gestellt. Sie enthält Eingabemasken für insgesamt 26 verschiedenen Typen von Datensätzen.

Besonderer Wert wird hierbei darauf auf eine qualitätsgesicherte Eingabe gelegt. Sie soll zum einen die Regelkonformität der Eingaben sicherstellen, zum anderen Doppeleinträge automatisiert abfangen. Hierzu stellt das Modul über das Internet eine permanente Verbindung zur THEREDA-Datenbank her und vergleicht Neueinträge mit schon vorhandenen Daten. Neue Datensätze werden nicht direkt in die Datenbank eingetragen, sondern über eine XML-Zwischenspeicher-Datei erfasst und an die Datenbankverantwortlichen bei der GRS übermittelt. Neben diesem Transport-Format stellt das Dateneingabemodul noch ein zweites in Klartext formuliertes Speicherformat zur Verfügung, das sowohl den Dateneingebnern als auch den Datenbankverantwortlichen (GRS) eine separate manuelle Prüfung ermöglicht.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Die Oberfläche wird zu Beginn des folgenden Halbjahres an die Projektpartner ausgeliefert und bei Bedarf weiterentwickelt.
- Fertigstellung eines Moduls zum Einlesen von Daten in die Datenbank.
- Erstellung weiterer Export-Filter zur Erstellung codespezifischer Parameterdateien.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1436</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 109.732,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brendler	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektmanagement  
(Berichtswesen, Treffen mit Projektpartnern, Intranet)
- AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation  
(Definition von Richtlinien, Testrechnungen mit vom DB-Generator entwickelten Parameterdateien, Konsistenzprüfungen, Nutzerhandbuch)
- AP3: Datenmanagement: Datenbank, Filter, Parameterdateien  
(Erstellung und Weiterentwicklung der Datenbankstruktur, Sicherstellung eines Archivierungsmodus, Interface zur Datenrecherche und -verarbeitung)
- AP4: Datenbasis für Schwermetalle und Arsen  
(Sammeln, Auswerten und Auswählen von Daten und Übertragung in ASCII-Dateien für späteres Einlesen in die Datenbank, FZD: stoffliche Schwerpunkte As und Fe<sup>III</sup>)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1: Projektmanagement

- Projektstarttreffen in Braunschweig
- Überführung der Intranetseiten in die THEREDA-Internetpräsenz unter [www.thereda.de](http://www.thereda.de), kontinuierliche Pflege und Aktualisierung

#### AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation

- Abgestimmter Entwurf der Nomenklatur von Reaktionen
- Richtlinien zu Datenbewertung und -klassifizierung, technische Grundlagen der Datenbank

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

- Arbeiten an der Datenbankstruktur (gemeinsam mit GRS)

#### AP4: Datenbasis für Schwermetalle und Arsen

- Fortführung der Literaturrecherche

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP1:

- Pflege und Erweiterung der Intranetseite

#### AP2:

- Abgestimmter Entwurf der Nomenklatur von Temperatur- und Druckfunktionen

#### AP3:

- Entwurf eines Exportmoduls (generisches Datenformat)

#### AP4:

- Zusammenstellung der Daten zur Komplexchemie des Arsen und des Eisen(III)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Münzberg: Konzeptioneller Entwurf und prototypische Realisierung einer Datenbanklösung für chemische Risikoanalysen, Diplomarbeit, HTW Dresden, 2007

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1446</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2006 bis 30.06.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 99.646,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Voigt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Projektmanagement: Berichtswesen, Treffen mit Projektpartnern, Intranet
- AP2: Qualitätsmanagement und Dokumentation  
(Definition von Richtlinien, Testrechnungen mit vom DB-Generator entwickelten Parameterdateien, Konsistenzprüfungen, Nutzerhandbuch)
- AP3: Datenmanagement: Datenbank, Filter, Parameterdateien  
(Erstellung und Weiterentwicklung der Datenbankstruktur, Sicherstellung eines Archivierungsmodus, Interface zur Datenrecherche und -verarbeitung)
- AP4: Datenbasis für Schwermetalle und Arsen (FZ Dresden-Rossendorf, GRS Braunschweig)
- AP5: Datenbasis für das System der ozeanischen Salze (TU BAF)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1/AP2: Projektmanagement und Datenverarbeitung

- Teilnahme am Projekttreffen in Braunschweig am 4.10.2007
- Erstellung neuer PDF-Files mit Ergebnissen für Intra- und Internet zur Dokumentation der Datenqualität für die Öffentlichkeit

AP5: Datenbasis für System der ozeanischen Salze

- Weiterführung Literaturlaufarbeitung zu neuen Daten des ozeanischen Systems. Dieser Teil nimmt an Umfang zu, da international wieder verstärkt experimentelle Arbeiten zur Thermodynamik von Elektrolytsystemen publiziert werden.
- Erstellung verbesserter Parametersätze für das Pitzermodell für das System  $K_2SO_4$ - $MgSO_4$ - $H_2O$  bis 110 °C und Beginn der Modellierung  $CaSO_4$ -haltiger Systeme.
- Es ist jetzt gelungen, die Schwierigkeiten bei der Beschreibung des ternären Systems  $K_2SO_4$ - $MgSO_4$ - $H_2O$  bei Temperaturen oberhalb 75 °C im Rahmen des Pitzer-Modells zu überwinden. Es konnte daran anschließend gezeigt werden, dass einige der wenigen verfügbaren Literaturdaten in den höheren Systemen  $Na^+$ ,  $K^+$ ,  $Mg^{++}$  /  $Cl^-$ ,  $SO_4^{--}$  //  $H_2O$  bei erhöhten Temperaturen falsch sind und Versuche der Anpassung an diese Daten unterbleiben sollten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Qualitätsmanagement

- Weitere Mitarbeit am Entwurf der verbindlichen Richtlinien zu: Datenbewertung und -klassifizierung, Nomenklatur von Reaktionen, Temperatur- und Druckfunktionen
- Mitwirkung an der Schaffung weiterer entwickelter Möglichkeiten zur Darstellung der Beschreibungsgüte von Löslichkeiten mit der Datenbasis für die Öffentlichkeit

AP3: Datenmanagement

- Erstellung eines Filters für die Anwendung der Datenbasis in CHEMSAGE/ ChemApp / FACTSAGE (2. Quartal 2008)

AP5: Datenbasis für System der ozeanischen Salze

- Einbeziehung kalorischer Daten in die Beschreibung der  $MgSO_4$ -haltigen Systeme
- Bearbeitung der  $CaSO_4$ -haltigen Systeme

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Teilnahme an der "30. Internationalen Conference on Solution Chemistry" in Perth an der Murdoch University mit Vortrag und Poster zur Löslichkeit von  $CaSO_4$  in konz. Salzlösungen.

Publikation zur Löslichkeit von Gips in konz. Lösungen eingereicht (J. Chem. Eng. Data).

Publikation zur Charakterisierung schwermetallhaltiger Polyhalite eingereicht.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1456</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Bestimmung der Änderung des räumlichen und zeitlichen Ausbreitungsverhaltens von chemotoxischen Schwermetallen nach Wechselwirkung mit Natural Organic Matter (NOM) in geologischen Formationen von Untertagedeponien		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2006 bis 30.09.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 466.693,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Mansel	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Synthese und Reinigung von kommerziell nicht erhältlichen Radioisotopen für die 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)
- Komplexierungsstudien von chemotoxischen Schwermetallen mit NOM unter Verwendung von Radioisotopen und unter naturnahen Bedingungen
- Speziation von chemotoxischen Schwermetallen im ternären System Schwermetall / NOM / Geomaterialien mit der Methode der radioaktiven Mehrfachmarkierung
- Speziation der Oxidationszustände des im NOM gebundenen Schwefels (XANES) und Bestimmung der Art der Bindung von chemotoxischen Schwermetallen; Speziation der Redoxzustände des im NOM gebundenen Eisens (II, III) (EXAFS)
- Abschließende Auswertung, Dokumentation und Schlussberichterstellung.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bei Verteilungsmessungen (Batch) im ternären System  $[^{64}\text{Cu}]\text{Cu}^{2+}/\text{Huminsäure}/\text{Kaolinit}$  wurde im Vergleich zum huminsäurefreien System ( $K_d = 12,2 \text{ l/kg}$ ) eine Erhöhung der Adsorption des  $\text{Cu}^{2+}$  um einen Faktor 2 bestimmt (pH 6). Es wurden Verteilungsmessungen (Batch) im ternären System  $[^{65}\text{Zn}]\text{Zn}^{2+}/\text{Huminsäure}/\text{Granit}$  im pH-Bereich von 3-10 durchgeführt. Auch hier erfolgt im Vergleich zum huminsäurefreien System ( $K_d = 0,122 \text{ l/kg}$ ) eine Erhöhung der Adsorption des  $\text{Zn}^{2+}$  um einen Faktor 2 (pH 6). Säulenexperimente mit  $[^{65}\text{Zn}]\text{Zn}^{2+}$  und Granit wurden in Form von Durchbruchkurven im pH-Bereich 4-6 realisiert. Im Vergleich zu pH 4 und 5 (Wiedererhalt ~30 %) wurde  $\text{Zn}^{2+}$  bei pH 6 vollständig in der Säule immobilisiert. Die Durchbruchkurven von Säulenexperimenten mit  $[^{14}\text{C}]\text{Huminsäure}$  und Granit im pH-Bereich 4-9 ergeben eine deutliche pH-Abhängigkeit der Immobilisierung der Huminsäure (Durchbruch: 3, 4, 4, 6, 15 und 16 % für pH 4, 5, 6, 7, 8 und 9). Säulenexperimente mit  $[^{65}\text{Zn}]\text{Zn}^{2+}$ , Huminsäure und Granit zeigen eine Verdreifachung (pH 4) und eine Verdopplung (pH 5) der Retention des  $\text{Zn}^{2+}$  im Vergleich zum huminsäurefreien System bei gleich bleibenden Wiedererhalten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die binären Systeme Fe/Huminsäure und Fe/Geomaterialien sollen unter Verwendung von  $^{59}\text{Fe}$  vermessen werden. Die Oxidationszustände des im NOM gebundenen Schwefels sollen mit Hilfe der Röntgenabsorptionsspektroskopie bestimmt werden. Das binäre System Pb/Geomaterialien soll unter Verwendung von  $^{203/212}\text{Pb}$  untersucht werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- A. Mansel: „Interaction of  $[^{65}\text{Zn}]\text{Zn}(\text{II})$  and  $^{14}\text{C}$ -labelled humic acid with a sandy soil: column experiments at varied pH.“ MIGRATION '07, München, 26.-31.08.2007.
- A. Mansel: „Wechselwirkung von  $[^{65}\text{Zn}]\text{Zn}^{2+}$  und  $^{14}\text{C}$ -markierten Huminstoffen mit einem sandigen Sediment: Säulenexperimente in Abhängigkeit vom pH-Wert.“ GDCh-Jahrestagung, Ulm, 16.-19.09.2007.
- H. Lippold: „Migration von Actiniden im System Ton, Huminstoff, Aquifer.“ Actinidenverbund, Saarbrücken, 11.-12.10.2007.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Konrad-Wachsmann-Allee 1, 03046 Cottbus		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1466</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrogeologie und Geochemie des Gesamtsystems		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.217.647,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Voigt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### AP1: Geohydraulische Analyse und Entwicklung eines hydrogeologischen Modells

AP1.1: Erkundung durch Flachbohrungen

AP1.1.1: Konzeption der Bohrungen

AP1.1.2: Ausschreibung und Vergabeverfahren der Bohrungen

AP1.1.3: Kontrolle der Bohrarbeiten und begleitende Tests

AP1.1.4: Auswertung der Bohrerkundung

AP1.2: Monitoring und Spezialuntersuchungen zur Analyse von Strömungsvorgängen und Austauschprozessen

AP1.2.1: Konzeption, Erweiterung und Auswertung des Monitoring zur GW-Beschaffenheit und GW-Dynamik

AP1.2.2: Orts- und zeitaufgelöstes Monitoring der Grundwasserdynamik im Deckgebirge durch Sohldruckmessungen

AP1.3: Überführung des geologischen Modells und des Hohlraummodells in ein hydrogeologisches Strukturmodell

### AP2: Geochemische Analyse und Modellierung der Lösungsvorgänge

AP2.1: Typisierung und Charakterisierung der Lösungen anhand ihrer hydrochemischen Beschaffenheit und ihres Lösungspotentials

AP2.2: Geochemische Modellierung der Lösungsvorgänge ausgewählter Szenarien/Reaktionssysteme

AP2.3: Räumliche Analyse der lösungsanfälligen Bereiche im hydrogeologischen Modell

AP3: Zusammenfassende Bewertung der Dynamik und Austauschprozesse im Gesamtsystem unter Berücksichtigung geochemischer und hydraulischer Modellierung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Abschluss des Ausschreibungs- des Vergabeverfahren der Flachbohrungen, Vertragsgestaltung und Auftragserteilung für Baulos 1 (Bohrarbeiten) und Baulos 2 (begleitende Geophysik) (08/2007) (AP1.1.2)
- Abwicklung der Genehmigungsverfahren für die Bohrungsstandorte unter Berücksichtigung der Auflagen des Umweltamtes LK Aschersleben-Staßfurt. Aufgabe einiger Standorte aufgrund von in den Voruntersuchungen nachgewiesenen Kontaminationen. Auswahl von Alternativstandorten (AP1.1.2)
- Durchführung der Bohrarbeiten und der begleitenden Untersuchungen und Tests für 6 Bohrungen. Errichtung von 6 Grundwassermessstellen im Buntsandstein, Gipsst. und Hauptanhydrit (von 10/2007 bis 12/2007) (Zusammenarbeit mit der IHU GmbH) (AP1.1.3)
- Analyse des vorhandenen Grundwassermessnetzes in oberflächennahen Lockergestein, Planung und Errichtung von Grundwassermessstellen zur Erweiterung des Messnetzes (Zusammenarbeit mit der BGR) (AP1.2.1)
- Neuvermessung des vorhandenen Altmessnetzes in Lage und Höhe aufgrund festgestellter Unplausibilitäten und Fehlangaben (Zusammenarbeit mit der IHU GmbH) (AP1.2.1)
- Funktionsprüfung, Reaktivierung und Wiederherstellung der Beprobbarkeit von Altmessstellen im Salinargebirge, Einsatz einer aus Eigenmitteln finanzierten Spezialpumpe (AP1.2.1)
- Aufbau des Messnetzes zur kontinuierlichen Datenerfassung, Ausstattung von 11 Messstellen mit Datenloggern (bis 12/2007), Einsatz von speziell angefertigten Sonden zur kontinuierlichen Erfassung von Druck, Temperatur, elektr. Leitfähigkeit in hochsalinaren Wässern (Zusammenarbeit mit BGR und IHU GmbH) (AP1.2.1)
- Durchführung und erste Auswertung von 2 Monitoringkampagnen zur Analyse der Grundwasserbeschaffenheit (Statuserfassung der Altmessstellen) (AP1.2.1)
- Druck-Temperatur-Leitfähigkeitsprofilierung von Messstellen und Schächten in Deck- und Salinargebirge (AP1.2.2)
- Datenrecherche und Aufbereitung für das hydrogeologische Strukturmodell (AP1.3)
- Vorbereitung von 2D-Prinzipmodellierungen für die WASY (AP1.3)
- Präsentation des Projektes auf dem Kongress der IAH Lissabon 09/2007

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Bohrarbeiten incl. des Messstellenneubaus (bis 02/2008), geologisch-hydrogeologische Auswertung und Interpretation
- Fertigstellung des Messnetzes zum Monitoring von Grundwasserdynamik und –beschaffenheit (03/2008), Instrumentierung von ca. 20 ausgewählten Messstellen mit entspr. Datenloggern, Beginn des systematischen Monitorings im gesamten Messnetz
- Erarbeitung des hydrogeologischen Modells

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Bohn, A., Herrmann, F., Jahnke, Ch., Walter, N. & Voigt, H.-J. (2007): Hydrogeochemical and hydrodynamic processes in post-mining landscapes of the potash mining area Nordharz – Analysis of active leaching and subsidence processes. – Ribeiro et al. (Eds.): Groundwater and Ecosystems. XXXV IAH Congress Lissabon, Abstract book. p. 524

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1476</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 2 (BGR): Geophysikalische Untersuchungen, Seismische Erkundung, Geologisches 3D-Modell, Bohrungen, Server-Datenbank, Koordination des Gesamtvorhabens		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.028.893,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Gerardi	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Teilvorhaben (TV) 2 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 verfügbar gemacht. Mittels airborne Laserscanner- und magnetischen Messungen werden tektonische Strukturen des Arbeitsgebietes abgebildet. Die Bodengeophysik präzisiert die gefundenen Strukturen. An Messstellen in Flachbohrungen erfolgen Langzeitgrundwasserüberwachungen. Die gewonnenen Daten dienen der hydraulischen Modellierung im TV1. Durch das seismologische Langzeit-Monitoring sollen Bruchereignisse identifiziert und geortet werden, um so das Hohlraummodell und die Standsicherheitsprognose (TV3) verifizieren zu können.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### Geophysik

- Laser Scanning/Multispektralaufnahmen
- Hubschraubergeophysik
- Hochauflösende Bodengeophysik
- Hohlschneckenbohrungen mit dem BGR-Bohrgerät
- Grundwasser Langzeit-Monitoring in Flachbohrungen
- Temperaturmessungen in Bohrungen
- Seismisches Monitoring

### 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. In einem Workflow erfolgt die Proben- und Bohrkernverwaltung sowie die bildliche (Scanner) und textliche Bohrkerndokumentation.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP Aerogeophysik: Das Untersuchungsgebiet wurde mit insgesamt ca. 5100 km Messprofilen bei einem Linienabstand von 100 m abgedeckt. Es liegen Kartensätze vor, die ein digitales Höhenmodell und die scheinbaren spezifischen Widerstände und Schwerpunkttiefen zu den jeweiligen Messfrequenzen abbilden.

AP Bodengeophysik / Grundwasser Monitoring: Durchführung von 8 Kartierungsbohrungen (max. 68 m tief) im Arbeitsgebiet. 5 Bohrungen wurden Grundwassermessstellen ausgebaut.

AP Laserscanbefliegung: Die Laser-Höhenmessungen und Ortho-Luftbildaufnahmen wurden für ein ca. 50 km<sup>2</sup> großes Gebiet bearbeitet.

AP Seismisches Monitoring: 5 Seismometerstationen wurden für das seismologische Langzeitmonitoring betrieben und die Messdaten ausgewertet. Bergbaubedingte seismische Ereignisse waren nicht zu verzeichnen.

AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung: Die Gruben Berlepsch-Maybach, v.d. Heydt-Manteuffel, Achenbach und Leopoldshall wurden weitgehend modelliert. Für das geologische Modell erfolgten aufgrund von Defiziten der Datenbasis stratigraphische Bearbeitungen und geochemische Untersuchungen.

AP Server-Datenbank und Koordination des Gesamtprojekts: Der Bohrkernscanner und die Eingabedatenbank wurde bei der LAGB-Bohrung G4 eingesetzt und weiterentwickelt. Die Projektdatenbank wurde aufgebaut und für den Internetzugang vorbereitet. Für die Niederbringung von max. 3 Tiefbohrungen haben die Planungsarbeiten begonnen. Im Rahmen der Koordination wurde das Projekt in Präsentationen und im Rahmen der Öffentlichkeitsarbeit vertreten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP Aerogeophysik: Auswertung der Messdaten und Erstellung thematischer Karten.

AP Bodengeophysik/Grundwassermonitoring und AP Laserscanbefliegung: Bodengeophysikalische Messungen im Umfeld der Tagesbrüche Leopoldshall, Identifizierung von Störungen im Arbeitsgebiet und Weiterentwicklung von Multiparametersonden zur Grundwassermessung.

AP Seismisches Monitoring: Die Messstationen werden weiter betrieben. Die Station STF3 wird verlegt. Mit der Uni Stuttgart wird ein nanoseismisches Monitoring durchgeführt.

AP Geologische 3D- und Hohlraummodellierung: Die 3D-Modelle der Gruben v.d. Heydt-v. Manteuffel, Achenbach und Leopoldshall werden abgeschlossen bzw. fortgesetzt. In Kombination mit neuen geophysikalischen Messungen und neu interpretierten Bohrungen werden für repräsentative Teilbereiche des Staßfurter Sattels geologische 3D-Modelle erarbeitet.

AP Server-Datenbank und Koordination des Gesamtprojekts: Die Projektdatenbank (DB) wird zur Nutzung freigegeben. Die Projektdaten werden für die Aufnahme in die DB aufbereitet und verfügbar gemacht. Neue Visualisierungstechniken für große Bilddaten werden entwickelt und Korrelationen von Bohrungen sowie die Darstellung teufenabhängiger Messungen ermöglicht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

BREITFELDER, G.; DRESBACH, C.; HAMMER, J. (2007): 3D-Modell des Staßfurter Sattels am Beispiel der Grube Berlepsch-Maybach. - Poster, 7. Altbergbaukolloquium Bergakademie Freiberg.

GERARDI, J. (2007): Das Forschungsverbundvorhaben „Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes“ – Ein Überblick.- Poster, 7. Altbergbaukolloquium Bergakademie Freiberg.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2 a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1486</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 327.815,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Literaturrecherche zu Tagesbruchmechanismen (Fallbeispiele / Modellierungsansätze).
- AP2: Herstellung von Lagerungsbehältern für Kernmaterial 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

Eine erste im Rahmen von AP1 durchzuführende Literaturrecherche zu Tagesbruchmechanismen wurde unter Verwendung der Suchbegriffe *Tagesbruchmechanismen, Tagesbruch, Senkungen, Restfestigkeit und Nachbruchbereich* durchgeführt. Als Ergebnis wurden nur wenige Literaturquellen erhalten, die inhaltlich Modelle zur Einschätzung der Tagesbruchgefahr sowie statistische Modelle zur Simulierung bruchloser Senkungen (Markscheiderische Verfahren) beschreiben. Für die im Rahmen von TV3 beabsichtigte numerische Simulation des Bruch- und Senkungsgeschehens sind diese Literaturquellen von untergeordneter bzw. marginaler Bedeutung.

Die Herstellung der Lagerungsbehälter (60 Stk.) für Bohrkernmaterial (AP2) ist abgeschlossen.

Die in 2007 geteufte Bohrungen B (13.04.07), G1 (06.06.07) und G4 (25.10.2007) wurden beprobt. Für die im Rahmen von AP3 durchzuführenden Laboruntersuchungen zu den festigkeitsmechanischen Eigenschaften der im Bereich des Staßfurter Sattels anstehenden Gesteine konnte in zunächst ausreichendem Umfang Bohrkernmaterial der Einheiten Buntsandstein, Gips bzw. Anhydrit (A3), Steinsalz (Na<sub>2</sub>r), Liegendgruppe Kaliflöz (K2L) und Roter Salztön (T4) entnommen werden. Aus der Bohrung B weiterhin verfügbar sind einige Meter Bohrkernmaterial aus kompaktiertem NaCl-Versatz. Bisher nicht in ausreichendem Umfang verfügbar sind die Formationen des Grauen Salztöns (T3) und der Hangendgruppe des Kaliflözes Staßfurt (K2H).

Im Rahmen von AP3 wurden im abgelaufenen Berichtszeitraum 30 festigkeitsmechanische Laborversuche an Prüfkörpermaterial des A3 mit Bestimmung von Bruch-, Dilatanz- und Restfestigkeit, Bruchstauchung sowie der mechanischen Verformungsmoduli im Vor- und Nachbruchbereich durchgeführt. Neben den mechanischen Kennwerten standardmäßig erfasst wurden die Gesteinsdichte, der Wassergehalt sowie der dynamische E-Modul und die dynamische Poissonzahl der Prüfkörper.

Für die in AP5 durchzuführende Prognose des Gebirgstragverhaltens wurde für das Profil V ein 3D-FDM Berechnungsmodell diskretisiert. Das Modell bildet mit 19718 Zonen und 39522 Knotenpunkten einen Gebirgsausschnitt von 1268 m Breite und 477 m Tiefe im Bereich des südwestlichen Staßfurter Sattels ab. Es beinhaltet 23 Hohlräume und 13 Homogenbereiche.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Labor:

- Weitere Laborversuche zum Spannungs-Verformungs-Verhalten der anstehenden Gesteine, insbesondere Bst, T4, Na
- Auswertung der Laborversuche, Ermittlung der Materialparameter
- Ableitung von Grenzwerten für die Initialisierung bruchhafter Deformationen
- Simulationen:
  - Generierung Berechnungsmodell Profil VI (Strandbad)
  - Generierung Berechnungsmodell Profil I (Mühlengraben)
  - Verifikationsberechnungen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Kali-Umweltechnik GmbH vorm. Kaliforschungsinstitut, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1496</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTEK): Grundlagen für Geomodellierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 643.387,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Bode	

## 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 (BRG): 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**

AP4: Koordinierung der Bohrarbeiten, der Bohrkernbearbeitung und des messtechnischen Begleitprogramms an den Bohrungen B, G1 und G2. Bearbeitung der geologischen und bergschadensrelevanten Interpretation des Bohrergebnisses und Bearbeitung der Abschlussdokumentation.

AP5: Herausarbeitung der Ziel- und Prioritätensetzungen für drei weitere Tiefbohrungen im Bereich des Grubenfeldes v. d. Heydt / v. Manteuffel und Leopoldshall I / II sowie in einem sattelfernerem Bereich. Dabei steht die Aufklärung rezenter, subrosiver Vorgänge am Salinargestein, die Ableitung von Kriterien zur Charakterisierung der latenten Bruchgefahr und die geologische Detailerkundung im Vordergrund.

AP6: Untersuchung von bergbaulich- und rezent subrosiv beeinflussten Räumen im salinaren Untergrund anhand der Entwicklung des Senkungsbildes, des Reliefschwundes und der Bewertung geomechanischer Deckgebirgsparameter.

AP7: Lösekinetische Untersuchungen am Kainit (äquivalente Proben aus der Kaligrube Brefeld).

AP8: Recherche und Beistellung von risslichen Schnitt- und Profildarstellungen für die Erarbeitung des geologischen- sowie des Hohlraummodells.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP4: Erarbeitung der endgültigen Ergebnisdarstellung zum Bohrprogramm LAGB mit den Bohrungen B, G1 und G4.

AP5: Präzisierung der Bohransatzpunkte und Erarbeitung der Planungsvorgaben für das Tiefbohrprojekt Staßfurt II, Vorbereitung und Begleitung der Ausschreibung der Bohrungen A1... A3.

AP6: Recherche und Ableitung von Grundlagen für das Hohlraummodell (Reliefveränderungen, Bohrergebnisse, lösungskinetische Betrachtungen, Substanztransport, spezifische Lagerstättenbedingungen, Analyse Betriebsgeschichte).

AP7: Lösekinetische Untersuchungen an Probenmaterial, Berechnungen von Massentransportvorgängen.

AP8: Datenvergleich und –bereitstellung der seismologischen Aufzeichnungen.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IHU Geologie und Analytik Gesellschaft für Ingenieur- Hydro- und Umweltgeologie mbH, Dr.-Kurt-Schumacher-Str. 23, 39576 Stendal		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1506</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 5 (IHU): Erfassung, Bewertung und Darstellung der Strukturgeologie und Hydrochemie		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 397.238,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Stahl	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

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

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

Die Schwerpunkte der bisherigen Arbeiten lagen in den Arbeitspaketen 1, 2 und 3. 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.

Im Rahmen von AP2 erfolgte geologische Fachbegleitung, Schichtenaufnahme und Dokumentation der 12 Hohlschneckenbohrungen des Geozentrums Hannover (TV2). Die Bereitstellung des Probenmaterials aus Bohrungen wurde für alle Projektpartner koordiniert.

Innerhalb der Bearbeitung des AP3 wurde das Monitoringprogramm der Flachpegel mit den Projektpartnern abgestimmt. Im Oktober 2007 erfolgte die zweite Monitoringkampagne von ausgewählten Altmessstellen im Untersuchungsgebiet. Es wurden 15 Grundwassermessstellen beprobt und jeweils bezüglich 17 verschiedener chemisch-analytischer Parameter untersucht. Zusätzlich wurde Probenmaterial für Untersuchungen bei Projektpartnern gewonnen.

Zur Standortauswahl und Prioritätenabstimmung der Tiefbohrungen des Verbundvorhabens erfolgten mehrere Konsultationen mit den Projektpartnern, vorrangig mit der BTU, der BGR, der K-UTEC sowie der WASY GmbH.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Arbeiten im Teilvorhaben werden wie geplant fortgeführt.

Die Schwerpunkte sind, wie im zurückliegenden Berichtszeitraum, die Arbeitspakete 1, 2 und 3: „Zuarbeit und Mitwirkung bei der Erstellung des geologischen 3D-Modells“, „Erweiterung der Datenbasis durch Bohrungen und geophysikalische Messungen“ sowie „Hydrogeologische Analyse von Strömungsvorgängen und Austauschprozessen“.

Die gewonnenen Daten der Geologie, Hydrogeologie und Hydrochemie werden erfasst, geprüft, aufbereitet und den Partner zur Verfügung gestellt.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> WASY Gesellschaft für Wasserwirtschaftliche Planung und Systemforschung mbH, Waltersdorfer Str. 105, 12526 Berlin		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1516</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 220.307,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Diersch	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Forschungsvorhaben zielt auf die Modellierung der Strömungs- und Salzwassertransportprozesse orientiert in einer mehrstufigen Vorgehensweise auf den Aufbau eines regionalen dreidimensionalen Strömungs- und Salzwassertransportmodells mit notwendiger Detailliertheit zur Simulation entsprechender Prozesse in aufgelassenen Salzbergwerken und ihrer Deckgebirge. Die Arbeitsziele bei der Strömungs- und Stofftransportsimulation sind (1) die Modellierung der dichtgekoppelten Strömungs- und Salzwassertransportprozesse in repräsentativen Strukturen (Ursache-Wirkungs-Studium) und im Gesamtsystem (Quali- und Quantifizierung des Salzaustrages und -migration) des Untergrundes im Untersuchungsgebiet der Stadt Staßfurt, (2) eine begleitende Modellunterstützung von Erkundungsmaßnahmen (Standortauswahl, physikalisch basierte Interpretation und Validierung von Beobachtungen und Messungen) und (3) die Durchführung von Szenarienanalysen zur Abschätzung und Prognose der Entwicklung der Auslaugungsprozesse.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### TA1: Prinzipstudien zu Strömungs- und Transportprozessen an Profilschnitten

- Analyse des geologischen und hydrogeologischen Datenbestandes
- Einbau von Wechselwirkungsprozesse zwischen Salinar und zirkulierenden Lösungen in das Simulationssystem FEFLOW
- Feststellung der Sensitivität der Parameter und Randbedingungen, die für die standortspezifische Modellierung von Bedeutung sind
- Erarbeitung eines besseren Verständnisses der Strömungsphänomene und Wechselwirkungsprozesse im Untergrund des Standortes Staßfurt

### TA2: Aufbau von Finite-Element-Modellen für 2D- und 3D-Schematisierungen

- Untersuchung der numerischen Anforderungen betreffs Genauigkeit, Robustheit und Stabilität
- Entwicklung und Erprobung von Vernetzungen mit unterschiedlicher Feinheit und Detailliertheit
- Festlegung und Begründung geeigneter Modellgebietsgrenzen und Randbedingungen

### TA3: Simulationen von Strömungs- und Transportprozessen an ausgewählten Modellszenarien

- Herausarbeiten der prinzipiellen Mechanismen und Abhängigkeiten, die für die Strömungszirkulation und Laugungsprozesse maßgeblich sind
- Entwicklung eines 3D-Modells, in dem die Erfahrungen und Kenntnisse aus den vorangegangenen Prinzipuntersuchungen Berücksichtigung finden

### TA4: Vergleich von Modellierungsergebnissen mit In-situ-Befunden

- Überprüfung der hydrogeologischen, hydrodynamischen und hydrochemischen Modellvorstellungen anhand der numerischen Modellierung und der Feldversuche
- Vergleich der Hypothesen für die maßgebenden hydraulischen und geochemischen Abhängigkeiten für den Standort mit In-situ-Befunden
- Prognose der Strömungs- und Salzwassertransportprozesse

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In Fortführung der im 1. HJ 2007 begonnenen Arbeiten lagen die im 2. HJ durchgeführten Untersuchungen auf folgenden zwei Schwerpunkten:

(1) In Zusammenarbeit mit der BTU Cottbus Erweiterung der hydrogeologischen Datenbasis für Prinzipmodellierungen, Auswahl eines repräsentativen hydrogeologischen Schnittes, Parameterermittlung und Festlegung von Modellierungsszenarien sowie (2) Durchführung von Modellrechnungen am Profilschnitt, Untersuchung von Randbedingungsszenarien, Parametersensitivitätsanalyse und Modellauswertungen. Auf Grund der Verzögerung in der Datenbereitstellung, des Fortganges der Strukturmodellierung und der 3D-Datenanalyse wurde eine Mittelverschiebung aus dem Jahr 2007 in das Jahr 2010 vorgenommen.

(1) Gemeinsam mit der BTU Cottbus erfolgte die für die Modellierung erforderliche Erweiterung der hydrogeologischen Datenbasis im raumbezogenen GIS. Sie umfasst inzwischen topografische und geologische Karteninformationen, Bergwerkslagen, Bohr- und Messpunkte (Tief- und Flachbohrungen) und einzelne geologische Profile, die im ArcGIS (ArcView) gehalten werden. Insbesondere sind jedoch die dreidimensionalen Strukturdaten noch unvollständig, da diese Informationen sich erst im Aufbau befinden, so dass für die anstehenden Prinzipmodellierungen nur die bisher gekannten geologischen Profilschnitte zur Verfügung stehen. Diese wurden jedoch mit dem gegenwärtigen Datenbefund abgeglichen und präzisiert. Für die Prinzipmodellierungen wurde ein geologischer SW-NO-Profilschnitt ausgewählt, für den Untersuchungsszenarien festgelegt wurden. Hauptzielstellungen waren hierbei anhand von Ursache-Wirkungs-Untersuchungen die Wechselwirkung der Oberflächengewässer (Bode) und der Wasserhaltungsmaßnahmen (Pumpstation Zillestraße) auf den Salzaufstieg, die Rolle des Buntsandsteines mit den Rogensteinformationen sowie die hydraulische Wirkung des Hauptanhydrits auf den Salz- und Wärmetransport im Untergrund zu untersuchen.

(2) Auf der Grundlage des ausgewählten Profilschnittes wurden sechs Hauptszenarien modelliert, um die Wirkung der Einstrombedingungen des Buntsandsteines, des Hauptanhydrits und die Pumpstation auf den Salzwasseraufstieg und auf das Temperaturprofil zu untersuchen. Dabei wurden geogene und anthropogene Einflussgrößen unterschieden. Die Berechnungen erfolgten mit dem Simulationssystem FEFLOW unter vollständiger Berücksichtigung der Dichtekopplung seitens Salzwasser und der Temperatur. Verschiedene Strömungs-Zirkulationsregime wurden festgestellt und dokumentiert (incl. Videodarstellungen zur Salzwasserdynamik). Die Modellierungen zeigen die Bedeutung des Buntsandsteines mit den Rogensteinformationen und insbesondere des Hauptanhydrits (gespannt) im Tiefenbereich. Die hydraulische Entlastungswirkung der Oberflächengewässer (insbes. die Bode) erweist sich ebenso als eine wesentliche Komponente, die für die regional Salzwasserausbreitung im Untersuchungsgebiet eine zentrale Stellung erlangen kann. Vom zweiten Rang sind die Variationen in den Strömungs- und Transportparametern innerhalb der gegebenen geologischen Strukturen. Sie bestimmen jedoch die quantitative Ausprägung der ermittelten Strömungs- und Ausbreitungsmuster.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Am geologischen Profilschnitt wird eine Sensitivitätsanalyse vorgenommen, indem die hydraulischen Parameter der geologischen Formationen in festgelegten Bereichen variiert werden. Ferner sollen Szenarien berechnet werden, die den Einfluss (Hohlräume, Zerrüttungszonen) des Bergbaues simulieren. Weitere Profilschnitte sind auszuwählen und alternativ in die Berechnung einzubeziehen. Unterstützt durch die Ergebnisse aus der systematischen Modellierung anhand der Profilschnitte erfolgt die Festlegung der hydrogeologisch wirksamen Begrenzungen und Randbedingungen im Untersuchungsgebiet, die für die Ausdehnung des aufzubauenden 3D-Modells von zentraler Bedeutung sind. Parallel dazu ist die 3D-Datenbasis zu komplettieren, um daraus neue Profilschnitte generieren zu können und fernerhin die Übernahme in das 3D-Modell vorzubereiten.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1526</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 7 (JoGU): Bestimmung der durchflusswirksamen Porosität		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 254.420,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Enzmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Dieses Vorhaben ist Teil des Arbeitspaketes zur zerstörungsfreien Strukturanalyse repräsentativer Bohrkernproben, 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 Radiotracerexperimenten (PET-Tomogramme des TV8: IIF Leipzig).

Untersuchungsziel ist die strukturelle Analyse an repräsentativen Bohrkernproben zur Bestimmung der durchflusswirksamen Klüftigkeit auf der Skala des Porenraums ( $\mu\text{m-cm}$ ). 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:

Sämtliche Bohrkerne aus den Bohrungen Staßfurt B1, G1 und G4 wurden mit Hilfe des in BGR-Besitz befindlichen Corescanners (DMT CoreScan II) erfasst und die Daten den Projektpartnern übergeben (u. a. zur Integration der Daten in die BGR „Saltcorebase“-Datenbank).

Die von uns erstellte Mängelliste (siehe Zwischenbericht des ersten Halbjahres 2007) wurde in Absprache mit der BGR an die DMT weitergeleitet. Daraufhin erfolgte in 09/07 eine Vor-Ort Inspektion des Corescanners durch die DMT zur Beseitigung der Mängel.

Insgesamt lässt sich feststellen, dass die Scanner-Arbeiten eine enge Zusammenarbeit mit den Geologen vor Ort ermöglichten, die geologische Kernaufnahme und die bohrlochgeophysikalischen Messungen (AP1.3) unterstützten.

#### AP1.4:

Für weitere CT- und PET-Untersuchungen (TV8) wurden in 09/07 Proben aus den Bohrungen B und G4 entnommen. Die Probenpräparation für die XCT- und PET-Experimente erfolgte in enger Kooperation mit TV8 (Vorbereitung der Proben, Anbringen von PET/CT kompatiblen Markern).

Insgesamt sechs vorpräparierte Proben wurden in 12/07 der BAM zur XCT-Messung übergeben, von denen zwischenzeitlich bereits drei Proben gemessen und die Daten unserer Arbeitsgruppe überstellt worden sind. Erste an den Datensätzen vorgenommene Auswertungen zeigen nutzbare geologische Strukturen im Sinne der Projektziele von TV7/8.

#### AP1.5:

Sämtliche an der BAM gemessene und für PET-Experimente als brauchbar eingestufte Proben stehen dem IIF (TV8) zur weiteren Verwendung zur Verfügung.

#### AP2.1:

Die Entwicklung digitaler Bildfilter (3D-Filter zur Eliminierung des Beam-Hardening-Effekts) erfolgte in 09-10/07. In 3/07 wurde eine Diplomarbeit zur räumlichen Referenzierung der XCT- und PET-Datensätze begonnen, die zwischenzeitlich weitgehend abgeschlossen wurde (Voraussetzung für die Arbeitspakete 2.3 + 2.4). Die Arbeit erfolgt in Kooperation mit dem Institut für Informatik der Universität Mainz (Prof. E. Schömer). Die Simulationssoftware „PoreFlow“ wird weiterhin optimiert (AP2.4).

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Das Untersuchungsprogramm soll an geeignetem Probenmaterial weiterer Tiefbohrungen weitergeführt und für die vorhandenen Proben abgeschlossen werden.

An ausgewählten Proben soll ergänzend Neutronen-Tomographie (SINQ-Anlage des Paul-Scherrer-Instituts in Villigen, Schweiz) durchgeführt werden. Ein entsprechender Antrag auf Messzeit an der PSI-SINQ ist in Kooperation mit TV8 in 01/08 gestellt. Bei positiver Begutachtung ist im zweiten Halbjahr 2008 mit einer ersten Messkampagne zu rechnen. Die Untersuchungen mit der Neutronen-Tomographie sollen die tomographischen Verfahren XCT und PET methodisch ergänzen.

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

Keine

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Interdisziplinäre Isotopenforschung e.V. an der Universität Leipzig, Permoserstr. 15, 04318 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1536</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 173.362,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kulenkampff	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Die Funktion des MiniPET wurde anhand von Untersuchungen an Granitgestein und kompaktierten Tonproben nachgewiesen. Es zeigt sich weiterer Entwicklungsbedarf hinsichtlich der Korrekturverfahren aufgrund der großen Dichte der Probekörper im Vergleich mit den üblichen biologischen Untersuchungsgegenständen.

AP3-5: Die gewonnenen sechs Bohrkern aus den unterschiedlichen Lithologien wurden in Kooperation mit JGUM präpariert und in Plexiglasröhren eingegossen. Erste Durchströmungsversuche an Deckgebirgsgestein wurden zum Test der Einbettungsmethode vorgenommen, ohne dass sich Probleme (z. B. Undichtigkeiten, Randfluss) zeigten.

Nach dieser Probenvorbereitung wurden röntgentomographische Untersuchungen bei der BAM vorgenommen, die noch nicht abgeschlossen sind.

Als sinnvoller Radiotracer wurde  $^{124}\text{I}$  ausgewählt.

Für die weitere Vorbereitung der Messungen war der Bau einer speziellen Halterung für größere Kaliber notwendig, der nun abgeschlossen ist.

AP7: Für die Auswertung wurden Schnittstellen zum Statistikpaket R und zum Visualisierungsprogramm „VisIt“ geschaffen. Die weitere Entwicklung der Auswertalgorithmen geschieht anhand der Messdaten. Entsprechend kann ein Übergabeformat in die Projektdatenbank jetzt noch nicht definiert werden.

AP8: Die Fluoreszenztraceruntersuchungen werden derzeit vorbereitet, um zum Abschluss des hydrogeologischen Bohrprogramms einsatzbereit zu sein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im Winter bis Frühjahr sollen die vorbereiteten Durchströmungsversuche durchgeführt werden, so dass die wichtigsten Messdaten fristgerecht zum 30.4.2008 an TV7 und in die Projektdatenbank übergeben werden können. Voraussichtlich im Frühjahr soll mit den Fluoreszenztraceruntersuchungen nach Absprache mit TV1 begonnen werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

J. Kulenkampff, M. Gründig, M. Richter, F. Enzmann: Evaluation of Positron-Emission-Tomography for visualisation of migration processes in geomaterials. Migration 2007, München. Eingereicht bei Physics and Chemistry of the Earth.

M. Gründig, M. Richter, J. Kulenkampff, A. Seese: Studies of the spatial water flow distribution and colloid transport in granite with Positron Emission Tomography. Migration 2007, München.

J. Kulenkampff, M. Gründig, M. Richter : Positron Emission Tomography for Transport Visualisation and Quantification in Geosciences. UFZ Summer School Chemicals in Soil, Leipzig.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1546</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 9 (GGA-S1): Deckgebirgseigenschaften über einem bergbaubedingt destabilisiertem Untergrund, abgeleitet aus seismischen Beobachtungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 265.635,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> 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**

Im Rahmen der letzten einwöchigen Messkampagne des Jahres 2007 vom 8.10.07 – 12.10.07 wurden weitere 7 P-Wellen Profile mit einer Gesamtlänge von 3840 m und Profillängen zwischen 360 m und 700 m realisiert, so dass bis jetzt insgesamt 14912 Profilmeter zur Auswertung zur Verfügung stehen. Die ursprüngliche Projektvorgabe von 8000 Profilmetern wurde damit um 87,5 % übertroffen. Um eine bessere Verifizierbarkeit der S-Wellenprofile zu gewährleisten, wurde die Profile „Industriestraße I und II, Sportplatz, Strandsolbad und Hoher-nexlebener Straße (Rathmannsdorf) zusätzlich mit P-Wellen-Seismik vermessen, während die Profile Sodawerk I und II als neue P-Wellen-Messlinien hinzugekommen sind.

Erste Ergebnisse:

Der Fortschritt in der seismischen Datenbearbeitung stellt sich wie folgt dar: Das P-Wellen Profil „Mühlengraben“ liegt als migrierte (d. h. Korrektur der scheinbaren Raumlagen in die wahre Raumlage, Korrektur von Beugungsartefakten) Tiefensektion bearbeitet vor, das sich im Nordwesten anschließende Profil „Ludwigschacht“ liegt in einer Rohversion bearbeitet im Tiefen-/ Zeitbereich vor, ebenso die Profile „Sportplatz“ (P- und S-Welle) und „Strandsolbad“ (P-Welle). Anhand der P- und S-Wellenprofile vom „Sportplatz“ gelang ein erster Vergleich der beiden seismischen Messmethoden. In enger Zusammenarbeit mit dem TV2 der BGR, der K-UTEK, der IHU und der BTU Cottbus wurden die bearbeiteten seismischen Sektionen anhand von Bohrungen, des Grubenhohlraummodells und den Ergebnissen der Aero-geophysik in ersten Ansätzen wechselseitig verifiziert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Prioritär erfolgt nun die weitere Datenbearbeitung unter Einbeziehung der in 2007 generierten VSP-Datensätze und der weitere Abgleich mit dem Grubenhohlraummodell und den Bohrungen, um die seismischen Daten zuverlässiger interpretieren zu können. Diese Arbeiten werden aufgrund der nun vorliegenden umfangreichen Datenmenge und nach dem derzeitigen Stand der Bearbeitungsgeschwindigkeit mit hoher Wahrscheinlichkeit bis zum Ende der Projektlaufzeit andauern, was auch schon in der Projektplanung berücksichtigt worden war.

Darüber hinaus besteht insbesondere nach den nun vorliegenden Ergebnissen der Hub-schrauberbefliegung weiterhin eine intensive Nachfrage der Projektpartner nach zusätzlichen seismischen Linien zur Verifizierung der strukturgeologischen und hydraulischen Systemmodelle. Sollten diese Arbeiten zusätzlich zu den bisher aufgelaufenen Arbeiten im Sinne der Projektziele auch durchgeführt werden müssen, wird nach derzeitiger Erkenntnislage mit hoher Sicherheit Bearbeitungszeit über den ursprünglichen gesetzten Zeitrahmen hinaus benötigt.

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

Leder, T., 2007, Geophysikalische Messungen im Stadtgebiet Staßfurt 2007. - Austauschsit-zung des GGA-Instituts, 14.-15.11.2007; Hannover.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1556</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2006 bis 30.06.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 253.554,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Frechen	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

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

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das TV10 umfasst folgendes Arbeitsprogramm:

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Schwerpunkt der im Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten waren zum einen die Fortführung der Optimierung der Vakuum-Destillationsapparatur zur Präparation hochsalinärer Wässer für die Analytik auf  $^2\text{H}$  und  $^{18}\text{O}$  am IRMS. Hierzu wurde eine Bachelorarbeit von Herrn M. Blättermann mit dem Titel „Entwicklung einer neuen Methode zur Analyse der stabilen Isotope hochsalinärer Wässer aus dem Raum Staßfurt“ an der FU Berlin erfolgreich im September abgeschlossen.

Ein weiterer Fokus lag in der Erhebung von Felddaten und fortlaufenden Beprobung von Grundwassermessstellen. In einer Beprobungskampagne im Oktober wurden in enger Zusammenarbeit mit dem Projektpartner BTU Cottbus und dem Ingenieurbüro IHU Geologie und Analytik Stendal schwerpunktmäßig Messstellen im quartären Grundwasserleiter beprobt. Die Analytik dieser entnommenen Proben auf  $^3\text{H}$ ,  $^3\text{He}/^4\text{He}$ , FCKW,  $^{18}\text{O}$ ,  $^2\text{H}$ ,  $^{34}\text{S}-\text{SO}_4^{2-}$ ,  $^{18}\text{O}-\text{SO}_4^{2-}$  und  $^{14}\text{C}$  wurde gerade begonnen und wird während der nächsten Monate fortgeführt.

Aus der ersten Messkampagne im April liegen erste Messwerte vor, die mit nun folgenden Beprobungskampagnen verdichtet werden sollen. Der Schwerpunkt hierbei liegt auf einer Identifikation typischer isotopenhydrologischer Signaturen der einzelnen vorkommenden Wasserkörper durch geeignete Parameterkombinationen. Geplante Probenahmen an der Tiefbohrung G4 konnten nicht durchgeführt werden, da an dieser Bohrung die hydraulischen Tests und damit die Probemöglichkeit entfiel.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Intensive Planung und Durchführung weiterer Beprobungskampagnen an bestehenden und im Bau befindlichen Flachbohrungen, um teufen- und lithologiebezogene Isotopenmuster zu identifizieren. Hierbei wird in der Planung, Durchführung und der Korrelation mit hydrochemischen Daten in enger Zusammenarbeit mit der BTU Cottbus und IHU Stendal verfahren.

Messung der bereits entnommenen Wasserproben im GGA-Labor (stabile Isotope und  $^{14}\text{C}$ -Datierung) sowie weitere Vergabe von Analytikaufträgen (Tritium und FCKW/SF<sub>6</sub>) der ab 2008 zu entnehmenden Wasserproben. Methodische Tests für die Untersuchung von  $^{86}\text{Sr}/^{87}\text{Sr}$  an ausgewählten Grundwasserproben.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Blättermann, M. (2007): Entwicklung einer neuen Methode zur Analyse der stabilen Isotope hochsalinärer Wässer aus dem Raum Staßfurt. - Bachelor-Arbeit an der FU Berlin, Institut für Geographische Wissenschaften. 40 Seiten.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Dr. Andreas Hampel, Pfarrer-Heberer-Str. 34, 55411 Bingen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1577</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 30.04.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.08.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 238.963,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hampel	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich 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).

Zu Projektbeginn wurde auf dem Start-Workshop zunächst der von allen Partnern mit dem jeweiligen Stoffgesetz und Programmsystem zu berechnende Ausschnitt der ausgewählten Grube Angersdorf festgelegt. Zur besseren Vergleichbarkeit der Berechnungsergebnisse wurden gemeinsame Modellvorgaben definiert. Die zu dieser Lokation bereits vorhandenen In-situ- und Laborversuchsdaten wurden besprochen und allen Partnern zur Verfügung gestellt.

Im Berichtszeitraum hat der Zuwendungsempfänger die Versuchsdaten ausgewertet sowie erste Anpassungen mit dem CDM zur vorläufigen Bestimmung der salztypspezifischen Kennwerte der Stoffgesetzparameter und zur Ermittlung des Bedarfs an weiteren Versuchen durchgeführt.

Auf dem zweiten gemeinsamen Workshop wurden die im Projekt durchzuführenden Laborversuche, die untertägige Probengewinnung und die In-situ-Messungen im Detail besprochen. Außerdem wurden erste Ergebnisse der Auswertung und Nachrechnung der vorhandenen Laborversuche sowie erste Modellerstellungen zum Grubenausschnitt Angersdorf vorgestellt. Als Schwerpunktthema wurde auf diesem Workshop die experimentelle Untersuchung und Modellierung der Permeabilität (bei den Partnern und in der Literatur) diskutiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2008 wird der Zuwendungsempfänger das FLAC-3D-Modell des gemeinsam für die Benchmark-Modellberechnungen ausgewählten Ausschnitts der Grube Angersdorf erstellen sowie erste Berechnungen mit dem CDM in FLAC-3D durchführen.

Parallel dazu wird der Partner IfG Leipzig für den Verbund in der Grube Angersdorf die In-situ-Arbeiten beginnen, die Laborproben herstellen sowie zusammen mit der TU Clausthal die ergänzenden Laborversuche (Kriech- und Festigkeitsversuche) beginnen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Hampel, A. & O. Schulze (2007): The Composite Dilatancy Model: A constitutive model for the mechanical behavior of rock salt. \*)
- 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 Geoingenieurwesen, TU Bergakademie Freiberg, S. 211-224.
- Hampel, A., O. Schulze, U. Heemann, F. Zetsche, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, Z. Hou, R. Wolters, U. Düsterloh, D. Zapf, R. Rokahr, A. Pudewills (2007): Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1004-1054), Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Projektträger PTKA-WTE.
- Schulze, O., U. Heemann, F. Zetsche, A. Hampel, A. Pudewills, R.-M. Günther, W. Minkley, K. Salzer, Z. Hou, R. Wolters, R. Rokahr & D. Zapf (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, I. Modeling of deformation processes and benchmark calculations. \*)
- Hou, Z., R. Wolters, U. Düsterloh, R. Rokahr, D. Zapf, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, U. Heemann, O. Schulze, F. Zetsche & A. Hampel (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, II. Numerical modeling of two in situ case studies and comparison. \*)
- \*) In: K.-H. Lux, W. Minkley, M. Wallner & H.R. Hardy, Jr. (Hrsg.): Basic and Applied Salt Mechanics; Proc. of the Sixth Conf. on the Mechanical Behavior of Salt (Saltmech 6), Hannover, Mai 2007, Taylor & Francis (A.A. Balkema Publ.), Lisse.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1587</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 30.04.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.08.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 281.450,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Salzer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das vorliegende Teilvorhaben 2 beteiligt sich mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach MINKLEY und dem erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach GÜNTHER/SALZER am Stoffgesetzvergleich. und verwendet das Programm FLAC-3D.

Zu Projektbeginn wurde auf dem Start-Workshop zunächst der von allen Partnern mit dem jeweiligen Stoffgesetz und Programmsystem zu berechnende Ausschnitt der ausgewählten Grube Angersdorf festgelegt. Zur besseren Vergleichbarkeit der Berechnungsergebnisse wurden gemeinsame Modellvorgaben definiert. Die zu dieser Lokation bereits vorhandenen In-situ- und Laborversuchsdaten wurden vom IfG dokumentiert, allen Partnern zur Verfügung gestellt und besprochen. Im Berichtszeitraum hat das IfG die Versuchsdaten, ausgewertet sowie erste Anpassungen zur vorläufigen Bestimmung der salztypspezifischen Kennwerte der Stoffgesetzparameter und zur Ermittlung des Bedarfs an weiteren Versuchen durchgeführt. Das IfG hat weiterhin die Probenahme und die In-situ-Messungen mit der Grube Teutschenthal vorbereitet. Auf dem zweiten gemeinsamen Workshop wurden die im Projekt durchzuführenden Laborversuche, die untertägige Probengewinnung und die In-situ-Messungen im Detail besprochen. Außerdem wurden erste Ergebnisse der Auswertung und Nachrechnung der vorhandenen Laborversuche sowie erste Modellerstellungen zum Grubenausschnitt Angersdorf vorgestellt. Als Schwerpunktthema wurde auf diesem Workshop die experimentelle Untersuchung und Modellierung der Permeabilität (bei den Partnern und in der Literatur) diskutiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2008 wird das IfG das FLAC-3D-Modell des gemeinsam für die Benchmark-Modellrechnungen ausgewählten Ausschnitts der Grube Angersdorf erstellen sowie erste Berechnungen durchführen.

Außerdem wird das IfG Leipzig für den Verbund in der Grube Angersdorf die In-situ-Arbeiten beginnen, die Laborproben gewinnen, herstellen sowie zusammen mit der TU Clausthal die ergänzenden Laborversuche (Kriech- und Festigkeitsversuche) beginnen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- R.-M. Günther, W. Minkley, K. Salzer, (2007): A model for rock salt, describing transient, stationary, and accelerated creep and dilatancy. \*)
- W. Minkley, J. Mühlbauer, (2007): Constitutive models to describe the mechanical behaviour of salt rocks and the imbedded weakness planes. \*)
- Hampel, A., O. Schulze, U. Heemann, F. Zetsche, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, Z. Hou, R. Wolters, U. Düsterloh, D. Zapf, R. Rokahr, A. Pudewills (2007): Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1004-1054), Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Projektträger PTKA-WTE.
- Schulze, O., U. Heemann, F. Zetsche, A. Hampel, A. Pudewills, R.-M. Günther, W. Minkley, K. Salzer, Z. Hou, R. Wolters, R. Rokahr & D. Zapf (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, I. Modeling of deformation processes and benchmark calculations. \*)
- Hou, Z., R. Wolters, U. Düsterloh, R. Rokahr, D. Zapf, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, U. Heemann, O. Schulze, F. Zetsche & A. Hampel (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, II. Numerical modeling of two in situ case studies and comparison. \*)
- 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 Geingenieurwesen, TU Bergakademie Freiberg, S. 211-224.

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

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1597</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 3		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 30.04.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.08.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 120.265,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Pudewills	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zu Projektbeginn wurde auf dem Start-Workshop zunächst der von allen Partnern mit dem jeweiligen Stoffgesetz und Programmsystem zu berechnende Ausschnitt der ausgewählten Grube Angersdorf festgelegt. Zur besseren Vergleichbarkeit der Berechnungsergebnisse wurden gemeinsame Modellvorgaben definiert. Die zu dieser Lokation bereits vorhandenen In-situ- und Laborversuchsdaten wurden besprochen und allen Partnern zur Verfügung gestellt.

Die im Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten betrafen die folgenden Themen:

- Mit dem neu erworbenen Programm-Modul ADINA-M wurden eine einfache 3D Struktur in Anlehnung an den zu untersuchenden Ausschnitt der Grube Angersdorf erstellt. Die Rechenergebnisse der 1800 Tage Kriechsimulationszeit wurden auf dem zweiten Workshop in Leipzig am 11.12.07 präsentiert und mit den Partnern diskutiert. Ziel dieser Untersuchung war die Ermittlung des notwendigen Rechenaufwands für eine komplexe 3D-Untertagestruktur.
- Weiterhin wurde eine Literatur-Studie hinsichtlich der aktuellen Permeabilitäts-Porositäts-Beziehungen für Steinsalz durchgeführt. Die verschiedenen Formulierungen aus Literatur und EU-Vorhaben (BAMBUS, NF-PRO) wurden zusammen dargestellt und miteinander verglichen. Ebenfalls wurden auf dem Workshop in Leipzig die Modellierung der Permeabilität in den Benchmark-Rechnungen diskutiert. Die Permeabilitäts-Porositäts-Beziehung von der BGR wurde als einheitliche Formulierung für die Simulationsrechnungen dieses Verbundprojekts gewählt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2008 sollen die Anpassung der vorhandenen Stoffmodelle und Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffgesetzparameter durchgeführt werden. Weiterhin wird mit dem Programm ADINA-M ein 3D-Modell des ausgewählten Ausschnitts der Grube Angersdorf erstellt und die ersten Rechnungen durchgeführt.

Parallel dazu wird der Partner IfG Leipzig für den Verbund in der Grube Angersdorf die In-situ-Arbeiten beginnen, die Laborproben herstellen sowie zusammen mit der TU Clausthal die ergänzenden Laborversuche (Kriech- und Festigkeitsversuche) beginnen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

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

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 + Synthesericht) 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*, Int. Conf. on Rad. Waste Disposal in Geological Formations, Braunschweig, 6.-9. Nov. 2007.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 C 1607</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 4		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 30.04.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.08.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 132.635,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Rokahr	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich im Teilvorhaben 4 mit dem von ihm entwickelten Stoffgesetz IUB-MDCF an dem Stoffgesetzvergleich und verwendet das Finite-Differenzen-Programm Flac3D der Firma Itasca.

Zu Projektbeginn wurde auf dem Start-Workshop zunächst der von allen Partnern mit dem jeweiligen Stoffgesetz und Programmsystem zu berechnende Ausschnitt der ausgewählten Grube Angersdorf festgelegt. Zur besseren Vergleichbarkeit der Berechnungsergebnisse wurden gemeinsame Modellvorgaben definiert. Die zu dieser Lokation bereits vorhandenen In-situ- und Laborversuchsdaten wurden besprochen und allen Partnern zur Verfügung gestellt.

Im Berichtszeitraum hat der Zuwendungsempfänger die Versuchsdaten ausgewertet sowie erste Anpassungen mit dem CDM zur vorläufigen Bestimmung der salztypspezifischen Kennwerte der Stoffgesetzparameter und zur Ermittlung des Bedarfs an weiteren Versuchen durchgeführt.

Des Weiteren wurde ein dreidimensionales Berechnungsmodell auf der Grundlage der auf dem ersten Workshop besprochenen Randbedingungen erstellt.

Auf dem zweiten gemeinsamen Workshop wurden die Arbeiten des Teilvorhabens 4 an den Kennwertbestimmungen sowie an der Modellerstellung des Grubenausschnitts Angersdorf vorgestellt. Weiterhin wurden die im Projekt durchzuführenden Laborversuche, die untertägige Probengewinnung und die In-situ-Messungen im Detail besprochen. Als Schwerpunktthema wurde auf diesem Workshop die experimentelle Untersuchung und Modellierung der Permeabilität (bei den Partnern und in der Literatur) diskutiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im ersten Halbjahr 2008 wird der Zuwendungsempfänger erste Berechnungen mit dem erstellten Flac3D-Modell des gemeinsam für die Benchmark-Modellrechnungen ausgewählten Ausschnitts der Grube Angersdorf durchführen. Außerdem werden weitere Anpassungen der Stoffgesetzkennwerte des vorliegenden Salzgesteins vorgenommen.

Parallel dazu wird der Partner IfG Leipzig für den Verbund in der Grube Angersdorf die In-situ-Arbeiten beginnen, die Laborproben herstellen sowie zusammen mit der TU Clausthal die ergänzenden Laborversuche (Kriech- und Festigkeitsversuche) beginnen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Hauck, R. (2001): Tragverhalten tiefliegender Salzkavernen bei atmosphärischem Innendruck
- Hampel, A., O. Schulze, U. Heemann, F. Zetsche, R.-M. Günther, K. Salzer, W. Minkley, Z. Hou, R. Wolters, U. Düsterloh, D. Zapf, R. Rokahr, A. Pudewills (2007): Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen. Abschlussbericht (Einzelberichte + Synthesebericht) z. BMBF-Verbundprojekt (FKZ 02C1004-1054), Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Projektträger PTKA-WTE.
- Schulze, O., U. Heemann, F. Zetsche, A. Hampel, A. Pudewills, R.-M. Günther, W. Minkley, K. Salzer, Z. Hou, R. Wolters, R. Rokahr & D. Zapf (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, I. Modeling of deformation processes and benchmark calculations. \*)
- Hou, Z., R. Wolters, U. Düsterloh, R. Rokahr, D. Zapf, K. Salzer, R.-M. Günther, W. Minkley, A. Pudewills, U. Heemann, O. Schulze, F. Zetsche & A. Hampel (2007): Comparison of advanced constitutive models for the mechanical behavior of rock salt - results from a joint research project, II. Numerical modeling of two in situ case studies and comparison. \*)
- \*) In: K.-H. Lux, W. Minkley, M. Wallner & H.R. Hardy, Jr. (Hrsg.): Basic and Applied Salt Mechanics; Proc. of the Sixth Conf. on the Mechanical Behavior of Salt (Saltmech 6), Hannover, Mai 2007, Taylor & Francis (A.A. Balkema Publ.), Lisse.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 C 1617</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2007 bis 30.04.2010	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.08.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 187.145,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

In Deutschland und auch international wurde in den vergangenen Jahrzehnten von verschiedenen Arbeitsgruppen umfangreiches experimentelles und theoretisches Wissen zur Salzmechanik erarbeitet. Es wurden diverse Stoffgesetze entwickelt und angewendet, um die Eigenschaften und das Verhalten von Salzgesteinen unter mechanischen Belastungen zu beschreiben bzw. im Rahmen von Tragwerksanalysen prognostizieren zu können. Dieses Verbundvorhaben schließt sich inhaltlich an das BMBF-Verbundvorhaben „Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Steinsalz: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen“ an. 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. 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 Startworkshop wurde im August 2007 durchgeführt. Das 3D-Berechnungsmodell des abzubildenden Untertagebauwerks sowie die durchzuführenden Laboruntersuchungen wurden im Grundsatz festgelegt, bereits durchgeführte Laboruntersuchungen wurden vorgestellt.

- AP2: Das untertägige Bohr- und Messprogramm sowie die durchzuführenden Laboruntersuchungen wurden beim Startworkshop im Grundsatz festgelegt. Beim 2. Workshop im Dezember 2007 wurden die durchzuführenden Laboruntersuchungen in Bezug auf die Randbedingungen Belastungsgeschichte, Versuchstemperatur und Art der Versuche präziser festgelegt.
- AP3: Das 3D-Berechnungsmodell des abzubildenden Untertagebauwerks wurde mit Hilfe des FDM-Programms FLAC3D erstellt. Die bisher durchgeführten Laboruntersuchungen wurden zu einer ersten Bestimmung von salztypspezifischen Kennwerten für die Stoffmodellparameter herangezogen.
- AP4: Mit 3D-Berechnungen zum Test des Modells wurde begonnen. Für ausführliche Berechnungen fehlen noch wesentliche Stoffmodellparameter, die aus den noch durchzuführenden Laboruntersuchungen abgeleitet werden sollen.
- AP5: keine
- AP6: keine
- AP7: Der 2. Workshop wurde im Dezember 2007 durchgeführt. Es wurden Detailfragen zum 3D-Berechnungsmodell des abzubildenden Untertagebauwerks sowie zu den noch durchzuführenden Laboruntersuchungen diskutiert. Des Weiteren wurden verschiedene Porositäts-Permeabilitäts-Modelle vorgestellt.
- AP8: keine
- AP9: keine

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Der Startworkshop ist abgeschlossen.
- AP2: Durchführung des geplanten untertägigen Bohr- und Messprogramms sowie der geplanten Laboruntersuchungen.
- AP3: Kennwertermittlung aus den weiteren Laboruntersuchungen und Nachrechnung einiger Laborversuche.
- AP4: 3D-Modellrechnungen unter Verwendung der ermittelten Materialkennwerte.
- 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

*Hampel, A. & O. Schulze (2007): The Composite Dilatancy Model: A constitutive model for the mechanical behavior of rock salt. \*)*

*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 Forschungshäfte, C515 Geoingenieurwesen, TU Bergakademie Freiberg, S. 211-224.*

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

*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.*



### **2.3 W-Vorhaben**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> FZ-Jülich, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 W 6243</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Institutionelle und technologische Weiterentwicklung von internationalen Kernmaterialkontrollen		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung der Kernmaterialüberwachung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2003 bis 30.04.2009	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.047.262,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Stein	

### 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: Erweiterung der Methode zur automatischen radiometrischen Normierung von multi-temporalen Satellitendaten; Arbeiten an zwei Buchveröffentlichungen: (1) „Object-based Image Analysis and Treaty Verification -- New Approaches in Remote Sensing Applied to Nuclear Facilities in Iran“, (2) „Safeguards and Satellite Imagery“.
- Geologische Endlagerung: Mitarbeit in der ASTOR-Gruppe der IAEO.
- Standortlager: Mit den Betreibern Diskussion der von IAEO und Euratom geplanten Safeguards-Techniken für die Standortlagerung abgebrannter Brennelemente.
- Datenfernübertragung: Mit den Betreibern, BMWi, BMU und BSI Diskussion des von Euratom vorgeschlagenen Ansatzes; Arbeiten zu zukünftigen Überwachungstechniken.
- ESARDA: Leitung der Arbeitsgruppen „Containment and Surveillance“, „Verification Technologies and Methodologies“ sowie „Integrated Safeguards“, Entwicklung einer Bewertungsmethode für Containment and Surveillance-Techniken, Mitarbeit in Executive Board und Editorial Committee; Fertigstellung eines Lehrbuchkapitels über Containment and Surveillance für die studentische Nachwuchsausbildung, Diskussion und Bewertung von Unannounced Inspections.
- Proliferationsresistenz: Zusammenarbeit mit der IAEO.
- Unattended Systems: Diskussion und Abstimmung von Designänderungen bei die Entwicklung des Digital Unattended Multi-channel Analyser (DIUM); Projektsitzung zur Prototyp-Entwicklung für das IAEA Next Generation Surveillance System (NGSS).
- Zusatzprotokoll: Unterstützung von BMWi und Betreibern bei ihren Deklarationspflichten, Dokumentation der Deklarationen, Bewertung von Safeguards in Europa, Mitarbeit in nationalen und internationalen Gremien (z. B. Atomic Questions Group), Evaluierung früherer deutscher Nuklearaktivitäten für IAEA State Level Approach.
- Elektronische Erfassung und Auswertung von IAEO-Inspektionsberichten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA-Gremien
- Entwicklung eines nichtlinearen Änderungsdetektionsalgorithmus' mit neuronalen Netzen
- Proliferationsresistenz
- Unterstützung des BMWi bei Implementierung des Zusatzprotokolls und Integrated Safeguards
- zukünftige Safeguardstechniken und -strategien
- Dokumentation abgeschlossener Arbeiten

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

S. NUSSBAUM, I. NIEMEYER; “Automated extraction of change information from multispectral satellite imagery”, ESARDA Bull. 36, Juni 2007, 19-25.

B. RICHTER; “The ESARDA Working Group on Containment and Surveillance”, ESARDA Bull. 36, Juni 2007, 26-27.

S. NUSSBAUM, M.J. CANTY, P.R. MARPU; “Image Analysis based on object features and invariant moments explified for nuclear verification”, Proc. 29th Symposium on Safeguards and Nuclear Material Management, Mai 2007 (auf CD-ROM).

M.J. CANTY, A.A. NIELSEN; Advances in Statistical Change Detection Methods within the GMOSS Network, in: Global Monitoring for Security and Stability, Eds. G. Zeug, M. Pesaresi, JRC 41424, JRC IS-PRA, 2007, 365-373.

M.J. CANTY, A.A. NIELSEN; Investigation of Alternative Iteration Schemes for the IR-MAD Algorithm, Proceedings of SPIE, Image and Signal Processing for Remote Sensing, Florence, Sept 2007, Vol 6748.

A. REZNICZEK, B. RICHTER, “How to Determine the Performance and Assurance of C/S Equipment“, Proc. 29th Symposium on Safeguards and Nuclear Material Management, Mai 2007 (auf CD-ROM).

A. REZNICZEK, H.H. REMAGEN, B. RICHTER, G. STEIN „How much Safeguards is Needed in Europe?“, Proc. 29th Symposium on Safeguards and Nuclear Material Management, Mai 2007 (auf CD-ROM).

A. REZNICZEK, “Activities of the ESARDA Working Group on Integrated Safeguards”, IAEA Symposium on International Safeguards, Wien, Oktober 2006, erschienen 2007 (auf CD-ROM).



## **2.4 BMWi-Hausvorhaben**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>KWA 2003</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine		
<b>Zuordnung zum FuE-Programm:</b> Entsorgung gefährlicher Abfälle in tiefen geologischen Formationen: Weiterentwicklung von Endlager- und Untertagedeponiekonzeptionen unter Sicherheitsgesichtspunkten		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2003 bis 31.12.2007	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2007 bis 31.12.2007	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.222.760,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hemberle	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das übergeordnete Ziel des Vorhabens ist die Koordinierung der Mitarbeit deutscher Wissenschaftler an den internationalen Forschungsprogrammen zu den alternativen Wirtsgesteinen Granit und Ton. Diese Mitarbeit dient in erster Linie der weiteren Vertiefung der Kenntnisse über die Mobilität und Ausbreitung von Radionukliden in der Umgebung eines Endlagers und der Verbesserung der Instrumentarien für die Charakterisierung des Endlager-Wirtsgesteins und für die Durchführung von Endlager-Sicherheitsanalysen. Zur Erreichung dieser Aufgabenstellung werden In-situ-Untersuchungen in den Untertagelabors, Laborversuche an den Standorten der beteiligten Institutionen und Modellentwicklungen und -rechnungen durchgeführt. Ein weiteres wesentliches Ziel ist die Mitarbeit in internationalen Arbeitsgruppen, die den Erfahrungsaustausch und die Kenntniserweiterung auch auf den an die o. g. Ziele angrenzenden Gebieten ermöglicht.

Die Arbeiten sind in die wissenschaftlichen Programme mit internationaler Beteiligung eingebunden, die in den Untertagelabors (URL) Felslabor Grimsel (CH), HRL Äspö (S), Mt. Terri (CH), Tournemire (F) und Bure (F) durchgeführt werden.

Die von BMWi geförderten Vorhaben werden von DBE Technology, FZD, TU Clausthal und GRS durchgeführt. Sie 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 02E9390, 02E9743, 02E9945, 02E9985, 02E10096, 02E10106, FZK/INE, BGR)

**FuE-Arbeiten zu Tonstein in den Untertagelabors Mt. Terri, Tournemire und Bure**  
(Vorhaben 02E9834, 02E9894, 02E9914, 02E10045, 02E10116, 02E10226, 02E10377, 02E10427, 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 (NF-PRO (FEBEX); HRL Äspö (Projekte: Prototype Repository, Task Force EBS, Temperature Buffer Test, Microbe, LASGIT)

- 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 wird planmäßig abgeschlossen. Die Aktivitäten werden im zwischenzeitlich bewilligten Vorhaben mit dem Förderkennzeichen KWA9003 fortgesetzt.

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

Siehe Berichte zu den einzelnen Vorhaben in Kapitel 2.1.



### 3 Verzeichnis der ausführenden Forschungsstellen

- |   |   |     |
|---|---|-----|
| <b>Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Fahrenbergplatz, 79098 Freiburg</b>                     |   |     |
| 02 E 10306  | Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme $d^3f$ und $r^3t$ - Entwicklung effizienter Diskretisierungsverfahren für die zu entwickelnden numerischen Verfahren zur Datenanalyse  | 118 |
| <b>Bauhaus-Universität Weimar, Geschwister-Scholl-Straße 8, 99423 Weimar</b>                    |   |     |
| 02 C 1104   | Experimentelle und numerische Untersuchungen zum Langzeitverhalten von Abschlussbauwerken: Thermo-Hydro-Mechanisch-Chemisch gekoppelte Systeme  | 174 |
| 02 C 1224   | Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlusselement im Salinar - Experimentelle Untersuchungen zur Struktur, dem Abbindeverhalten, der Kompressibilität und den volumetrischen Eigenschaften                 | 198 |
| 02 E 10437  | Hydraulische Permeabilität von Moderat bis hochverdichteten expansiven Tonen  | 144 |
| <b>Bergische Universität Wuppertal, Gaußstraße 20, 42119 Wuppertal</b>                          |   |     |
| 02 C 1084   | Verbundvorhaben „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Entwicklung eines aktiven richtungssensitiven Bohrlochantennensystems  | 170 |
| <b>Brandenburgische Technische Universität Cottbus, Konrad-Wachsmann-Allee 1, 03046 Cottbus</b> |   |     |
| 02 C 1466   | Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 1 (BTU): Hydrologie und Geochemie des Gesamtsystems   | 238 |
| <b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover</b>     |   |     |
| 02 C 1074   | Verbundvorhaben „Entwicklung eines richtungssensitiven Georadar-Bohrlochmessverfahrens“, Teilvorhaben: Weiterentwicklung der räumlichen Auswertung von richtungssensitiven EMR-Bohrlochmessdaten  | 168 |
| 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 | 240 |
| <b>DBE Technology GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine</b>  |   |     |
| 02 E 9743   | Messtechnische und modelltheoretische Untersuchungen zum THM-Verhalten einer Bentonit-Barriere im Bereich des Phasenübergangs der Porenflüssigkeit unter Einsatz faseroptischer Technologie im Rahmen von Versuchen im URL Äspö   | 20  |
| 02 E 9854   | Optimierung der Direkten Endlagerung durch Kokillenlagerung in Bohrlöchern, Machbarkeitsstudie und Entwurfs- und Konzeptplanung (DENKMAL, Phase 1)  | 32  |

- 02 E 9965 Untersuchung zur Wirksamkeit des geologischen und geotechnischen Barriersystems im Hinblick auf die Standortauswahl in magmatischen Gesteinen - WIBASTA  52
- 02 E 10065 Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW - Kurztitel: ISIBEL  70
- 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-  74
- 02 E 10246 Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)  106
- 02 E 10286 Referenzkonzept für ein Endlager für radioaktive Abfälle in Tongestein (ERATO)  114
- 02 E 10346 Entwicklung und Umsetzung von technischen Konzepten für tiefe geologische Endlager in allen Wirtsgesteinen (EUGENIA)  126
- 02 E 10407 Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX  138
- 02 E 10487 Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm  154

**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  172
- 02 C 1154 Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-DMT)  184

**Dr. Andreas Hampel, Pfarrer-Heberer-Str. 34, 55411 Bingen**

- 02 C 1577 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 1  258

**Dr. Veerhoff & Scherschel GbR erd\_sicht, Staffelfgasse 15, 53347 Alfter**

- 02 C 1174 Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-EnviCon)  188

**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  176

- 02 C 1295 Kopplung Numerischer Modelle für C:HM - Transportprozesse, Teilprojekt Uni Tübingen: Validierung Numerischer Modelle für geochemische Prozesse in geotechnischen Dichteelementen  212

**Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich**

- 02 E 10357 Wechselwirkung mobilisierter Radionuklide mit sekundären Phasen in endlagerrelevanten Formationswässern  128
- 02 W 6243 Institutionelle und technologische Weiterentwicklung von internationalen Kernmaterialkontrollen  270

**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  262
- 02 E 10096 Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado  76
- 02 E 10126 Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZ Karlsruhe  82
- 02 E 10206 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Einfluss von tonorganischen Substanzen auf die Rückhaltung von Actiniden in der Tonbarriere  98

**Forschungszentrum Dresden-Rossendorf e.V. (FZD), Bautzner Landstraße 128 (B6), 01328 Dresden**

- 02 C 1144 Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-FZD)  182
- 02 C 1436 Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD  232
- 02 E 9985 Mobilisierung von Actiniden durch mikrobiell produzierte Liganden unter Berücksichtigung der Endlagerung von radioaktivem Abfall  56
- 02 E 10136 Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben FZD  84
- 02 E 10156 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Charakterisierung und Quantifizierung des Einflusses von Tonorganika auf die Wechselwirkung von U und Am im Ton  88

**Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V. (FhG), Hansastraße 27c, 80686 München**

- 02 C 1184 Entwicklung eines Messsystems zur hochauflösenden zerstörungsfreien Erkundung von Gesteinsnahbereichen mittels Sonar  190
- 02 C 1325 Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswertesystem zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar – Sonarverfahren  218

**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  120

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

- |                  |   |     |
|------------------|---|-----|
| <b>02 C 0983</b> | Komplettierung der Datenbasis zur Modellierung der Schwermetallmobilisierung in salinaren Systemen  | 162 |
| <b>02 C 0993</b> | Geochemische Modellierung des Langzeitverhaltens von silikatischen und aluminosilikatischen Materialien im Temperaturbereich 30 °C und 90 °C  | 164 |
| <b>02 C 1164</b> | Verbundprojekt: Integriertes Sorptions-Datenbanksystem für Wechselwirkungen chemisch-toxischer und radioaktiver Kontaminanten mit mineralischen Systemen in geologischen Formationen (ISDA-GRS)                     | 186 |
| <b>02 C 1244</b> | Prognose der Redoxeigenschaften natürlicher wässriger Lösungen  | 202 |
| <b>02 C 1254</b> | Geochemische Barriereeffizienz im anaeroben Deponienahfeld einer UTD  | 204 |
| <b>02 C 1285</b> | Kopplung Numerischer Modelle für C:HM - Transportprozesse, Teilprojekt GRS  | 210 |
| <b>02 C 1426</b> | Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS  | 230 |
| <b>02 E 9390</b> | Untersuchungen zur Gasentwicklung und -freisetzung aus dem Tonversatz sowie dessen Gas- und Wasserpermeabilität im Projekt „Full Scale Engineered Barriers Experiment in Crystalline Host Rock – Phase II“ FEBEX II | 18  |
| <b>02 E 9783</b> | Handbuch der Endlagerung – Umgang mit wärmeentwickelnden und langlebigen schwach- und mittelaktiven Abfällen  | 22  |
| <b>02 E 9813</b> | Entwicklung eines Instrumentariums zur Berechnung des Radionuklidtransports in Tonformationen   | 26  |
| <b>02 E 9834</b> | Laborprogramm zur Untersuchung der Entwicklung und Verheilung von Auflockerungszonen in Tonsteinformationen – LUVEAT  | 28  |
| <b>02 E 9844</b> | NF-PRO 5, Process Couplings and Integration in Performance Assessment   | 30  |
| <b>02 E 9884</b> | Langzeitwechselwirkungen von Tonen und Zementen in Ton- und Salzformationen   | 36  |
| <b>02 E 9894</b> | Selbstdichtende Barrieren aus Ton/Mineral-Gemischen in einem Tonendlager – SB-Experiment im Mt. Terri Untertagelabor – Hauptprojekt   | 38  |
| <b>02 E 9914</b> | Geoelektrische Untersuchung der Entsättigung des Opalinuston im Ventilationsversuch im Mt. Terri Untertagelabor Phase 2; Kurzzeitentwicklung der EDZ  | 42  |
| <b>02 E 9934</b> | Modellierung des großräumigen Schadstofftransports (Kurztitel: MOST)  | 46  |
| <b>02 E 9944</b> | Geoelektrische Untersuchung der Aufsättigung von Bentonitbarrieren im HRL-Äspö-Projekt „Prototype Repository“ – Phase 2   | 48  |
| <b>02 E 9954</b> | Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlager   | 50  |

- 02 E 9975 Untersuchung zur Wirksamkeit des geologischen und geotechnischen Barriersystems im Hinblick auf die Standortauswahl in magmatischen Gesteinen - WIBASTA 54
- 02 E 9995 Grundlegende Prozesse zum Radionuklidtransport im Fernfeld eines Endlagers im Salz – FUNMIG-RTDC-5 58
- 02 E 10045 Beteiligung am Forschungsprogramm der ANDRA im Untertagelabor Bure 66
- 02 E 10055 Überprüfung und Bewertung des bereits verfügbaren Instrumentariums für sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HLW – Kurztitel: ISIBEL 68
- 02 E 10075 Thermodynamische Daten für Eisen(II) in hochsalinaren Lösungen bei Temperaturen bis 90 °C – Kurztitel: FeT90 72
- 02 E 10106 Verbundprojekt: Kolloidgetragener Radionuklidtransport in geklüfteten Gesteinen, Kurztitel: Kolorado 78
- 02 E 10116 Barriereintegrität des einschlusswirksamen Deckgebirges in Tonformationen (BET) 80
- 02 E 10146 Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben GRS 86
- 02 E 10226 Gasmigration im Opalinus Ton in Abhängigkeit vom Gasinjektionsdruck (unterhalb des Fracdruckes) Kurztitel: HG-C 102
- 02 E 10236 Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU) 104
- 02 E 10276 Weiterentwicklung sicherheitsanalytischer Methoden zur Vorbereitung eines Safety Case in Deutschland -WESAM- 112
- 02 E 10336 Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme  $d^3f$  und  $r^3t$  124
- 02 E 10367 Anpassung des EMOS-Programmsystems an moderne Softwareanforderungen 130
- 02 E 10377 Untersuchung der THM-Prozesse im Nahfeld von Endlagern in Tonformationen 132
- 02 E 10387 Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX 134
- 02 E 10477 Restporosität und -permeabilität von kompaktiertem Salzgrus-Versatz in einem HAW-Endlager, Kurztitel: Repoperm 152

**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 194

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

- 02 E 10447 Zerstörungsfreie In-situ-Permeabilität 146

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

- 02 C 1234 Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlusselement im Salinar - Untersuchungen der mechanischen Anforderungen und Eigenschaften  200
- 02 C 1264 Beweissicherungsprogramm zum geomechanischen Verhalten von Salinarbarrieren nach starker dynamischer Beanspruchung und Entwicklung einer Dimensionierungsrichtlinie zum dauerhaften Einschluss  206
- 02 C 1587 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 2  260
- 02 E 9874 Untersuchung der komplexen mechanischen und hydraulischen Eigenschaften von Tongesteinen unter besonderer Berücksichtigung der Foliation  34
- 02 E 9904 Untersuchung des mechanischen Verhaltens von kompaktiertem Salzgrus im Kontakt mit dem Wirtsgestein  40
- 02 E 10256 Verbundprojekt: Überprüfung und Kalibrierung eines THM-Modells zur Beschreibung des Langzeitverhaltens der Auflockerungszone im Steinsalz (MOLDAU)  108

**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  246

**Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA), Stilleweg 2, 30655 Hannover**

- 02 C 1315 Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswertesystem zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar – Elektromagnetik, Georadar und Quantitative Charakterisierung von Problemzonen  216
- 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  254
- 02 C 1556 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 10 (GGA-S3): Isotopenhydrologische Untersuchungen  256

**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  236

02 C 1536 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 8 (IIF): Tomographische Radiotraceruntersuchungen und Fluoreszenztraceruntersuchungen  252

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  92

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

02 E 10266 Numerische Modellierung der Dilatanz-induzierten, perkolativen Permeation in Salzgestein  110

02 E 10467 Beschreibung des reaktiven Stofftransports in einem salinaren Endlager mit dem Code TOUGHREACT  150

**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  250

02 E 10166 Verbundprojekt Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Wechselwirkung von Neptunium und Plutonium mit natürlichem Tongestein  90

**Kali-Umwelttechnik GmbH vorm. Kaliforschungsinstitut, Am Petersenschacht 7, 99706 Sondershausen**

02 C 1214 Verbundprojekt: Weiterentwicklung von Magnesiabindern von der Strömungsbarriere hin zu einem Verschlusselement im Salinar  196

02 C 1395 Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 1  224

02 C 1496 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 4 (K-UTEK): Grundlagen für Geomodellierung  244

**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  264

02 E 10025 Stabilität von Organotonen als Anionen-Adsorber unter Endlagerbedingungen – Experiment und Modellierung  62

**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  166

**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  24
- 02 E 10397 Verbundprojekt: Chemisch-toxische Stoffe in einem Endlager für hochradioaktive Abfälle - Kurztitel: CHEMOTOX  136

**Projektträger Forschungszentrum Karlsruhe, Wassertechnologie und Entsorgung, Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen**

- KWA 2003 Unterstützungsprogramm Alternative Wirtsgesteine  274

**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  116

**Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Grabengasse 1, 69117 Heidelberg**

- 02 E 10326 Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Rechenprogramme  $d^3f$  und  $r^3t$  - Modellierung des Wärmetransports und Modellierung freier Oberflächen  122

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

- 02 C 1124 Diversitäre und redundante Dichtelemente für langzeitstabile Verschlussbauwerke  178
- 02 C 1446 Verbundvorhaben THEREDA: Entwicklung einer Thermodynamischen Referenzdatenbasis - Teilvorhaben TU BAF  234
- 02 E 10457 Untersuchungen und modelltechnische Beschreibung heterogener Strukturen aus Bindemittel und Zuschlag  148

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

- 02 C 0952 Modellentwicklung zur Gaspermeation aus unterirdischen Hohlräumen im Salzgebirge  160
- 02 C 1134 Untersuchungen an Calciumsulfat-Steinsalz-Baustoffen für Damm-  
bauwerke in Untertage-Deponien und Endlagern  180
- 02 C 1275 Kopplung Numerischer Modelle für C:HM – Transportprozesse, Teil-  
projekt TUC: Gekoppelte Modellierung des C:HM Verhaltens von  
selbstverheilendem Salzversatz  208
- 02 C 1355 Weiterentwicklung der EDV-Software INFIL zur Simulation des  
druckbetriebenen Infiltrationsprozesses von Fluiden in ein nicht per-  
meables Barrieren-Gebirge (Salinar)  222
- 02 C 1405 Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die  
Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und  
Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 2  226
- 02 C 1415 Verbundprojekt: Optimierung von Magnesiabindersystemen für die  
Verwendung in Verschlussbauwerken für untertägige Deponien und  
Endlager für radioaktive Abfälle im Salinar – Teilprojekt 3  228

- 02 C 1486 Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 3 (TUC): Geomechanische Modellierung  242
- 02 C 1617 Verbundprojekt: Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von 3D-Modellberechnungen zum mechanischen Langzeitverhalten eines realen Untertagebauwerks im Steinsalz; Teilvorhaben 5  266
- 02 E 10025 Stabilität von Organotonen als Anionen-Adsorber unter Endlagerbedingungen – Experiment und Modellierung  62
- 02 E 10427 Untersuchungen zur Validierung von Modellansätzen für Tongestein anhand von Feldexperimenten am Standort Tournemire (F) im Rahmen DECOVALEX-THMC  142
- Technische Universität Darmstadt, Karolinenplatz 5, 64289 Darmstadt**
- 02 E 10015 Untersuchungen zum Gastransport in der Auflockerungszone in einem geologischen Endlager in Tongestein  60
- 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  140
- Technische Universität Ilmenau, Ehrenbergstraße 29, 98693 Ilmenau**
- 02 C 1194 Entwicklung eines Messsystems zur hochauflösenden zerstörungsfreien Erkundung von Gesteinsnahbereichen mittels Höchsthäufigkeits-Radar  192
- Technische Universität München, Arcisstraße 21, 80333 München**
- 02 E 10035 Wechselwirkungen von Actiniden mit Anorgano-Huminkolloiden  64
- 02 E 10186 Verbundvorhaben Actinidenmigration im natürlichen Tongestein: Quantenmechanische Modellierung von Aktinoidenkomplexen: Komplexbildung durch Huminstoffe und Sorption an Tonmineralien  94
- 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  96
- 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  158
- Universität Leipzig, Ritterstraße 26, 04109 Leipzig**
- 02 C 1305 Universelles integriertes geophysikalisches Mess- und Auswertesystem zur Charakterisierung von Problemzonen im Salinar – Geologie, Geoelektrik, Seismik und Szenarienmodellierung  214

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

**02 E 9924** Verbundprojekt: Migration von Actiniden im System Ton, Huminstoff, Aquifer - Spektroskopische Bestimmung von thermodynamischen und kinetischen Kenngrößen zur Beschreibung der Humin-Metall-Komplexierung  44

**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  100

**WASY Gesellschaft für Wasserwirtschaftliche Planung und Systemforschung mbH, Waltersdorfer Str. 105, 12526 Berlin**

**02 C 1516** Verbundprojekt: Dynamik abgesoffener oder gefluteter Salzbergwerke und ihres Deckgebirgsstockwerkes; Teilvorhaben 6 (WASY): Strömungs- und Transportmodellierung  248