

**KIT**  
**Karlsruher Institut für Technologie**  
**Die Forschungsuniversität in der**  
**Helmholtz-Gemeinschaft**

**PTE Nr. 54**

BMWi geförderte FuE-Vorhaben zur  
„Entsorgung radioaktiver Abfälle“

Berichtszeitraum: 1. Juli - 31. Dezember 2017

Projektträger Karlsruhe  
Wassertechnologie und Entsorgung  
(PTKA-WTE)

**April 2018**

## PTE-Berichte

Der Projektträger Wassertechnologie und Entsorgung (PTKA-WTE) informiert mit Fortschrittsberichten über den aktuellen Stand der von ihm administrativ und fachlich betreuten FuE.

Die Fortschrittsberichtsreihen behandeln folgende Themenschwerpunkte:

- Entsorgung radioaktiver Abfälle  
(PTE Nr. x seit 1991, fortlaufend \*)
- Stilllegung und Rückbau kerntechnischer Anlagen  
(PTE-S Nr. x seit 2001, fortlaufend #)
- Nukleare Sicherheitsforschung  
(PTE-N Nr. x seit 2010, fortlaufend)

Die Fortschrittsberichtsreihen sind online verfügbar: [www.ptka.kit.edu/wte/287.php](http://www.ptka.kit.edu/wte/287.php)

Verantwortlich für den Inhalt sind die Autoren bzw. die entsprechenden Forschungsstellen. Das KIT übernimmt keine Gewähr insbesondere für die Richtigkeit, Genauigkeit und Vollständigkeit der Angaben sowie die Beachtung privater Rechte Dritter.

*\* Bis Ende des Jahres 2011 wurde in dieser Fortschrittsberichtsreihe auch über die BMBF-geförderte FuE zur untertägigen Entsorgung chemotoxischer Abfälle informiert. Die FuE-Schwerpunkte „Untertägige Entsorgung chemotoxischer Abfälle“ und „Sicherheitsforschung für Bergbauregionen“ wurden zum 31.12.2011 beendet.*

*# Bis Ende des Jahres 2016 wurde in dieser Fortschrittsberichtsreihe auch über die BMBF-geförderte FuE zu Stilllegung und Rückbau kerntechnischer Anlagen informiert. Seit 1.10.2016 wird dieser Förderschwerpunkt durch den Projektträger GRS betreut.*

## Vorwort

Im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) und des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) arbeitet das KIT seit 1991 als Projektträger auf dem Gebiet „Entsorgung“.

Im Rahmen dieses Auftrages betreut der Projektträger Karlsruhe fachlich und administrativ die vom BMWi im Rahmen des jeweilig gültigen Förderkonzepts geförderten FuE-Vorhaben. Seit Februar 2015 ist das Förderkonzept „Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle – Förderkonzept des BMWi (2015-2018)“ Grundlage der Projektförderung.

Die FuE-Inhalte sind in folgende *sechs FuE-Bereiche* aufgeteilt innerhalb derer Projekte gefördert werden können:

- Bereich 1: Auswirkung verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle und Behälter  
(Federführung PT GRS)
- Bereich 2: Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl
- Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik
- Bereich 4: Sicherheitsnachweis
- Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen
- Bereich 6: Kernmaterialüberwachung (Safeguards)

Der vorliegende Fortschrittsbericht dokumentiert Stand und Ergebnisse dieser FuE-Vorhaben. Er wird vom Projektträger *halbjährlich* herausgegeben, um kontinuierlich über die durchgeführten Arbeiten zu informieren.

Der Bericht ist wie folgt gegliedert:

Teil 1 listet die FuE-Vorhaben auf, die dem jeweiligen FuE-Bereich zugeordnet sind.

Teil 2, der Hauptteil, enthält die „formalisierten Zwischenberichte“ zu den FuE-Vorhaben, die nach dem Förderkennzeichen geordnet sind. Im Förderkennzeichen bedeuten die Buchstaben

- E ⇒ „Entsorgung radioaktiver Abfälle“ und
- W ⇒ „Kernmaterialüberwachung“.

Teil 3 listet die FuE-Vorhaben, zugeordnet nach der jeweiligen Forschungsstelle, auf.



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche .....</b>	<b>1</b>
1.1	<i>Auswirkung verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle und Behälter .....</i>	<i>1</i>
1.2	<i>Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl .....</i>	<i>3</i>
1.3	<i>Endlagerkonzepte und Endlagertechnik.....</i>	<i>5</i>
1.4	<i>Sicherheitsnachweis .....</i>	<i>9</i>
1.5	<i>Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen.....</i>	<i>13</i>
1.6	<i>Kernmaterialüberwachung.....</i>	<i>15</i>
<b>2</b>	<b>Formalisierte Zwischenberichte .....</b>	<b>17</b>
2.1	VORHABEN BEREICH 1 .....	17
2.2	VORHABEN BEREICH 2 bis 5 .....	37
2.3	VORHABEN BEREICH 6 .....	181
	Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung.....	185
<b>3</b>	<b>Verzeichnis der Forschungsstellen .....</b>	<b>187</b>



# 1 Verzeichnis der Vorhaben gemäß FuE-Bereiche

## 1.1 Auswirkung verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle und Behälter

<b>1501509</b>	Langzeitverhalten von Metall- und Elastomerdichtungen sowie Polyethylen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (LaMEP)	<b>Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)</b>	📖 18
<b>1501510</b>	Struktur-Eigenschafts-Funktionsbeziehungen von Elastomerdichtungswerkstoffen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (StrukElast)	<b>TU Dresden</b>	📖 20
<b>1501518A</b>	Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport- und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Analysen zu strahlungsbasierten und thermographischen Messverfahren	<b>TU Dresden</b>	📖 22
<b>1501518B</b>	Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport- und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Akustische Messverfahren	<b>Hochschule Zittau/Görlitz</b>	📖 24
<b>1501538A</b>	Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Analysemethoden zur Simulation der Schädigung und der induzierten Erschütterungen in Stahlbetonstrukturen infolge stoßartiger Belastungen (SimSEB) - Teilvorhaben: Verhalten von Stahlbetonstrukturen bei Stoßbelastungen unter Berücksichtigung der Boden-Bauwerk-Wechselwirkung	<b>TU Kaiserslautern</b>	📖 26
<b>1501543B</b>	Verbundvorhaben: Methodik zur zuverlässigkeitsorientierten Nachrechnung und Bewertung bestehender kerntechnischer Bauwerke mit verlängerter Nutzungsdauer — Teilvorhaben: Besondere Berücksichtigung der werkstoffspezifischen Besonderheiten großer Stahlbetonquerschnitte sowie der zugehörigen Bestandsaufnahme	<b>TU Kaiserslautern</b>	📖 28

<b>RS1552</b>	Langzeitverhalten zwischengelagerter Brennelemente bei deutlich längerer Zwischenlagerung	<b>GRS</b>	 30
<b>RS1553A</b>	Verbundvorhaben: Methodik zur zuverlässigkeitsorientierten Nachrechnung und Bewertung bestehender Bauwerke mit verlängerter Nutzungsdauer – Teilprojekt: Methodik zur probabilistischen Bewertung („ProbBau“)	<b>GRS</b>	 32
<b>1501560</b>	Modellierung und Untersuchung der Degradation von Hüllrohrmaterialien aus Zr-Legierungen durch Hydridbildungs- und Hydridverteilungsprozesse im Hinblick auf die Langzeitzwischenlagerung (KEK)	<b>Leibniz Universität Hannover</b>	 34

## **1.2 Wissenschaftliche Grundlagen der Standortauswahl**

Bisher keine Vorhaben in diesem FuE-Bereich



### 1.3 Endlagerkonzepte und Endlagertechnik

<b>02 E 11193A</b>	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 42
<b>02 E 11193B</b>	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 44
<b>02 E 11243</b>	Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Rekompaktionsverhalten der EDZ (LASA-EDZ)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) GmbH, Köln</b>	📖 46
<b>02 E 11294</b>	Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 50
<b>02 E 11385</b>	Entwicklung von Monitoring-Konzepten in Anlehnung an Sicherheits- und Nachweiskonzepte sowie Ableitung von Entscheidungsgrößen und Reaktionsoptionen (MONTANARA)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 76
<b>02 E 11395</b>	Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA)	<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Hannover</b>	📖 78
<b>02 E 11405C</b>	Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt C	<b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>	📖 84
<b>02 E 11425</b>	Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Bautechnische Realisierung Technikumsprüfstand mit Durchführung und Auswertung erster Versuche (Salzschnittblöcke)	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 102

<b>02 E 11435</b>	MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl <sub>2</sub> -Lösung (MgO-SEAL)	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 104
<b>02 E 11516</b>	Entwicklung eines technischen Konzeptes für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle und ausgediente Brennelemente in Kristallingestein in Deutschland (KONEKD)	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 134
<b>02 E 11526A</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in Tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt A	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 136
<b>02 E 11526B</b>	Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in Tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt B	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 138
<b>02 E 11527</b>	Verbundprojekt: Anforderungen und Konzepte für Behälter zur Endlagerung von Wärme entwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein (KoBra), Teilprojekt A	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 140
<b>02 E 11537</b>	Verbundprojekt: Anforderungen und Konzepte für Behälter zur Endlagerung von Wärme entwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein (KoBra), Teilprojekt B	<b>Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)</b>	📖 142
<b>02 E 11557</b>	Gefügestabilisierter Salzgrusversatz - Phase 2 (GE-SAV II)	<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg</b>	📖 150
<b>02 E 11577A</b>	Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 156
<b>02 E 11587A</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Vorprojekt (SANDWICH-VP), Teilprojekt A	<b>Karlsruher Institut für Technologie (KIT)</b>	📖 160
<b>02 E 11587B</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Vorprojekt (SANDWICH-VP), Teilprojekt B	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 162
<b>02 E 11597</b>	Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase II: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel (STROEFUN-II)	<b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>	📖 164
<b>02 E 11617A</b>	Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt A	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 174

**02 E 11627**    **Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)**    **Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln**     178



## 1.4 Sicherheitsnachweis

<b>02 E11072A</b>	Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K <sub>d</sub> -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 38
<b>02 E11102</b>	Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 40
<b>02 E 11284</b>	Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-Nahfeld (BIGBEN)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 48
<b>02 E 11304</b>	Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 52
<b>02 E 11314</b>	Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen (KORPHA)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 54
<b>02 E 11324</b>	Entwicklung eines chemisch-hydraulischen Modells für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen (LAVA-2)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 56
<b>02 E 11334A</b>	Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 58
<b>02 E 11334B</b>	Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 60
<b>02 E 11334C</b>	Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt C	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 62
<b>02 E 11344A</b>	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt A	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 64
<b>02 E 11344B</b>	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.</b>	📖 66

<b>02 E 11344C</b>	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt C	<b>Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald</b>	📖 68
<b>02 E 11344D</b>	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt D	<b>TU München</b>	📖 70
<b>02 E 11365</b>	Lösungsverhalten von Spalt- und Aktivierungsprodukten im Nahfeld eines Endlagers (LÖVE)	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 74
<b>02 E 11405A</b>	Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt A	<b>DBE Technology GmbH, Peine</b>	📖 80
<b>02 E 11405B</b>	Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt B	<b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>	📖 82
<b>02 E 11415A</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt A	<b>Johannes-Gutenberg Universität Mainz</b>	📖 86
<b>02 E 11415B</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt B	<b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Dresden</b>	📖 88
<b>02 E 11415C</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt C	<b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b>	📖 90
<b>02 E 11415D</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt D	<b>Universität des Saarlandes, Saarbrücken</b>	📖 92
<b>02 E 11415E</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt E	<b>TU München</b>	📖 94
<b>02 E 11415F</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt F	<b>Universität Potsdam</b>	📖 96
<b>02 E 11415G</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt G	<b>TU Dresden</b>	📖 98
<b>02 E 11415H</b>	Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt H	<b>Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg</b>	📖 100

- |                    |  |  |       |
|--------------------|--|--|-------|
| <b>02 E 11446A</b> | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A                             | <b>Dr. Andreas Hampel, Mainz</b>   | 📖 106 |
| <b>02 E 11446B</b> | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B                             | <b>IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Leipzig</b>  | 📖 108 |
| <b>02 E 11446C</b> | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C                             | <b>Leibniz Universität Hannover</b>  | 📖 110 |
| <b>02 E 11446D</b> | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D                             | <b>TU Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig</b>  | 📖 112 |
| <b>02 E 11446E</b> | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E                             | <b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>  | 📖 114 |
| <b>02 E 11456A</b> | Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- $e^2$ ), Teilprojekt A | <b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b> | 📖 116 |
| <b>02 E 11456B</b> | Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- $e^2$ ), Teilprojekt B | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 118 |
| <b>02 E 11466</b>  | Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)   | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 120 |
| <b>02 E 11476A</b> | Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt A   | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 122 |
| <b>02 E 11476B</b> | Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt B   | <b>Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main</b>  | 📖 124 |
| <b>02 E 11486A</b> | Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt A | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 126 |
| <b>02 E 11486B</b> | Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt B | <b>DBE Technology GmbH, Peine</b>  | 📖 128 |

- |                    |  |  |       |
|--------------------|--|--|-------|
| <b>02 E 11496A</b> | Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt A  | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 130 |
| <b>02 E 11496B</b> | Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt B  | <b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b> | 📖 132 |
| <b>02 E 11567A</b> | Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim), Teilprojekt A | <b>TU Clausthal, Clausthal-Zellerfeld</b>  | 📖 152 |
| <b>02 E 11567B</b> | Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim), Teilprojekt B | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 154 |
| <b>02 E 11577B</b> | Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B  | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 158 |
| <b>02 E 11607A</b> | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt A                         | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 166 |
| <b>02 E 11607B</b> | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt B                         | <b>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V.</b>  | 📖 168 |
| <b>02 E 11607C</b> | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt C                         | <b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b> | 📖 170 |
| <b>02 E 11607D</b> | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt D                         | <b>Forschungszentrum Jülich GmbH</b>   | 📖 172 |
| <b>02 E 11617B</b> | Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt B                     | <b>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Köln</b>                                     | 📖 176 |

## 1.5 Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen

- |                    |  |  |       |
|--------------------|--|--|-------|
| <b>02 E 11355</b>  | Eine experimentelle Analyse der Verhandlungen um ein Endlager für radioaktive Abfälle (Expander)   | <b>Karlsruher Institut für Technologie (KIT)</b>   | 📖 72  |
| <b>02 E 11547A</b> | Verbundprojekt: Konzepte und Maßnahmen zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle (SOTEC-radio), Teilprojekt A | <b>Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V.</b>  | 📖 144 |
| <b>02 E 11547B</b> | Verbundprojekt: Konzepte und Maßnahmen zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle (SOTEC-radio), Teilprojekt B | <b>Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Eggenstein-Leopoldshafen</b> | 📖 146 |
| <b>02 E 11547C</b> | Verbundprojekt: Konzepte und Maßnahmen zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle (SOTEC-radio), Teilprojekt C | <b>Freie Universität Berlin</b>  | 📖 148 |



## 1.6 Kernmaterialüberwachung

**02 W 6263** Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden **Forschungszentrum Jülich GmbH**  182



## **2 Formalisierte Zwischenberichte**

### **2.1 Vorhaben Bereich 1**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), 12200 Berlin		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>1501509</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitverhalten von Metall- und Elastomerdichtungen sowie Polyethylen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (LaMEP)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2015 bis 30.09.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 373.351,03 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Jaunich	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Forschungsvorhabens sollen Prognosemodelle zur Bewertung der Langzeiteignung von Metall- und Elastomerdichtungen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (TLB) entwickelt sowie weiterführende Erkenntnisse zur strahleninduzierten und thermischen Alterung des in TLB eingesetzten Neutronenabsorbers Polyethylen gewonnen werden.

An der TU Dresden werden im Rahmen des Vorhabens 1501510 „StrukElast“ Struktureigenschafts-Funktionsbeziehungen von Elastomerdichtungswerkstoffen zur differenzierten Bewertung in Kooperation mit der BAM erarbeitet.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

**Metалldichtungen (M):**

Zur Generierung neuer Erkenntnisse über das Verhalten von Metалldichtungen nach thermischer Belastung sollen experimentelle Untersuchungen an vorgealterten Dichtungen durchgeführt sowie Materialmodelle zur rechnerischen Abschätzung des Langzeitverhaltens der Metалldichtungen entwickelt werden.

**Elastomerdichtungen (E):**

Die experimentellen und numerischen Untersuchungen zu Elastomerdichtungen beschäftigen sich mit der Alterung von Elastomeren und dem Einfluss der durch diese hervorgerufenen Eigenschaftsänderungen auf die Dichtfunktion.

**Polyethylen zur Neutronenabschirmung (P):**

Im Rahmen dieses Arbeitspakets soll der Einfluss der Gammastrahlung in Kombination mit Alterung (Zeit und Temperatur) untersucht sowie eine Apparatur im Großmaßstab zur Bestimmung der Ausdehnungskoeffizienten bzw. des Kriechens der verwendeten Polyethylene gebaut und in Betrieb genommen werden.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- M: Die Untersuchungen an Al- und Ag-Dichtungen mit großem Torus-Durchmesser (9,9 mm bzw. 9,7 mm) wurden fortgesetzt. Die Messungen an 8,5 Jahre gealterten Proben bestätigen den bisherigen Trend. Die Leckagerate der Vergleichsflansche mit Al-Dichtungen die bei 150 °C gealtert wurden lag in der Vergangenheit zeitweise über dem Grenzwert von  $10^{-8} \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{s}$ . Bei der letzten Messung zeigte diese Dichtung aber wieder eine deutlich geringere Leckagerate. Auch die Untersuchungen an Al- und Ag-Dichtungen mit kleinem Torus-Durchmesser (5,6 mm bzw. 5,4 mm) nach 2 Jahren Alterung sowie die Vergleichsflansche mit Ag-Dichtungen (Alterung: 0,5 Jahre) bestätigen das bisher beobachtete Verhalten. Die Dichtspurbreite der Dichtungen in den Flanschen zeigt eine Abhängigkeit von der Alterungstemperatur. Darüber hinaus wurden Zeitstandversuche an Al-Zugproben (Temperaturen: 100 °C, 150 °C, Spannungen: 25 MPa, 35 MPa) und Druckkriechuntersuchungen (Temperaturen: 23 °C – 200 °C, Spannungen: 32 MPa – 96 MPa) an Al-Blechproben durchgeführt. Die Zugproben zeigen eine Kriechgeschwindigkeit im für Al erwarteten Bereich. Die Werte der Kriechgeschwindigkeit der Blechproben sind denen der Zugproben ähnlich.
- E: Die Untersuchungen an Elastomerdichtungen zur Alterung wurden fortgesetzt. Die bis zu 3 Jahre gealterten Dichtungen zeigen eine Fortsetzung der bisher beobachteten Verläufe. Die geprüften HNBR(Hydrierter Acrylnitrilbutadien-Kautschuk)- und EPDM(Ethylen-Propylen-Dien-Kautschuk)-Dichtungen erwiesen sich nach einer 1,5 jährigen Alterung bei 125 °C als undicht.
- P: Die Vorrichtung für die Untersuchung des thermischen Ausdehnungsverhaltens von Polyethylen an würfelförmigen Proben wurde fertiggestellt. Die Apparatur ermöglicht Messungen an Würfeln und Quadern unterschiedlicher Kantenlänge in Abhängigkeit von Temperatur und Heizraten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- M: Die Untersuchungen zur Alterung an den Metalldichtungen werden fortgeführt.
- E: Die Elastomerproben werden weiter gealtert. Die eingelagerten Versuchsflansche werden im März bzw. im Mai wieder zur Leckageratenmessung entnommen.
- P: Thermische Alterung der Polyethylen-Proben und der Aufbau des Versuchsstandes werden fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Journalartikel:

A. Kömmling et al.: “Discoloration Effects of High-Dose gamma-Irradiation and Long-Term Thermal Aging of (U)HMW-PE”; International Journal of Polymer Science, Volume 2017, Article ID 1362491

Vorträge:

M. Jaunich et al.: „Ageing behaviour of elastomer seals, ElastoMER2017; Meseburg, Deutschland

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>1501510</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Struktur-Eigenschafts-Funktionsbeziehungen von Elastomerdichtungswerkstoffen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (StrukElast)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2015 bis 30.04.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 208.642,28 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Wießner	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Forschungsvorhabens sollen die Struktur-Eigenschafts-Beziehungen für elastomere Dichtungsmaterialien erarbeitet werden, welche in Prognosemodellen zur Bewertung der Langzeiteignung von Elastomerdichtungen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (TLB) einfließen sollen. Als Ziel sollen belastbare Aussagen zur Langzeiteignung von Elastomerdichtungen in TLB in Abhängigkeit struktursensitiver elastomerspezifischer Werkstoffeigenschaften bereitgestellt werden.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um eine Zuarbeit zum Vorhaben 1501509 „LaMEP“ der Bundesanstalt für Materialprüfung (BAM).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Literaturrecherche zur Materialauswahl der Elastormischungen sowie zur Festlegung deren Variation
- AP2: Mischungsherstellung und Vulkanisation mit gezielter Rezepturvariation
- AP3: Charakterisierung von Strukturparametern der erzeugten Modellelastomere
- AP4: Charakterisierung der Modellelastomere hinsichtlich ihrer mechanischen Eigenschaften
- AP5: Charakterisierung des viskoelastischen Deformationsverhaltens
- AP6: Ermittlung charakteristischer Relaxationszeitspektren und Beschreibung des Spannungsrelaxationsverhaltens
- AP7: Erstellung von Modellen zur Beschreibung der Struktur-Eigenschafts-Korrelation
- AP8: Untersuchung gealterter Proben auf deren Struktur- und Eigenschaftsveränderungen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Für ein Rezeptur-Screening wurden HNBR-basierte Elastomer-Rezepturen mit zweistufig variierendem Füllstoffgehalt fertiggestellt.
- AP2: Die entsprechenden HNBR-Mischungen wurden hergestellt und ihr Vulkanisationsverhalten sowie ihre Shore-Härte bestimmt. O-Ringabschnitte der FKM-, EPDM- und VMQ-Elastomere wurden zur Alterung unter Verpressung bei 150 °C eingelagert. Eine Charakterisierung erfolgte nach 100, 500 und 1000 Stunden Alterung. Weiterhin erfolgte eine Einlagerung von EPDM-Prüfkörpern ohne Verpressung sowie verpressten Modell-O-Ringen basierend auf zwei FKM-Rezepturen bei 150 °C.
- AP3: Für die Charakterisierung der Vernetzungsdichte wurde die TSSR-Methode (Temperature-Scanning-Stress-Relaxation) erprobt. Die TSSR-Ergebnisse korrelieren gut mit den Ergebnissen aus den Gleichgewichtsquellungsmessungen. Das elastomerspezifische Alterungsverhalten der Proben wurde anhand sog. Ahagon-Plots charakterisiert.
- AP4: Die Untersuchungen konnten zeigen, dass das Druckspannungsrelaxationsverhalten ungealterter Modellelastomere mittels Maxwell-Modell beschreibbar ist.
- AP5: Die Ermittlung des viskoelastischen Deformationsverhaltens der gealterten Elastomere ergab deutliche Unterschiede zwischen den Elastomeren (v. a. EPDM, FKM).
- AP6: Eine Anpassung der hierbei ermittelten Masterkurven für EPDM-Elastomere mittels Multiskalenfit war nur für ungealterte Proben möglich, da sich durch die Alterung das Relaxationsverhalten der EPDM-Elastomere zu stark ändert.
- AP7: Eine erste Zusammenstellung bisheriger Ergebnisse lässt auf eine Abhängigkeit des Druckverformungsrests vom Füllstoffgehalt im ungealterten Zustand schließen.
- AP8: Die Unterschiede im Alterungsverhalten von FKM- und EPDM-Elastomeren konnte auf den bei EPDM auftretenden Effekt der diffusionslimitierten Oxidation zurückgeführt werden, der zu einer heterogenen Alterung über den Querschnitt der Modell-O-Ringe führt. Der Alterungseinfluss beim EPDM auf das viskoelastische Deformationsverhalten zeigt sich u.a. in einer mit dem Alter zunehmenden Versprödung bis hin zum Verlust der Deformationseigenschaften der EPDM-Elastomere.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Herstellung von HNBR-Rezepturen, Prüfkörpern und Modell-O-Ringen
- AP3: Fortsetzung der Strukturparametercharakterisierung an gealterten Proben
- AP4: Fortsetzung der Spannungsrelaxationsuntersuchungen an HNBR-Modellelastomeren
- AP5: Fortführung dynamisch-mechanischer Analysen an HNBR-Modellelastomeren
- AP6: Anpassung der Masterkurven für HNBR-Modellelastomere mittels Multiskalenfit
- AP7: Fortführung Modellerstellung mit Fokus auf das Spannungsrelaxationsverhalten
- AP8: Ermittlung der Strukturabhängigkeit der elastomerspezifischen Alterungsmechanismen sowie des Einflusses der Alterung auf die dichtungsrelevanten Größen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Konferenzbeiträge:

“Aging study of FKM, EPDM and VMQ rubber O-Rings and electrical resistance based stress-monitoring in rubber parts”; 192nd Technical Meeting of the Rubber Division of the American Chemical Society (ACS); 10.10.-12.10.17; Cleveland, USA

“Einfluss der Alterung auf dichtungsrelevante Eigenschaften von FKM-, VMQ- und EPDM-Elastomeren”; Technomer 2017; 09.11.-10.11.17; Chemnitz

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>1501518A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport- und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Analysen zu strahlungsbasierten und thermographischen Messverfahren		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2016 bis 31.01.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 413.887,23 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Hampel	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens besteht in einer Bewertung verschiedener physikalischer Messprinzipien, Verfahren und Methoden zur nichtinvasiven Überwachung des Zustandes des Inventars von Transport- und Lagerbehältern bei verlängerter Zwischenlagerung. Damit sollen Veränderungen der Brennelemente bzw. Behälterstrukturen über Zeiträume von mehreren Jahrzehnten erkannt werden können, ohne die Behälter zu öffnen. Dazu werden in diesem Vorhaben die Messverfahren Strahlungsemissionsmessung (Gammastrahlung, Neutronen), Thermographie und Myonenbildgebung näher untersucht.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um ein Teilvorhaben des Verbundes „DCS-Monitor“. Verbundpartner ist die Hochschule Zittau/Görlitz (HSZG). Der Arbeitsschwerpunkt der HSZG liegt auf akustischen Messverfahren (FKZ 1501518B).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Allgemeine Analyse des Standes von Wissenschaft und Technik
- AP2: Methodenscreening für Strahlungsemission, Myonen und Thermographie
- AP4: Analyse zum Gamma- und Neutronenstrahlungsfeld mittels Monte-Carlo-Simulation
- AP5: Monte-Carlo-basierte Analysen zur Bewertung der Myonen-Radiographie
- AP6: FEM-Analysen zur Bewertung der Thermographie
- AP10: Entwicklung von Verfahrenskonzepten zur Behälterüberwachung

Die AP3, 7, 8, 9 des Verbundarbeitsplans werden ausschließlich durch den Verbundpartner bearbeitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP5: Die Arbeiten zur Myonen-Radiografie konzentrieren sich auf die Radiografie Coulomb-gestreuter Myonen. Hierfür wird ein umfassender Simulations-Code zur Myonen-basierten Bildgebung entwickelt. Als Rekonstruktionsalgorithmus wurde der heuristische Algorithmus „Point of Closest Approach (PoCA)“ in den Code implementiert. Der Algorithmus stellt die eingehenden und ausgehenden Trajektorien von Myonen vor und nach der Streuung an Atomen gegenüber und berechnet den Punkt, der beiden Bahnen am nächsten ist (PoCA). Dieser wird dann als Ort des Streueignisses definiert. Erste Tests zur Rekonstruktion simulierter Blöcke aus Uran, Stahl und Polyethylen mittels PoCA zeigten, dass eine Unterscheidung der Materialien mit dieser Methodik möglich ist.
- AP6: In Zusammenarbeit mit dem Verbundpartner wurden CAD-Modelle eines CASTOR-Behälters und des Versuchsstands des Verbundpartners HSZG mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad erstellt. Das erste Modell approximiert das Behälterinventar als homogenen Zylinder. An dem Modell wurden erste Simulationen mit ANSYS AIM zur Wärmeleitung, -strahlung und Konvektion innerhalb und an der Außenwand des Behälters durchgeführt, mit dem Ziel, Wärmeübergangskoeffizienten für den Wärmeübergang an der Außenwand des Behälters zu ermitteln. Im zweiten, detaillierteren Modell wird das Behälterinventar bis auf die Kühlrippen abgebildet. Brennelemente werden als homogene Körper approximiert. Für die Simulation mit dem Modell wird derzeit das Gitternetz erstellt, wobei verschiedene Varianten der manuellen Gitterverfeinerung erprobt werden.
- Darüber hinaus wurden Szenarien für das Behälter-Inventar erarbeitet, die während der Zwischenlagerung eintreten könnten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP4: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen werden Messungen am Versuchstand des Verbundpartners HSZG gegenübergestellt. Weiterhin sollen realistische Neutronen- und Gammaquellverteilungen mit Hilfe der Codes FISPACT-II und SOURCES-4D errechnet und verschiedene Ansätze zur Varianzreduzierung getestet werden.
- AP5: Die Entwicklung des Simulationscodes zur Bildgebung von Objekten durch Myonenstreuung und -transmission wird fortgeführt.
- AP6: Schwerpunkt der Arbeiten wird auf der Gittererzeugung für das detaillierte CASTOR-Modell und der Simulation des Wärmeübergangs an Kühlrippen an der Außenwand des Behälters liegen.
- AP10: Die Entwicklung des Verfahrenskonzepts im kommenden Berichtszeitraum wird sich vorerst auf die erarbeiteten Szenarien für das Behälterinventar und deren Detektierbarkeit fokussieren.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Hochschule Zittau/Görlitz, Theodor-Körner-Allee 16, 02763 Zittau		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>1501518B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport- und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Akustische Messverfahren		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.02.2016 bis 31.01.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 750.814,95 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kratzsch	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Vorhabens besteht in einer Bewertung verschiedener physikalischer Messprinzipien, Verfahren und Methoden zur nichtinvasiven Überwachung des Zustandes des Inventars von TLB bei verlängerter Zwischenlagerung. Damit sollen Möglichkeiten eruiert werden, Veränderungen der Brennelemente bzw. der aufnehmenden Behälterstrukturen über sehr lange Zeiträume von mehreren Jahrzehnten erkennen zu können, ohne Behälter zu öffnen. Dazu werden in diesem Vorhaben die Messverfahren aktive und passive Schwingungsspektroskopie näher untersucht sowie experimentelle Analysen aller Messmethoden durchgeführt.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um ein Teilvorhaben des Verbundes „DCS-Monitor“. Verbundpartner ist die Technische Universität Dresden (TUD). Der Arbeitsschwerpunkt der TUD liegt auf der Strahlungsemissionsmessung, der Thermographie und der Myonenbildgebung (FKZ 1501518A).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Allgemeine Analyse des Standes von Wissenschaft und Technik
- AP3: Methodenscreening für Messmethode Schwingungsspektroskopie
- AP7: Entwicklung von Zustandserkennungsmethoden für multimodale Behälterüberwachungsdaten
- AP8: Experimentelle Analysen für die Messmethoden Gammastrahlungsemission und Thermographie
- AP9: Experimentelle Analysen für die Messmethode Schwingungsspektroskopie
- AP10: Entwicklung von Verfahrenskonzepten zur Behälterüberwachung

Die AP2, 4, 5, 6 des Verbundarbeitsplans werden ausschließlich durch den Verbundpartner bearbeitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP7: Es wurden Untersuchungen zur Anwendung von tiefergeschichteten künstlichen neuronalen Netzen (TKNN) für die Klassifikation von multimedialen Behälterüberwachungsdaten bei der nichtinvasiven TLB-Überwachung durchgeführt. TKNN lassen sich jedoch nur in einem begrenzten Umfang zur nichtinvasiven Überwachung von TLB einsetzen, da für deren Training eine sehr große Anzahl an Daten benötigt wird. Diese Daten stehen bei einer nichtinvasiven TLB-Überwachung aber nicht in diesem Umfang zur Verfügung.
- AP8: Der Versuchsstand zur experimentellen Analyse der Messmethode Gammastrahlungsemission wurde fertiggestellt. Die Erstinbetriebnahme ist erfolgt. Mit dem Aufbau des Versuchsstandes zur experimentellen Analyse der Messmethode Thermographie und der Programmierung der Steuerung des Versuchsstandes wurde begonnen.
- AP9: Für den Versuchsstand zur experimentellen Analyse der Messmethode aktive akustische Schwingungsspektroskopie (Schwingungsanalyse) wurden die erforderlichen Komponenten beschafft und die Programmierung der Steuerung des Versuchsstandes begonnen. Weiterhin wurden erste Vorversuche zur Erprobung der zu verwendenden Messtechnik durchgeführt. Für den Versuchsstand zur experimentellen Analyse der Messmethode passive akustische Schwingungsspektroskopie (Schallemissionsanalyse) erfolgten die Auslegungsplanung und –berechnungen. Darüber hinaus erfolgten erste Programmierarbeiten und die Beschaffung der wesentlichen Komponenten für den Versuchsstand.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP7: Die Weiterentwicklung des Konzepts für die Zustandserkennung wird mit Fokus auf die Identifikation und Analyse von Klassifikationsalgorithmen fortgeführt.
- AP8: Mit den Experimenten am Versuchsstand zur experimentellen Analyse der Messmethode Gammastrahlungsemission wird begonnen. Der Versuchsstand zur experimentellen Analyse der Messmethode Thermographie wird fertiggestellt.
- AP9: Die Versuchsstände für die experimentellen Analysen der Messmethoden Schwingungsanalyse und Schallemissionsanalyse werden aufgebaut und in Betrieb genommen.
- AP10: Mit der Entwicklung der Verfahrenskonzepte wird begonnen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Fiß D. et al.: “Fundamental R&D work on methods for state monitoring of transport and storage containers for spent fuel and heat-generating high-level radioactive waste on prolonged intermediate storage”; 25<sup>th</sup> International Conference on Nuclear Engineering (ICONE25); 02.-06. Juli 2017; Shanghai, China

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Hochschule Kaiserslautern, Gottlieb-Daimler-Straße, 67663 Kaiserslautern		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>1501538A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Analysemethoden zur Simulation der Schädigung und der induzierten Erschütterungen in Stahlbetonstrukturen infolge stoßartiger Belastungen (SimSEB) - Teilvorhaben: Verhalten von Stahlbetonstrukturen bei Stoßbelastungen unter Berücksichtigung der Boden-Bauwerk-Wechselwirkung		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 15.02.2017 bis 31.07.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 460.820,88 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Sadegh-Azar	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Gesamtziel der geplanten Arbeiten ist die Weiterentwicklung und Erprobung von Analysemethoden zur Simulation der Schädigung und der induzierten Erschütterungen in Stahlbetonstrukturen infolge stoßartiger Belastungen. Dabei sollen zur Validierung der Analysemethoden die Ergebnisse zur Thematik kürzlich durchgeführten sowie noch geplanten Aufprallversuchen bei VTT in Finnland berücksichtigt werden. Die Erprobung der Methoden soll an der Struktur eines Zwischenlagers erfolgen. Das Projekt wird im Rahmen eines Verbundvorhabens mit der GRS durchgeführt. Die Arbeiten der GRS fokussieren sich auf das Reaktorgebäude inklusive einer Kühlkreislaufschleife.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Lokales Schädigungsverhalten von Stahlbeton unter stoßartiger Belastung Untersuchungen zum Einfluss der Durchstanzbewehrung auf den Penetrationswiderstand (Tragfähigkeit) von Stahlbetonstrukturen.
- AP2: Ansätze im Zeitbereich und im Frequenzbereich zur Berücksichtigung der Boden-Bauwerk-Wechselwirkung Untersuchung und Umsetzung der Analysemethoden im Frequenzbereich
- AP3: Verhalten von Stahlbetonstrukturen beim Aufprall von Turbinen
- AP4: Ganzheitliche nichtlineare dynamische Berechnung von Aufprallversuchen zu induzierten Erschütterungen
- AP5: Aufprallsimulationen auf reale Gebäudestrukturen unter Berücksichtigung induzierter Erschütterungen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Aufbauend auf dem existierenden Rechenmodell für den weichen Stoß (Zweimassenmodell nach Schlüter) wurden die Anwendungsgrenzen des Zweimassenmodells analysiert und notwendige Anpassungen und Ansätze für den harten Stoß implementiert. Hierbei wurden zunächst die Wechselwirkung zwischen der Stahlbetonstruktur und dem Impaktor sowie das Eindringen des Impaktors in die Stahlbetonstruktur, berücksichtigt. Der Eindringvorgang des Projektils wird im Rechenmodell für den harten Stoß in zwei Phasen untersucht. Zu Beginn dringt das Projektil ein und erzeugt eine zylinderförmige Eindringform. Nachdem die Schubbruchlast des Stahlbetons überschritten wird, bildet sich der Stanzkegel. Bei der Verifikation des Rechenmodells für den weichen Stoß konnten gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen von Meppen und den berechneten Ergebnissen von Schlüter und CEB festgestellt werden.
- AP2: Zur Berücksichtigung der dynamischen Boden-Bauwerk-Wechselwirkung bei nichtlinearen numerischen Finite-Elemente Berechnungen, wie dem Lastfall Flugzeugabsturz, werden spezielle Anforderungen an Verfahren und Methoden gestellt. Ungeeignet sind bspw. reine Frequenzbereichsmethoden, die auf dem Superpositionsprinzip beruhen und deshalb nur für lineare Berechnungen brauchbar sind. Für nichtlineare Berechnungen sind insbesondere transiente Zeitbereichsverfahren interessant. Vielversprechend scheint die relativ neue PML-Methode ("Perfectly Matched Layers"), die für elektromagnetische Wellen entwickelt und für elastische Wellen adaptiert wurde. Hierbei werden PML-Elemente verwendet, die sich im Boden ausbreitende Wellen aller Einfallswinkel und Frequenzen absorbieren können.
- AP3: Zu Beginn dieses Arbeitspunktes wurden mittels Literaturrecherchen geeignete Triebwerksmodelle ausgewählt und mit der Modellierung der Geometrie in LS-Dyna und ANSYS begonnen. Bestehende empirische und semi-empirische Formeln, die in aktuellen Richtlinien empfohlen werden, wurden hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit und Grenzen untersucht. Hinsichtlich der Auswertung der UKAEA Versuche kann bspw. die Aussage getroffen werden, dass der Impakt sowohl aus harten als auch aus weichen Stoßvorgängen besteht, die in den Formeln nicht berücksichtigt werden können.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Der Schwerpunkt der weiteren Arbeiten soll in der Kalibrierung und Verbesserung des analytischen Modells zur rechnerischen Simulation des Aufprallvorganges kompakter Projektilen auf Stahlbetonplatten liegen.
- AP2: Zunächst sollen einfache Bauwerk-Baugrund-Konfigurationen, vorerst nur Oberflächenbauwerke, mittels Verwendung von PML-Elementen modelliert und mit anderen Methoden verglichen werden. Anschließend soll für die Validierung von Modellen mit geschichteten Böden ein hybrides Verfahren zum Einsatz kommen.
- AP3: Weiterentwicklung der bestehenden empirischen und semi-empirischen Formeln sowie Ansätze und Rechenmodelle.
- AP4: Durchführung von Kalibrierungsrechnungen der vorliegenden experimentellen Impakt-Ergebnisse, die im Rahmen des IRIS 3 Benchmark zur Verfügung gestellt werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Kaiserslautern, Erwin-Schrödinger-Str. 1, 67663 Kaiserslautern		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>1501543B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Methodik zur zuverlässigkeitsorientierten Nachrechnung und Bewertung bestehender kerntechnischer Bauwerke mit verlängerter Nutzungsdauer — Teilvorhaben: Besondere Berücksichtigung der werkstoffspezifischen Besonderheiten großer Stahlbetonquerschnitte sowie der zugehörigen Bestandsaufnahme(ProbBau)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2017 bis 30.06.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 245.580,20 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schnell	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Verbundvorhabens besteht darin, vorhandene Methoden und Werkzeuge für probabilistische Bauwerksanalysen von Langzeitzwischenlagern weiterzuentwickeln und zu vervollständigen. Hierbei soll das Langzeitverhalten der Lagergebäude besondere Berücksichtigung finden, um Standsicherheit, Gebrauchstauglichkeit und Dauerhaftigkeit besser zu bewerten und ggf. durch geeignete Maßnahmen sicherstellen zu können. Die Arbeiten an der TU Kaiserslautern fokussieren sich dabei auf Besonderheiten großer Bauteilquerschnitte.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um ein Teilvorhaben des Verbundes „ProbBau“. Verbundpartner ist die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (FKZ: RS1553A).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Darstellung der Grundlagen für die zuverlässigkeitsorientierte Bewertung und Nachrechnung kerntechnischer Bauwerke
- AP2: Möglichkeiten der Anpassung des Zielzuverlässigkeitsindex für die Nachrechnung bestehender Bauwerke
- AP4: Erstellung einer qualifizierten Bestandsaufnahme als Grundlage für die Nachrechnung und Besonderheiten großer Querschnitte
- AP5: Verwendung von Monitoring-Maßnahmen
- AP6: Methodik zur Entwicklung der vorhandenen Zuverlässigkeit der bestehenden kerntechnischen Bauwerke
- AP7: Entwicklung einer Methodik für die zuverlässigkeitsorientierten Nachrechnungen kerntechnischer Bauwerke mit verlängerter Nutzungsdauer

Der AP3 des Verbundarbeitsplans wird ausschließlich durch den Verbundpartner bearbeitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Im Berichtszeitraum wurde die in den Eurocodes (insbesondere DIN EN 1990 - Eurocode 0) enthaltenen Verfahren zur Sicherstellung der Bauwerkszuverlässigkeit sowie verschiedene (semi-)probabilistische Verfahren zur Nachrechnung bestehender Tragwerke im Hochbau aufbereitet. Ein weiterer Fokus der Recherche lag auf den vom Betonverband fib (International Federation for Structural Concrete) veröffentlichten Verfahren zur Modifikation von Teilsicherheitsbeiwerten. Hierbei kann der Streuung der Materialeigenschaften, der Restnutzungsdauer sowie wirtschaftlichen Überlegungen ein wesentlicher Einfluss auf die anzusetzenden Teilsicherheitsbeiwerte attestiert werden. Für die Übertragung der recherchierten Verfahren auf kerntechnische Bauwerke wurden die wesentlichen zuverlässigkeitstheoretischen Grundlagen bei der Bemessung kerntechnischer Bauwerke zusammengestellt.
- AP2: Weiterhin wurden verschiedene Verfahren zur Anpassung des Zielzuverlässigkeitsindexes gesichtet. Im Fokus lagen dabei ebenfalls vom Betonverband fib veröffentlichten Verfahren. Eine Analyse der Ansätze zeigte den Einfluss der Restnutzungsdauer sowie der wirtschaftlichen Optimierung.
- AP4: Die Arbeiten zur Erstellung einer qualifizierten Bestandsaufnahme wurden mit einer Zusammenstellung der gebräuchlichen Verfahren im allgemeinen Hoch- und Ingenieurbau sowie der Auswertung dieser in Bezug auf ihre Übertragbarkeit in die Kerntechnik begonnen. Dabei zeigte sich deutlich, dass bei den gebräuchlichen Verfahren die Besonderheiten großer Querschnittsabmessungen vollkommen unberücksichtigt bleiben. Solche Besonderheiten können bspw. die Festigkeitsverteilung über die Querschnittsdicke sowie Einflüsse der Nacherhärtung und Karbonatisierung sein.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Literaturrecherche zu Verfahren zur Nachrechnung bestehender Tragwerke und Bewertung dieser auf ihre Anwendung im kerntechnischen Bereich
- AP2: Literaturrecherche zur Identifizierung von Verfahren zur Anpassung des Zielzuverlässigkeitsindex und Prüfung auf Eignung für die Nachrechnung kerntechnischer Bauwerke.
- AP4: Anpassung gebräuchlicher Verfahren zur Durchführung einer Bestandsaufnahme für die Anwendung auf Bauteile mit großen Querschnitten sowie Durchführung von Kleinteilversuchen zu Umlagerungsmöglichkeiten bei Betondruck und Zugfestigkeit und zu Maßstabeffekten

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>RS1552</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitverhalten zwischengelagerter Brennelemente bei deutlich längerer Zwischenlagerung (BREZL)			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2017 bis 29.02.2020		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 923.990,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Stuke	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens ist die Entwicklung eines Werkzeugs zur Unterstützung bei Fragen zur Integrität und Handhabbarkeit von Brennelementen nach verlängerter Zwischenlagerung. Der Anwendungszweck dieses Werkzeuges ist die Identifikation und Analyse der interessierenden Zeitskalen, Brennstäbe und –elemente sowie der Behälterladungen. Zur Berücksichtigung der gesamten Phänomenologie des Hüllrohrverhaltens während der Lagerphase, bestehend aus der Nasslagerung, dem anschließenden Trocknungsprozess sowie dem langsamen Abkühlen während der Lagerphase in trockener Inert-Umgebung, soll das zu schaffende Werkzeug umfassend und konsistent die relevanten Größen wie Abbrände, Hüllrohrmaterialien, Behälterladungen, Zeitdauern, Temperaturen, Drücke und Spannungen berücksichtigen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Temperaturfeldberechnung:  
Erstellung einer Datenbasis bzgl. Abbrand, Nachzerfallsleistung, Nuklidinventar und Aktivität möglicher Varianten eingelagerter Brennelemente sowie von Modellen und Methoden zur Berechnung des Temperaturfeldes im Behälter über die zu betrachtenden Lagerzeiträume.
- AP2: Brennstabverhalten:  
Entwicklung von Modellen und Methoden zur Beschreibung der für die Hüllrohrintegrität entscheidenden Parameter unter den Bedingungen der verlängerten Zwischenlagerung.
- AP3: Erstellung von Datenbanken und Schnittstellen:  
Bereitstellung einer Datenbankstruktur für die generierten relevanten Daten sowie von Schnittstellen zwischen den für die verschiedenen Berechnungsschritte verwendeten Codes.
- AP4: Verfolgung aktueller Forschungsarbeiten:  
Zusammenstellung und Bewertung aktueller Erkenntnisse aus der nationalen und internationalen Forschung zur Langzeit-trockenlagerung sowie Austausch mit den in diese Forschung involvierten Forschungsstellen.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Anhand verfügbarer Daten aus Nuklidbibliotheken und den verwendeten Codes wurden Unsicherheitsbetrachtungen hinsichtlich der Bestimmung der Nachzerfallsleistung der abgebrannten Brennelemente (BE) durchgeführt. Eine große Rolle spielen hierbei vorhandene Unsicherheiten bei der Nachzerfallsleistung der Spaltprodukte sowie bei den Einfangsquerschnitten der Aktiniden. Messdaten für Nachzerfallsleistungen von BE für eine Verifizierung sind nur für relativ kurze Zeiträume nach Entladung von BE vorhanden. Im Code COBRA-SFS wurde ein lauffähiges Modell eines generischen Transport- und Lagerbehälter (TLB) für die Temperaturfeldberechnung erstellt und erfolgreich verifiziert. Die mit dem Modell berechneten Temperaturen reagieren jedoch äußerst sensitiv auf Variationen in der Modellierung des unteren Plenums des TLB.
- AP2: Für die in Deutschland eingesetzten Hüllrohrmaterialien (Zry-4, ZIRLO, M5 und DUPLEX) existieren nur sehr wenige (übertragbare) experimentelle Daten zum Löslichkeits- und Ausscheidungsverhalten von Hydriden. Bei Auswertung der vorhandenen Messdaten stellt man große Abweichungen beim Temperaturverhalten der Hydridlöslichkeit und -ausscheidung fest. In der gesichteten Literatur herrscht trotz der erheblichen Unterschiede der Legierungen, u.a. in Bezug auf ihre Textur und ihr Verhalten, der Konsens, dass die Hydrid-Löslichkeit und Hydrid-Ausscheidungsprozesse im Wesentlichen legierungsunabhängig sind. Die vorhandenen experimentellen Daten wurden auf Angaben der Messunsicherheiten geprüft. Aus den Ergebnissen dieser Untersuchung wurden Unsicherheitsbänder für die Daten zum Temperaturverlauf des Hydridverhaltens ermittelt.
- AP3: Die Datenbank wurde um eine Routine zum Auslesen von Abbranddaten erweitert. Weiterhin wurde eine Datenbank für Daten zum Hydridverhalten erstellt.
- AP4: Im Berichtszeitraum wurde ein von SCK-CEN (Belgien) ausgerichteter Workshop zur Thematik der Bestimmung der Nachzerfallswärmeleistung von abgebrannten BE besucht, wobei wichtige Erkenntnisse bzgl. der Datenunsicherheiten gewonnen werden konnten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Weitere Arbeiten zur Quantifizierung der Unsicherheiten bei der Bestimmung der Nachzerfallsleistung sowie vertiefte Untersuchungen zu den Temperaturschwankungen bei der Behältersimulation aufgrund der Modellierung des Plenums.
- AP2: Abschluss der Arbeiten zur Zusammenstellung und Analyse der verfügbaren Daten zur Festkörperlöslichkeit von Wasserstoff in BE-Werkstoffen.
- AP3: Erweiterung der Datenbasis und Verbesserung der Datenbankstruktur
- AP4: Fortführung der Zusammenarbeit mit nationalen und internationalen Arbeitsgruppen zu den Themen Hüllrohrtemperatur und mechanisches Verhalten der Hüllrohre.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

M. Stuke; „Symposium Verlängerte Zwischenlagerung“; Vortrag beim 74. Fachausschuss Ver- und Entsorgung (FaVE); 18.10.2017; Hannover

M. Stuke, F. Boldt et al.; „Safety of long-term dry storage in Germany – Challenges and Perspectives“; Vortrag und Paper; Eurosafe 2017; 06.-07.11.2017; Paris, Frankreich

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>RS1553A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundvorhaben: Methodik zur zuverlässigkeitsorientierten Nachrechnung und Bewertung bestehender Bauwerke mit verlängerter Nutzungsdauer – Teilprojekt: Methodik zur probabilistischen Bewertung (ProbBau)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 15.03.2017 bis 14.06.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 341.390,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Suchard	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des beantragten Vorhabens besteht darin, vorhandene Methoden und Werkzeuge für probabilistische Bauwerksanalysen von Langzeitzwischenlagern weiterzuentwickeln und zu vervollständigen. Hierbei soll das Langzeitverhalten der Lagergebäude besondere Berücksichtigung finden, um Standsicherheit, Gebrauchstauglichkeit und Dauerhaftigkeit besser zu bewerten und ggf. durch geeignete Maßnahmen sicherstellen zu können. Die Arbeiten bei der GRS fokussieren sich dabei auf die Entwicklung probabilistischer Methoden zur Bewertung der längerfristigen Sicherheit von Zwischenlagern.

Bei dem Vorhaben handelt es sich um ein Teilvorhaben des Verbundes „ProbBau“. Verbundpartner ist die TU Kaiserslautern (FKZ: 1501543B).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Darstellung der Grundlagen für die zuverlässigkeitsorientierte Bewertung und Nachrechnung kerntechnischer Bauwerke
- AP2: Möglichkeiten der Anpassung des Zielzuverlässigkeitsindex für die Nachrechnung bestehender Bauwerke
- AP3: Methodik zur Untersuchung und probabilistischen Analyse der Einwirkungen für die Bewertung und Nachrechnung der kerntechnischen Bauwerke
- AP5: Verwendung von Monitoring-Maßnahmen
- AP6: Methodik zur Entwicklung der vorhandenen Zuverlässigkeit der bestehenden kerntechnischen Bauwerke
- AP7: Entwicklung einer Methodik für die zuverlässigkeitsorientierten Nachrechnungen kerntechnischer Bauwerke mit verlängerter Nutzungsdauer

Der AP4 des Verbundarbeitsplans wird ausschließlich durch den Verbundpartner bearbeitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Im Zuge der Weiterverfolgung des Standes von Wissenschaft und Technik wurde im Berichtszeitraum an der Konferenz „Bauen im Bestand“ („Existing Structures“) teilgenommen. Dabei konnten intensive Diskussionen mit Vertretern der Working Group „WG2 Assessment and Retrofitting of Existing Structures“ des europäischen Komitees für Normung (CEN: Comité Européen de Normalisation) sowie Mitgliedern des Komitees „Existing concrete structures“ des internationalen Betonverbands FIB geführt werden. Durch den wissenschaftlichen Austausch konnte u.a. ein vertiefter Einblick in den aktuellen Stand der Eurocode-Entwicklung gewonnen werden. Ein Vortrag auf der Konferenz beleuchtete zudem die potentiell konkurrierenden Aspekte der Kostenoptimierung und der menschlichen Sicherheit bei der Festlegung des Zielzuverlässigkeitsindex.
- AP2: Im Berichtszeitraum wurde eine Recherche hinsichtlich der Anpassung des Zielzuverlässigkeitsindex für die Nachrechnung bestehender (kerntechnischer) Bauwerke durchgeführt. Diese zeigte u. a., dass der Zielzuverlässigkeitsindex für kerntechnische Bauwerke bisher nicht festgelegt wurde und die Zielzuverlässigkeit kerntechnischer Bestandsbauwerke geringer ist als die Zielzuverlässigkeit kerntechnischer Neubauten.
- AP3: Bezüglich der Entwicklung einer Methodik zur Untersuchung und probabilistischen Analyse von Einwirkungen wurde eine Recherche zu unterschiedlichen Einwirkungen von außen (EVA) durchgeführt. Die Auslegung gegen Flugzeugabsturz (FLAB) ist in internationalen kerntechnischen Anlagen häufig nicht vorhanden. Die Entscheidung über die Auslegung gegen FLAB basierte dabei (nur) zum Teil auf probabilistischen Überlegungen zur Absturzhäufigkeit im Zivil- und Militärflugverkehr. Die Fortführung der Analyse der Antworten aus der Umfrage im Rahmen OECD/NEA WGIAGE Aktivität zeigte, dass in den Teilnehmerländern die Versagenswahrscheinlichkeit von sicherheitstechnisch wichtigen Bauwerken in der Regel nicht festgelegt ist. Die Bemessung dieser Baustrukturen erfolgt i. d. R. mit Hilfe semiprobabilistischer bautechnischer Normen, wobei teilweise probabilistische Hintergrundinformationen für die Bewertung von EVA verwendet werden. Für seismische Einwirkungen wird dabei in einigen Ländern eine vom EPRI beschriebene Methodik genutzt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Dokumentation und Weiterverfolgung des Standes von W&T
- AP2: Weiterverfolgung der internationalen Normenentwicklung und Analyse des Einflusses qualifizierter Bestandsaufnahmen auf den Zielzuverlässigkeitsindex kerntechnischer Bauwerke
- AP3: Fortführung der Auswertung der Fragebogen und Erstellung eines Berichts zu den Ergebnissen der Evaluierung für die CSNI WGIAGE
- AP5: Untersuchung von Ansätzen aus dem konventionellen Ingenieurbauwesen zur Berücksichtigung von Monitoring-Maßnahmen bei der Prognose der Nutzungsdauer

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>1501560</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Modellierung und Untersuchung der Degradation von Hüllrohrmaterialien aus Zr-Legierungen durch Hydridbildungs- und Hydridverteilungsprozesse im Hinblick auf die Langzeitzwischenlagerung (KEK)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 1: Auswirkungen verlängerter Zwischenlagerzeiten auf Abfälle u. Behälter, Feld 1.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2017 bis 30.11.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.12.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 206.081,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Maier	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bei Brennelementen stellt das Zirkonium-Hüllrohr die innere Barriere gegen Nuklidfreisetzung dar. Neben dem Langzeitverhalten des Behälters ist das der Hüllrohre für die Verlängerung der Zwischenlagerphase bis zur Endlagerung von Interesse. Wichtig für die Stabilität sind die Entstehung und Verteilung von Zirkoniumhydriden in der Zirkonium-Matrix.

Ziel des Vorhabens ist es, Modellvorstellungen zu entwickeln, wie die langfristige Entwicklung der Materialeigenschaften verläuft. Durch Modellexperimente und Modellierungsansätze sollen die Schädigungsvorgänge im Material dargestellt werden. Die langfristigen Schädigungen der Zirkoniumhydrid-Bildung und -umverteilung stehen dabei im Fokus der Arbeiten.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Definition der Randbedingungen

AP2: Materialwissenschaftliche Basisuntersuchungen an Zirkonium-Basislegierungen

AP3: Modellexperimente zur Simulation der Materialentwicklung

AP4: Modellierungsansätze zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung des Zirkonium-Materials

AP5: Beschreibung und Untersuchung des Spannungszustandes im Zr-Material

AP6: Verifikation Experiment-Simulation

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

Der Start der Arbeiten ist für den Berichtszeitraum 2018-1 vorgesehen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

AP1: Literaturrecherche mit Fokus auf die für die Hüllrohrintegrität relevanten Umgebungsbedingungen und deren Änderung über die Lagerzeit.

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

Keine.



## **2.2 Vorhaben Bereich 2 bis 5**

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11072A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K <sub>d</sub> -Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2012 bis 28.02.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.925.553,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt WEIMAR (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig) dient zur Weiterentwicklung des Smart-K<sub>d</sub>-Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen, welches im Rahmen des Vorhabens ESTRAL entwickelt und in das Rechenprogramm r<sup>3t</sup> implementiert wurde. Nach einer Qualifizierung des neuentwickelten Rechenprogramms sollte dieses Konzept so erweitert werden, dass weitere, in natürlichen Systemen wichtige Prozesse berücksichtigt werden. Hierzu zählen die Rückkopplung von Redoxreaktionen und Ionenaustausch- bzw. Sorptionsreaktionen mit verschiedenen Einflussgrößen sowie die Berücksichtigung von Wässern mit sehr hoher Ionenstärke, bei denen der Pitzer-Formalismus anzuwenden ist. Diese Prozesse sollen nun berücksichtigt werden, um die Vorgänge noch realitätsnäher abzubilden und das Programm auf weitere Systeme anwendbar zu machen. Das hier zu entwickelnde Konzept ist sowohl auf andere Formationen als auch auf andere Codes übertragbar und gestattet somit auch einen Wissenstransfer auf andere Forschungsfelder.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Vergleichsrechnungen mit anderem Code  
(Qualifizierung des neuen Rechenprogramms, z. B. mit Programmcode PHAST)
- AP2: Implementierung zusätzlicher Prozesse, Komponenten und Einflussgrößen  
(Erarbeitung eines aktualisierten konzeptuellen Modells zur Berücksichtigung weiterer wichtiger Prozesse und Einflussgrößen, z. B. Redoxprozesse, höhere Ionenstärken)
- AP3: Laborexperimente  
(Sorptions- und Säulenexperimente im Rahmen von Promotionsarbeiten)
- AP4: Erzeugung von SCM-Datensätzen und K<sub>d</sub>-Wert Matrizen  
(Gewinnung thermodynamischer Sorptionsdaten und K<sub>d</sub>-Berechnung)
- AP5: Berücksichtigung weiterer externer FEPs  
(Umsetzung weiterer FEPs/Szenarien in Strömungs- und Transportmodellen)
- AP6: Anwendungsrechnungen (Strömungs- und Transportrechnungen)
- AP7: Qualitätsmanagement/Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Abschließende Korrektur des konzeptionellen Modells für die Behandlung von Al im Transportprogramm d<sup>3</sup>f<sup>++</sup>.
- AP3: Fertigstellung der Dokumentation der Ergebnisse zum reaktiven Stofftransport Eu(III) durch ausgewählte, reine Mineralphasen.  
 Auswertung und SCP-Bestimmung aus Ni-Sorptionsdaten.  
 Auswertung der Säulenexperimente von Ni mit Quarz, Orthoklas.  
 Planung, Durchführung und Auswertung von Säulenexperimenten mit Ni im synthetischen Sediment (Quarz+Orthoklas).  
 Planung, Durchführung und Auswertung von Batchversuchen: Al mit Quarz. Ergänzende Versuche zu Ni mit Quarz, Orthoklas.  
 Vorstellung der aktuellen Ergebnisse auf der Goldschmidtkonferenz 2017 (Paris, Frankreich, Posterbeitrag sowie Vortrag).
- AP7: Durchführung eines Arbeitsgesprächs mit dem Verbundpartner zur Korrektur des konzeptuellen Modells für die Behandlung von Al.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP3: Planung, Durchführung und Auswertung von Säulenexperimenten mit Ni und Muskovit.
- AP7: Durchführung eines abschließenden Projekttreffens mit dem Verbundpartner HZDR in Leipzig.  
 Fertigstellung des Abschlussberichts.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Steinbrecher, L.: Sorption von Cs an Orthoklas und Muskovit – Batchversuche und geochemische Modellierung. Masterarbeit, GRS gGmbH – TU Braunschweig (2017) 73p.
- Stockmann, M.; Schikora, J.; Becker, D.A.; Flügge, J.; Noseck, U.; Brendler, V.: Smart  $K_d$ -values, their uncertainties and sensitivities - Applying a new approach for realistic distribution coefficients in geochemical modeling of complex systems. *Chemosphere* 187, (2017) 277-285.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11102</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.2	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2012 bis 31.03.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.384.037,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

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

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

TA1: Bearbeitung grundlegender Aspekte

- Verfolgung und Bewertung internationaler Entwicklungen zu offenen Fragen bei Langzeitsicherheitsnachweisen und Einbringung nationaler Interessen in internationale Aktivitäten.
- Weiterentwicklung methodischer Vorgehensweisen in der Langzeitsicherheitsanalyse bzw. für den Safety Case.
- Diskussion von eigenen und externen Ergebnissen in nationalen Diskussionsforen zur Erarbeitung gemeinsamer Stellungnahmen und Vorgehensweisen zu ausgewählten Themen der Endlagerung in Deutschland.
- Auswertung neuer wissenschaftlicher Ergebnisse und Aufbereitung zur Verwendung in Instrumentarien für Langzeitsicherheitsanalysen.

TA2: Bearbeitung von Schwerpunktthemen

- Entwicklung methodischer Ansätze im Hinblick auf die Abwägung zwischen Sicherheit in der Betriebsphase und Langzeitsicherheit.
- Weiterführende Untersuchungen zur Aufsättigung von Bentonithaltigen Buffermaterialien im Hinblick auf die Aufsättigungsdynamik bei begrenztem Wasserangebot.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

TA1:

- Teilnahme an den Sitzungen der IGSC Core Group und der IGSC mit Leitung der Topical Session zum Thema „Criticality and Safeguards in DGRs“.
- Vorbereitung und Durchführung eines gemeinsamen Workshops von FSC/IGSC zum Thema „Safety Case Communication“ und Planung einer zukünftigen Zusammenarbeit.
- Teilnahme am Arbeitstreffen der NEA Initiative „Preservation of Records, Knowledge and Memory (RK&M)“. Leitung der Arbeitsgruppe „Set of Essential Records (SER)“ und Erstellung eines Berichtsentwurfs.

- Teilnahme am US-German Workshop in Middelburg. Verschiedene Vorträge, u. a. über die Ergebnisse des REPOPERM-Projekts.
- CAST: Erstellung der Beiträge zu den CAST Deliverables D6.3 und D6.4.
- Teilnahme am Technical Meeting zum Projekt MODARIA-II bei der IAEA in Wien.
- Erweiterung der FEP-Datenbank ([www.saltfep.org](http://www.saltfep.org)) zum Salt Knowledge Archive durch verbesserte Verwaltung von Literatur. Entwicklung eines Konzeptes zur Einbindung eines Glossars in die Datenbank.
- Fertigstellung der Arbeiten zu dreiwertigem Eisen und Blei sowie Teilnahme am Arbeitstreffen zum NEA State-of-the-art report „High ionic-strength solutions“ mit Diskussion der Ergebnisse.

#### TA2:

- Die letzten Probleme bei den Aufsättigungsversuchen mit begrenzter Wasserzufuhr wurden gelöst. Erste Ergebnisse wurden auf der Clay Conference in Davos und bei der Task Force EBS vorgestellt. Eine Veröffentlichung wurde vorbereitet und ist im Review-Prozess.
- Erste Rechnungen zur Bentonitaufsättigung des FEBEX-Versuchs im Rahmen der Task Force EBS.
- Erstellung eines Berichtsentwurfs zu Analoga-Studien in Ton: Zusammenstellung vorhandener Studien, Strukturierung in Anlehnung an den FEP-Katalog sowie Bewertung im Hinblick auf ein deutsches Sicherheitskonzept für ein Endlager in einer Tonformation.
- Teilnahme am Workshop on Uncertainty management in Albuquerque, Erarbeitung eines Fragebogens zur Beschreibung vorhandener sicherheitsanalytischer Rechnungen für die probabilistische Analyse und Planung einer gemeinsamen Aktivität zur Sensitivitätsanalyse.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

#### TA1:

- Teilnahme an der nächsten Sitzung des Salt-Clubs.
- Fertigstellung des Berichts zum Thema Set of Essential Records (SER) und Teilnahme am Abschluss-Treffen des NEA Projekts RK&M in Paris.
- CAST: Fertigstellung der Beiträge zu den Deliverables D6.3 und 6.4 sowie Teilnahme und Vortrag beim Abschluss-symposium in Lyon.
- Beginn des Peer Reviews zum Entwurf des NEA State-of-the-art reports „High ionic-strength solutions“ und ggf. Überarbeitung.
- Fertigstellung des Projektabschlussberichts.

#### TA2:

- Abschluss der Versuche zur Bentonitaufsättigung bei begrenzter Wasserzufuhr und Dokumentation.
- Fertigstellung des Berichts zu Analoga-Studien in Ton.
- Analyse von Modellsystemen anderer Länder im Rahmen der gemeinsamen Aktivität zur Sensitivitätsanalyse.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Swanson, J.; Cherkouk, A.; Arnold, T.; Meleshyn, A.; Reed, D.: The microbiology of subsurface, salt-based nuclear waste repositories: using microbial ecology, bioenergetics, and projected conditions to help predict microbial effects on repository performance. LA-UR-16-27825.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11193A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2013 bis 31.08.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 2.881.392,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kudla	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben ELSA2 hat folgende Ziele: 1. Entwicklung eines Schachtverschlusskonzeptes als standortunabhängiges Grundkonzept für Salz- und Tonsteinformationen. 2. Test von einzelnen Funktionselementen im Labor und in halbtechnischen Versuchen mit Entwicklung, Test und Kalibrierung von Materialmodellen zur modelltheoretischen Beschreibung des Materialverhaltens für die rechnerische Nachweisführung. Untersuchungsschwerpunkte sind Füllsäulen aus verdichtetem Steinsalz, Kalotten aus Basaltsteinen als Zusatzelemente in setzungsstabilen Schottersäulen, Widerlagerelemente aus MgO-Beton, Weiterentwicklung von Vergütungsverfahren für konturnahe Gebirgsbereiche und Kontaktzone, Weiterentwicklung der Bauausführung und Qualitätskontrolle von Asphalt dichtungen, Zusatzuntersuchungen zum Bentonitdichtelement (z. B. Integration von Äquipotentialsegmenten), Modelltheoretische Analyse von Bauzuständen sowie Belastungs- und Strömungsprozessen. Das Vorhaben ELSA2 kann in den Schwerpunkt 3 der Technologie-Plattform (IGD-TP): "Plugging and Sealing" eingeordnet werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse für HAW-Endlager
- AP2: Planung für halbtechnische Versuche in situ
- AP3: Laborversuche zu den Arbeitsschritten 2.1 bis 2.6
- AP4: Halbtechnische Versuche zu den Arbeitsschritten 2.1 bis 2.6
- AP5: Modellierung
- AP6: Berichterstattung

AP1 und AP6 werden gemeinsam mit DBE TECHNOLOGY federführend bearbeitet. Die TU Bergakademie Freiberg ist federführend für AP2 bis AP4. Bei AP5 ist DBE TECHNOLOGY federführend.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Teilberichte zu AP1.4 liegen vor.
- AP2: Die Planung für den In-situ-Großbohrlochversuch mit MgO-Beton der Rezeptur C3 musste angepasst werden, da zeitliche Verzögerungen auftraten. Der ursprünglich vorgesehene Versuchsstandort war ungeeignet.
- AP3: Bestimmung der Materialeigenschaften des Tones (Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität, Dichte, Wassergehalt, Durchlässigkeit, bodenmechanische Kennwerte) aus dem Standort der Bohrlochversuche mit Bitumen und Asphalt.
- AP4: Drei In-situ-Bohrlochversuche zum Einbau von Bitumen und Asphalt im Ton wurden abgeschlossen und die Temperaturentwicklung im Bitumen bzw. Asphalt und dem umliegenden Gebirge gemessen. Außerdem wurde ein Rückbau der Dichtelemente mit dem umliegenden Ton durchgeführt. Die gemessenen effektiven Gaspermeabilitäten des Gesamtsystems werden durch die Durchlässigkeit des umliegenden Tones bestimmt.

Der zweite Gesenkversuch zur Impulsverdichtung des Salzgrus-Ton-Gemisches mit ca. 7 % Friedländer Ton wurde durchgeführt. Trotz eines nicht vermeidbaren Witterungseinflusses waren die ermittelten Ergebnisse für eine Auswertung ausreichend. Im Vergleich zum ersten Gesenkversuch wurde eine um 1 % geringere Gesamtporosität zwischen 8 % (unten) und 16 % (Einzelproben) erreicht. Da die verbleibende Luftporosität im Bereich von 1 ... 2 % lag, kann davon ausgegangen werden, dass eine weitere Verdichtung nicht möglich ist und ein Grenzzustand erreicht wurde. Dies wurde durch die Ergebnisse begleitender Ultraschallmessungen bestätigt.

Der ursprünglich vorgesehene Standort für den In-situ-Großbohrlochversuch mit einem Pfropfen aus MgO-Beton C3 war ungeeignet. Ein alternativer Standort wurde ausgewählt.

Der Sandwich-Technikumsversuch HTV-5 mit einem neuen Bentonitgemisch aus Calcigel und einer Flüssigkeitsdruckbelastung von ca. 100 bar mit Pearson-Water verläuft erfolgreich.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fortschreibung der Teilberichte.
- AP2: Keine weiteren Arbeiten.
- AP3: Verbesserung der MgO-Betonrezeptur C3.
- AP4: Herstellen des Großbohrloches im Steinsalz in der Grube Teutschenthal, Einbau der Instrumentierung und des MgO Betons C3 (AP4.3).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Gruner, M.; Freyer, D.; Popp, T.: MgO-Beton: Ein lange bekannter und doch ganz neuer Baustoff. In: Beiträge zum 3. Internationalen Freiburger Fachkolloquium. Baustoffe und Versatz, 5.-6. Oktober 2017. ISBN: 978-3-86012-5601.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11193B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2013 bis 31.08.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.074.607,85 EUR	<b>Projektleiter:</b> Herold	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen dieses Vorhabens sollen allgemein gültige Grundkonzepte für Schachtverschlüsse in Salz- und Tonsteinformationen entwickelt werden. Das Verschlussystem soll modular aufgebaut sein, damit es an unterschiedliche lokale Situationen und Bedingungen angepasst werden kann. Einzelne Funktionselemente eines solchen Verschlusses sollen im Labor und in halbtechnischen Versuchen auf ihre Eignung getestet werden. Um in der Lage zu sein, rechnerische Zuverlässigkeitsnachweise zu führen, sollen Materialmodelle entwickelt und getestet werden, die in der Lage sind, das Materialverhalten adäquat zu beschreiben.

Um die genannten Ziele zu erreichen, werden vielversprechende Funktionselemente, wie eine Füllsäule aus verdichtetem Steinsalz, Basaltsteinkalotten als Zusatzelemente in Schottersäulen und Bitumendichtelemente im Rahmen von Labor- und In-situ-Untersuchungen getestet. Zu Verbesserung der Einbautechnologie werden Verfahren zur Injektion und zur Vergleichmäßigung einer Fluidaufnahme von Abdichtmaterial weiterentwickelt und getestet. Begleitet werden diese Untersuchungen durch modelltheoretische Arbeiten zur Analyse von Bauzuständen sowie Belastungs- und Strömungsprozessen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse für HAW-Endlager
- AP2: Planung für halbtechnische Versuche in situ
- AP3: Laborversuche
- AP4: Halbtechnische Versuche
- AP5: Modellierung
- AP6: Berichte

Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend beteiligt an den Arbeitspaketen 1, 5 und 6.

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP5:

Im Berichtszeitraum wurde das bestehende partikelbasierte 2D-Modell in ein 3D-Modell überführt. Die Berechnung großräumiger dreidimensionaler Schottersäulen ist mit einer gro-

ßen Partikelanzahl verbunden, die mit dem verwendeten Rechencode und aktueller Rechnerkapazitäten keine praxistauglichen Rechenzeiten zulassen. Im Zuge der Umsetzung wurden daher verschiedene Strategien untersucht, die eine Reduzierung der im Modell verwendeten Partikel ermöglichen. Aufbauend auf vergleichbaren Forschungen wurden im Rahmen der Untersuchungen drei Strategien näher betrachtet: Vereinfachung der Partikel- bzw. Clumpform, Ausnutzung von Symmetrieeffekten bei Betrachtung einer zylindrischen Form, Hochskalierung der Korngrößen durch einen definierten Faktor.

Im Rahmen der bisherigen Untersuchungen wurden vereinfachte Partikelformen verwendet. Dabei wird die Kornform über die sog. Clump-Logik realisiert, indem die zu simulierenden Schotterpartikel durch unterschiedlich große und überlappende Kugeln nachgebildet werden. Neuste Forschungsergebnisse zeigen, dass das mechanische Verhalten von Schotterpartikeln über eine Kornform auch mit deutlich weniger Partikeln abgebildet werden kann. Tuan (2016) konnte zeigen, dass mit einem aus zwei gleichgroßen Kugeln aufbauenden Clump die mechanischen Eigenschaften von Schotter nachgebildet werden kann. Dieser Ansatz wurde für das 3D-Modell übernommen. Durch die Ausnutzung von Symmetrie-Eigenschaften und der Betrachtung eines Zylindersegments ("Tortenstück") kann das Modell in Bezug auf die Partikelanzahl erheblich vereinfacht werden. Durch die Vergrößerung der Partikel kann die Partikelanzahl in einem Schacht deutlich verringert werden und stellt so ein probates Mittel zur Verringerung der Rechenzeiten dar. Je größer die Skalierung, desto größer sind die berechneten Horizontal- und Vertikalspannungen. Hinsichtlich der berechneten Spannungsverhältnisse sind zwischen dem Skalierungsfaktor 3 und 6 nur geringfügige Unterschiede, bei den Rechenzeiten jedoch deutliche Unterschiede festzustellen (3 Tage vs. 18 Tage; 2x Intel Xeon; 24 Kerne). Ein Skalierungsfaktor von 6 kann daher als ein Kompromiss zwischen Rechendauer und Rechengenauigkeit bezeichnet werden. Die dreidimensionale Partikel-Modellierung eines mit Schotterpartikeln gefüllten Schachtes bei Berücksichtigung realistischer Modelldimensionen ist durch die Vereinfachung der Partikelform, die Ausnutzung von Symmetrieeffekten und über eine Größenskalierung der Partikelform durchführbar. Während die beiden ersten Modellierungsstrategien nur einen unwesentlichen Einfluss auf das mechanische Verhalten haben, kann die Größenskalierung den Siloeffekt maßgeblich beeinflussen.

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

AP5:

Die Arbeiten zur Simulation von Schottersäulen mit Hilfe eines partikelbasierten Codes werden weitergeführt. Durch eine Verknüpfung der partikelbasierten Schottersäule mit einer kontinuumsmechanischen Umgebung soll die Anregungsfunktion eines Erdbebens realitätsnäher abgebildet werden.

Die Arbeiten zum Bitumenstoffgesetz werden weitergeführt. Die von der TU Bergakademie bereitgestellten und ausgewerteten Messergebnisse werden zur Kalibrierung des Modellansatzes genutzt.

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

P. Herold, E. Kuate Simo, C. Müller, M. Jobmann, M. Hofmann, M. Gruner, W. Kudla: Development, testing, and numerical simulation of shaft sealing elements made of bitumen and asphalt for German HLW and SF repository, Clay Conference 2017, Davos, 2017

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11243</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborative und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Rekompaktionsverhalten der EDZ (LASA-EDZ)	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2013 bis 30.06.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.065.602,50 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Czaikowski

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Vorhabens LASA-EDZ besteht in der gezielten Bereitstellung von Labordaten für die hydro-mechanisch gekoppelte modelltheoretische Analyse des Langzeitdichtvermögens der Auflockerungszone im Bereich eines Schachtverschlusses für ein Endlager in Salzformationen. Hierzu sind die notwendigen Kenntnisse und Daten zum geomechanischen und geohydraulischen Materialverhalten auf der Grundlage von laborativen Untersuchungen zu ermitteln und im Hinblick auf einen fundierten Nachweis der Langzeitdichtfunktion zur Verfügung zu stellen.

Das Vorhaben wird in Kooperation mit dem Vorhaben LAVA 2 (Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen) der GRS durchgeführt. Während im Projekt LASA die mechanisch-hydraulischen Eigenschaften im Vordergrund stehen, soll im Projekt LAVA-2 das System bezüglich chemisch-hydraulischer Prozesse untersucht werden. Die Beschreibungen der Einzelprozesse sollen langfristig in ein THMC-Modell zur Prognose des Langzeitverhaltens von Dichtbauwerken aus Salzbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen einfließen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelle Untersuchungen zur Gasdurchlässigkeit im Autoklav (IST-Zustand der Proben), Ermittlung der Beziehung zwischen der Gasdurchlässigkeit und Minimalspannung während der Belastung in triaxialen Rekompaktionsversuchen, Ermittlung des Langzeitverhaltens der (trockenen/teilgesättigten) Steinsalzproben, bei Lösungszufluss (drainiert) und unter Lösungsdruck (undrainiert).
- AP2: Prozessanalytische Modellierung: Identifikation der bei Entnahme des Kernmaterials an der Entnahmelokation vorliegender Gebirgsbeanspruchungen, Auswahl geeigneter Stoffmodelle und Bestimmung der Stoffparameter für das HM-Verhalten der Auflockerungszone, Nachprüfung der Anwendbarkeit der bestehenden Salzmodelle bei Rekompaktion unter Feuchteeinfluss, Bestimmung der Stoffparameter aus den GRS-Laborversuchen, Kalibrierung und Validierung der ausgewählten Stoffmodelle durch Simulation typischer Laborversuche.
- AP3: Ergebniszusammenführung und Berichterstattung.

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

Das Vorhaben LASA-EDZ wird in Kooperation mit dem Vorhaben LAVA 2 (Entwicklung chemisch-hydraulischer Modelle für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen) der GRS durchgeführt. Es hat sich herausgestellt, dass die neu entwickelte Methodik mit kombinierten Prüfkörpern auch zur Präparation geeigneter Probekörper für Advektionsversuche herangezogen werden kann. Gegenwärtig laufen dazu noch weitere Versuche mit unterschiedlicher Minimalspannung. Es ist zu erwarten, dass diese Ergebnisse zur Erstellung des Abschlussberichts vorliegen.

Während die gewonnenen Daten zur Permeabilitätsreduzierung im Rahmen LAVA 2 eher von untergeordnetem Wert sind, da sie ja der Vorbereitung des eigentlichen Advektionsversuches dienen, werden diese Daten herangezogen, um dann auch im Hinblick auf die modelltheoretischen Untersuchungen Auskunft über dominierende Prozesse geben zu können.

Derzeit kann auf Basis der durchgeführten Versuche nicht eindeutig belegt werden, ob der vorherrschende Prozess, der zur Reduzierung der Permeabilität führt, durch die Wechselwirkungen mit der gesättigten Salzlösung zu erklären ist, so dass die Minimalspannung in diesem Fall eher eine untergeordnete Rolle spielt bzw. unterstützend wirksam ist.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Abschluss experimenteller Untersuchungen
- Durchführung orientierender modelltheoretischer Untersuchungen
- Erstellung des Abschlussberichts

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

Czaikowski, O., Hertel, U; Jantschik, K.; Wiczorek, K.: Hydro-mechanics in a seal/rock salt system. SALTMECH IX, Hannover 2018, - Review process -

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11284</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-Nahfeld (BIGBEN)	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2014 bis 31.03.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 707.450,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kröhn

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Dampfdiffusionsmodell stellt die Sorptionsisotherme für Bentonit, die den empirischen Zusammenhang zwischen relativer Luftfeuchtigkeit und Wassergehalt widerspiegelt, eine zentrale Zustandsgleichung dar. Bei der Beschreibung der Isotherme existieren zurzeit noch einige Unklarheiten. Dies betrifft vor allem den Temperatureinfluss auf die Isotherme, der in einem realen Buffersystem dadurch von Bedeutung ist, dass die Wiederaufsättigung in der thermischen Phase der Entwicklung eines Endlagers erfolgt. Die Wärmeentwicklung bewirkt im Inneren des Buffers auch ohne Wasseraufnahme von außen eine erhebliche Feuchtigkeitsumlagerung. Ferner ist noch unklar, welchen Einfluss die Hysterese zwischen Auf- und Entsättigung auf den Prozess der Wiederaufsättigung hat.

Diese Unklarheiten sollen durch Untersuchungen des Feuchteaufnahmevermögens unter Temperatureinfluss an tonhaltigen Dicht-/Versatzmaterialien, die noch genauer festzulegen sind (z. B. Calcigel, MX80, Febex-Material), beseitigt werden. Die ermittelten Ansätze für die Sorptionsisothermen werden im Code VIPER implementiert und deren Einsatzfähigkeit durch Modellrechnungen bestätigt.

Parallel dazu wird eine Rechenfallbibliothek einschließlich Dokumentation erstellt. Damit können nicht nur neue Programmversionen auch anhand älterer Modelle getestet werden. Vor allem erfolgt damit eine Überprüfung der älteren Modelle vor dem Hintergrund des im Laufe der Zeit stetig verbesserten und erweiterten Modellkonzepts.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP1: Bestimmung von temperaturabhängigen Sorptionsisothermen
- AP2: Modellrechnungen mit neuen Sorptionsisothermen
- AP3: Erstellung einer systematischen Rechenfallbibliothek
- AP4: Erstellung des Abschlussberichts

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Bestimmung von temperaturabhängigen Sorptionsisothermen im Ofen:

Das Sorptionsgleichgewicht bei den Bentonitproben unter unterschiedlichen Luftfeuchtigkeiten, die in Exsikkatoren über verschiedenen Salzlösungen platziert und in einem Wärmeschrank bei 60 °C gehalten worden waren, wurde im Berichtszeitraum erreicht. Daraufhin wurde die Temperatur im Wärmeschrank wieder auf 30 °C abgesenkt.

Durch verschiedene Schwierigkeiten (temperaturabhängige Löslichkeit, Salzkristallbildung im Feuchte- und Temperatursensor) waren die Werte von drei Exsikkatoren für die Temperaturstufe von 90 °C nicht verlässlich gewesen. Exsikkator 9 hatte zudem Unregelmäßigkeiten gezeigt, die wegen der Toxizität des verwendeten Salzes (Bariumchlorid) nicht behoben werden konnten, so dass dieser Exsikkator nicht weiter betrieben werden konnte. Die Luftfeuchtigkeiten bei der darauffolgenden Temperaturstufe von 60 °C waren dagegen sehr stabil. Allerdings machte eine Leckage in Exsikkator 10 die diesbezüglichen Messungen unbrauchbar. Die gewonnenen Datenpunkte zeigen das erwartete Verhalten und konsistente Wassergehalte.

Testmessungen einer Isotherme mit dem VSA:

Nachdem Scanlines für die Desorption von MX-80 aufgenommen werden konnten, versagte die Feuchtezuführung für hohe Luftfeuchtigkeiten, wie sich herausstellte infolge einer Verstopfung der Wasserzuführung mit Feinstpartikeln. Nach Behebung dieser Störung wurden die Scanlines für Adsorption und Desorption bei MX-80 aufgenommen. Die Kurven sind nicht ganz passend zu den früher gemessenen Kurven der Hysterese. Möglicherweise ist das schnellere dynamische Messverfahren nicht adäquat.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschluss der Entsättigung im Wärmeschrank bei 30 °C. Bei Erreichen des Gleichgewichts zwischen Luftfeuchtigkeit und Wassergehalt letzte Auswertung der Daten.
- Interpretation der Abweichungen zwischen den bisher gemessenen Adsorptions- und Desorptionskurven. Fortsetzung der Messungen mit der VSA zur Bestimmung der Scanlines für den Übergang zwischen Adsorptions- und Desorptionsisotherme für Calcigel. Herleitung geeigneter analytischer Funktionen zu deren Beschreibung.
- Aufnahme der Arbeiten zur systematischen Quantifizierung des Einflusses einer Einspannung der Bentonitproben auf die Mikrostruktur des Bentonits und den daraus resultierenden Verlauf der Isothermen (vgl. /SEI 14/).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11294</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA)			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.1			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2014 bis 30.06.2018		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.011.080,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Herold	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zielsetzung des Vorhabens ERNESTA ist es, die technische Umsetzung von Rückholungskonzepten weiter zu konkretisieren, sicherheitstechnische Konsequenzen und Auswirkungen der Sicherheitsanforderung „Rückholbarkeit“ auf die Endlagerauslegung weiter vertieft zu untersuchen und die Auswirkungen hinsichtlich Aufwand und Zeitbedarf aufzuzeigen. Die Planungen sollen Grundlagen für eine genehmigungsreife technische Lösung liefern.

In Deutschland ist die Möglichkeit zur Rückholung als Auslegungsanforderung an ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente seit dem Jahr 2010 in den Sicherheitsanforderungen des BMU. Die Erfüllung der Sicherheitsanforderungen ist Genehmigungsvoraussetzung für die Inbetriebnahme des Endlagers. Innerhalb des Vorhabens sollen zunächst allgemeine Fragestellungen zur Umsetzung und Implementierung der Rückholungsforderung für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente beantwortet werden. Im Anschluss erfolgt eine Weiterentwicklung und vertiefende Planung für eine mögliche Rückholung von Endlagerbehältern für das Konzept der Strecken- und Bohrlochlagerung im Salz- und Tongestein. Darüber hinaus werden Arbeitsprogramme zur Realisierung des Nachweises der technischen Machbarkeit für die relevanten Komponenten der Rückholungskonzepte erarbeitet.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Konzeptübergreifende Fragestellungen und grundlegende Untersuchungen
- AP2: Planung von Rückholungskonzepten bei der Endlagerung im Salzgestein
- AP3: Planung von Rückholungskonzepten bei der Endlagerung im Tongestein
- AP4: Erarbeitung eines Umsetzungsplanes zur Durchführung möglicher Demonstrationsversuche
- AP5: Berichtswesen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2.4: Im Berichtszeitraum wurde die Auslegungsoptimierung der horizontalen Streckenlagerung im Salz weitergeführt. Auf der Basis von Vergleichsrechnungen wurden die erwarteten Temperaturen an der Behälteroderkante und am Stoß der Teilstrecke zur Auffahrung der Rückholungstrecke bestimmt. Die Berechnungen umfassen eine Variation der Behälterbeladung und des Abstandes der Einlagerungstrecken zu einander. Zur besseren Vergleichbarkeit mit den bereits durchgeführten thermo-mechanischen Berechnungen zur Stabilität der Rückholungstrecken wurde die Zwischenlagerzeit nicht variiert. Auf eine Variation des Behälterabstandes in Streckenrichtung wurde ebenfalls verzichtet, da der Einfluss dieses Designparameters auf das Temperaturfeld sehr gering ist. Mittels Vergleichsrechnungen wurden mögliche Auslegungskonfigurationen bei Einhaltung des vorläufigen 100 °C Temperaturkriteriums nach StandAG und zur Optimierung der Bedingungen während der Rückholung erarbeitet. Zur Optimierung der Bedingungen während der Rückholung wird eine möglichst geringe Temperatur in der Rückholungstrecke bei gleichzeitig möglichst guter Ausnutzung der Auslegungstemperatur angestrebt. Dies könnte theoretisch z. B. durch eine deutliche Reduzierung der Behälterbeladung erreicht werden. Bei gleichbleibendem Streckenabstand könnten ca. 4,5 Brennelemente (DWR) oder das Äquivalent an SWR bzw. WWER Brennelementen in einen POL-LUX® verpackt werden. Innerhalb der Rückholungstrecken sind für diese Konfiguration Gebirgstemperaturen von bis zu max. 85 °C zu erwarten. Dies führt rechnerisch zu einer Verdopplung der benötigten Endlagerfläche und der Anzahl an benötigten POL-LUX-Behältern. Alternativ wurden Auslegungskonfigurationen untersucht, bei denen die Behälterbeladung nicht verändert wird, aber der Streckenabstand. Es zeigte sich, dass eine Vergrößerung des Streckenabstandes um wenige Meter zu einer deutlichen Reduzierung der mittleren Streckentemperatur in den Teilstrecken der Rückholungstrecke führt. Vergleichend zur bisherigen Auslegungskonfiguration mit 36 m Streckenabstand wurden alternativ Streckenabstände von 40 m, 44 m und 50 m untersucht.
- AP2.5: Auf die geplante Vergabe einer Machbarkeitsstudie zum Plateauwagen passend zur modifizierten Einlagerungsvorrichtung wurde aus Kostengründen verzichtet. Der dafür bereits erstellte detaillierte Anforderungskatalog wird genutzt, um in Eigenleistung das Design des Plateauwagens zu überarbeiten.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2.4: Für die neu entwickelten Auslegungskonfigurationen (100 °C und Optimierung) sollen die thermo-mechanischen Berechnungen zur Auffahrung der Rückholungstrecken und die Klimavorausberechnungen durchgeführt werden. Dies erlaubt einen direkten Vergleich zur bisherigen Endlagerauslegung.
- AP2.5: Der Oberwagen des Plateauwagens wird überplant und an die Erfordernisse der modifizierten Einlagerungsvorrichtung angepasst.
- AP5: Die Projektergebnisse des Vorhabens werden in je einem Teilbericht zu jeder Einlagerungs- bzw. Rückholungsvariante dokumentiert. Zusätzlich werden die Ergebnisse aller APs in einem Abschlussbericht zusammengefasst.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11304</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2014 bis 30.06.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.560.517,33 EUR	<b>Projektleiter:</b> Wieczorek

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Als Partner im Betreiber-Konsortium führt die GRS seit 1999 im Auftrag des BMWi Forschungsarbeiten im schweizerischen Untertagelabor Mont Terri im Opalinuston durch. Die Arbeiten dienen dem Ziel, das Verständnis der in einem Endlagersystem im Tonstein ablaufenden Prozesse weiterzuentwickeln sowie die Stoffmodelle und numerischen Simulationsprogramme zu qualifizieren. Für diesen Zweck werden auch relevante Daten ermittelt. Die Untersuchungen betreffen vor allem Fragestellungen bezüglich des THM-Verhaltens des Tonsteins, der Auflockerungszone und von tonhaltigen Buffer- bzw. Verschlussmaterialien. Durch die Arbeit in Gemeinschaftsprojekten mit internationalen Partnern wird der Aufwand reduziert und der Erkenntnisgewinn maximiert.

Die Ergebnisse des Projekts werden direkten Einfluss auf die Konzeption und -auslegung eines Endlagers im Tonstein haben und ergänzen damit die Arbeiten des Projekts AnSichT.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: FE Experiment – Porendruckmessungen und Modellrechnungen als Beitrag zum Streckenlagerexperiment der NAGRA im 1:1 Maßstab
- AP2: HE-E Experiment – Weiterführung des im Rahmen des EU-Projekts PEBS aufgebauten Erhitzerversuchs im Mikrotunnel (mit NAGRA, ENRESA und BGR)
- AP3: DM-A Experiment – Langzeitverformungsmessung des Tonsteins in einem Bohrloch
- AP4: SB-A Experiment – Untersuchung von Bohrlochabdichtung und Auflockerungszone (mit BGR)
- AP5: DB Experiment – Messung von Porendruckverlauf sowie chemischem und thermischem Potential im ungestörten Tonstein in einem tiefen Bohrloch durch die Opalinuston-Formation (mit Swisstopo, IRSN, NWMO, NAGRA und BGR)
- AP6: LT-A Experiment – Eigenschaften der sandigen Fazies: Modellkalibrierung an Hand von Laborexperimenten (mit BGR)
- AP7: Weiterentwicklung von VIRTUS für den Einsatz in Tonstein
- AP8: Mine-By Experiment (MB-A) in der sandigen Fazies (mit BGR und Swisstopo)
- AP9: Technical und Steering Meetings

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Messungen des Porendrucks in der Umgebung des FE-Tunnels dauern an und liefern aussagekräftige Ergebnisse. Die Ergänzung des dreidimensionalen Finite-Element-Modells des FE Experiments um die Spritzbetonauskleidung wurde vorbereitet.
- AP2: Der HE-E Versuch wurde weitgehend störungsfrei weitergeführt. Der Buffer im zentralen und erhitzernahen Bereich ist immer noch entsättigt, und der tunnelnahe Gebirgsbereich steht noch unter Saugspannung. Mit dem mittels VIRTUS erstellten 3D-Modell wurden thermisch-hydraulisch gekoppelte Simulationen mit realistischer Geometrie mit CODE\_BRIGHT durchgeführt.
- AP3: Seit 2009 werden mit einer in einem horizontalen Bohrloch eingebauten Dilatometersonde die Langzeitverformung des Bohrlochquerschnitts sowie ergänzend Temperatur und Luftfeuchte gemessen. Es ist weiterhin eine stetige, nahezu stationäre Bohrlochkonvergenz messbar.
- AP4 und AP5 sind abgeschlossen.
- AP6: Zur Bestimmung der Langzeitverformung von unterschiedlichen Tonsteinen wurden Triaxialkriechversuche an 6 Proben der sandigen und karbonatreichen Fazies der OPA-Tonformation und – zum Vergleich – der oberen karbonatreichen COX-Tonformation gestartet und werden bei unterschiedlichen Beanspruchungen für weitere 2-3 Jahre durchgeführt. Zur Prüfung des Verheilungsvermögens des sandigen OPA-Tonsteins wurde eine neue Versuchsserie mit drei künstlich geschädigten Proben angefangen, wobei die Wasserdurchlässigkeit jeder Probe als ein wichtiger Parameter bei erhöhter Druckspannung gemessen wird.
- AP7: Seit Mai 2017 steht ein neues detailliertes Modell der Mont Terri Geologie zur Verfügung. Die Übernahme in VIRTUS wurde vorbereitet.
- AP8: Mit den Versuchspartnern wurden mehrere Planungsgespräche geführt.
- AP9: Teilnahme am Steering Meeting im November 2017. Teilnahme an der 7th International Clay Conference 24.-27. September 2017 in Davos, mit einer Präsentation zum hydromechanischen Verhalten des sandigen OPA-Tonsteins und einem Poster zur HE-E Simulation.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Messungen in den laufenden Experimenten
- THM-Simulation der Aufheizphase im FE Experiment (unter Einsatz von VIRTUS)
- 3D-Modellierung (TH und THM) des HE-E (unter Einsatz von VIRTUS)
- Modellierung der Bohrlochverformung in DM-A mit viskosen Ansätzen
- Weitere Laborexperimente zur Ermittlung der triaxialen Kompression- und Extensionsverhalten des sandigen OPA-Tonsteins
- Import des neuen geologischen Modells in VIRTUS
- Durchführung des Mine-By Experiments

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Wieczorek, K., O. Czaikowski, L. Friedenber (2017): Three-Dimensional Simulation of the HE-E Heater Experiment Performed at the Mont Terri Rock Laboratory (Switzerland). Poster, The 7th International Conference on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Davos, Switzerland, 24-27 September 2017.

Zhang, C.-L., Czaikowski, O., Wieczorek, K., Kaufhold, A., Laurich, B., Gräsle, W. (2017): Investigations of the Hydro-Mechanical Behaviour of the Sandy Facies of Opalinus Clay. The 7th International Conference on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, Davos, Switzerland, 24-27 September 2017.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11314</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen (KORPHA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2014 bis 30.11.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 666.350,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hagemann	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

- Identifizierung von Behälterkorrosionsphasen, mit denen in einem Endlager in einer norddeutschen Tonformation zu rechnen ist.
- Synthese und thermodynamische Charakterisierung von Behälterkorrosionsphasen.
- Ableitung des korrosionsdeterminierten Redoxniveaus im Nahfeld eines Endlagers in einer norddeutschen Tonformation und Prüfung der Auswirkung auf den Transport von Radionukliden.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Aufbauend auf einer kritischen Bewertung experimenteller Daten zur Korrosion von Behälterstahlmaterialien werden Korrosionsphasen ermittelt, die in einem Endlager in einer norddeutschen Unterkreide-Tonformation auftreten könnten.
- Die zuvor identifizierten Korrosionsphasen werden mit verschiedenen Methoden gezielt synthetisiert. Mit den erhaltenen Verbindungen wie auch anderen kommerziell erhältlichen oder von anderen Arbeitsgruppen hergestellten Präparaten werden experimentelle Untersuchungen durchgeführt, um ihre thermodynamische Stabilität zu ermitteln.
- Auf Grundlage der Erkenntnisse sowie weiterer bekannter Randbedingungen wird die mögliche Bandbreite des Redoxniveaus in einem Endlager in einer norddeutschen Unterkreide-Tonformation modellhaft ermittelt. Mit Hilfe von Stofftransportmodellen wird gezeigt, wie sich die Variabilität des Redoxniveaus auf die Konzentration der Radionuklide entlang des Ausbreitungspfad im einschlusswirksamen Gebirgsbereich auswirkt.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Bildung von Fe(II)-Hydroxid-Verbindungen bei hohen Chlorid-Gehalten liegen bislang nur wenige Untersuchungen vor. Es wurden deshalb Versuche unternommen um zu prüfen, ob sich in Analogie zu Mg-Verbindungen Hydroxychloride bilden, die ein höheres Hydroxid zu Chlorid-Verhältnis aufweisen als Fe-Hibbingit –  $\text{Fe}(\text{OH})_3\text{Cl}$  – wie z. B. in der Art von Nepskoit -  $\text{Mg}_4\text{Cl}(\text{OH})_7 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ . Sie führten zu hellgrünen Produkten, die aufgrund ihrer extrem schnellen Oxidierbarkeit noch nicht außerhalb der Glovebox untersucht werden konnten. Dies soll in Kürze mit einer neuen XRD-Messzelle erfolgen.

Die Experimente zu Fe(II)-Mg-Mischphasen wurden fortgesetzt. Hierzu gehören Versuche zur Herstellung und Charakterisierung von gemischten Mg,Fe-Hydroxiden (Mineral Amakinit), die die Formel  $(\text{Fe},\text{Mg})(\text{OH})_2$  aufweisen wie auch magnesiumhaltigem Chukanovit  $(\text{Mg},\text{Fe})_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$  und Hibbingit  $(\text{Mg},\text{Fe})_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ . Begonnen wurden zudem Versuche zur Bildung von Mischphasen mit Ca sowie Langzeitversuche zur Bildung von grobkristallinen Fe(II)-Hydroxidphasen.

Weiterhin im Fokus standen weiterhin Untersuchungen zur potentiellen Bildung von Fe(II)-Analoga für M(II)carbonate. Im Zentrum standen hier Fe-Northupit (Analogon zu  $\text{Na}_3\text{Mg}(\text{CO}_3)_2\text{Cl}$ ), und von Fe-Kambaldait (Analogon zu  $\text{Na}_2\text{Ni}_8(\text{CO}_3)_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Weiterführung der Synthesen von gemischten eisen(II)- und magnesiumhaltigen Festphasen.
- Synthese und Charakterisierung von Fe(II)-haltigen Analoga von basischen Nickel- und Cobald-Verbindungen.
- Synthese von Grüner-Rost-Verbindungen.
- Prüfung der Bildung von Fe(II)/Ca-Mischphasen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11324</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines chemisch-hydraulischen Modells für die Prognose des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen (LAVA-2)	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2014 bis 31.03.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 771.673,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Moog

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen von LAVA-2 wird ein Modell entwickelt und experimentell abgesichert, mit dem die veränderliche Permeabilität eines Dichtbauwerks aus Salzbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen in Salzformationen infolge der Korrosion durch Salzlösungen zeit- und ortsabhängig beschrieben werden kann. Das Modell soll die diffusionsbestimmte Korrosion durch die geringpermeable störungsfreie Salzbeton-Matrix ebenso beschreiben, wie die Korrosion auf Rissen und Kontaktfugen Dichtbauwerk-Salzgebirge.

Das Vorhaben wird in Kooperation mit dem Vorhaben LASA (Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar) der GRS durchgeführt. Während im Projekt LASA die mechanisch-hydraulischen Eigenschaften im Vordergrund stehen, soll im Projekt LAVA-2 das System bezüglich chemisch-hydraulischer Prozesse untersucht werden. Die Beschreibungen der Einzelprozesse sollen langfristig in ein THMC-Modell zur Prognose des Langzeitverhaltens von Dichtbauwerken aus Salzbeton in Schacht- und Streckenverschlüssen einfließen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

### AP1: Laborversuche

AP1.1: Präparation der Salzbetonproben und der Korrosionslösungen

AP1.2: Ermittlung von Materialkenngrößen des unkorrodierten Salzbetons

AP1.3: Kaskadenversuche, Versuche zur Ermittlung des Reaktionspfades der Korrosion mit NaCl- und IP21-Lösung

AP1.4: Vorbereitung der Versuchsreihen

AP1.5: Durchführung der Versuchsreihen

AP1.6: Probenahme und Messungen: Matrixproben, Schnittflächen- und Kontaktflächenproben

AP1.7: Auswertung der Messdaten

### AP2: Modelltheoretische Arbeiten

AP2.1: Bereitstellung der thermodynamischen Daten

AP2.2: Test und Anpassung eines reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung des diffusions- und advektiv bestimmten Lösungsangriffs auf die poröse Matrix von Salzbeton

AP2.3: Test des reaktiven Stofftransportmodells zur Beschreibung diskreter Risse

AP3: Simulationsrechnungen

AP3.1: Geochemische Gleichgewichtsmodellierung der Kaskadenversuche

AP3.2: Modelltheoretische Betrachtung der Diffusions- sowie Advektionsversuche

AP3.3: Modelltheoretische Betrachtungen der Schnittflächen- und Kontaktflächenversuche mit diskreten Rissen

AP4: Dokumentation der Ergebnisse und Abschlussbericht

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

Advektionsversuche an zwei kombinierten Prüfkörpern wurden fortgeführt. Vor dem Einbau in die Advektionszellen wurde ein Kern einer Mantelspannung von 100 MPa, der Zweite von 30 MPa ausgesetzt. Bei Durchströmung mit NaCl-Lösung (ohne Manteldruck) ergab sich in beiden Proben ein initialer Anstieg der Permeabilität, die in beiden Fällen nach 6000 Stunden auf Werte von etwa  $2 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$  abfiel. Die initiale erhöhte Durchlässigkeit konnte visuell in der Auflockerungszone des Steinsalzes verortet werden, das den Kern aus Salzbeton umgab. Ferner wurde der Abschlussbericht erstellt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Abschluss der Advektionsversuche in Advektionszellen und Autoklaven.  
Fertigstellung des Abschlussberichts.

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

Jantschik, K., Czaikowski, O., Moog, H.C., Wieczorek, K. (2017): CHM-coupled long-term evolution of seals in rock salt repositories, IHLRWM Conference 2017, Paper, North Carolina (USA)

Jantschik, K; Czaikowski, O. (2017): Aktuelle Untersuchungen der Dichtfunktion zementbasierter Baustoffe bei Durchströmung mit salinärer Lösung, Fachgespräch Verschlussysteme 2017, Freiberg

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11334A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt A	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2014 bis 30.11.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 848.318,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Muñoz

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel des Projektes EDUKEM ist die Gewinnung abgesicherter Daten zur Speziation und zu den Löslichkeitsgrenzen von Uran (IV/VI) in verdünnten bis hochsalinaren Lösungen flankiert von methodischen Weiterentwicklungen.

Das Ziel des GRS-Teilprojekts EDUKEM ist die Entwicklung neuartiger elektrochemischer Methoden zur Bestimmung der Speziation von U(IV) und U(VI) in komplexen hochsalinaren Lösungen und zur Gewinnung der entsprechenden thermodynamischen Daten. Dieses Ziel wird in zwei Phasen erreicht. In der ersten Phase werden Nieder- und Hochfrequenzmethoden zur Messung der Ionen-Mobilität in hochsalinaren Milieus entwickelt. Die gewonnenen Daten werden in der zweiten Projektphase für die Auswertung der geplanten potentiometrischen Experimente in Uran-Systemen angewandt.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Aufbau des experimentellen Messplatzes
- AP2: Durchführung von experimentellen Messungen der Ionen-Mobilität
- AP3: Auswertung der experimentellen Daten und systematische Darstellung der Ionen-Mobilität durch die MSA-Theorie
- AP4: Durchführung der potentiometrischen Messungen
- AP5: Koordination des Verbundvorhabens
- AP6: Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Durchführung von experimentellen Messungen der Ionen-Mobilität (AP2):

Wie bereits in unserem letzten Bericht informiert, wurde eine neue Zelle aus Plexiglas mit Wasserzirkulation angefertigt. Diese Zelle bietet die Möglichkeit, Referenzelektroden nah zu den Endelektroden einzusetzen. Damit lassen sich die Beiträge der Elektrodendoppelschichten einzeln messen und diese aus den reinen Transportbeiträgen in den Impedanzspektren trennen. Dieser Messprozess dient der Validierung des formulierten theoretischen Modells zur Datenauswertung.

Auswertung der experimentellen Impedanz-Messungen (AP3):

Nach einem langen Iterationsprozess zwischen Theorie und experimentellen Ergebnisse konnte ein theoretisches Modell erstellt werden, das die experimentellen Daten wiedergeben kann. Dieses besteht aus relativ komplexen Gleichungen, aus deren Anpassung zu den experimentellen Daten, die Transportdaten Diffusionskoeffizient und Ionenmobilität zu extrahieren sind.

Auswertung der experimentellen TDR (AP3):

Mithilfe des in diesem Jahr neu entwickelten TDR-Sensors und des optimierten Rechenprogramms zur Transformation der in der Zeit-Domäne aufgenommenen Daten in die Frequenzdomäne wurde die komplexe Permittivität von salinaren Lösungen (CsCl-, KCl-, NaCl-, MgCl<sub>2</sub>- CaCl<sub>2</sub>-, Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> und K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) in einem Konzentrationsbereich von 0.001 bis 1.3 mol Kg<sup>-1</sup> bei 25 °C ermittelt. Durch die Anwendung einer Debye-Funktion ließ sich die statische Dielektrizitätszahl als Funktion der Konzentration bestimmen. Diese Werte werden für die Auswertung der Impedanzdaten verwendet. Das Verhalten der dielektrischen Spektren bei Niederfrequenzen zeigen aber interessante Tendenzen mit der Konzentration, die eine Verbindung zur Ionenmobilität vermuten lässt. Ausgewählte dazu gehörende Interpretationen werden in die von diesem Projekt geförderte Dissertation einfließen.

Betreuung des Doktoranden (AP5):

Der für dieses Projekt eingestellte Doktorand hat mit dem Schreiben seiner Dissertation, angefangen und ein paar Kapitel liegen bereits vor. Es ist zu erwarten, dass er voraussichtlich im Sommer 2018, nach Vervollständigung einiger ergänzenden kurzen Messkampagnen im ersten Quartal, in der Lage ist, seine Dissertation abgeben zu können. Seine Verpflichtungen an der Universität (zur Nivellierung seines FHS-Abschlusses mit dem der TU Braunschweig) hat er bereits abgeschlossen.

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

- Verfeinern des physikalischen Modells und Auswertung der Transportdaten aus den experimentellen Messungen.
- Standardisierung der Transportdaten mit den Gleichungen des MSA-Modells.
- Fortsetzung der elektrochemischen und spektroskopischen Experimente des U(IV)/U(VI) Redoxsystem bei neutralen Systemen am HZDR.

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

Es wurden keine weiteren Publikationen in diesem Berichtszeitraum geschrieben.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11334B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2014 bis 30.11.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 259.275,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Steudtner	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Verbundprojekt EDUKEM (Partner: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig und Institut für Nukleare Entsorgung, Karlsruhe Institut für Technologie) setzt neuartige komplementäre Ansätze zur Analyse der Uranspeziation um, welche durch die hohe chemische Komplexität uranhaltiger Lösungen im salinaren Milieu erforderlich sind. Uran bildet im reduzierenden wie auch im oxidierenden Milieu eine Vielzahl von Komplexen, welche oft gleichzeitig und in stark unterschiedlichen Konzentrationen in Lösung vorliegen. Zudem ist für die thermodynamische Beschreibung der Chemie in hochsalinaren Lösungen die Kenntnis ionenspezifischer Wechselwirkungsparameter (Pitzer-Parameter) zwingend erforderlich, um über Aktivitätskoeffizienten eine zuverlässige Einschätzung von Ionenstärkeeffekten auf Löslichkeit und Speziation zu ermöglichen. Die Bestimmung von Pitzer-Parametern mit klassischen Methoden, wie Löslichkeitsexperimenten und spektroskopischen Untersuchungen, soll hier durch alternative elektrochemische Verfahren unterstützt werden. Die Ergebnisse sollen zum Abbau von Unsicherheiten und Konservativitäten bei der Berechnung der Speziation und Löslichkeitsgrenzen von Uran (IV/VI) in hochsalinaren Lösungen führen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Elektrochemische Messungen (GRS)
- AP2: Löslichkeit relevanter U(IV) und U(VI) Phasen (KIT-INE)
- AP3: Spektroskopische Untersuchungen (HZDR-IRE)
- AP3.1: Spektroskopische Charakterisierung von Uran(IV/VI)-Mineral- und -Sekundärphasen
- AP3.2: Spektroskopische Charakterisierung von Uran(IV/VI) in ausgewählten hochsalinaren Lösungen
- AP3.3: Spektroskopische Untersuchungen an Gleichgewichtslösungen
- AP3.4: Ableitung thermodynamischer Parameter
- AP4: Entwicklung eines thermodynamischen Modells für U(VI) (GRS, KIT-INE, HZDR-IRE)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP3.2:

- Absorptionsspektroskopische Untersuchungen bei stark erhöhten Sulfatkonzentrationen und bei konstanter Ionenstärke wurden durchgeführt. Präzisierung der in der Literatur gefundenen Komplexbildungskonstanten für den  $U(SO_4)^{2+}$  Komplex und  $U(SO_4)^2$  Komplex mit Hinweis auf eine weitere Sulfat-Spezies bei höheren Sulfatkonzentrationen.
- Durchführung von TRLFS für U(IV)-Speziationsuntersuchungen am U(IV)-Sulfat-System bei Tieftemperatur und Bestimmung der Fluoreszenzlebensdauer.
- Erstellung der Masterarbeit von Thomas Zimmermann – Einfluss der Speziation auf die Fluoreszenzeigenschaften von Uran(IV) im Sulfat-System, Master-Arbeit Hochschule für Technik und Wirtschaft Dresden.
- Untersuchung des Einflusses der Parameter pH-Wert und Ionenstärke auf das Fluoreszenzverhalten am U(IV)-Sulfat System. Sulfat wirkt sich als statischer Quencher auf die Lumineszenzeigenschaften von Uran(IV) auf.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

#### AP3.2:

- Erstellung der Publikation zum Einfluss von Sulfat auf die U(IV)-Speziation.
- Erste spektroskopische Untersuchungen zum Einfluss von Carbonat auf das Lumineszenzverhalten von Uran(IV)
- Wellenlängenabhängige TRLFS für U(IV)-Speziationsuntersuchungen am Sulfat-System bei Tieftemperatur, Abhängigkeit der Lebenszeit von der Temperatur und Einfluss der Anregungswellenlänge auf das Lumineszenzverhalten.
- Einfluss der Parameter pH-Wert und Ionenstärke auf das Lumineszenzverhalten des freien Uran(IV)-Ion.
- Vollständige Charakterisierung des kristallinen U(IV)-sulfat mittels Thermogravimetrie, Infrarotspektroskopie, powder-XRD und Fluoreszenzspektroskopie

#### AP3.4:

- Vertiefende Einarbeitung in Chemometrie (HypSpec) zur Spektreninterpretation und daraus resultierender Bestimmung von Komplexbildungskonstanten
- Ionenstärkekorrekturberechnung nach SIT für die gefundenen Komplexbildungskonstanten für den  $U(SO_4)^{2+}$  Komplex und  $U(SO_4)^2$  Komplex

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

T. Zimmermann: Einfluss der Speziation auf die Fluoreszenzeigenschaften von Uran(IV) im Sulfat-System, Master-Arbeit Hochschule für Technik und Wirtschaft Dresden, 2017.

S. Lehmann, R. Steudtner, T. Zimmermann, V. Brendler: "Speciation of U(IV) sulfate in aqueous solution – Spectroscopic characterization and thermodynamic model"; Migration 2017, Barcelona September 10-15, 2017.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11334C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2014 bis 30.11.2017	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 30.11.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 394.555,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Altmaier	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Gesamtziel dieses Vorhabens ist die Gewinnung abgesicherter Daten zur Speziation und zu den Löslichkeitsgrenzen von Uran(IV/VI) in verdünnten bis hochsalinaren Lösungen flankiert von methodischen Weiterentwicklungen.

Ziel dieses Projektes ist, zu einem verbesserten Verständnis der Uranchemie in endlagerrelevanten wässrigen Systemen und einer wesentlich verbesserten quantitativen Modellierung der Löslichkeit und Speziation für Quelltermabschätzungen im Rahmen von Langzeitsicherheitsanalysen zu kommen. Die Entwicklung neuartiger komplementärer Messmethoden, die zum Abbau von Ungewissheiten und Konservativitäten bei der Berechnung der Speziation und Löslichkeitsgrenzen von Uran(IV/VI) in hochsalinaren Lösungen führen sollen, ist Teil dieses Ansatzes. Es werden erfolgreich etablierte spektroskopische Analysen und Löslichkeitsmessungen durchgeführt, so dass sowohl ein integrales Bild der untersuchten Systeme abgeleitet werden kann, als auch neu entwickelte spektroskopische und elektrochemische Methoden validiert werden können. Dies gilt vor allem für das für endlagerrelevante Bedingungen besonders wichtige U(IV)-System, für das die Datenlage besonders begrenzt ist, aber auch für das unter nicht-reduzierenden Bedingungen relevante U(VI)-System. Die im Rahmen von EDUKEM gewonnenen thermodynamischen Daten und Modellparameter für U(IV) und U(VI) werden in nationale und internationale Datenbankprojekte (NEA-TDB, THEREDA) implementiert.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Elektrochemische Messungen (GRS)
- AP2: Löslichkeit und Thermodynamik relevanter U(IV) und U(VI) Phasen (INE)
  - AP2.1: Arbeiten zu U(VI)
  - AP2.2: Arbeiten zu U(IV)
- AP3: Spektroskopische Untersuchungen (IRE)
- AP4: Entwicklung eines thermodynamischen Modells für U(VI) – (INE, GRS, IRE)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Die experimentellen Arbeiten von KIT-INE innerhalb von EDUKEM wurden beendet. Die Publikation von Arbeiten des KIT-INE innerhalb von EDUKEM wird fortgeführt und in 2018 abgeschlossen.
- Das Manuskript (Cevirim et al.) zu "Uranium redox processes in dilute to concentrated saline systems" wurde fertiggestellt und wird in Applied Geochemistry (Special Issue Migration) eingereicht.
- Das Manuskript (Cevirim et al.) zu „Solubility of U(VI) in dilute to concentrated KCl systems“ wurde fertiggestellt und wird in Applied Geochemistry (Special Issue Migration) eingereicht.
- Das Manuskript (Yalcintas et al.) zu „Pitzer model for U(VI) in NaCl, KCl and MgCl<sub>2</sub> solutions“ ist in internem Review am KIT-INE und soll vor Juni 2018 in der Special Issue der IUPAC ISSP Konferenz publiziert werden.
- Ein Manuskript (Yalcintas et al.) zu "Solubility of U(IV) in NaCl-NaHCO<sub>3</sub>-Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> systems. Comparison with Th(IV)" ist derzeit in Präparation.
- Nach Abschluss der Löslichkeitsexperimente mit Ca<sub>2</sub>UO<sub>2</sub>(CO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·xH<sub>2</sub>O(cr) in verdünnten bis konzentrierten NaCl Lösungen ist die Erstellung eines Manuskripts (Lee et al.) derzeit in Bearbeitung.
- Die Löslichkeitsexperimente mit U(IV) in verdünnten bis konzentrierten NaCl-, MgCl<sub>2</sub>- und CaCl<sub>2</sub>-Lösungen unter Karbonatausschluss werden innerhalb der Doktorarbeit von Nese Cevirim (Juli 2018) zusammengefasst und später in einer wissenschaftlichen Fachzeitschrift publiziert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Erstellung des Projekt-Abschlussberichts für KIT.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Poster: Gaona et al.: „Impact of carbonate on the solubility of An(IV) under alkaline to hyperalkaline pH conditions“, ACS meeting, Washington DC (USA), August 20-24, 2017.

Poster: Cevirim et al.: „Redox chemistry, solubility and hydrolysis of uranium in reducing, dilute to concentrated NaCl, MgCl<sub>2</sub> and CaCl<sub>2</sub> systems“, Migration conference, Barcelona (Spain), September 10-15, 2017 (poster award!).

Poster: Cevirim et al.: „Solubility of U(VI) in dilute to concentrated KCl solutions“, Migration conference, Barcelona (Spain), September 10-15, 2017.

Poster: Schepperle et al.: "Hydroxo-carbonate complex formation and solubility of tetravalent actinides at alkaline pH conditions", Migration conference, Barcelona (Spain), September 10-15, 2017.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11344A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt A	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.01.2015 bis 28.02.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 858.857,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Meleshyn

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Ziele des Verbundvorhabens bestehen in der Entwicklung abgesicherter, objektiver Kriterien zur Auswahl geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle. Das Hauptziel des Projektes ist es, den Umwandlungsmechanismus von Bentoniten als Funktion von Lösungszusammensetzung, Temperatur und mikrobieller Aktivität anhand von Laborversuchen aufzuklären. Konkret soll festgestellt werden, ob diese Einflüsse zu Änderungen des Fe(III)-Gehalts der reagierten Bentonite bzw. zu Änderungen des Quelldrucks und der Lösungspermeabilität von hochkompaktierten Bentoniten führen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Diese Aufklärung soll im Projekt anhand der Untersuchungen von 15 Bentoniten erfolgen, die mit einer auf den für die Endlagertiefe in der Unterkreidetonformation in Norddeutschland erwarteten Salzgehalt von 150 g/L verdünnten Giphutlösung und der Opalinustonporenlösung bei 25 °C, 60 °C, 90 °C und 120 °C ein und zwei Jahre reagieren werden.

Die durch die Reaktion veränderten Quelldruck und Permeabilität – sowie der Fe(II)/Fe(III)-Gehalt für mikrobielle Versuche – der Bentonite und die Haptonkonzentrationen der reagierten Lösungen sollen erfasst werden.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden 20 von insgesamt geplanten 84 Quelldruck- und Permeabilitätsversuchen, die am 7. Juni 2017 gestartet wurden, fortgesetzt. Die Änderungen der Quelldrucke und der gemessenen Permeabilitäten zeigten, dass für den Abschluss dieser Versuche mehr als die geplanten fünf Monate erforderlich sind. Diese Versuche können voraussichtlich Anfang Februar abgeschlossen werden. Daher ist abzusehen, dass innerhalb der Projektrestlaufzeit im günstigsten Fall (Dauer der Messkampagnen 5 bis 6 Monate) noch 40 und andernfalls nur noch 20 Quelldruck- und Permeabilitätsversuche durchgeführt werden können. Es werden daher in der nächsten Messkampagne die, für die Auswertung der Projektergebnisse wichtigsten Proben (bei 90 °C) untersucht.

Die Anfang Januar 2017 in Betrieb genommene Syringe-Pumpe zeigte zwar im Berichtszeitraum keine Leckagen, jedoch stellte sich heraus, dass sie aufgrund des hohen Salzgehaltes der Lösung nicht den voreingestellten Lösungsdruck aufrechterhalten konnte. Dies wurde auch

nur dadurch entdeckt, dass der zur Kontrolle im Lösungskreislauf des Versuchs eingesetzte Lösungsdrucksensor deutlich niedrigere Druckwerte anzeigte, als die Druckanzeige der Pumpe. Eine Inspektion der Pumpe ergab, dass das Salz aus dem Lösungskreislauf im mechanischen Bereich der Pumpe, der für die Lösung unzugänglich sein sollte, auskristallisierte und die Kolbenbewegung der Pumpe im steigenden Maße beeinträchtigte. Diese Beeinträchtigung wurde von der Pumpe offensichtlich als steigender Lösungsgegendruck behandelt, wodurch der tatsächliche Lösungsdruck der Pumpe gesenkt wurde. Diese Pumpenfehlfunktion hatte zu keinem negativen Einfluss auf die Qualität der Ergebnisse geführt, allerdings trat dadurch eine gewisse Verzögerung auf, da die Permeabilität bei den Lösungsdrucken unter 1 bar anstelle der voreingestellten 2 bar aufgrund der sich nur sehr langsam durch die Tonpellets bewegend Lösung kaum gemessen werden konnte.

Es wurden 17 Batches, die bei 25 °C zwei Jahre reagiert haben, Anfang Oktober gemeinsam mit den Verbundprojektpartnern aus Rossendorf und Greifswald beprobt.

Die ICP-OES und Dichtemessungen der bei 60 °C und 90 °C ein Jahr und bei 25 °C zwei Jahre reagierten Lösungen wurden durchgeführt.

Die Messungen der Wasseraufnahmekurve der untersuchten Bentonite in Abhängigkeit von der relativen Luftfeuchte wurden bei 75 % und 85 % durchgeführt und bei 94 % gestartet.

Die Messungen des Fe(II)/Fe(III)-Gehaltes wurden für 19 reagierte Bentonitproben aus mikrobiellen Versuchen durchgeführt.

Die Karbonatbombe-Messungen der Karbonatgehalte in Ausgangsbentoniten wurden durchgeführt.

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

- Die 20 Quelldruck- und Permeabilitätsmessungen der bei 25 °C ein Jahr reagierten Bentonite werden fortgesetzt. Die Quelldruck- und Permeabilitätsmessungen der bei 90 °C ein Jahr reagierten Bentonite werden im Anschluss gestartet.
- Die Batches mit einer Reaktionszeit von zwei Jahren bei allen untersuchten Temperaturen und mit einer Reaktionszeit von einem Jahr bei 120 °C werden im Februar gemeinsam mit Verbundprojektpartnern beprobt. Damit werden alle im Projekt geplanten Batches beendet sein.
- Die ICP-OES und Dichtemessungen der reagierten Lösungen werden fortgesetzt.
- Die Messungen des Fe(II)/Fe(III)-Gehaltes für reagierte Bentonitproben aus mikrobiellen Versuchen mit einer zweijährigen Reaktionszeit werden durchgeführt.
- Die Messungen der Wasseraufnahmekurve der untersuchten Bentonite in Abhängigkeit von der relativen Luftfeuchte werden fortgesetzt.
- Die Karbonatbombe-Messungen der Karbonatgehalte in bei 120 °C reagierten Bentoniten werden durchgeführt.
- Versuche zur Aufklärung der Mechanismen der Gasfreisetzung in Bentoniten bei 120 °C werden gestartet.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11344B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2015 bis 31.12.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 300.296,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Arnold	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel der Arbeiten ist die Entwicklung abgesicherter, objektiver Kriterien zur Auswahl geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern für wärmeentwickelnde Abfälle in Tonformationen. Die konkreten Ziele dieses Vorhabens sind: (1) Aufklärung des Lösungs- und Umwandlungsmechanismus von Smektiten (basierend auf dem GRS-Vorhaben „Fe-Bentonit“ und dem BGR Projekt „idealer Bentonit“) als Funktion von Lösungszusammensetzung und Temperatur anhand von Laborversuchen, optimierter Analytik und quantenmechanischer Modellrechnungen; (2) Identifizierung der Prozesse, die bei unterschiedlichen Bentoniten zu unterschiedlichen Reaktivitäten (Langzeitverhalten) führen; (3) Korrelierung der chemisch-mineralogischen Veränderungen der kompaktierten Bentonite mit Änderungen der hydraulischen Eigenschaften (Quelldruck und Permeabilität); (4) Untersuchungen zum Einfluss von Bakterien auf die Bentonitumwandlung; (5) Erläuterung der Rolle der Löslichkeit von Smektiten hinsichtlich der Fe-Korrosion und (6) Ableitung von Kriterien zur Auswahl optimal geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern.

Bisher ist es nicht hinreichend zuverlässig gelungen, alle relevanten experimentellen Daten zum Langzeitverhalten von Bentoniten im Kontakt zu Lösungen unter Endlagerbedingungen mit einem einheitlich abgesicherten Modell zu erklären. Eine Unsicherheit liefert in diesem Zusammenhang die Mikrobiologie. Reaktionen, die abiotisch nicht stattfinden, sind im Kontakt mit Mikroben möglicherweise als relevant anzusehen, da Mikroben spezielle Reaktionen katalysieren können.

Durch ein experimentelles und modelltheoretisches Arbeitsprogramm sollen Lücken im Prozessverständnis der Bentonitumwandlung im Kontakt zu Formationslösungen geschlossen werden. In dem hier vorgeschlagenen Vorhaben sollen zum ersten Mal vier in der Bentonitforschung ausgewiesene nationale Arbeitsgruppen zusammenarbeiten. Zum Erreichen der oben genannten Ziele sind aufeinander abgestimmte experimentelle und analytische Arbeiten in den Laboren der GRS, der Universität Greifswald und des HZDR vorgesehen. Dafür stellt die BGR 40 unterschiedliche, gut charakterisierte Bentonite zur Verfügung, von denen 15 von der GRS auf ihre hydromechanischen Eigenschaften bei erhöhten Temperaturen untersucht werden. Zwei Bentonitproben werden mit Nährsubstraten in den Lösungen durchgeführt, um Informationen über eine mögliche Beteiligung von Bakterien an Mineralumwandlungen zu belegen oder auszuschließen.

Innerhalb der Kooperationspartner (Förderkennzeichen 02E11344): Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), Abteilung Sicherheitsanalysen, Bereich Endlagersicherheitsforschung, Braunschweig; Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Institut für Geographie und Geologie, Greifswald; Technische Universität München, Theoretische Chemie.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP7.1.2: Einfluss von mikrobiellen Prozessen auf die Bentonitumwandlung

- Bestimmung der Zellzahl bzw. Zelldichte
- Bestimmung der mikrobiellen Diversität
- Real Time Quantitative PCR (oder Q-PCR)
- Kultivierung von Mikroorganismen auf geeigneten Nährmedien
- Catalyzed Reporter Deposition Fluorescence In-Situ-Hybridization (CARD-FISH)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Das HZDR analysiert die Entwicklung der mikrobiellen Diversität in den Bentonit-Proben B36 und SD80 unter dem Einfluss verschiedener Parameter nach einem Jahr und nach zwei Jahren Inkubation. Die beiden Bentonite wurden zuvor bei der GRS mit Opalinuston-Porenlösung bzw. verdünnter Gipshut-Lösung versehen und inkubiert in gasdichten Glasflaschen bei 25 °C, 60 °C und 90 °C. Für eine Stimulation der mikrobiellen Aktivität wurden Parallel-Ansätze mit Substraten versehen (50 mM Laktat, 50 mM Azetat, 1 mM Methanol, 0,1 mM AQDS).

Von den insgesamt 24 Proben, welche ein Jahr inkubierten, konnte die DNA von 6 Proben (einschließlich des Ausgangsmaterials) isoliert und sequenziert werden (SD80-Ausgangsmaterial; SD80-Opa-25 °C +S; B36-Ausgangsmaterial; B36-Opa-25 °C +S; B36-Gips-25 °C +S; B36-Gips-25 °C). In der Probe mit SD80, welche für ein Jahr bei 25 °C mit Opalinuston-Porenlösung und Substrat inkubiert wurde, dominierten Sulfat-reduzierenden Bakterien: *Desulfitobacterium* (50 %), *Desulfosporosinus* (8 %), und *Desulfotomaculum* (8 %). Im Gegensatz dazu wurden in den Ansätzen von Bentonit B36 bei 25 °C nach einem Jahr Inkubation mit Opalinuston-Porenlösung und Substrat fast ausschließlich Arten der Gattung *Bacillus* (99 %) vorgefunden und in den Ansätzen mit verdünnter Gipshut-Lösung und Substrat dominiert dagegen *Marinobacter* (45 %). Diese Ergebnisse zeigen, dass die mikrobielle Diversität, je nach den gewählten Bedingungen stark variiert. Bei den identifizierten Mikroorganismen handelt es sich hauptsächlich um Sporenbildner, welche wieder zu vegetativen, metabolisch aktiven, Zellen auskeimen können, wenn die Bedingungen es erlauben. Besonders bedeutend ist die Anwesenheit und Aktivität von Sulfat-reduzierenden Bakterien im Bentonit SD80.

Bisher ist es noch nicht gelungen die DNA aus den 60 °C- und 90 °C-Proben erfolgreich zu isolieren und zu vervielfältigen. Derzeit wird die Methodik angepasst und entsprechend optimiert, um erfolgreich DNA auch aus diesen Proben zu isolieren.

Am 01.11.2017 erfolgte die Beprobung der 25 °C-Proben ohne Substrat, die für zwei Jahre inkubiert wurden. Aus diesen 4 Proben (SD80-Opa, SD80-Gips sowie B36-Opa und B36-Gips) wurde bereits DNA isoliert. Derzeit wird versucht einen Abschnitt des 16S rRNA Gens zu amplifizieren, um diesen anschließend zu sequenzieren.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Isolation der DNA aus dem bereits vorhandenen Material wird weitergeführt. Des Weiteren soll in Zukunft auch auf die Anreicherung/Isolation von Mikroorganismen näher verfolgt werden.

Die nächste und letzte Probenahme (verbleibenden Zwei-Jahres-Proben) wird im Februar 2018 bei der GRS in Braunschweig erfolgen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Die ersten Ergebnisse des UMB-Projektes wurden als Poster mit dem Titel: „Microbial transformation of bentonite“ und den Autoren N. Matschiavelli, J. Steglich, S. Kluge, A. Cherkouk, bei der 16th International Clay Conference - Clays, from the oceans to space – vom 17. bis 21.07.2017 in Granada, Spain sowie beim GDCh-Wissenschaftsforum Chemie 2017 Interdisziplinäre Symposien Jahrestagung Nuklearchemie, vom 10.-14.09.2017 in Berlin, Deutschland vorgestellt.

Weiterhin werden die Ergebnisse des UMB-Projektes im Jahresbericht 2017 des Instituts für Ressourcenökologie unter dem Titel: „Evolution of microbial diversity in bentonite-microcosms“ mit den Autoren N. Matschiavelli, S. Kluge, V. Prause, A. Meleshyn und A. Cherkouk veröffentlicht.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11344C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2015 bis 31.12.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 198.054,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Warr	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge zur

- Aufklärung des Lösungs- und Umwandlungsmechanismus von Smektiten (basierend auf dem GRS-Vorhaben „Fe-Bentonit“) als Funktion von Lösungszusammensetzung und Temperatur anhand von Laborversuchen, optimierter Analytik und quantenmechanischer Modellrechnungen
- Identifizierung der Prozesse, die bei unterschiedlichen Bentoniten zu unterschiedlichen Reaktivitäten (Langzeitverhalten) führen
- Korrelierung der chemisch-mineralogischen Veränderungen der kompaktierten Bentonite
- Untersuchungen zum Einfluss von Bakterien auf die Bentonitumwandlung
- Erläuterung der Rolle der Löslichkeit von Smektiten hinsichtlich der Fe-Korrosion
- Ableitung von Kriterien zur Auswahl optimal geeigneter Bentonite für den Einsatz in Endlagern.

Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten 02E11344A und 02E11344B.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Analytik der Originalproben (XRD, TEM, CEC)
- AP2: Natürliches Analogon: Beprobung & Analytik
- AP3: Natürliches Analogon: Saponit/Experimente
- AP4: Vorversuche für mineralogische Analytik
- AP5: Vorversuche für Elektronen-Mikroskopie
- AP6: Natürliches Analogon: Saponit/Analytik
- AP7: Natürliches Analogon: Experimente & Analytik
- AP8: Analytik der GRS Reaktionsprodukte
- AP9: Auswertung (Mechanismen)
- AP10: Berichte

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Proben der einjährigen Batchversuche bei 25 und 90 °C in Gipshuttlösung zeigen im Vergleich zum unbehandelten Material keine signifikanten mineralogischen Änderungen (XRD). Na-dominierte Bentonite (z. B. B09, B11) zeigen partiellen Kationenaustausch von  $\text{Ca}^{2+}$  bei den Experimenten mit Gipshuttlösung bei 20 °C. Ca-dominierte Bentonite zeigen hingegen keine minera-

logischen Veränderungen. Zudem wurden die mikrobiellen Proben B36 und SD80 (Opalinustonlösung, 25 °C) bei denen die höchste mikrobielle Diversität und Aktivität erwartet wurde mittels TEM untersucht. So entstanden TEM Aufnahmen von Mikroorganismen in Verbindung mit Tonmineralen und Polyphosphatkugeln. Die Beprobung der zweijährigen Batchversuche bei 25 °C wurde im November 2017 abgeschlossen.

Im Rahmen des AP7 erfolgte die experimentelle Bestätigung zur Abschätzung des spezifischen Lösungspotentials von Smektit nach Nguyen-Thanh et al. (2014). Anhand von Proben Zentralvietnams und 5 Bentoniten aus der chinesischen GMZ-Lagerstätte konnte ein Zusammenhang zwischen der Zusammensetzung der Oktaeder- und Zwischenschicht von Smektit und der daraus folgenden Reaktionsgeschwindigkeit mit Wasser bestätigt werden. Das bisherige Formelwerk zur Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit wird um einen zusätzlichen linearen Faktor zur Auflösung von Smektit ergänzt, um auch Änderungen des Montmorillonit-Schichtanteils anzugeben. Die TEM-Daten wurden mittels XRD und FT-IR bestätigt. Insbesondere für Na-dominierten Smektit (GMZ-Bentonit) sind Mechanismen der Smektit-Alteration in Wasser, wie Auflösung von Partikeln, Änderung des Montmorillonit-Schichtanteils im Smektit und Veränderung der Partikeldicke von Smektit von Bedeutung. Ein hohes spezifisches Auflösungsvermögen („Sprinter“) zeigt sich in Proben mit deutlicher Abnahme des Smektitanteils (z. B. -7 %) und erhöhter Partikeldicke von Smektit (~3-4 nm). Dickere Partikel sind so stärker gegen Umwandlungsprozesse geschützt, sodass die Reduzierung der Montmorillonit-Schichtanteile moderat ausfiel („Sleeper“-Modus). Das berechnete niedrige spezifische Auflösungsvermögen („Sleeper“) ist hingegen durch geringfügige Änderungen im Smektit-Gehalt und durch die Verfeinerung der Smektit Partikelhöhe (~3-4 nm) charakterisiert. Dünnere Partikel sind anscheinend sensitiver für „solid-state“-Transformationen. Die Reduzierung der Montmorillonit-Schichtanteile ist deutlich erkennbar („Sprinter“-Modus). Die Änderung des Montmorillonit-Schichtanteils zeigt sich in den „Überkopf-Rotationsexperimenten“ lediglich als „precursor-Illitisierung“, welche nicht zwangsläufig Ergebnis von „solid-state“-Transformationen ist. Das Auflösen dünner Partikel als auch die Delamination von Smektit-Partikeln kann z. B. numerisch insgesamt einen geringeren Montmorillonit-Schichtanteil ergeben. Alle drei Mechanismen stehen miteinander in einem linearen Zusammenhang und werden anhand der Berechnung des spezifischen Lösungspotentials nach Nguyen-Thanh et al. (2014), durch die Belegung der Zwischen- und der Oktaederschicht, kontrolliert.

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

Mit der mineralogischen und chemischen Charakterisierung der Reaktionsprodukte der zweijährigen Batchversuche wird zeitnah begonnen. Die Beprobung der einjährigen Batches bei 120 °C und die der Batches nach zweijähriger Reaktionszeit erfolgt im Februar 2018, wobei die entsprechende Analytik auch auf diese Proben angewandt wird. Im Rahmen einer Bachelorarbeit erfolgen Alterationsexperimente an verschiedenen Korngrößenfraktionen von Saponit und Wyoming-Bentonit (SWy-3) in alkaliner Lösung, wobei unter anderem deren Einfluss auf die Kationenaustauschkapazität untersucht wird.

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

Nguyen-Thanh et al. (2014): Effects of chemical structure on the stability of smectites in short-term alteration experiments, *Clays and Clay Minerals*, 62(5), 425-446

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11344D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt D	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2015 bis 31.12.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 229.490,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Krüger

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

Quantenmechanische Modellierung von Eisensubstitutionen im Kristallgitter und an den Oberflächen von Smektiten und Untersuchung des Einflusses auf die Mineraleigenschaften.

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren“.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete:

- Charakterisierung von Referenzmineralen
- Eisensubstitutionen in Smektiten
- Eisensubstitutionen an Smektitoberflächen
- Eisenadsorption an Smektitoberflächen

Ziel der Arbeiten ist ein Beitrag zur Charakterisierung von Eisenionen in Montmorillonit und Beidellit sowie die Untersuchung der Verteilung dieser Ionen im Festkörper und an seinen Oberflächen als Beitrag zur Untersuchung der Mineraleigenschaften in Abhängigkeit vom Eisengehalt.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Eisensubstitutionen in Smektiten

AP3: Eisensubstitutionen an Smektitoberflächen

AP4: Eisenadsorption an Smektitoberflächen

Untersuchungen zu oktaedrischen Fe(III)-Substitutionen in Pyrophyllit und Smektiten (AP2) wurden insbesondere um weitere Analysen ergänzt. Bisher konnte gezeigt werden, dass bevorzugte oktaedrische Gitterplätze für Fe(III) etwas größere Volumina der umgebenden Sauerstoffoktaeder aufweisen. Da diese Korrelation nicht alle Befunde erklärt, wurden ergänzend Atomladungen der Plätze bestimmt. Es ist anzunehmen, dass Fe als elektronegativeres Element im Vergleich zu Al elektronenreiche Plätze bevorzugt. Die Ergebnisse zeigen, dass

effektive Ladungen der Plätze Abweichungen von der Korrelation relativer Energien mit dem Platzvolumen erklären können, jedoch insgesamt von untergeordneter Bedeutung sind. Insbesondere die Verteilung von Fe in Montmorillonitmodellen mit Schichtladung  $q = -0.5$  bleibt weiterhin unverstanden. Weiterhin wurden tetraedrische Fe(III)-Substitutionen anhand eines beidellitischen ( $q = -0.25$ ) und eines gemischt substituierten Smektitmodells betrachtet. Der Austausch von Al(III) durch Fe(III) in der Tetraederschicht ist mit etwa 30 kJ/mol endotherm und damit ungünstiger als Fe(III)-Substitution in der Oktaederschicht (0-10 kJ/mol). Dies bestätigt gewöhnlich sehr geringe Konzentrationen von tetraedrischem Fe(III). Obwohl das Ion Fe(III) deutlich größer als Al(III) ist, wurden nur geringfügig größere Gitterparameter (um 1-2 pm) berechnet. Der Vergleich bevorzugter trans-vakanter mit cis-vakanten Gitterstrukturen ergab, dass Energieunterschied zwischen diesen durch Austausch von tetraedrischem Al(III) durch Fe(III) sinkt.

Modellierungen zu Fe(III)-Substitutionen in Smektitoberflächen (AP3) wurden am Beispiel der Kantenfläche (010) für Montmorillonit und Beidellit ( $q = -0.25$ ) auch mit größeren explizit solvatisierten Schichtmodellen fortgesetzt. Dabei konnten die vorläufigen Ergebnisse bestätigt werden, dass Fe und Mg als große Ionen bevorzugt an der Oberfläche sind bzw. die Oberflächenenergie erniedrigen. Tetraedrische Al-Substitutionen zeigen jedoch an der Oberfläche um etwa 10 kJ/mol höhere Energien. Es ist damit insbesondere für Montmorillonit von einer erhöhten Eisenkonzentration an Kantenflächen im Vergleich zum Festkörperinneren auszugehen.

Schließlich wurde mit der Modellierung der Adsorption von Fe(III) an Smektitkantenflächen (AP4) anhand des exemplarischen Modells einer trans-vakanten (010)-Montmorillonitoberfläche ( $q = -0.25$ ) begonnen. Die Untersuchungen gehen von bidentat adsorbiertem, oktaedrisch koordiniertem Fe(III) an Aluminol- und gemischten Silanol-Aluminol-Plätzen sowie an einem oktaedrischen Leerstellenplatz des Schichtgitters aus. Erste Ergebnisse der laufenden Rechnungen zeigen, dass adsorbiertes Fe(III) ein bis zwei OH-Liganden trägt und durch Verlust eines Wasserliganden auch fünffach koordiniert sein kann.

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

AP4: Eisenadsorption an Smektitoberflächen

APV1: Fe(III) in Ca-Smektiten

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

S. Kaufhold, A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch, K. Emmerich, R. Dohrmann: Crystal-chemical composition of dioctahedral smectites: An energy-based assessment of empirical relations. *Earth and Space Chemistry* 1 (2017) 629.

Vortrag:

A. Kremleva, S. Krüger, S. Kienzle, N. Rösch: Quantum chemical modeling of octahedral Fe(III) substitutions in 2:1 dioctahedral smectites, 16. International Clay Conference, 17.-21.7.2017, Granada, Spanien

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstraße 12, 76131 Karlsruhe		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11355</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Eine experimentelle Analyse der Verhandlungen um ein Endlager für radioaktive Abfälle (Expander)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2015 bis 31.08.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtförderbetrag des Vorhabens:</b> 307.607,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schultmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist es, die Herausforderungen der Allokation beständiger Gefahrgüter am Beispiel der Endlagerung radioaktiven Abfalls über wirtschaftswissenschaftliche Laborexperimente besser zu verstehen, Ansätze für eine Lösung dieses gesellschaftlichen Dilemmas zu identifizieren und (wirtschafts-)politische bzw. strategische Empfehlungen abzuleiten. Das Problem wird gezielt in einer Serie von Laborstudien untersucht und um ausführliche Stakeholder-Interviews ergänzt, um sowohl theoretisch als auch empirisch fundierte Lösungsansätze zur Bewältigung der Herausforderungen im Prozess der Endlagersuche zu erarbeiten.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das vorliegende Forschungsvorhaben lässt sich als iterativer Prozess verstehen. Ausgehend von einem intensiven Studium der Literatur bezüglich vorheriger Laborexperimente und der Evaluation möglicher Experimentdesigns in Expertengesprächen wird ein grundlegendes Basisdesign entworfen, das im Laufe des Projekts unterschiedlich variiert wird.

Jeder Schritt der erneuten Variation der zu beobachtenden Variablen geht somit auf eine begleitende Diskussion mit Experten und eine Literaturrecherche zurück. Damit soll für jede Untersuchungseinheit bzw. für jeden Analyseschritt ein gewisses Maß externer Validität gewährleistet werden. Zudem geben die Interviews wesentliche Impulse zur Hypothesenbildung.

Das Projekt gliedert sich damit in zwei Phasen. Zum einen wird die Entwicklung eines Designs fokussiert, zum anderen wird dieses Design im weiteren Verlauf gezielt angewandt und variiert.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Die Auswertung der ersten Experimentserie zeigt, dass die Spieler in den Entscheidungsszenarien vor allem günstige Lagervarianten wählen. „Günstige“ Lagerstandorte werden statistisch signifikant deutlich häufiger gewählt, zudem sind auch die Akzeptanzraten dieser Lagerungsvorschläge deutlich höher. Es handelt sich dabei um einen Effekt mittlerer Größe. Weitere Analysen führen in dieser ersten einfachen Entscheidungssituation (Festlegung aller Spieler auf einen einzigen Standort) zu keinen weiteren signifikanten Effekten. Damit zeigt sich, dass die Spieler durchaus rational entscheiden.

Die Analyse der Interviews zu einzelnen Themen ist daneben ebenfalls vorangeschritten. Es werden im Einzelnen gezielt Aussagen über die Rolle der Medien und ihrer Berichterstattung, der wahrgenommenen Fairness und Transparenz der Endlagersuche sowie der Einfluss durch vergangene Entscheidungen untersucht.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Das Projekt kommt im August 2018 zum Abschluss. Dafür werden in den kommenden Monaten die Datenerhebung und –auswertung abgeschlossen. Die Analyse der medialen Berichterstattung wurde gemäß Projektantrag an einen Auftragnehmer abgegeben. Die Ergebnisse werden im März 2018 erwartet. Diese werden dann mit den Aussagen aus den Interviews zusammengeführt. Die experimentelle Analyse wird für den Fall teilbarer Güter in ähnlichen Szenarien fortgesetzt. Alle bis dahin erzielten Teilergebnisse werden überdies in interaktiven Interviews ausgewählten Experten vorgestellt und gemeinsam mit ihnen diskutiert.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Schmidt, H-M., Finantz, P., Wiens, M., Schultmann, F. (2017): WoPEE: A Web-oriented Platform for Economic Experiments. Presentation at the Jahrestagung der Gesellschaft für Experimentelle Wirtschaftsforschung, Kassel.

Schmidt, H-M., Wiens, M., Schultmann, F. (2017): The Search for a Final Repository in Germany: Results of a Series of Stakeholder Interviews and Economic Experiments. Presentation at the ENTRIA Final Conference 2017, Braunschweig.

Schmidt, H-M., Schindler, M., Wiens, M., Schultmann, F. (2017): Stakeholders' Perceptions of Gorleben and their Claims towards a new Approach. Presentation at the ENTRIA Final Conference 2017, Braunschweig.

Weitere Publikationen aktuell in Arbeit.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11365</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Lösungsverhalten von Spalt- und Aktivierungsprodukten im Nahfeld eines Endlagers (LÖVE)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2015 bis 31.05.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 827.281,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hagemann	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

- Ermittlung der Löslichkeitsgrenzen für Spalt- und Aktivierungsprodukte in salzhaltigen Wässern von norddeutschen Unterkreideton- und Steinsalzformationen
- Entwicklung von theoretischen Methoden zur Ableitung thermodynamischer Größen für Spalt- und Aktivierungsprodukte
- Abbau der Ungewissheiten in Bezug auf die geochemischen Eigenschaften dieser chemischen Elemente und Verbesserung der Belastbarkeit von Ergebnissen von geochemischen Modellrechnungen

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Auswertung von Korrosionsexperimenten an radioaktiven Abfällen
- Ermittlung von Bandbreiten für die Zusammensetzungen salzhaltiger Lösungen im Endlager
- Experimentelle Ermittlung maximaler Lösungskonzentrationen
- Ermittlung thermodynamischer Größen durch Schätzverfahren
- Geochemische Modellierung der Radionuklidlösungskonzentration im Nahfeld
- Ableitung von Löslichkeitsgrenzen
- Überprüfung der Auswirkung neuer oder aktualisierter Löslichkeitsgrenzen auf die Ergebnisse von Langzeitsicherheitsanalysen

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

Im Mittelpunkt der Arbeiten standen Löslichkeitsversuche in Lösungen, die an Halit und Anhydrit gesättigt waren. Die Versuche wurden so angesetzt, dass jeweils ein pH-Bereich von etwa 6,6 bis 11,5 abgedeckt war. Bei Elementen, bei denen eine Oxidation oder eine Löslichkeitsbeeinflussung durch Kohlendioxid zu befürchten war, erfolgten Ansatz und Versuchsdruckführung in einer Glove-Box. Eine Probenahme erfolgt mehrfach, um die Elementkonzentration unmittelbar nach Einstellung des pH-Wertes zu notieren und nach einer mindestens einmonatigen Wartezeit. Eine weitere Probenahme ist vorgesehen, um festzustellen, ob länger andauernde Umwandlungsprozesse die Löslichkeit beeinflussen. Eine Untersuchung der Bodenkörper folgt nach der dritten Probenahme. Derzeit erfolgt die Analyse der ersten und zweiten Probenahme.

Anhand bereits vorliegenden Daten lässt sich bereits jetzt schließen, dass die in chloridhaltigen Lösungen auftretenden löslichkeitsbestimmenden Festphasen häufig nicht diejenigen sind, die bislang für ähnliche Wässer angenommen wurden. Die tatsächlich beobachteten Phasen sind tendenziell stärker wasserhaltig und weisen eine eher höhere Löslichkeit auf. Es wird daher nötig sein sich mit den Bildungsbedingungen dieser Feststoffe näher zu befassen, um zuverlässige Aussagen über das Lösungsverhalten der betroffenen Spalt- und Zerfallsprodukte treffen zu können.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Fortsetzung der Versuche zur Bestimmung der Löslichkeit von Spaltelementen in ausgewählten salinaren Lösungen.

Untersuchung von Analogien und Korrelationen für ausgewählte Wechselwirkungen zwischen Spaltelement-Spezies und Hintergrundsazionen.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11385</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung von Monitoring-Konzepten in Anlehnung an Sicherheits- und Nachweiskonzepte sowie Ableitung von Entscheidungsgrößen und Reaktionsoptionen (MONTANARA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.4		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2015 bis 30.06.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 549.185,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Zuge des Vorhabens soll zunächst die Entwicklung von Monitoring-Konzepten für Endlager in einer Tonformation in Deutschland verfolgt werden. Diese Monitoring-Konzepte soll entwickelt werden auf der Basis des Monitoring Workflows, der im Rahmen des internationalen MoDeRn-Projektes erarbeitet wurde. Ein Monitoring-Konzept soll so ausgerichtet sein, dass es möglich ist, im Zusammenspiel mit dem Einlagerungskonzept bzw. der zeitlichen Abfolge der Einlagerung, die Möglichkeiten und Grenzen einer Überwachung nach Verschluss des Endlagers noch während der Betriebsphase zu bewerten. In Ergänzung dazu werden in analogerer Weise auch die konzeptionellen Überlegungen zum Monitoring eines Endlagers in einer Steinsalzformation aus dem MoDeRn Projekt weiterentwickelt.

Ein weiteres Teilziel ist die Entwicklung von sogenannten „Trigger Values“. Das sind Werte von Messgrößen oder zeitliche Entwicklung von Messgrößen, die, wenn sie erreicht werden, darauf hindeuten, dass das Endlagersystem möglicherweise nicht mehr der erwarteten Entwicklung also dem „Referenzszenario“ entspricht. Abschließend sollen mögliche Handlungsoptionen bei Erreichen von „Trigger Values“ erarbeitet werden sowie eine Einschätzung bzgl. der Effektivität eines Monitorings nach Verschluss des Endlagers. Aktuelle Arbeiten und Ergebnisse des Vorhabens sollen auf entsprechenden internationalen Workshops präsentiert und diskutiert werden, um eine möglichst breite internationale Akzeptanz der Konzeptionen zu erzielen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Weiterentwicklung Monitoring-Konzept für Endlager im Steinsalz
- AP2: Neuentwicklung Monitoring-Konzepte für Endlager im Tonstein
- AP3: Erzeugung synthetischer Monitoring-Ergebnisse und Ableitung von „Trigger Values“ für einzelne Endlagerkomponenten
- AP4: Handlungsoptionen bei Erreichen von „Trigger Values“ und offene Fragen
- AP5: Dokumentation der Ergebnisse

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

Als eine Randbedingung für die Entwicklung von Monitoring-Konzepten wurde vorgesehen, die Endlagerkonzepte aus dem Forschungsvorhaben ANSICHT zu verwenden, im Rahmen dessen ein Sicherheits- und Nachweiskonzept für ein Endlager in einer Tonformation in Deutschland entwickelt wurde. Aus den dortigen Endlagerkonzepten wird zunächst die Option vertikale Bohrlochlagerung verwendet. Zur Ausarbeitung eines Monitoring-Programms wird der „Parameter-Screening“ Prozess genutzt, der im Rahmen des MODERN2020 Projektes entwickelt wird. Dieser Screening Prozess hat zum Ziel, diejenigen Parameter zu identifizieren, die geeignet sind, Informationen über die Entwicklung des Endlagers im Bereich einzelner geotechnischer Barrieren zu liefern.

Im Berichtszeitraum wurde der Parameter-Screening Prozess mehrfach getestet und überarbeitet. Schlussendlich konnte eine Version erarbeitet werden, die eine geeignete Anwendung im Zusammenhang mit dem aktuellen Sicherheits- und Nachweiskonzept aus dem ANSICHT-Projekt ermöglicht. Diese Version des Parameter-Screening Prozesses wurde anschließend genutzt, um ein Monitoring-Konzept für den Verschluss der vertikalen Einlagerungsbohrlöcher zu erarbeiten.

Wesentliche Eingangsgrößen für die Parameterbestimmung sind die Prozesse, die im Verlauf der Zeit auf das Verschlussbauwerk einwirken. Gemäß dem Nachweiskonzept aus dem Projekt ANSICHT wurden unter Zuhilfenahme des darin entwickelten FEP-Kataloges diese einwirkenden Prozesse identifiziert. Nachdem alle diese Prozesse im Parameter-Screening Prozess behandelt wurden, ergaben sich insgesamt sieben Parameter, deren messtechnische Beobachtung es ermöglichen würde, die Entwicklung des Bohrlochverschlusses hinsichtlich seiner Abdichtfunktion zu bewerten.

Abschließend wurde damit begonnen, für die so ermittelten Parameter ein Konzept zur messtechnischen Erfassung zu entwickeln ohne die Barrierewirkung des Verschlussbauwerkes zu beeinträchtigen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Weiterentwicklung eines Monitoring-Konzeptes für das Endlagerkonzept der vertikalen Bohrlochlagerung, speziell des Verschlusskonzeptes, aus dem ANSICHT Projekt. Hierbei soll insbesondere Bezug genommen werden auf die Aussagen des Berichtes der Endlagerkommission, der Ende 2016 vorgelegt wurde und auf die Sicherheitsanforderungen, die seitens des BMUB im Jahr 2010 vorgelegt wurden.

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

Jobmann, M., Burlaka, V. & Kuate Simo, E. (2017): MODERN2020, WP2, Task 2.2, Screening of test cases, Test Case Report DBE TECHNOLOGY - The ANSICHT Case -, Internal Report, DBE TECHNOLOGY GmbH, Peine, Germany.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11395</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieften in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2015 bis 30.04.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 283.017,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Kühnlenz	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Dies schließt auch die Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein solches Endlager ein. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Gruben- gebäudekonzeption und Auslegungsberechnungen. Das zweite und dritte Teilziel sind die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedene Einlagerungsvarianten. Das vierte Teilziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagern in unterschiedlichen geologischen Formationen geschaffen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagenermittlung (DBE TEC)
- AP2: Erstellung von generischen geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern (BGR und IfG)
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (GRS)
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität (BGR und IfG)
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten (DBE TEC)
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen (GRS)
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit (DBE TEC)
- AP8: Synthesebericht (DBE TEC)

Die BGR ist gemeinsam mit IfG federführend für die AP2 und AP4 zuständig und weiterhin am AP6 beteiligt.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Der im Rahmen des AP2 zu erstellende Zwischenbericht „Entwicklung generischer geologischer Modelle für flachlagernde Salzformationen (KOSINA)“ wurde fertiggestellt und befindet sich im Druck. Den Projektpartnern liegt der Bericht im Entwurf vor.

Die Arbeiten im AP4 konzentrieren sich auf die thermomechanischen Berechnungen zur Überprüfung der Integrität.

Durch IfG wurde eine Simulation zur Schädigung des Gebirges im Hangenden bei Mehrsohlenabbau durchgeführt (Week-Island-Versagensfall). Ziel der Simulation war, die Wegsamkeiten der Fluide zu zeigen und das Absaufen der Grube zu erklären. Mit den zur Verfügung stehenden Daten konnte der Versagensfall im Modell gut abgebildet werden.

Die von der BGR durchgeführten TM-Berechnungen haben gezeigt, dass die unterschiedlichen im Vorhaben KOSINA betrachteten Einlagerungsvarianten „Direkte Endlagerung von Transport- und Lagerbehältern“ und „Endlagerung in vertikalen Bohrlöchern“ ein vergleichbares Verhalten aufweisen. Bei der Variante „Direkte Endlagerung von Transport- und Lagerbehältern“ ist der Temperatureintrag auf eine größere Fläche verteilt. Dies führt zu geringeren Hebungen an der Geländeoberkante und am Salzspiegel sowie zu geringeren Verletzungen der Integritätskriterien als bei der vertikalen Bohrlochlagerung. Dabei sind keine Bedenken bezüglich der Einschlusswirksamkeit des ewG zu erwarten. Basierend auf den Integritätskriterien ist keine der Varianten zu bevorzugen.

Es wurden Vergleiche zwischen den thermomechanischen Berechnungen von BGR und IfG durchgeführt. Die Unterschiede, die bei den thermisch induzierten Hebungen auftreten, lassen sich durch Unterschiede bei den 2D- und 3D-Simulationen und die unterschiedlichen Herangehensweisen bei der Modellierung des Deckgebirges sowie vergleichsweise kleine Unterschiede bei der Temperaturentwicklung erklären. In Bezug auf Integritätsaussagen sind diese Unterschiede aber nicht relevant.

Zum Vergleich wurde das VSG-Modell von IfG mit KOSINA-Parametern berechnet. Es hat sich ergeben, dass die Eindringtiefe der Verletzung des Minimalspannungskriteriums etwa 100 m tiefer als im KOSINA-Modell für die flache Lagerung liegt. Dieses Ergebnis ist auf eine größere Teufe der Einlagerungssohle im VSG-Modell und auf Besonderheiten der geologischen Struktur (steil einfallende Schichtgrenzen) zurückzuführen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Der Bericht „TM- und THM-gekoppelte Modellberechnung zur Integritätsanalyse der geologischen Barrieren in flach lagernden Salzformationen“ (AP4) wird fertiggestellt.
- Der Bericht „Zusammenstellung der Materialparameter für THM-Modellberechnungen“ (AP4/AP2) wird fertiggestellt.
- Erstellung des Syntheseberichtes. Sprache: Englisch.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Völkner, E., Kühnlenz, T., Hammer, J., Gast, S. (2017): Entwicklung generischer geologischer Modelle für flach lagernde Salzformationen (KOSINA). Zwischenbericht, 80 S.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11405A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2015 bis 30.04.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 650.107,83 EUR	<b>Projektleiter:</b> Bollingerfehr	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Dies soll auch die Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein solches Endlager einschließen. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Grubengebäudekonzeption und Auslegungsberechnungen. Das zweite und dritte Teilziel sind die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedenen Einlagerungsvarianten. Das vierte Teilziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen geschaffen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagersystemen in unterschiedlichen geologischen Formationen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen ermitteln und zusammenstellen
- AP2: Erstellung von generischen geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit
- AP8: Synthesebericht

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend zuständig für AP1, AP5, AP7 und AP8

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

Die Planungsarbeiten im AP5 "Entwicklung von Endlagerkonzepten" wurden für alle vier Einlagerungsvarianten für die beiden betrachteten geologischen Typen "flache Lagerung" und "Salzkissen" abgeschlossen und in einem Berichtsentwurf dokumentiert. Die zusätzlichen thermomechanischen Berechnungen zum Vergleich der Konvergenz an sicherheitsrelevanten Stellen im Endlager bei Auslegungstemperaturen von 100 °C und 200 °C wurden durchgeführt. Ebenso wurden die Planungen zu Verfüll- und Verschlussmaßnahmen weitergeführt.

Die Arbeiten zur Analyse der Betriebssicherheit wurden abgeschlossen und in einem AP-Berichtsentwurf dokumentiert. Die Betriebsabläufe für die vier Einlagerungsvarianten sowie dazugehöriger sicherheitsrelevanter Komponenten, Einrichtungen und Prozesse wurden untersucht, beschrieben und für die Variante Horizontale Bohrlochlagerung neu bewertet.

Mit den Projektpartnern wurden der Umfang und die Struktur des gemeinsamen Syntheseberichtes (in English) abgestimmt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Schwerpunkt der Arbeiten wird der Abschluss der Arbeiten im AP5 "Entwicklung von Endlagerkonzepten" und AP7 "Bewertung der Betriebssicherheit" sein sowie die entsprechende Dokumentation der Ergebnisse in AP-Berichten.

Darüber hinaus wird zusammen mit den Partnern der Synthesebericht in English erstellt, abgestimmt und veröffentlicht werden.

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

Bollingerfehr, W., Bertrams, N., Filbert, W., Prignitz, S., Kuate Simo E.: Repository Designs in Bedded Salt, the KOSINA-Project, Middelburg (NL), September 2017

Kuate Simo, E., Bollingerfehr, W., Bertrams, N., Filbert, W., Prignitz, S.: Auslegung eines HAW-Endlagers in flachlagernden Salzformationen - das KOSINA Projekt. - 46. Geomechanik-Kolloquium, Leipzig, November 2017

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11405B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2015 bis 30.04.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 525.090,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kindlein	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Dies soll auch die Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein solches Endlager einschließen. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Grubengebäudekonzeption und Auslegungsberechnungen. Das zweite und dritte Teilziel sind die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedenen Einlagerungsvarianten. Das vierte Teilziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen geschaffen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagersystemen in unterschiedlichen geologischen Formationen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen ermitteln und zusammenstellen
- AP2: Erstellung von generischen, geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit
- AP8: Synthesebericht

GRS ist federführend für die Arbeitspakete 3 und 6.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Es wurden im Berichtszeitraum insgesamt 3 Arbeitsgespräche mit den vier am Projekt beteiligten Organisationen (GRS, BGR, DBE TECHNOLOGY und IfG) durchgeführt. Die diskutierten Inhalte betrafen die Ergebnisse der geologischen, geomechanischen und radiologischen Modellrechnungen, die Verfüll- und Verschlusskonzepte sowie die Inhalte und Gliederungen der Abschlussberichte.

Die Arbeiten in den Arbeitspaketen waren:

AP2: Prüfung und Kommentierung des Abschlussberichts.

AP3: Erstellung des Abschlussberichts für Sicherheits- und Nachweiskonzepte für ein Endlager in flach lagernden Salzstrukturen sowie des Konzepts für den Umgang mit Ungewissheiten.

Der Entwurf des Abschlussberichts wurde fertiggestellt und mit den Projektpartnern diskutiert. Änderungswünsche und Kommentare wurden in einer Überarbeitung des Berichtes berücksichtigt.

AP4: Diskussion der geomechanischen Modellrechnungen zur Integritätsanalyse für den Typ Salzkissen. Bewertung der Ergebnisse bezüglich Einschlusswirksamkeit des ewG.

AP5: Diskussion von Verfüll- und Verschlusskonzepten. Ableitung von technischen Maßnahmen für die Position und die Materialien der Strecken- und Schachtverschlusskomponenten. Untersuchungen zur Konvergenzentwicklung.

AP6: Durchführung von radiologischen Modellrechnungen, Diskussion der Ergebnisse.

Die Arbeiten zur radiologischen Konsequenzenanalyse wurden im Berichtszeitraum fortgeführt. Insbesondere wurden weitere deterministische Modellrechnungen für die Endlagervarianten horizontale und vertikale Bohrlochlagerung durchgeführt und Modellfehler behoben. Zusätzliche Parametervarianten und What-If-Rechenfälle zur Untersuchung des Einflusses des Behälterausfalls sowie der Nuklidmobilisierung wurden durchgeführt. Die Durchführung probabilistischer Rechnungen für die Endlagervariante Streckenlagerung wurde vorbereitet, statistische Parameter (Verteilungsfunktionen, Bandbreiten) abgeleitet. Methodik und Ergebnisse der radiologischen Konsequenzenanalyse wurden im September auf dem 8. US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation in Middelburg/NL vorgestellt.

AP8: Entwurf des gemeinsamen Abschlussberichts. Inhalt und Aufbau des Syntheseberichts wurden diskutiert, eine vorläufige Gliederung erstellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP3: Berichtsfertigstellung.

AP4: Diskussion des Berichtsentwurfs.

AP5: Diskussion des Berichtsentwurfs.

AP6: Auswertung von probabilistischen Modellrechnungen. Berichterstellung.

AP8: Fertigstellung des gemeinsamen Abschlussberichtes.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11405C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b>  01.07.2015 bis 28.02.2018	<b>Berichtszeitraum:</b>  01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b>  599.728,00 EUR	<b>Projektleiter:</b>  Dr. Minkley	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, erstmalig ein technisches (standortunabhängiges) Konzept sowie die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente auf der Grundlage generischer geologischer Modelle für flach lagernde Steinsalzformationen zu entwickeln. Das erste Teilziel ist die Herleitung von generischen geologischen Modellen inklusive Modellparametern als Grundlage für die Grubengebäudekonzeption und Auslegungsberechnungen. Ein zweites Teilziel ist die Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes sowie die Entwicklung von technischen Konzepten für Endlagerbergwerke für vier verschiedenen Einlagerungsvarianten. Ein weiteres Ziel ist die Überprüfung der Ausweisbarkeit eines einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (Integritäts- und Konsequenzenanalyse für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle in der flachen Lagerung). Insgesamt werden mit dem Vorhaben technisch-wissenschaftliche Grundlagen geschaffen für eine sicherheitstechnische Bewertung von Endlagersystemen in unterschiedlichen geologischen Formationen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Grundlagen ermitteln und zusammenstellen
- AP2: Erstellung von generischen geologischen Modellen, Ableitung von Modellparametern
- AP3: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes
- AP4: Analyse der geomechanischen Integrität
- AP5: Entwicklung von Endlagerkonzepten
- AP6: Analyse der radiologischen Konsequenzen
- AP7: Bewertung der Betriebssicherheit
- AP8: Synthesebericht

Das IfG ist gemeinsam mit BGR federführend für die AP2 und AP4 zuständig und führt ergänzende Untersuchungen zur Dichtheit von Salzgesteinen und zur Fluidperkolation durch.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nach Abschluss der geomechanischen Berechnungen zur Integritätsanalyse des generischen Modells zur „Flache Lagerung“ wurden die Arbeiten zur Integritätsanalyse für die verschiedenen Einlagerungs-Konstellationen für den Typ „Salzkissen“ durchgeführt. Unter Berücksichtigung der verschiedenen Einlagerungsvarianten (u. a. vertikale Bohrlochlagerung, direkte Endlagerung von CASTOR-Transportbehältern) wurden vom IfG 3D-Streifenmodelle betrachtet. Dabei wurden explizit die Grubenbaue des Endlagerbergwerks mit den Einlagerungsstrecken und dem Versatz berücksichtigt und abgebildet. Die thermo-hydro-mechanisch gekoppelten Simulationen zeigen eine lokale Verletzung des Minimalspannungskriteriums am Salzspiegel im Zentrum über dem Einlagerungshorizont infolge der thermische Expansion und des Hebungsprozesses im Gebirge. In diesem Bereich, in dem die minimale Hauptspannung unter den anstehenden Grundwasserdruck abgefallen ist, dringt druckgetrieben in Richtung der größten Hauptspannung, die im Zentrum über dem Einlagerungshorizont vertikal ausgerichtet ist, Salzlösung in die Barriere. Die Eindringtiefe in die Barriere liegt in der Größenordnung von 60 m, sodass in den Berechnungen ein über 500 m mächtiger Bereich der Salarbarriere über dem Einlagerungshorizont verbleibt, in dem zu keinem Zeitpunkt eine Kriterienverletzung bzw. Fluidperkolationsausweisung ausgewiesen wird. Ergänzend wurden Parameterstudien zu Einflüssen der Deckgebirgsmodellierung und der Umsetzung der thermischen Leistung durchgeführt.

Parallel dazu wurde zur Überprüfung und Validierung der Berechnungsmodelle zur Integritätsanalyse eine Backanalyse zum Versagensfall einer geologischen Barriere durch fluiddruck-getriebene Perkolationsentlang diskreter Fließwege im Salzgestein durchgeführt. Diese Rückrechnung war Voraussetzung für eine Validierung der THM-gekoppelten Modellrechnungen zum Nachweis der Integrität der geologischen Barriere.

Zur Überprüfung der Hypothese (Ghanbarzadeh et al., 2015) zum Dichtheitsverlust von Steinsalz bei hohen Temperaturen und Drücken wurden weitere Untersuchungen zur Dichtigkeit und Fluidperkolations von Salzgesteinen durchgeführt. Die Versuche wurden bei Einspannungen und Temperaturen durchgeführt bei denen nach der Hypothese Steinsalz permeabel sein müsste. Die experimentellen Untersuchungen an natürlichen Steinsalzproben zeigen dagegen einen Verlust der Dichtheit erst bei Überwindung der minimalen Hauptspannung, die als Perkolationschwelle unabhängig von Temperatur und Druck wirksam ist. Die Hypothese, dass die Perkolationschwelle bei hohen Drücken und Temperaturen verloren geht, ist durch die Versuche an natürlichen Steinsalzproben widerlegt und damit die Grundannahme der Theorie falsifiziert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Erarbeitung Abschlussbericht und Synthesebericht.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Salt Club am 04.09.2017 in Middelburg (NL): es wurde ein Vortrag zur Fluidperkolations in Salzgesteinen gehalten.

Waste Management Conference im März 2018 in Phoenix: es wurden vom IfG zwei Vorträge zur Dichtigkeit von Salzgesteinen und Fluidperkolations sowie zu THM-gekoppelten Berechnungen zur Barriereintegrität für ein HLW-Endlager in flach lagernde Steinsalzformationen eingereicht.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johannes Gutenberg-Universität Mainz, Saarstr. 21, 55122 Mainz		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11415A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2015 bis 31.08.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 431.000,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Reich	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die geochemische Wechselwirkung der Actiniden Np, Pu und des Spaltproduktes Tc mit Zementkorrosionsphasen sowie die Vorgänge an der Grenzfläche zwischen Beton und natürlichem Tongestein bzw. Bentonit werden bei mittleren und hohen Ionenstärken untersucht. Bei den Studien mit Pu wird auch der Einfluss organischer Zusätze auf dessen Sorption an Zementphasen betrachtet. Der Schwerpunkt der Studien soll bei den drei- und vierwertigen Actiniden und beim vierwertigen Technetium liegen. Teilweise sollen aber auch Np(V) und Tc(VII) zum Vergleich mit in die Untersuchungen einbezogen werden. Zur Identifizierung der wichtigsten Prozesse bei der Radionuklidrückhaltung sollen die Sorptions- und Diffusionsexperimente mit Speziationsmethoden (XAFS, XRD, XPS, CE-ICP-MS) gekoppelt werden. Diese Daten sollen es ermöglichen, die wichtigsten Prozesse wie Sorption und Diffusion zu modellieren und auf molekularer Ebene zu verstehen, so dass Vorhersagen im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse gemacht werden können. Im Rahmen des Verbundprojekts wird schwerpunktmäßig mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, dem Karlsruher Institut für Technologie, der Universität des Saarlandes und der TU München zusammengearbeitet.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Untersuchung des Einflusses von Zementalterationsphasen auf die Migration von Np, Pu und Tc in Portlandzement
- Einfluss von organischen Zementadditiven auf die Sorption von Plutonium an Zementphasen
- Untersuchung der Diffusion von Np, Pu und Tc in Tongestein unter hyperalkalinen Bedingungen
- Untersuchung der Sorption von Pu und Tc an Ca-Bentonit und ihrer Diffusion in kompaktiertem Ca-Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

In Batch-Experimenten wurde der Einfluss von verdünnter Gips-Lösung (VGL) im Vergleich zu MilliQ-Wasser auf die Sorption von  $10^{-7}$  M U(VI) an Calcium-Silicat-Hydrat (CSH)-Phasen (5,0 g/L) mit unterschiedlichen Ca:Si-Verhältnissen (C:S) untersucht. In der VGL konnte nach dem Zentrifugieren kein Uran mit ICP-MS bestimmt werden. Unter Berücksichtigung der Nachweisgrenze des Messverfahrens liegt die Sorption von U(VI) bei  $> 99$  %. Für die Sorption in MilliQ-Wasser wurden Verteilungskoeffizienten für U(VI) mit  $\log K_d = 4,1 - 5,7$  ermittelt.

Eine ähnlich hohe Sorption ( $\log K_d = 4,1 - 5,9$ ) an CSH-Phasen ( $0,7 \leq C:S \leq 1,8$ ) in MilliQ-Wasser wurde für  $10^{-13}$  M Th(IV) beobachtet. Dabei lag der pH-Wert zwischen 10,0 und 12,5. Anschließend wurde mit einige Proben ( $1,1 \leq C:S \leq 1,8$ ) untersucht, ob in VGL durch die Erniedrigung des pH-Wertes auf 8,3 Th(IV) innerhalb von einer Woche mobilisiert werden kann. Bei allen Proben wurde weniger als 1 % des an die CSH-Phase gebundenen Th(IV) desorbiert. Kinetische Studien mit  $10^{-13}$  M Th(IV) zeigten, dass bereits nach 20 min mehr als 99 % des Th ( $\log K_d = 4,4 - 4,6$ ) an der CSH-Phase (C:S 0,75, S/L 5,0 g/L) sorbiert ist.

Die Sorption von  $7 \times 10^{-12}$  M Np(V) an Opalinuston ( $0,5 \leq S/L 20,0$  g/L) wurde sowohl in VGL (pH 8,0) als auch in einem aus VGL und Zementstein hergestellten Zementporenwasser (VGL-CW, pH 12,6) unter Argon-Atmosphäre bestimmt. Die mittleren  $\log K_d$ -Werte für beide Messreihen betragen  $\approx 3,0$ .

Pu L<sub>3</sub>-Kante XANES-Messungen an der Rossendorf Beamline (ESRF) zeigten, dass bei der Sorption von  $5 \times 10^{-6}$  M Pu(III) an Zementsteinpulver (HCP) in VGL und auch in VGL-CW das eingesetzte Pu(III) zu Pu(IV) oxidiert wird. Die aus den Pu L<sub>3</sub>-Kante EXAFS-Spektren erhaltenen Strukturparameter weisen auf die Bildung eines mononuklearen Oberflächenkomplexes von Pu(IV) mit den CSH-Phasen des Zements hin. Für die Sorption von  $1 \times 10^{-5}$  M Pu(III) an CSH-Phasen in MilliQ-Wasser konnte durch Pu M<sub>5</sub>-Kante HR-XANES-Messungen an der CAT-ACT Beamline (KIT) gezeigt werden, dass das von den CSH-Phasen aufgenommene Pu vierwertig ist.

Zur Untersuchung der Diffusion von <sup>99</sup>Tc(VII) in Bentonit mit VGL als mobile Phase wurden insgesamt vier Diffusionsexperimente unter Argon-Atmosphäre bei  $26 \pm 2$  °C und zwei Experimente an Luft bei 60 °C gestartet. Weiterhin wurde mit der Erprobung des Prototyps einer Diffusionszelle für Diffusionsexperimente mit Zementstein begonnen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Batch-Versuche zur Sorption von Actiniden an CSH-Phasen in VGL-CW
- Untersuchung des Einflusses von Gluconat auf die Sorption von Pu(III) an Zementstein
- Abschluss der EXAFS-Untersuchungen zur Wechselwirkung von Pu mit Zementstein und CSH-Phasen
- Fortführung der Experimente zur Diffusion von Tc(VII) in kompaktiertem Ca-Bentonit
- Charakterisierung des Zementsteins in dem Prototyp der Diffusionszelle mittels HTO-Diffusion und anschließend Diffusionsversuche mit Tc(VII) und Np(V)

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Y. Ishikawa: Sorption von Thorium an Calcium-Silicat-Hydrat-Phasen, 2017, Bachelorarbeit.  
 V. Häußler, S. Amayri, T. Reich: Uptake of Actinides by Calcium Silicate Hydrate (CSH) Phases, Poster auf der 16th International Conference on the Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere (MIGRATION 2017), 10.09.-15.09.2017, Barcelona, Spanien

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11415B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2015 bis 31.08.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 638.860,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Schmeide	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel des Vorhabens sind Beiträge zur Verbesserung des Verständnisses dominierender Prozesse für die Mobilisierung bzw. Immobilisierung von Radionukliden auf molekularer Ebene sowie die Bestimmung quantitativer Parameter zur geochemischen Radionuklidrückhaltung an endlagerrelevanten Festphasen. Im Detail wird das Rückhaltevermögen von Zementphasen und Tonmaterialien gegenüber Radionukliden (Cm, Eu, U, Tc) unter hyperalkalinen Bedingungen bei mittleren bis hohen Ionenstärken mittels Batch- und Diffusionsexperimenten untersucht. Durch Einsatz spektroskopischer Methoden sollen gebildete Oberflächenkomplexe bzw. der strukturelle Einbau der Radionuklide in die Mineralphasen auf molekularer Ebene spezifiziert und über längere Zeiträume verfolgt werden, um eine mögliche Freisetzung von Radionukliden infolge von veränderten Umgebungsparametern aufzuzeigen. Ein weiteres Ziel besteht in der Bereitstellung verbesserter Bewertungsgrundlagen zum Einfluss polymerer Zementfließmittel (Superplasticizer) auf das Adsorptionsverhalten von Radionukliden im Freisetzungsfall. Am Beispiel von Polycarboxylatethern (PCE) als aktuelle Generation von Superplasticizern sollen die Bedingungen für eine verringerte adsorptive Immobilisierung von Actiniden-Analoga an Zementphasen und Tonmaterialien festgestellt werden. Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit den Förderprojekten der Universitäten Mainz, Dresden, Saarbrücken, München, Heidelberg, Potsdam und des Karlsruher Instituts für Technologie.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Spektroskopische Untersuchung der Stabilität von Radionuklid-dotierten Zementphasen (Cm, U und Tc)
- AP2: Spektroskopische Untersuchung der Stabilität von Radionuklid-dotierten Tonmineralphasen (Cm, U und Tc)
- AP3: Untersuchung der Sorption und Diffusion von U an/in Tongestein und Ca-Bentonit unter hyperalkalinen Bedingungen
- AP4: Untersuchung der Komplexbildung von Eu mit polymeren Zementfließmitteln (Polycarboxylatether)
- AP5: Synthese und Charakterisierung <sup>14</sup>C-markierter Polycarboxylatether
- AP6: Untersuchung des Einflusses polymerer Zementfließmittel (Polycarboxylatether) auf die Adsorption von Eu an Zementphasen
- AP7: Untersuchung des Einflusses polymerer Zementfließmittel (Polycarboxylatether) auf die Adsorption von Eu an Tongestein und Ca-Bentonit
- AP8: Entwicklung geochemischer Modelle
- AP9: Methodenentwicklung

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zur Beurteilung der Stabilität von Cm(III)-dotierten CSH-Phasen (Ca:Si-Verhältnis 1,0 und 2,0) bei höheren Ionenstärken wurden Batch-Laugungsexperimente mit endlagerrelevanten Salzlösungen (2,5 M NaCl/0,02 M NaHCO<sub>3</sub> und 0,02 M NaHCO<sub>3</sub>) durchgeführt. Nach 30 bzw. 60 Tagen wurde die Cm(III)-Konzentration in der überstehenden Lösung bestimmt. Es zeigte sich, dass das Laugen kein Cm(III) aus der Festphase mobilisiert. Vor und nach der Laugung wurden die Cm(III)-dotierten CSH-Phasen mittels site-selektiver Laserfluoreszenzspektroskopie untersucht, um Änderungen der Cm(III)-Speziation durch die Laugung zu detektieren. Die Ergebnisse zeigten, dass im Fall der CSH-Phase mit einem Ca:Si-Verhältnis von 1,0 der Kontakt mit carbonathaltigen Lösungen zu einer partiellen Umwandlung der Cm(III)-Koordinationsumgebung von CSH hin zu Sekundärphasen wie Calcit und Vaterit führt. Für die CSH-Phase mit dem Ca:Si-Verhältnis von 2,0 wurde diese Änderung nicht beobachtet. Eine Änderung der Cm(III)-Retention oder der Cm(III)-Koordinationsumgebung durch die Gegenwart von 2,5 M NaCl wurde nicht beobachtet.

Um den Einfluss der verschiedenen Umgebungsparameter im komplexen System Ca-Bentonit – verdünnte Gipshuttlösung – U(VI) besser quantifizieren zu können, wurden weiterführende Batch-Sorptionsversuche im Ca-freien System Na-Montmorillonit – NaCl-Lösung (2,6 und 0,1 M) – U(VI) durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, dass die U(VI)-Sorption durch die hohen Calciumgehalte der Gipshuttlösung lediglich im pH-Bereich  $\leq 9,5$  durch die Bildung ternärer Calciumuranylcarbonat-Komplexe beeinflusst wird. Gegenüber dem Tricarbonat-Komplex zeichnen sich diese Komplexe durch eine noch geringere Sorptionsaffinität aus. Hingegen ist das Sorptionsverhalten im pH-Bereich  $>10$  in beiden Systemen nahezu identisch. Die Versuche in 0,1 M NaCl verdeutlichen, dass die Ionenstärke einen sehr geringen Einfluss auf das U(VI)-Sorptionsverhalten im untersuchten pH-Bereich hat. Allen untersuchten Systemen gemein ist eine extrem starke U(VI)-Rückhaltung im pH-Bereich 10-12. Die entsprechenden Sorptionskomplexe konnten mit site-selektiver Laserfluoreszenzspektroskopie auf dem Feststoff detektiert werden.

Gegenstand weiterer Arbeiten war das Mobilisierungsvermögen polymerer Zementfließmittel gegenüber Actiniden im Freisetzungsfall. Mittels <sup>152</sup>Eu als Analogtracer wurde der Einfluss eines kommerziellen Superplasticizers (PCE-Basis, MasterGlenium® 51) auf die Adsorption an Ca-Bentonit bei pH 11 unter Ausschluss von CO<sub>2</sub> untersucht, wobei die Haupt-Elektrolytbestandteile NaCl und CaCl<sub>2</sub> in Konzentrationen bis 4 M zugegeben wurden. Bisherige Ergebnisse lassen auf einen Carrier-Effekt schließen, der stark vom Elektrolytgehalt abhängig ist.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Um im System U(VI)/Ca-Bentonit zwischen Oberflächenkomplexierung und -ausfällung unterscheiden zu können, werden XAS-Messungen an der ESRF in Grenoble durchgeführt. Weiterhin sollen pH-induzierte Veränderungen der Tonoberfläche (Mineralauflösungen, Mineralumwandlungen, Mineralneubildungen) mit Hilfe von AFM und CTR/RAXR betrachtet werden, um deren Einfluss auf das Retentionsverhalten von Radionukliden abschätzen zu können.

Untersuchung der [<sup>152</sup>Eu]Eu(III)-Adsorption in An- und Abwesenheit von PCE an Ca-Bentonit bei Variation von pH-Wert (9-13) und Ionenstärke (0-4 M NaCl bzw. CaCl<sub>2</sub>) unter CO<sub>2</sub>-Ausschluss.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Philipp, T., Schmeide, K., Stumpf, T.: Retention of uranium(VI) by Ca-bentonite at high ionic strength and high pH studied by batch sorption tests and TRLFS. Posterbeitrag: 7th International Conference on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement, 24.-27.09.2017, Davos, Schweiz.

Lippold, H.: Radiotracer exchange studies for gaining direct insight into the equilibrium characteristics of elementary processes determining humic-bound metal transport. Vortrag: GeoBremen 2017, 24.-29.09.2017, Bremen, Deutschland.

Wolter, J.-M., Schmeide, K., Stumpf, T.: Interactions between U(VI) doped CSH phases and high saline brines. Posterbeitrag: Migration 2017, 10.-15.09.2017, Barcelona, Spain.

Philipp, T., Schmeide, K., Stumpf, T.: U(VI) sorption by Ca-bentonite under alkaline and saline conditions as a function of pH and carbonate content. Posterbeitrag: Migration 2017, 10.-15.09.2017, Barcelona, Spain.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11415C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2015 bis 31.08.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 559.679,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Marquardt	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Forschungs- und Entwicklungs-Aktivitäten (FuE) dieses Vorhabens befassen sich mit anwendungsbezogener, standortunabhängiger Grundlagenforschung auf dem Gebiet der Entsorgung, insbesondere Wärme entwickelnder und langlebiger radioaktiver Abfälle. Sie haben zum Ziel, wissenschaftlich-technische Grundlagen zur Realisierung eines Endlagers für radioaktive Abfälle bereitzustellen, den Stand von Wissenschaft und Technik ständig weiterzuentwickeln sowie zum Aufbau, Weiterentwicklung und Erhalt der wissenschaftlich-technischen Kompetenz und Nachwuchsförderung im Bereich der nuklearen Entsorgung in Deutschland beizutragen. Im Rahmen des Projekts wird das geochemische Verhalten von Actiniden in simulierten Grundwässern bzw. Porenwässern–, die im Kontakt mit Betonbauwerken stehen, untersucht. Hierbei wird zum einen die Actinidwechselwirkung mit gelösten organischen Komplexbildnern wie z. B. den bei der Betonherstellung verwendeten Plasticizern und Superplasticizern untersucht. Des Weiteren wird die Actinidsorption an Tonmineralphasen in Gegenwart anionischer Liganden ( $\text{CO}_3^{2-}$ , Gluconat, Citrat) quantifiziert. Anhand experimenteller Daten werden geochemische Modelle entwickelt sowie Daten und Parameter abgeleitet, die für Sicherheitsanalysen Verwendung finden können.

Die Arbeiten finden in enger Zusammenarbeit mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, den Universitäten Mainz, Potsdam, Heidelberg, Köln, Saarbrücken sowie der TU Dresden und TU München statt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Radionuklidrückhaltung im System Zement-, Zementkorrosionsprodukten bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- AP2: Radionuklid-Rückhaltung durch Sorption am Tonmineral Illit bei mittleren bis hohen Ionenstärken
- AP3: Thermodynamische Modellierung:
- AP4: Methodenentwicklung: Analytik, Spektroskopie, Quantenchemie

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Rahmen des AP1 wurden detaillierte Studien zur Löslichkeit von Th(IV) in Anwesenheit von Gluconat (GLU) und Citrat (CIT) als organische Zementadditive bzw. Modellliganden durchgeführt. Als Hintergrundelektrolyte wurden NaCl (0.5 M, 2.5 M, 5 M), CaCl<sub>2</sub> (0.25 M, 1 M, 3.5 M) und MgCl<sub>2</sub> (0.25 M, 1 M, 3.5 M) verwendet. Mit insgesamt 180 Proben wurden sowohl die pH- als auch die Ligand-Konzentrationsabhängigkeit (pH 7 – 14, CIT- bzw. GLU-Konzentration von 10<sup>-5</sup> bis 10<sup>-1</sup> M) untersucht. Es wurden 3 Probennahme-Kampagnen in einem Zeitraum von 6 Monaten durchgeführt. Eine Erhöhung der Th(IV)-Löslichkeit tritt in allen Systemen bei GLU/CIT-Konzentrationen > 10<sup>-4</sup> M auf. Dies kann auf die Bildung verschiedener Th(IV)-GLU- bzw. Th(IV)-CIT-Komplexe zurückgeführt werden (je nach Hintergrundelektrolyt und pH-Wert können verschiedene Komplexe gebildet werden). Die Ergebnisse der Experimente in NaCl und MgCl<sub>2</sub> sind dabei komplementär. Bei Ligandkonzentrationen ≥ 10<sup>-2</sup> M scheint die Löslichkeitskurve in ein Plateau mit einer Konzentration (mol/L) an gelöstem Th(IV) von ungefähr log [Th(IV)] = -5 zu laufen. Diese Ergebnisse deuten auf die Bildung einer Th(IV)-GLU-Festphase hin. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse der Th(IV)-Löslichkeitsexperimente werden nun ausgewählte Np(V)-Löslichkeitsexperimente durchgeführt. Die hierfür benötigten Np(V)-Festphasen wurden bereits synthetisiert und charakterisiert.

Im Rahmen von AP2 wurde die Sorption von Eu(III) an Illit (Na-IdP-2, 1 g/L) in Abhängigkeit von der GLU-Konzentration (1·10<sup>-5</sup>-1·10<sup>-2</sup> M) in verdünnten und konzentrierten NaCl-Lösungen (0.1, 1, 3 M NaCl) untersucht. Experimente wurden auf den für Lösungen, die mit Zement in Kontakt stehen, relevanten pH-Bereich von pH = 9 - 12 beschränkt. Bis zu einer GLU-Konzentration von 5·10<sup>-4</sup> M zeigt sich kein Einfluss auf das Sorptionsverhalten (log K<sub>d</sub> ~ 6). Bei einer weiteren Erhöhung der GLU-Konzentration beobachtet man eine signifikante Reduktion der Eu(III)-Sorption. Ab einer GLU-Konzentration von 3·10<sup>-3</sup> M erreicht die Sorptionskurve ein Minimum mit log K<sub>d</sub> ~ 3-4. Log K<sub>d</sub> bleibt bei einer weiteren Konzentrationserhöhung weitgehend konstant. Somit kann ein unterer Konzentrations-Grenzwert von 5·10<sup>-4</sup> M GLU festgelegt werden, bis zu welchem kein mobilisierender Effekt für Eu(III) durch die Anwesenheit von GLU zu beobachten ist. Ab einer Konzentration von 3·10<sup>-3</sup> M GLU nimmt die Eu(III) Sorption nicht weiter ab.

Weiterhin wurde eine Eu(III)-Sorptionsstudie in Anwesenheit von CIT (0.001 M) bei gleichzeitiger Abwesenheit von CO<sub>2</sub> in NaCl- und CaCl<sub>2</sub>-Lösungen (0.1 M, 1 M, 3 M NaCl und 0.06 M, 0.6 M, 2 M CaCl<sub>2</sub>) und einer Feststoffkonzentration 1 g/L (Na-IdP-2) durchgeführt. Die CIT-Konzentration wurde so ausgewählt, dass keine Übersättigung bzgl. der Festphase Ca<sub>3</sub>(CIT)<sub>2</sub>:4H<sub>2</sub>O(s) auftritt. Überraschenderweise findet man unter diesen Bedingungen im pH-Bereich 8-12.5 keine Verminderung der Eu(III) Sorption. Interpretation der Sorptionsdaten und ihre Modellierung mit Hilfe eines Oberflächenkomplexierungsmodells stehen noch aus.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Abschließende Untersuchungen der Th(IV)-Löslichkeitsproben (gegebenenfalls Untersuchung der gebildeten Festkörper mittels XRD, SEM-EDX etc., Abschluss der Probennahme für Th(IV)-GLU in NaCl bzw. CaCl<sub>2</sub> usw.)
- Modellierung der Löslichkeitsexperimente von Th(IV) in Anwesenheit von Citrat und Gluconat.
- Vorbereitung von Publikationen der Th(IV)- und U(VI)-Screeningexperimente sowie der Th(IV)-Löslichkeitsexperimente in Anwesenheit von GLU in NaCl-Systemen
- Durchführung von "Screening-Experimenten" für Np(V)-Systeme auf Basis der Ergebnisse der Löslichkeitsexperimente mit Th(IV).
- Experimente zur Sorption von Eu(III) an Illit bei verschiedenen Gluconat-Konzentrationen in CaCl<sub>2</sub> Elektrolytlösungen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität des Saarlandes, Campus, 66123 Saarbrücken	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11415D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt D	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2015 bis 31.08.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 458.021,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kickelbick

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Zu Projektbeginn werden Korrosionsprodukte von Zementstein bzw. auch von ausgewählten Betonproben inklusive der organischen Zementzusätze unter den Bedingungen eines Standorts in Tongestein unter hochsalinaren Bedingungen untersucht. Insbesondere wird Portlandzement (PZ Doppel N CEM I 42,5 N) ohne bzw. mit typischen organischen Zementzusätzen (beispielsweise Glenium 51) studiert werden. Dabei wird untersucht, welche Formationswässer sich im Kontakt mit mittleren bis hohen Salinitäten ausbilden und welche Korrosionsprodukte unter solchen Bedingungen entstehen. Zu diesen Arbeiten gehören die Charakterisierung der hyperalkalinen Porenwässer inklusive der enthaltenen organischen Komponenten sowie die Herstellung entsprechender synthetischer Formationswässer.

Als weiteren Schwerpunkt werden Untersuchungen zu den Wechselwirkungen solcher hochalkaliner Wässer mit den verwendeten Tonen durchgeführt. Hierzu werden Opalinuston sowie Ca-Bentonit (Calcigel), der als Puffermaterial und Bohrlochverschluss im Endlagerkonzept vorgesehen ist, eingesetzt. Ziel der Untersuchungen ist die Bestimmung der Rückhaltung bzw. Mobilität endlagerrelevanter Elemente (bzw. Elementgemische in einer dem Endlagerinventar entsprechenden Zusammensetzung) im Ton unter dem Einfluss der gebildeten hyperalkalinen Formationswässer hoher Ionenstärke mit Hilfe von Batch-Versuchen und Miniatur-Säulen-Experimenten (MSE). Das Forschungsvorhaben erfolgt in Kooperation mit dem Karlsruher Institut für Technologie, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und den Universitäten Dresden, Heidelberg, Mainz, München und Potsdam.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

UdS-API (Verbund AP1 und AP4)

- Untersuchung der Zusammensetzung von Zementporenwasser (CPW) mittels Auslaugversuchen, Definition und Herstellung von synthetischem Zementporenwasser (ACW) für weitere Untersuchungen

UdS-APII (Verbund AP2 und AP4)

- Untersuchung der Wechselwirkung von ACW mit Ton (Batch-Versuche mit Opalinuston und Calcigel), Analyse des Korrosionsprozesses von Ton durch hoch-pH und ACW

UdS-APIII (Verbund AP2)

- Untersuchung der Sorption von endlagerrelevanten Elementen an unverändertem und verändertem Ton („aged clay“) in Anwesenheit von ACW (Batch-Versuche)

UdS-APIV (Verbund AP2 und AP4)

- Wechselwirkung von CPW bzw. ACW mit Ton bzw. Tongemischen (OPA, Ca-Bentonit) mittels Miniatur-Säulen-Experimenten (MSE)

UdS-APV (Verbund AP1 und AP4)

- Untersuchung des Einflusses organischer Additive im Eluat aus Korrosionsprozessen auf die Retardation bzw. Mobilisierung von endlagerrelevanten Metallen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum konnten die Untersuchungen zur Rückhaltung der Einzelelemente an Opalinuston (OPA) abgeschlossen werden. Die Rückhaltung aller Elemente wurden bei pH 8 (Ausnahme Iodid, das durch Ansäuern der Lösung zu flüchtigen Iod umgewandelt wird) und pH 13 untersucht (verdünnte Gipschlösung / 0,1 M NaCl)

und pH 13 (0,1/1/5 M NaCl und synthetisches Zementporenwasser, kurz ACW). Dabei kann für Iodid bei 0,1/1 und 5 M NaCl keine Rückhaltung in OPA beobachtet werden. Im ACW konnte eine Rückhaltung, in einer ähnlichen Größenordnung wie mit Cs(I) beobachtet werden ( $\log K_d = 1,5$ ), vermutlich wird durch ACW flüchtiges Iod gebildet und eine Rückhaltung nur vortäuscht, was noch genauer untersucht wird.

Um zu verifizieren, ob sich das ACW vom ausgelaugten Zementporenwasser (CPW) unterscheidet, wurden Untersuchungen zur Rückhaltung aller Elemente einzeln und im Gemisch in ACW und CPW an OPA und Calcigel durchgeführt (Konzentrationen jeweils 0 – 250  $\mu\text{M}$ ). Dabei konnte festgestellt werden, dass im ACW bei fast allen Elementen eine etwas höhere Rückhaltung zu beobachten ist. Eine Ausnahme stellt hier Uranyl dar. Liegen alle Ionen gemeinsam in Lösung vor, kann man feststellen, dass die Rückhaltung von Eu(III) an OPA leicht erhöht wird, während sich die Rückhaltung an Calcigel kaum verändert. Der Rückhalt von Cs(I) zeigt im Gemisch einen deutlichen Unterschied zwischen ACW und CPW. Im ACW ist kein Einfluss durch das Gemisch zu beobachten, weder an Calcigel noch an OPA. Im CPW nimmt der Rückhalt bei hohen Cäsiumkonzentrationen zu. Beim Vergleich zwischen CPW und ACW wurde festgestellt, dass sich Eu(III) und Uranyl gegenseitig in der Rückhaltung beeinflussen können. Aus diesem Grund wurden Untersuchungen zur Rückhaltung beider Ionen im Gemisch durchgeführt. Die Gegenwart von Uranyl bei der Eu(III) Rückhaltung scheint sich nur im alkalischen pH Bereich bemerkbar zu machen. Dabei erhöht sich die Rückhaltung sichtbar über alle Ionenstärken ( $\log K_d = 5,1$ ). Der höchste Einfluss ist im ACW zu erkennen, der  $\log K_d$  für Eu(III) erhöht sich von 4,4 ohne Uranyl auf 5,6 in Gegenwart von Uranyl. Die Uranyl Rückhaltung verändert sich in Gegenwart von Eu(III) ebenfalls. Scheint vorher die erhöhte Ionenstärke zu einer Zunahme im Rückhalt geführt zu haben, nimmt die Rückhaltung des Uranyl in Gegenwart von Eu(III) leicht ab ( $\log K_d$  von 2,4 auf 2,1 in 5 M NaCl). Im ACW wird jedoch der gegenläufige Effekt beobachtet. Die Rückhaltung von Uranyl ist ohne Eu(III) im Vergleich zu den anderen Ionenstärken stark erhöht. Dieser Effekt kann in Gegenwart von Eu(III) sogar verstärkt beobachtet werden. Während bei Uranyl kaum ein pH Einfluss von 8 auf 13 zu beobachten ist, wird die Rückhaltung von Eu(III) im Alkalischen deutlich erhöht ( $\log K_d$  steigt von 4,0 auf 5,0). Die Ergebnisse mit Calcigel stimmen mit OPA weitestgehend überein.

Die Methode der HPLC-ICP-MS-Kopplung mit *split flow* Interface wurde zur Nutzung mit verdünnter Gipshutlösung als Eluent für die Miniatur-Säulen-Experimente (MSE) angepasst. Durch die, im Vergleich zu den bisher genutzten MSE-Eluenten, deutlich vergrößerte Salzfracht ist ein merklicher Empfindlichkeitsverlust des ICP-MS-Detektionsverfahrens erkennbar. Dieser entsteht wahrscheinlich durch *space charge* Effekte der Ionen im Plasma, was auch das erhöhte Rauschen der ICP-MS-Basislinie erklärt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im nächsten Untersuchungszeitraum werden die Arbeiten mit dem Elementgemisch aus Eu(III), Uranyl, Cs(I) und Iodid (WASTE-Cocktail) abgeschlossen. Da auch hier Iodid in Lösung vorliegt, wird auf die Untersuchungen bei pH 8 verzichtet werden und nur Untersuchungen bei pH 13 und unterschiedlichen Ionenstärken durchgeführt. Auch im Rahmen von MSE sollen mit der HPLC-ICP-MS-Kopplung im nächsten Berichtszeitraum Untersuchungen mit dem WASTE Cocktail ausgeführt werden.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Sander J.M. (2017): Entwicklung von Methoden zur Untersuchung der Metallmobilität in Ton und salinaren Systemen. Dissertation, Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät, Universität des Saarlandes

Oberhausen B. (2017): Validierung eines synthetischen Zementporenwassers basierend auf Sorptionsuntersuchungen von endlagerrelevanten Elementen an Tonmineralien. Masterarbeit, Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät, Universität des Saarlandes

Kautenburger R., Brix K., Hein C., Sander J.M., Kickelbick G. (2017): Mobility of metals in clay as a potential host rock for a HLW disposal – from batch and CE-ICP-MS speciation to column experiments using LC-ICP-MS. Book of Abstracts, Migration 2017 (Barcelona), S. 344-345 (Poster)

Brix K., Kautenburger R., Hein C., Sander J.M., Kickelbick G. (2017): Simultaneous quantification of iodine and high valent metals via ICP-MS under acidic conditions in complex matrices. Book of Abstracts, Migration 2017 (Barcelona), S. 346-347 (Poster)

Hein C., Brix K., Sander J.M., Kautenburger R. (2017): Retaining of elements relevant for nuclear waste disposal under high salinity conditions – application of a transient ICP MS measurement. Book of Abstracts, Migration 2017 (Barcelona), S. 348-349 (Poster)

Sander J.M., Brix K., Hein C., Kautenburger R., Kickelbick G. (2017): Fast miniaturised column experiments for host rock characterisation of final disposal sites in clay. Book of Abstracts, Migration 2017 (Barcelona), S. 379 (Poster)

Wiehn T. (2017): Untersuchungen an einem polycarboxylatetherbasierten Betonfließmittel zur Abschätzung eines eventuellen Einflusses auf die Radionuklidrückhaltung in Endlagern. Masterarbeit, Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät, Universität des Saarlandes

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität München, Arcisstr. 21, 80333 München	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11415E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt E	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2015 bis 31.08.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 476.760,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Krüger

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Vorhabensziele:

- Quantenmechanische Modellierung der Sorption von Actiniden an C-S-H-Phasen
- Quantenmechanische Modellierung der Komplexbildung von Actiniden in basischen Lösungen

Bezug zu anderen Vorhaben:

Teilprojekt im Verbund „Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen“ GraZ

Komplementär zum BMBF-Verbundprojekt ThermAC

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst folgende Arbeitspakete (AP):

AP1: Wechselwirkung von Actiniden mit C-S-H-Phasen

AP2: Actinidenkomplexe in basischen Lösungen

AP3: Unterstützung spektroskopischer Experimente

AP1 umfasst quantenmechanische Berechnungen periodischer Modelle von C-S-H-Phasen und die Untersuchungen der Wechselwirkung von Actinidenspezies mit diesen.

In AP2 werden Hydroxid- und Carbonatkomplexe von Actiniden in basischer wässriger Lösung sowie ihre Wechselwirkung mit Lösungskationen und Modellen von Zementadditiven untersucht.

AP3 ist der Unterstützung der Interpretation spektroskopischer Experimente im Verbund durch die Berechnung entsprechender Parameter gewidmet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.3: Sorption an C-S-H-Phasen; AP2.1: Hydroxide, Carbonate; AP2.2 Ternäre Komplexe mit Lösungskationen.

Modellierungen zur Sorption von U(VI) an 14-Å-Tobermorit (AP1.3) konzentrierten sich auf die Suche weiterer Absorptionskomplexe und die Charakterisierung von Schwingungsmoden. Um weitere Sorptionspezies zu bestimmen wurde eine automatische Suche nach geeigneten Bereichen im Gitter implementiert, die sich an gemessenen Strukturparametern orientiert. Für C/S-Verhältnisse von 0.67 und 0.83 wurden dabei interessante Bereiche abseits der bereits bekannten Plätze gefunden. Nach Vorooptimierungen wurden drei stabilere neue Spezies genauer modelliert. Für C/S = 0.83 ergab sich ein Komplex mit drei Substratbindungen als neue stabilste Spezies. Ei-

nige der neuen Komplexe zeigen gleichzeitig kurze und lange U-Si-Abstände, die aus EXAFS-Messungen bekannt sind. Damit wurde eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment erreicht. Die Untersuchung wird derzeit auf  $C/S = 1.0$  erweitert. Die systematische Berechnung der Schwingungen von sorbiertem U(VI) ergab für Uranyl-schwingungen sehr ähnliche Werte für ab- und adsorbierte Spezies, wobei absorbierte Komplexe in Übereinstimmung mit TRLS-Messungen etwas weichere Schwingungen zeigen. Für bevorzugte Plätze wurde eine gute qualitative Übereinstimmung mit dem Experiment erhalten, was die weiteren Modellierungsergebnisse unterstützt.

Untersuchung mehrkerniger U(VI)-Hydroxokomplexe wurden mit Rechnungen zu  $[(UO_2)_3(OH)_9]^{3-}$  und  $[(UO_2)_4(OH)_7]^+$  im Wesentlichen abgeschlossen (AP2.1).  $[(UO_2)_3(OH)_9]^{3-}$  zeigt als stabilstes Isomer eine  $\mu_3$ -Oxoverbrückung und eine weitere  $\mu_2$ -Oxobrücke bei vierfacher Koordination der Uranylionen. Lineare Strukturen bevorzugen eine dreifache Koordination der Uranylionen und sind weniger stabil als dreieckige. Sieben charakterisierte Isomere von  $[(UO_2)_4(OH)_7]^+$  bestätigen eine dreieckige, gemischt OH- und O-verbrückte Struktur als stabilste. Eine lineare sowie eine Struktur, die durch Erweiterung des stabilsten dreikernigen Komplexes gewonnen wurde, sind deutlich weniger stabil. In abschließenden Rechnungen werden derzeit die Koordinationszahlen der Uranylionen in diesen Komplexen überprüft. Die Modellierung einkerniger U(IV)-Hydroxokomplexe (AP2.1) zeigte als vorläufiges Ergebnis, dass bisher nicht bekannte anionische Spezies thermodynamisch möglich sind, eventuell bis hin zu  $U(OH)_7^{3-}$ .

Die Stabilisierung von anionischen Urankomplexen durch Lösungskationen (AP2.2) wird am Beispiel der Spezies  $M_xUO_2(CO_3)_3^q$  untersucht. Für den bekannten Komplex  $Ca_2UO_2(CO_3)_3^0$  wurde eine gute Übereinstimmung mit gemessenen Strukturparametern und Komplexierungskonstanten erhalten. Strukturunterschiede zu  $UO_2(CO_3)_3^{4-}$  sowie zu  $Na_2UO_2(CO_3)_3^{2-}$  sind gering mit Ausnahme der sehr unsicheren U-M-Abstände. Komplexierungsenergien zeigen, dass auch die Na-Komplexe existieren sollten. Komplexe  $Mg_nUO_2(CO_3)_3^{2n-4}$  erwiesen sich als stabiler als die entsprechenden Ca-Komplexe, was sich auch in leichten Abweichungen der Struktur spiegelt. Mit erweiterten Modellkomplexen wird versucht, bessere Komplexierungsenergien zu erhalten. Mit Rechnungen zum U(IV)-Komplex  $Ca_4U(OH)_8^{4+}$  wurde begonnen.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.3: Sorption an C-S-H-Phasen

AP2.1: Hydroxide und Carbonate

AP2.2: Ternäre Komplexe mit Lösungskationen

AP2.3: Ternäre Carboxylatkomplexe

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Chiorescu, A. Gray, S. Krüger, N. Rösch: Quantum chemical modeling of An(VI/V) hydrolysis complexes: Characterization of species and their relative stabilities. Vortrag, 16th Migration 2017, 10.-15.9.2017, Barcelona, Spanien

A. Kremleva, S. Krüger, N. Rösch: Computational modeling of U(VI) sorption on calcium silicate hydrate phases. Poster, 16th Migration 2017, 10.-15.9.2017, Barcelona, Spanien

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Universität Potsdam, Am Neuen Palais 10, 14469 Potsdam		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11415F</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt F		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2015 bis 31.08.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 339.580,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kumke	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Universität Potsdam (Physikalische Chemie) wird Laser-basierte optische Verfahren zur Bearbeitung der im Verbund definierten Arbeitspakete AP1 - AP4 einsetzen bzw. (weiter-)entwickeln. Ziel der durchgeführten Arbeiten ist die Entwicklung analytischer, optischer Methoden zur Verbesserung des molekularen Prozessverständnisses der Wechselwirkung von Actinoid-Ionen (bzw. Lanthanoid-Ionen als Analoga) mit Mineralphasen, wie Bentonit, Tongestein und Zementalterationsphasen. Mit Hilfe moderner, ortsauflösender Schwingungsspektroskopie werden komplementär die interessierenden Wechselwirkungen zusätzlich aus Sicht der Mineralphase(n) beschrieben.

Das Vorhaben wird in einem Verbundprojekt gemeinsam mit der Universität Mainz, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, dem Karlsruher Institut für Technologie, der Universität des Saarlandes, der TU München, der TU Dresden sowie der Universität Heidelberg durchgeführt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Radionuklid-Rückhaltung an Zementalterationsphasen (mittlere bis hohe Ionenstärken):  
Speziation von Eu(III) an/auf CSH-Phasen mittels:  
- zeitaufgelöster Laserspektroskopie (TRLFS)  
- Schwingungsspektroskopie/-mikroskopie
- AP2: Radionuklid-Rückhaltung an Tongestein (hyperalkalin, mittlere bis hohe Ionenstärke):  
- TRLFS, Raman-Mikroskopie und SFG-Spektroskopie zur Untersuchung von Opalinuston- bzw. Calcium-Bentonit-Oberflächen  
- Speziationsuntersuchungen von Eu(III) bei hohen pH-Werten und Ionenstärken in Lösung
- AP4: Methodenentwicklung:  
- Weiterentwicklung optischer Mikroskopie-Techniken zur Untersuchung von Mineraloberflächen im Zusammenhang mit der Sorption von Lanthanoiden

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Zugehörig zum AP1 wurden die von der Sorptionszeit (mind. 170 d) und dem  $pH$ -Wert ( $pH = 11.0 - 12.6$ ) abhängigen zeitaufgelösten Lumineszenzuntersuchungen (inkl. Messungen bei 4 K) von Eu(III) an CSH-Phasen mit C/S-Verhältnissen von 0.7, 0.9, 1.3 und 1.4 (Kooperation mit G. Deissmann und S. Lange vom FZ Jülich) abgeschlossen. Anschließende Untersuchungen der gealterten CSH-Phasen mittels XRD und Raman-Mikroskopie ergaben keine Veränderung der CSH-Struktur durch die Eu(III)-Sorption. Mittels Elementaranalyse zeigte sich, dass der Wasseranteil in den CSH-Phasen allerdings um 3 % – 4 % gestiegen ist. Die aus der ICP-OES/MS bestimmten C/S-Verhältnisse blieben in den meisten Proben unverändert. Bei einigen CSH-Proben erhöhten sie sich jedoch um 0.1 bis 0.2.

Mit Lumineszenz-basierten Untersuchungen der Sorption von Eu(III) an AFm-Phasen (AFm-CO<sub>3</sub> und AFm-SO<sub>4</sub>) in Abhängigkeit vom  $pH$ -Wert und der Sorptionszeit wurde begonnen. Weiterhin wurde mit der Analyse des Einflusses verschiedener Ionen (NaCl ( $I = 2.6$  M), Gips-H<sub>2</sub>O-Lösung ( $I = 2.6$  M), CaSO<sub>4</sub>·2H<sub>2</sub>O ( $I = 0.02$  M) und Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> ( $I = 0.02$  M)) auf die Eu(III)-Sorption an CSH-Phasen (C/S-Verhältnisse 0.7 und 1.3) bei  $pH = 12.0$  begonnen.

Dem AP1 zuzuordnen ist auch die in Kooperation mit der BAM (J. Stroh) durchgeführte Untersuchung des Einflusses verschiedener organischer Zementzusatzstoffe (Zitronensäure, Weinsäure sowie ein Gemisch aus Ethylencarbonat, Acrylsäure-2-acrylamido-2-methylpropan-sulfonsäure und 2-Hydroxy-2-sulfo-essigsäure) auf den Hydrationsprozess von Zement (bestehend aus 90 % Portland- und 10 % Calciumaluminat-Zement) in den ersten 24 h. Eu(III) wurde hierbei als Lumineszenzsonde verwendet. Zitronensäure und Weinsäure scheinen die beginnende Bildung von CSH zwischen 4 h und 6 h nicht zu beeinflussen. Weinsäure scheint allerdings die Bildung von Ettringit in den ersten Stunden zu verzögern. Diese Beobachtung soll allerdings noch mit strukturaufklärenden Methoden bestätigt werden.

Die dem AP2 zugeordneten, kontaktzeit- sowie ionenstärkeabhängigen (Milli-Q-Wasser, NaCl-Lösung, verd. Gips-H<sub>2</sub>O-Lösung) Lumineszenz-kinetischen Untersuchungen von Montmorillonit Suspensionen wurden für  $pH = 12$  abgeschlossen. Es zeigten sich parameterunabhängig zwei verschiedene Eu(III)-Spezies, welche vermutlich in CSH-Phasen eingebaut sind, die sich durch den hohen  $pH$ -Wert als Sekundärphasen gebildet haben. Analoge Messungen wurden für die  $pH$ -Werte 10 und 11 begonnen. Hier zeigten sich ebenfalls parameter-unabhängig dieselben beiden Spezies. Zusätzlich ist bei beiden  $pH$ -Werten eine dritte Spezies identifizierbar. Die relativ kurze Abklingkonstante weist auf eine am Montmorillonit Oberflächen-komplexierte Spezies mit Wassermolekülen in der ersten Koordinationssphäre hin.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die zum AP1 zugehörige Untersuchung der Sorption von Eu(III) an AFm-Phasen als auch unter dem Einfluss verschiedener Salze an CSH-Phasen (*vide supra*) soll fortgesetzt werden. Zusätzlich soll mit Hilfe des Inter-Lanthanoid-Energietransfers (Eu(III)/Nd(III)) die Abstandsverteilung von auf der CSH-Oberfläche sorbiertem Eu(III) bestimmt werden.

Die im AP2 anzusiedelnden kontaktzeitabhängigen spektroskopischen Untersuchungen der Montmorillonit-Proben sollen für einen  $pH$ -Wert von 9 begonnen sowie für  $pH = 10$  und  $pH = 11$  fortgeführt und abgeschlossen werden. Die gealterten Proben sollen nach Trocknung anschließend strukturanalytisch sowie tieftemperaturspektroskopisch untersucht werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

K. Burek, S. Eidner, S. Kuke, M. U. Kumke, Spectrochim. Acta A 191, 36-49 (2018).  
Weitere Manuskripte (zwei) werden derzeit erstellt.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Dresden, Helmholtzstr. 10, 01069 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11415G</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt G		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2015 bis 31.08.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 239.258,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Stumpf	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Projekt befasst sich mit Arbeiten zum grundlegenden Prozessverständnis der Speziation von (dreiwertigen) Actiniden/Lanthaniden (An/Ln) in chemischen Medien, die sich aus Zementdegradationsprozessen ergeben sowie die Bedingungen potentieller deutscher Wirtsgesteine berücksichtigen, d. h. es werden alkaline Lösungen mit mittleren bis hohen Ionenstärken betrachtet. Es werden folgende Vorhabensziele definiert: a) Identifizierung relevanter organischer Zementadditive (Plastifizierer und Super-plastifizierer, in enger Zusammenarbeit mit den Verbundpartnern), b) Bestimmung konsistenter thermodynamischer Datensätze zur Wechselwirkung der relevanten organischen Zementadditive mit redoxstabilen An/Ln in alkalinen Lösungen, c) Charakterisierung des Einflusses additivhaltiger CSH-Zementphasen auf die Actiniden-speziation, d) Erweiterung des bisherigen Wissenstandes zur Wechselwirkung von An/Ln mit Boratspezies in alkalinen Lösungen inklusive der Identifizierung von borathaltigen Sekundärphasen, e) Machbarkeitsstudie zur Sorptionskalorimetrie von Ln an endlagerrelevanten festen Phasen zur direkten Ermittlung von Sorptionsenthalpien

Das Forschungsvorhaben erfolgt in enger Kooperation mit den Projekten der Universitäten Mainz, Saarbrücken, München, Potsdam und Heidelberg sowie dem Institut für Ressourcenökologie vom Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf und dem Institut für Nukleare Entsorgung vom Karlsruher Institut für Technologie.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1.1: Thermodynamische Untersuchungen im System Ac/Ln-organische Zementzusatzstoffe in alkalischen Lösungen und künstlichen Zementporenwasser mit folgenden Schwerpunkten: Herstellung/Charakterisierung definierter CSH-Mineralphasen und Ettringit mit ausgewählten relevanten Additiven, Batchversuche zur Freisetzung und/oder Sorption von Additiven im binären System Zementadditiv-CSH-Mineralphase, spektroskopische und thermodynamische Charakterisierung löslicher Komplexspezies im binären System Actinid-Zementadditiv/Modellligand
- AP1.2: Untersuchungen im System Actinid-Borat-organische Zementadditive in alkalischen Lösungen mit folgenden Schwerpunkten: thermodyn. Charakterisierung der Wechselwirkung von Boraten mit Zementadditiv auf Polyolbasis (Boratesterbildung,  $\text{pH} > 7$ ), spektroskopische und thermodynamische Charakterisierung der Wechselwirkung von Ln/An mit den Boratestern
- AP4.1: Etablierung der isothermen Titrationskalorimetrie zur Bestimmung von Sorptionsenthalpien folgenden Schwerpunkten: Machbarkeitsstudie zur Sorptionskalorimetrie von Ln(III) mit Modellphasen (z. B.  $\text{TiO}_2$ ) als Funktion der Ionenstärke, Anpassung/Entwicklung entsprechender der Auswerteroutinen an die Spezifika der Sorption, sorptionskalorimetrische Untersuchungen mit Ln(III) an endlagerrelevanten Phasen (Ton, CSH-Phasen) als  $f(\text{pH}, I, \text{Medium})$

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

#### AP1.1:

- Für die Bestimmung von Strukturparametern (Koordinationszahl und Atomabstand) von Am(III)-Malat-Komplexen bei hohen pH-Werten wurde eine Probenreihe präpariert und mittels EXAFS-Spektroskopie untersucht (Dezember 2017). Alle EXAFS-Spektren der Proben im pH-Bereich 10 - 12 zeigen einen Am-Am-Abstand bei 3.5 - 4 Å. Dieser Abstand deutet auf eine Bildung von Kolloiden bzw. auf Ausfällungen des Am(III)-Malat-Komplexes hin. Eine genauere Auswertung der EXAFS-Messung ist gegenwärtig in Arbeit.
- Für weiterführende strukturelle Untersuchungen zur Intercalation von Am(III) bzw. des Am(III)-Malat-Komplexes in Calciumsilikatphasen (CSH) wurden diverse Am(III)dotierte-CSH-Phasen mit verschiedenen C/S-Verhältnissen und Malatkonzentrationen präpariert. Im Dezember 2017 sollten diese Proben mittels EXAFS untersucht werden. Aus technischen Gründen konnten die Messungen nicht durchgeführt werden, die Messungen werden im Februar 2018 nachgeholt.
- Es wurden TRLFS-Messungen zur Charakterisierung der Intercalation von Eu(III) bzw. Eu(III)-Malat-Komplex in den CSH-Phasen, beginnend bei einem C/S-Verhältnis von 0.4, durchgeführt. Anhand der Fluoreszenzabklingkurven konnten mindestens zwei verschiedene Spezies identifiziert werden, unabhängig von der Anwesenheit des Malats. Die Analyse der Fluoreszenzabklingzeiten deutet auf eine in die Ca(II)-Schicht eingebaute Eu(III)-Spezies (sehr lange Fluoreszenzabklingzeit ~ 1500 µs, keine koordinierten Wassermoleküle) und auf eine oberflächlich (an Silanol-Gruppen) gebundene oder in die wasserhaltige Zwischenschicht eingelagerte Eu(III)-Spezies (kürzere Fluoreszenzabklingzeit von 300-700 µs, 2-1 koordinierte Wassermoleküle) hin. Einen Einfluss des Zementadditivs Malat konnte bisher nicht nachgewiesen werden. Ebenso ergaben TGA-DSC und XRD-Messungen der Eu(III) bzw. Eu(III)-Malat (1:1) dotierten CSH-Phasen (C/S-Verhältnis 0.4) keine Unterschiede zu den reinen CSH-Phasen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fortführung der strukturellen Untersuchungen von Eu(III) bzw. Eu(III)-Malat dotierten CSH-Phasen bei höheren C/S-Verhältnissen (von 0.8 und 1.2.) und bei Eu(III)-Malat-Verhältnissen von 1:1 und 1:20-Verhältnis mittels spektroskopischer Methoden (u. a. TRLFS) sowie TGA-DSC und XRD-Messungen
- Weitere Experimente zur Sorption/Auslaugung (Batchexperimente) von Eu(III) bzw. Eu(III)-Zementadditiv unter Verwendung von Eu-152 und C-14 markiertem Malat unter Variation der Bedingungen (Ionenstärke, Hintergrundelektrolyt) sind geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Posterbeitrag: F. Taube, M. Acker, B. Drobot, A. Rossberg, H. Förstendorf, M. Patzschke, S. Taut, T. Stumpf: A multi-method investigation of An(III)/Ln(III)-malate complexes, 16th International conference on chemistry and migration behavior of actinides and fission products in the geosphere, Barcelona, Spain, September 10 - 15, 2017

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11415H</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt H		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2015 bis 31.08.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 352.934,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Panak	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel dieses Verbundprojektes ist die Aufklärung des geochemischen Verhaltens von Actiniden im natürlichen Tongestein unter dem Einfluss von Zementalterationsphasen und organischen Zementzusätzen. Die Arbeiten dieses Teilprojektes beschäftigen sich daher mit dem Einfluss diverser Plasticizer und Superplasticizer, die in der Herstellung von Zementen zum Einsatz kommen und im Laufe der Lagerzeit freigesetzt werden können, auf den Quellterm und die Komplexierung von trivalenten Actiniden im Temperaturbereich bis 90 °C. Ergänzt werden diese Untersuchungen durch Arbeiten zur Wechselwirkung mit verschiedenen Modellliganden wie Malonat, Succinat etc. Dadurch sollen wichtige thermodynamische Daten der im geochemischen Milieu im Nah- und Fernbereich eines Endlagers ablaufenden Reaktionen der dreiwertigen Actinidionen erhalten werden. Das Projekt liefert somit einen entscheidenden Beitrag für eine thermodynamisch fundierte Langzeitsicherheitsanalyse von nuklearen Endlagern. Des Weiteren werden grundlegende Erkenntnisse bezüglich des Komplexierungsverhaltens der trivalenten Actiniden und Lanthaniden erhalten, die auch in anderen wissenschaftlichen Bereichen von großer Bedeutung sein können.

Die in diesem Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten erfolgten in direkter Kooperation mit dem Karlsruher Institut für Technologie, dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, der Universität Mainz, Potsdam, Universität des Saarlandes sowie der TU-München.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Einfluss von organischen Zementadditiven auf den Quellterm von trivalenten Actiniden.
- AP2: Komplexierung von dreiwertigen Actiniden mit organischen Zementadditiven.
- AP3: Weiterentwicklung von spektroskopischen Methoden zur Anwendung auf saline Systeme unter zementrelevanten Bedingungen

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Temperaturabhängige TRLFS Untersuchungen zur Komplexierung von Eu(III) mit einem synthetischen Acrylsäure-verknüpften Polycarboxylatsuperplasticizer (52IPEG4,5; Kooperation mit Prof. Dr. Johann Plank (Technische Universität München)) wurden im Temperaturbereich von 20 bis 80 °C durchgeführt. Wie auch im Falle des kommerziellen Glenium 51 wurde nur eine Komplexspezies beobachtet. Im untersuchten Temperaturbereich zeigt die Komplexierungsreaktion tendenziell exothermes Verhalten, jedoch ist die Änderung der konditionalen Stabilitätskonstante  $\log \beta'(T)$  nur gering und variiert zwischen 5.9 und 6.6. Diese Werte sind geringer als im Falle von Glenium 51 und liegen in einem ähnlichen Bereich wie die Stabilitätskonstanten, die für verschiedene Fulvinsäuren bestimmt wurden (5.6-7.0). Auch die Lage und Form der Emissionsspektren der komplexierten Spezies sind in beiden Systemen sehr ähnlich.

Im Rahmen einer einwöchigen Synchrotronstrahlzeit an der KMC-2 beamline (BESSY II, Berlin) wurde die Wechselwirkung von drei synthetischen Superplasticizern (MPEG-PCE (45PC6), MPEG-PCE (45PC2) und IPEG-PCE (52IPEG4,5) mit verschiedenen Lanthaniden (Nd, Eu, Gd, Tb) mittels EXAFS Spektroskopie untersucht. Für die meisten Systeme (Nd fällt auf Grund des niedrigen Energiebereichs ein wenig gegenüber den schwereren Lanthaniden ab) konnten Spektren mit gutem Signal/Rausch-Verhältnis erhalten werden. Ziel der Messungen war die Bestimmung der molekularen Struktur der gebildeten Komplexe (interatomare Abstände und Koordinationszahlen) zur Komplementierung der TRLFS Untersuchungen. Die Spektren befinden sich zurzeit noch in der Auswertung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- TRLFS Untersuchungen zur Komplexierung von Cm(III) mit synthetischen Superplasticizern (Kooperation mit Prof. Dr. Johann Plank (TUM)).
- TRLFS Untersuchungen zur Komplexierung von Cm(III) mit kleinen organischen Liganden als potentielle Abbauprodukte komplexer Superplasticizer.
- TRLFS Untersuchungen ausgewählter Ligandsysteme bei hohen pH-Werten.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Skerencak-Frech, A., Trumm, M., Fröhlich, D.R., Panak, P.J.: Coordination and thermodynamics of trivalent actinides with malonate at increased temperatures: A spectroscopic and quantum chemical study, *Inorg. Chem.*, 2017, 56, 10172-10180.

Fröhlich, D.R., Panak, P.J.: A thermodynamical study on the complex formation of Cm(III) with methacrylate, submitted.

Vortrag:

Fröhlich, D.R., Panak, P.J.: Spektroskopische Untersuchungen zur Komplexierung dreiwertiger Actiniden und Lanthaniden mit einem Polycarboxylat-Superplasticizer, GDCh Wissenschaftsforum 2017, Berlin, 10.-14. September 2017.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolf-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11425</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Bautechnische Realisierung Technikumsprüfstand mit Durchführung und Auswertung erster Versuche (Salzschnittblöcke)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2015 bis 31.07.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.241.071,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr.-Ing. Düsterloh	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bautechnische Realisierung eines im Vorhaben FKZ 02E11223 ausgelegten Technikumsprüfstandes und Durchführung und Auswertung erster Versuche zur Eignung von Abdichtungselementen aus Steinsalzschnittblöcken mit Fugenfüllung zur langzeitsicheren Abdichtung eines Endlagers im Steinsalz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Erstellung der Ausschreibungsunterlagen und Einholung aktualisierter Angebote.
- AP2: Vorbereitung der Versuchshalle für die bautechnische Realisierung des Technikumsprüfstandes.
- AP3: Bautechnische Realisierung und Synthese der Anlagenkomponenten mit Testläufen zur Funktionalität und Anlagensicherheit.
- AP4: Beschaffung von gewachsenem Steinsalz.
- AP5: Herstellung von Salzschnittblöcken.
- AP6: Untersuchungen zur hydraulisch dichten Ummantelung der Großprüfkörper.
- AP7: Durchführung und Auswertung von Technikumsversuchen unter variierten THM-Beanspruchungen.
- AP8: Erstellung numerischer Berechnungsmodelle zur THM gekoppelten Reanalyse.
- AP9: Rechnerische Reanalyse der Technikumsversuche mit Verifikation und Validation.
- AP10: Erstellung Schlussbericht.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1, AP2, AP3, AP4, AP6, AP8 abgeschlossen.

AP5: Herstellung von Salzschnittblöcken mittels Fräsmaschine. Vorkonfektionierung Salzschnittblöcke mittels Kettensäge. Herstellung der Salzschnittblöcke deutlich zeitaufwendiger als geplant. Zeitbedarf ca. 1 Woche für 10 Schnittblöcke. Je Prüfkörper werden 395 Schnittblöcke benötigt.

AP7: Testversuche Kalibrierung und Temperaturregelung.

AP9: Numerische Berechnungen zur Analyse des Verbundtragverhaltens von Salzschnittblöcken mit und ohne Fugenfüllung. Triaxiale Kriech- und Festigkeitsversuche zur Charakterisierung der mechanischen Eigenschaften des Salzschnittblockmaterials.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Herstellung Salzschnittblöcke.
- Aufbau und Montage der Arbeitsbühne zum Prüfkörperaufbau.
- Aufbau Dichtelement aus Salzschnittblöcken.
- Numerische Untersuchungen zur Modellierung und Reanalyse der Technikumsversuche.
- Kriechversuche zur Charakterisierung des Schalzschnittblockmaterials.
- Feintuning und Kalibrierung der Triaxialprüfanlagenregelung.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Düsterloh, U. (2017): Konzeption, Untersuchung und Modellierung eines Abdichtungselementes aus Salzschnittblöcken zum Nachweis der Barrierenintegrität, Fachgespräch Verschlussysteme - Konzepte/Baustoffe/Demonstration/Anwendung, Freiberg, 03.-04. Mai 2017.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11435</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl <sub>2</sub> -Lösung (MgO-SEAL)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2015 bis 31.07.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.081.938,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kudla	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

MgO-Beton ist als Baustoff für zukünftige Verschlussbauwerke in einem HAW-Endlager im Salinar vorgeschlagen worden. Das Vorhaben MgO-SEAL dient dem Ziel, das Langzeitverhalten von MgO-Spritzbeton nach Lösungskontakt im Maßstab eines realen Bauwerks zu bewerten. Genutzt wird dazu, dass aus Spritzbeton der Rezeptur D4 (5-1-8-Bindemittelphase) in der Grube Teutschenthal errichtete Dammbauwerk GV2 nach einer Standzeit von 7 Jahren. Das Forschungsvorhaben ist ein Beitrag zum Langzeitsicherheitsnachweis von Verschlusselementen aus MgO-Beton mit der 5-1-8-Bindemittelphase für zukünftige HAW-Endlager im Salinar.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Voruntersuchungen, pneumatische Dichtheitsprüfung, Einrichtung des Versuchsortes GV2.
- AP2: Laboruntersuchungen an Bohrkernen aus dem MgO-Beton (Phasenbestand, Festigkeits- und Kriechverhalten, Porosität, Permeabilität).
- AP3: Lösungsangriff (hydraulische Druckbeaufschlagung GV2) über lange Bohrlöcher und über die vorhandene Druckkammer.
- AP4: Planung des selektiven Rückbaus und Nachuntersuchungen.
- AP5: Interpretation der Versuchsergebnisse und Empfehlungen für die Gestaltung von Verschlussbauwerken aus MgO-Spritzbeton.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Arbeiten sind abgeschlossen.
- AP2: Neue Ergebnisse der Hg- porosimetrie zeigen, dass im MgO-Spritzbeton Poren bis zu einem Durchmesser von 800  $\mu\text{m}$  vorliegen, die hydraulisch wirksam sind.
- AP3: Aus den bisherigen Ergebnissen der Druckbeaufschlagung des gesamten Bauwerkes GV2 lässt sich eine integrale Permeabilität von  $4 \cdot 10^{-14}$  bis  $1 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2$  ableiten. Dieser Wert ist aber durch die Durchlässigkeit der umliegenden ALZ dominiert. Aus dem Volumen der in der Bohrung B40 injizierten Lösung wurde eine radiale integrale Eindringtiefe von ca. 6 cm abgeschätzt. In den Bohrungen B38 und B39 kann durch das Absinken der Permeabilität auf  $< 10^{-18} \text{ m}^2$  der Effekt der Selbstabdichtung von Betonierabschnittsgrenzen im MgO-Spritzbeton (Rezeptur D4) bei Lösungszutritt weiter belegt werden.  
Die Auswertung der von der BAM mit Unterstützung der BGE durchgeführten ersten Ultraschall-Testmessungen zeigten, dass die Betonierabschnittsgrenzen über eine relativ große Fläche detektiert werden können. Im Spritzbeton sind die entsprechenden Echos der Betonierabschnittsgrenzen nur lokal ausgeprägt und erstrecken sich nicht über den ganzen Querschnitt.
- AP4: Durch die Haltephase und die Fortsetzung der Arbeiten zu AP3 und AP5 wurde die Planungen des zukünftigen partiellen Rückbaus und der Nachuntersuchungen angepasst.
- AP5: Der Zwischenbericht ist fertig gestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP2: Begleitende Laborversuche (Phasenanalyse) und Testmessungen zu CT- und GeOPET-Untersuchungen (HZDR - Reactive Transport Division).
- AP3: Fortsetzung der Langzeitmessungen in den Bohrungen B38, B39, B40 und B41 und Nachbelastung der Druckkammer GV2 bei einem konstanten Flüssigkeitsdruck von 3 bar. Weitere Abschätzung der integralen Eindringtiefe der Lösung.
- AP4: Berücksichtigung von Ultraschall-Messungen bei der Qualitätsprüfung von Spritzbeton beim späteren Rückbau.
- AP5: Vorversuche zur Verbesserung der "Klebrigkeit" des frischen Spritzbetons.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Gruner, M.; Freyer, D.; Popp, T.: MgO-Beton: Ein lange bekannter und doch ganz neuer Baustoff. In: Beiträge zum 3. Internationalen Freiburger Fachkolloquium. Baustoffe und Versatz, 5.-6. Oktober 2017. ISBN: 978-3-86012-5601.
- Freyer, D.; Gruner, M.; Popp, T.; Salzer, K.: Aktueller Stand zu MgO-Baustoffen mit Hartgesteinskörnung. Vortrag zum 46. Geomechanik-Kolloquium, Leipzig, 17.11.2017.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11446A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt A	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 30.06.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 330.429,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Hampel

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Leibniz Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

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

Der Zuwendungsempfänger (ZE) koordiniert das Vorhaben und betreut die Kooperation mit den Sandia National Laboratories. Er beteiligt sich im Teilprojekt A mit dem von ihm entwickelten Stoffmodell CDM und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D (Itasca).

Im Berichtszeitraum führte der ZE in AP2 die Vorausberechnungen diverser, von den Partnern gemeinsam geplanter Verheilungsversuche fort. Die Berechnungen dienen zur Optimierung der Randbedingungen für die Laborversuche sowie zum Testen und Vergleich bestehender Modellierungsansätze. Im Vordergrund stand in diesem Halbjahr beim ZE die Modellierung der Schädigungs- und Dilatanzentwicklung unter dem Einfluss von Zugspannungen in AP3. Mit der verbesserten Beschreibung im CDM führte er Berechnungsstudien zur Zugrissentstehung und Zugfestigkeit in einem Biegebalken und in einer Salzprobe im Brazilian-Test durch. Außerdem berechnete er in AP5 verschiedene Modellentwürfe des Virtuellen Demonstrators.

Im Berichtszeitraum beteiligte sich der ZE am 8. und 9. Projektworkshop am 21.08. bzw. 15.-16.11. beim IfG Leipzig. Außerdem präsentierte er gemeinsam mit den Partnern IfG und TUC Ergebnisse des Verbundes auf dem 8th US-German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation in Middelburg, NL.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Zuwendungsempfänger wird zusammen mit den Partnern die weiteren gemeinsam definierten Arbeiten durchführen. Im Fokus stehen dabei in AP2 Vergleiche der Ergebnisse der Vorausberechnungen zu den geplanten Verheilungsversuchen, in AP3 weitere Studien zur Wirkung von Zugspannungen im Salz und in AP5 Simulationen des Virtuellen Demonstrators. Der ZE wird seine Ergebnisse auf den weiteren Projektworkshops präsentieren und gemeinsam mit den Partnern die weiteren Arbeiten besprechen. Workshop 10 ist für den 11.-13.03.2018 in Albuquerque, NM, USA geplant. Anschließend werden bei Carlsbad, NM, Befahrungen der WIPP sowie einer benachbarten Salz- und Kali-Mine erfolgen. In letzterer wurden von RESPEC Inc., Rapid City, SD, Bohrkerne für Scherversuche an geschichteten Salzproben in AP4 gewonnen.

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

Literatur zum aktuellen Verbundprojekt:

Andreas Hampel, Till Popp, Kai Herchen: Current Status of Research in the Joint Project WEIMOS, Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifikation der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz, Proceedings of the 8th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation, Middelburg, The Netherlands, September 5-7, 2017

<b>Zuwendungsempfänger:</b> IfG Institut für Gebirgsmechanik GmbH, Friederikenstr. 60, 04279 Leipzig		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11446B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.03.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 545.980,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Salzer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum führten die Partner am 20./21. August und am 15./16. November in Leipzig, den 8. und 9. Projekt-Workshop durch.

Das vorliegende Teilvorhaben B beteiligt sich mit dem visko-elasto-plastischen Stoffmodell nach Minkley und dem Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatz nach Günther/Salzer an den geplanten Arbeiten. Dabei wird das Programm FLAC3D (Fa. Itasca) verwendet.

Außerdem realisiert das IfG die Planung und Durchführung der Laborversuche zur Ableitung der Kriechparameter bei kleinen Deviatorspannungen (AP1), wozu u.a. die Entwicklung und der Bau von drei neuartigen Versuchsständen für Kriechversuche mit einer verbesserten Messgenauigkeit sowie einer erschütterungsarmen, speziellen Klimakammer erfolgte.

Das IfG hat im Berichtszeitraum den 8. und 9. Projekt-Workshop gemeinsam mit den Partnern vorbereitet und durchgeführt. Auf den Workshops wurden die Ergebnisse der bisherigen Planungen und Arbeiten sowie der Zusammenarbeit mit Sandia National Laboratories sowie der BGR (zum AP1) vorgestellt und diskutiert.

Das IfG beteiligte sich weiterhin bei der Vorbereitung und Vorstellung der bisher in WEIMOS gewonnenen Ergebnisse auf dem 8. US-German-Workshop, am 5.-7. September in Middelburg (NL).

Auf beiden Projekt-Workshops wurden die Ergebnisse eines weiteren orientierenden Kriechversuches auf einem bereits vorhandenen älteren Kriechversuchsstand vorgestellt und mit den Projektpartnern diskutiert, mit dem bei konstanter Deviatorspannung von 4 MPa der Einfluss einer schrittweisen Temperaturabsenkung beginnend mit einer Temperatur von 120 °C untersucht wird. Der Bau der 3 neuartigen Kriechversuchsstände mit einer erhöhten Messgenauigkeit von 0,15 nm wurde abgeschlossen und die für die Versuchsdurchführung erforderliche erschütterungsarme Klimakammer fertiggestellt. Ende 2017 wurden erste Testversuche mit Stahl-Dummys begonnen. Gleichzeitig erfolgten Recherchen für den erforderlichen Aufwand zur Durchführung von ergänzenden Kriechversuchen an Steinsalz-Einkristallen, die es erlauben würden, das Kriechen auf den Korngrenzen vom Kriechen in den Körnern zu separieren.

Auf dem 8. WS wurde die Weiterentwicklung des Erweiterten Dehnungs-Verfestigungsansatzes nach Günther/Salzer sowie die entsprechende Parameterableitung für das Asse-Speisesalz vorgestellt. Mit dem so abgeleiteten Parametersatz wurden die Verheilungsversuche von TUC nachgerechnet bzw. Prognoserechnungen für die weiterhin geplanten Versuche durchgeführt.

Das IfG hat sich an der Erarbeitung von mehreren Beiträgen für die IX. Conference on Mechanical Behavior of Salt vom 12. bis 14. September 2018 in Hannover beteiligt, mit denen die bisher in WEIMOS gewonnenen Ergebnisse präsentiert werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im 1. Halbjahr 2018 werden erste Kriechversuche an Steinsalzprüfkörpern mit den drei neuartigen Kriechversuchsständen in der erschütterungsarmen Klimakammer begonnen.

Weiterhin werden die numerischen Arbeiten zum Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastung, zur Verheilung sowie mit dem virtuellen Demonstrator fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Literatur zum aktuellen Verbundprojekt:

Andreas Hampel, Till Popp, Kai Herchen: Current Status of Research in the Joint Project WEIMOS, Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifikation der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz, Proceedings of the 8th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation, Middelburg, The Netherlands, September 5-7, 2017

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11446C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.03.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 250.023,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Staudtmeister	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

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

In dem Berichtszeitraum hat der Zuwendungsempfänger seinen Materialparametersatz optimiert und weitere Berechnungen zum Salzstockaufstieg, zur Untersuchung eines Biegebalken-Versuchs sowie eines indirekten Zugversuchs und zur Nachberechnung von Verheilungsversuchen durchgeführt und Berechnungsergebnisse vorgestellt und diskutiert. Mit dem neuen Parametersatz wurden Vorberechnungen zu den geplanten Verheilungsversuchen durchgeführt. Die berechneten effektiven Dehnungen und Volumendehnungen wurden bei einem Workshop vorgestellt. Des Weiteren wurden weitere Berechnungen am virtuellen Demonstrator durchgeführt. Hierbei wurden vom Zuwendungsempfänger unterschiedliche Modelle generiert und der Einfluss des Generierungsmodells auf die Berechnungsergebnisse sowie auf die Berechnungszeiten untersucht. Die Modellgenerierung wurde den Projektpartnern für weitere Berechnungen zur Verfügung gestellt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Zuwendungsempfänger wird an weiteren Workshops teilnehmen. Eine davon wird voraussichtlich in den New Mexico, USA mit dem assoziierten Partner Sandia stattfinden. In diesem treffen werden die bisherigen Arbeitsergebnisse zusammenfassend vorgestellt. Der Zuwendungsempfänger wird hierbei ein Arbeitspaket übernehmen. Weitere Berechnungen zum virtuellen Demonstrator sind geplant. Die Verifizierung vom Stoffmodell Lubby-CF soll weitestgehend abgeschlossen werden.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11446D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.03.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 233.387,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Stahlmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Leibniz Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA.

Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert.

Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweis-konzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

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

Der Zuwendungsempfänger beteiligt sich an dem Verbundprojekt im Teilprojekt D mit dem Stoffmodell für Steinsalz TUBSSalt und verwendet für die Modellberechnungen der Untertagestrukturen das Finite-Differenzen-Programm FLAC3D der Fa. Itasca.

Im Berichtszeitraum wurden zwei Workshops in Leipzig durchgeführt.

Anhand der Messergebnisse des ersten Verheilungsversuchs der TUC wurden die Parameter der Verheilung im Modell TUBSSalt angepasst und die Auswirkungen auf die Berechnung des Verheilungsversuchs sowie die Laborversuche des vorherigen Projektes präsentiert.

Die Berechnungen mehrerer Partner haben gezeigt, dass das bisherige Modell des Virtuellen Demonstrators zu numerischen Problemen führt. Daher wurde vom Zuwendungsempfänger ein anderes Modell vorgeschlagen und an die anderen Partner verteilt, welches im Zuge des folgenden Workshops allerdings wieder verworfen wurde.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Die Parameter des Verheilungsanteils von TUBSSalt reagieren auf Anpassungen sehr sensibel und müssen voraussichtlich anhand der weiteren Versuchsergebnisse von Verheilungsversuchen noch weiter angepasst werden. Mit den angepassten Parametern sollen die verschiedenen Reihen von Verheilungsversuchen der TUC berechnet werden, sobald die Ergebnisse zur Verfügung gestellt wurden.

Die Arbeiten zur Festlegung eines Modells für den Virtuellen Demonstrator laufen auch weiterhin. Dazu wird momentan ein Modell der LUH verwendet und auf Lauffähigkeit geprüft.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolph-Roemer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11446E</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.03.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 406.332,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Zusammenarbeit der Projektpartner Dr. Hampel, IfG Leipzig, Leibniz Universität Hannover, TU Braunschweig und TU Clausthal (FKZ 02E11446A bis E) hat das Gesamtziel, Instrumentarien für die Nachweise zur sicheren Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle in untertägigen Steinsalzformationen weiterzuentwickeln und für die Anwendung zu qualifizieren, um die Zuverlässigkeit langzeitiger gebirgsmechanischer Prognosen zu verbessern. Als assoziierter Partner beteiligen sich die Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, USA. Die Arbeiten ergeben sich aus dem Forschungs- und Entwicklungsbedarf zur Modellierung des thermomechanischen Verformungsverhaltens von Steinsalz, hier fokussiert auf die flache Lagerung, der beim Vergleich aktueller Stoffmodelle und Berechnungsverfahren in drei Verbundprojekten zwischen 2004 und 2016 identifiziert wurde. Es wird eine verbesserte physikalische Beschreibung der in AP1 bis AP4 genannten Phänomene erarbeitet. Begleitend werden spezifische experimentelle Untersuchungen und exemplarische numerische Simulationen mit endlagerrelevanten Detailmodellen durchgeführt. Die Ergebnisse werden miteinander, mit experimentellen Befunden und In-situ-Beobachtungen verglichen. Auswirkungen der verbesserten Modellierung werden anhand eines komplexen gebirgsmechanischen 3D-Modells in AP5 demonstriert. Das Verbundprojekt weist einen engen thematischen Bezug zum BMWi-Vorhaben „Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes“ (KOSINA) auf. Da dort keine Laboruntersuchungen und Weiterentwicklungen der Stoffmodelle durchgeführt werden, bilden die Arbeiten in diesem Verbundprojekt eine notwendige methodische Absicherung und wichtige Ergänzung der in beiden Vorhaben eingesetzten geomechanischen Rechenverfahren und Datensätze.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Verformungsverhalten bei kleinen Deviatorspannungen
- AP2: Einfluss von Temperatur und Spannungszustand auf die Schädigungsrückbildung
- AP3: Verformungsverhalten infolge von Extensionsbelastungen
- AP4: Einfluss von Grenzflächen im Steinsalz auf die Verformung (Wechselagerung)
- AP5: Virtueller Demonstrator
- AP6: Administrative Arbeiten

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

Im Berichtszeitraum führten die Projektpartner am 21. August und am 15./16. November jeweils einen Projekt-Workshop in Leipzig durch. Die Projektpartner diskutierten auf den Workshops Arbeiten zu den Themenbereichen kleine Deviatorspannungen, Schädigungsrückbildung, Verformungsverhalten infolge von Zugbelastungen sowie den Virtuellen Demonstrator.

Der Zuwendungsempfänger stellte auf dem ersten Treffen in Leipzig die Ergebnisse der ersten Serie der Verheilungsversuche vor. Diese Versuche wurden im Frühjahr 2017 gestartet und nach einer Versuchsdauer von 120 Tagen im August beendet. Im Ergebnis zeigt sich bei drei Versuchen mit der gleichen Belastungsgeschichte eine maximale Dilatanz von 1,25 – 1,5 % sowie axiale Verzerrungen im Bereich von 8,2 – 9,1 %. Die geplanten weiteren zwei Versuchsserien wurden vorgestellt sowie zu diesen die Vorausberechnungen der zu erwartenden axialen, radialen und volumetrischen Verformungen auf Grundlage von Erfahrungen aus bereits durchgeführten Versuchen des gleichen Steinsalzes präsentiert. Darüber hinaus wurden erste Simulationsergebnisse des Virtuellen Demonstrators gezeigt. Das Berechnungsmodell des Virtuellen Demonstrators ist charakterisiert durch einen Streckenabschnitt im Steinsalz, der zunächst als offene Strecke simuliert und anschließend hälftig mit einem Abdichtungsbauwerk versehen wird. Die rechnerische Simulation betrifft sowohl Auffahrung-, wie auch Offenhaltungs- und Verschlussphase.

Die zweite Serie mit vier Verheilungsversuchen startete Ende September. Diese Versuche werden mit Asse-Steinsalzproben bei einer konstanten Temperatur von 35 °C durchgeführt und sind gekennzeichnet durch eine gleichartige Belastung aller Proben in der Schädigungsphase und unterschiedlichen deviatorischen Beanspruchungen in der Verheilungsphase, wodurch der Einfluss des Spannungszustandes auf das Verheilungsverhalten von Steinsalz untersucht werden soll. Auf dem zweiten Workshop in Leipzig wurden zu diesen Versuchen Zwischenergebnisse vorgestellt und diskutiert. Darüber hinaus zeigte der Zuwendungsempfänger Ergebnisse der numerischen Berechnungen zum Virtuellen Demonstrator mit einem modifizierten Berechnungsmodell.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Der Zuwendungsempfänger wird am zehnten Projekt-Workshop im März 2018 in Albuquerque (New Mexiko, USA) teilnehmen und weitere numerische Simulationen zum Virtuellen Demonstrator (AP5) durchführen. Die Verheilungsversuche werden gemäß der Planung fortgesetzt.

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

Literatur zum aktuellen Verbundprojekt:

Andreas Hampel, Till Popp, Kai Herchen: Current Status of Research in the Joint Project WEIMOS, Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifikation der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz, Proceedings of the 8th US/German Workshop on Salt Repository Research, Design and Operation, Middelburg, The Netherlands, September 5-7, 2017

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11456A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- e <sup>2</sup> ), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2016 bis 28.02.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 720.962,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Schäfer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel des Vorhabens ist es, die Kenntnisse zur Langzeit-Integrität der Bentonitbarriere im Kontakt mit niedrig mineralisierten Grundwässern (z. B. glazialen Schmelzwässern) und die damit verbundene Bentonit-Erosion und potentielle Mobilisation von Tonminerkolloide/-Nanopartikel aus dem Nahfeldbereich zu untersuchen. Ein weiterer Aspekt ist die Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen-Wechselwirkung und der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erweitern und auf dieser Basis die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation zu bewerten. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Es schließt damit an die Arbeiten der vorangegangenen KOLLORADO Vorhaben an.

Im Einzelnen soll das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel durch die im KIT-INE angewandten spektro-/mikroskopischen Methoden dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen Radionuklidtransports zu erreichen. Zudem sollen die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse verwendeten Codes ermittelt werden. Im Rahmen der Modellierungsarbeiten werden die Codes COFRAME und d<sup>3f++</sup> für den kolloidgetragenen Schadstofftransport anhand von In-situ-Experimenten am Standort Grimsel weiter qualifiziert und Modelle zu Bentoniterosion weiterentwickelt und angewandt. Im vorliegenden Bericht werden die Arbeiten des KIT beschrieben.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT-INE)
  - AP1.1 Mechanismen der Kolloid-RN-Kluftmineral-Wechselwirkung
  - AP1.2. Kolloidgetragene Radionuklid-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/KIT-INE)
  - AP2.1: Simulationsrechnungen für weitere CFM Homolog/RN Experimente (GRS)
  - AP2.2: Simulationsrechnungen für das integrierte CFM Experiment (GRS/KIT-INE))
  - AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
  - AP2.4: Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen im Kristallingestein (KIT-INE)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS/KIT-INE)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: *Status:* Der nächste Schritt im Long term In-situ-Test (LIT) sieht den Ausbau der Bentonitquelle mitsamt der enthaltenen Tracer sowie der Quellschicht vor. Dazu soll die gesamte Installation überbohrt werden. Um die Quelle und die fragile Quellschicht vor der mechanischen Belastung während des Überbohrens zu schützen, wird zuvor ein geeignetes Epoxidharz in die Scherzone injiziert und die Probe dadurch stabilisiert. Der LIT Mock-up Test wurde fortgesetzt, um die Quellschicht um die Bentonitquelle in einem geeigneten Verfahren zu konservieren und post-mortem zu untersuchen. Zusätzlich stehen drei weitere Erosions-Experimente mit kom-

paktiertem Bentonit für eine Machbarkeitsstudie zum Überbohren des LIT-Versuchs zur Verfügung. Die Vorbereitungen des Laborprogramms zur Untersuchung des Effektes sauerstoffreicher glazialer Schmelzwässer auf die RN-Mobilisierung in geklüfteten Bohrkernen wurden vorangetrieben. Mithilfe der IC-ICP-MS konnte die Reduktion des Tc- Homologes Re(VII) zu Re(IV) durch Sn(II) verfolgt werden.

AP1.2: *Status:* Schwerpunkt der Arbeiten im zweiten Halbjahr 2017 lag weiterhin auf der begleitenden Analytik und Interpretation der Proben von LIT sowie Proben der Remobilisationstests (REMO-I und REMO-II).

- a) Die Ultraspurenanalytik mittels AMS wurde auf Proben von den Experimentphasen LIT, LIT high flow und dem Laborexperiment LIT Mock-up angewendet. Die Ergebnisse zeigen für LIT und LIT high flow Proben eine gemessene Konzentration von  $^{99}\text{Tc}$  im ppq Bereich und für die getestete LIT Mock-up Probe  $\sim 100$  ppt.
- b) Eine Machbarkeitsuntersuchung zur Stabilisierung der LIT Quellschicht vor dem Überbohren wurde im Labor gestartet. In einem ersten Schritt wurden drei geeignete Epoxidharze beschafft und erste Experimente durchgeführt. Hierzu wurde zunächst Kluftfüllmaterial aus dem Untertagelabor Grimsel im wassergesättigten und im trockenen Zustand sowie nach dem Wasseraustausch durch Methanol imprägniert. Die Untersuchungen orientierten sich an den In-situ-Bedingungen im Untertagelabor. Ein Harz härtet unter den vorliegenden In-situ-Bedingungen nicht aus und wird nicht weiter betrachtet. Die finale Entscheidung für eines der übrigen Harze wird im Zuge des CFM Field-Team Meetings, im 1. Quartal 2018, getroffen.
- c) Die AMS Ergebnisse des Run 13-05 zeigen deutliche Signale von  $^{241}\text{Am}$  und  $^{244}\text{Pu}$  aus dem CRR Feldexperiment von 2002. Dieser Fund wurde kürzlich veröffentlicht und hat ein neues Experiment motiviert (REMO-II); die Injektion von Bentonitkolloiden als Konkurrenzoberfläche in den Injektionsbereich von Run 13-05 (CRR 99.02). REMO-II, der als Push-Pull-Test geplant war, musste aufgrund ungünstiger hydraulischer Bedingungen vor Ort angepasst werden. Die Injektion der Bentonitsuspension verlief erfolgreich, allerdings reichte die maximale Extraktionspumprate ohne Störung des LIT Experiments nicht aus um signifikante Anteile der Suspension wieder zu extrahieren. Daher wurde die Extraktion gestoppt und die Kolloidfahne in Richtung Pinkel Oberflächenpacker geleitet und kontinuierlich beprobt. Die im Verlauf des Experiments am Pinkel Oberflächenpacker erhaltenen Proben wurden charakterisiert.  $71 \pm 10$  % des konservativen Tracers wurde in den Proben detektiert, der Wiedererhalt der Kolloidphase liegt hingegen lediglich bei  $40 \pm 10$  %. LIBD-Messungen und radioanalytische Untersuchungen mit AMS stehen noch aus.

AP2.2: *Status:* Simulationsrechnungen zur Speziation und Löslichkeit der Radionuklide U, Np, Tc, Pu und Am in Grimsel- und Bentonitwässern wurden durchgeführt. Im Vergleich zu den Ergebnissen des CRR Projektes dominiert auch im reduzierenden Bentonit U(VI) die Speziation, während Np(V) und Tc(VII) zu Np(OH)<sub>4</sub> und TcO(OH)<sub>2</sub> reduziert werden. Das Pourbaix-Diagramm von Plutonium wird über einen weiten pH-Bereich (6,5-12) von Pu(OH)<sub>4</sub> bestimmt, wohingegen im reduzierenden Bentonit Pu(III)-Verbindungen Pu<sup>3+</sup>, Pu(CO<sub>3</sub>)<sup>+</sup> und Pu(OH)<sup>2+</sup> auftreten. Die Löslichkeit von Americium in Grimsel Wasser wird von Am(OH)<sub>3,am</sub> und ab einem pH-Wert von 8,8 von Am(CO<sub>3</sub>)(OH)<sub>am</sub> bestimmt.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1 & 2: Schwerpunkt des nächsten ½ a werden neben den laufenden Laborversuchen und Modellierungen vor allem weitere Machbarkeitsstudien zur Überbohrung und die Planung des Ausbaus von LIT selbst sein. Mehrere Protokolle der Imprägnation der Kontaktzone werden an vergleichbaren Laborexperimenten getestet. Die Bentonitquelle dieser Experimente wird in der Werkstatt des Untertagelabors überbohrt. Dabei soll die Stabilität der Imprägnation während der mechanischen Belastung des Überbohrens getestet werden. Weitere Proben von diesen Experimenten REMO-I und REMO-II werden derzeit analysiert. Die Simulationsrechnungen werden auf die Elemente Ra, Th, Se und Ca sowie auf Mischungen der Wässer (10 % Bentonit, 90 % Grimsel) ausgeweitet. Die Redoxkapazität des unter Argon-Atmosphäre gelagerten Äspö-Granites soll gemessen werden.

AP3: Für KOLLORADO-e<sup>2</sup> wird weiterhin auf Publikationen in peer-review Journalen fokussiert (siehe 5.)

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Rinderknecht, Franz: Bentonite erosion and colloid mediated transport of radionuclides in advection controlled systems, Diss., KIT, 2017

Drake, Mathurin, Zack, Schäfer, Roberts, Whitehouse, Karlsson, Broman, and Åström (2018): Incorporation of Metals into Calcite in a Deep Anoxic Granite Aquifer, Environ. Sci. Technol., 52(2), 493-502

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11456B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- $e^2$ ), Teilprojekt B	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.03.2016 bis 28.02.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 298.115,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Noseck

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Hauptziel des Vorhabens ist es, die Kenntnisse zur Radionuklid-Kolloid und Kolloid-Gesteinsoberflächen Wechselwirkung und der zugrundeliegenden Mechanismen unter naturnahen Bedingungen am Beispiel geklüfteter Granitsysteme zu erweitern und auf dieser Basis die Relevanz des kolloidgetragenen Radionuklidtransports hinsichtlich der Langzeitsicherheit eines Endlagers in einer Hartgesteinsformation zu bewerten. Darüber hinaus werden generische Aussagen zur Kolloidrelevanz erarbeitet. Es schließt damit an die Arbeiten der Vorhaben KOLLORADO-1 und KOLLORADO-2 an.

Im Einzelnen soll das experimentelle Programm im Labor und im Untertagelabor Grimsel durch die im KIT-INE angewandten spektroskopischen und mikroskopischen Methoden dazu beitragen, ein verbessertes mechanistisches Verständnis der Integrität der Bentonitbarriere und des kolloidgetragenen Radionuklidtransports zu erreichen. Zudem sollen die Übertragbarkeit der Labordaten auf natürliche Systeme überprüft und Eingangsdaten für die in der Langzeitsicherheitsanalyse verwendeten Codes ermittelt werden. Im Rahmen der Modellierungsarbeiten werden die Codes COFRAME und d<sup>3f++</sup> für den kolloidgetragenen Schadstofftransport anhand von In-situ-Experimenten am Standort Grimsel weiter qualifiziert und Modelle zu Bentoniterosion und Transport weiterentwickelt und angewandt.

Im vorliegenden Bericht werden die Arbeiten der GRS beschrieben.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Experimentelles Programm zum kolloidgetragenen RN-Transport (KIT-INE)
  - AP1.1: Mechanismen der Kolloid-RN-Kluftmineral-Wechselwirkung
  - AP1.2: Kolloidgetragene Radionuklid-Migration
- AP2: Modellrechnungen zum kolloidgetragenen RN-Transport (GRS/KIT-INE)
  - AP2.1: Simulationsrechnungen für weitere CFM Homolog/RN Experimente (GRS)
  - AP2.2: Simulationsrechnungen für das integrierte CFM Experiment (GRS/KIT-INE)
  - AP2.3: Bewertung des kolloidgetragenen RN Transports (GRS)
  - AP2.4: Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen im Kristallingestein (KIT-INE)
- AP3: Integration der Ergebnisse und Abschlussdokumentation (GRS/KIT-INE)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Planung eines Workshops zur Präsentation und Diskussion der Ergebnisse des thermodynamischen Benchmarks zur Speziation der in den CFM-Feldexperimenten verwendeten Radionuklide. Versendung der Excel-Datei mit der Aufgabenstellung an die Teilnehmer aus USA, UK, Südkorea, Japan, Deutschland und Tschechien. Durchführung und Dokumentation der Rechnungen zu Teil 0, 1 und 2 des Benchmarks. Beginn des Vergleichs von Screening-Rechnungen für das Remobilisierungsexperiment im Felslabor Grimsel, bei dem Grimsel-Grundwasser mit einer hohen Konzentration von Bentonit-Kolloiden in einen Dipol injiziert wurde, mit den Ergebnissen des Experiments. Diskussion möglicher Ursachen für die Abweichungen. Weiterführung der Simulationsrechnungen zu den Durchbruchkurven für U und Np in CFM RUN 13-05 und CRR #32 unter Berücksichtigung der Redoxkinetik.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP2: Sammlung und Zusammenstellung der Ergebnisse aller Teilnehmer, Durchführung eines Workshops zur Diskussion aller Ergebnisse, der weiteren Vorgehensweise und Vorbereitung eines zusammenfassenden Berichts zum thermodynamischen Benchmark für die Speziation der in den CFM-Feldexperimenten verwendeten Radionuklide. Durchführung von weiteren Rechnungen zum Remobilisierungsexperiment im Felslabor Grimsel unter Berücksichtigung der realen experimentellen Randbedingungen. Implementierung des konzeptuellen Modells zur Simulation der Prozesse im Nahbereich des LIT-Experiments in PHAST und Durchführung erster Testrechnungen. Weiterführung der Simulationsrechnungen zu den Durchbruchkurven für U und Np in CFM RUN 13-05 und CRR #32 unter Berücksichtigung der Redoxkinetik.

AP3: Ausrichtung des CFM-Modeller Workshops in Berlin zur Diskussion der Ergebnisse mit den anderen Modellierergruppen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11466</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.3	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.03.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.447.555,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Reiche

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Inhalt dieses FuE-Vorhabens ist die Entwicklung eines Rechenmoduls für das Programmpaket RepoTREND zur Simulation von Prozessen im Nahfeld eines Endlagersystems. Dabei muss die dem Nahfeldmodul zugrundeliegende Softwarearchitektur (sie definiert die grundlegenden Komponenten eines Softwaresystems und beschreibt die Zusammenhänge, die zwischen den Komponenten bestehen) vor allem eine hohe Modularität der Programmstruktur und eine hohe Flexibilität gegenüber neuen Anforderungen aufweisen, um eine einfache Modifikation und Erweiterung des Programmcodes zu gewährleisten. Die Entwicklung einer Softwarearchitektur mit den genannten Hauptmerkmalen ist eine Voraussetzung für den Erfolg des gesamten Projekts und beeinflusst maßgeblich den erforderlichen Aufwand für die Entwicklung des Programmcodes. Die Erstellung relevanter Softwarearchitektur gilt deswegen als das wichtigste Teilziel des Projekts.

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 sechs Arbeitspakete:

- AP1: Anforderungsanalyse und Wissensmanagement
- AP2: Vorarbeiten für die Codeentwicklung
- AP3: Codeentwicklung. Umsetzung der in AP2 erarbeiteten Konzepte in einen Programmcode
- AP4: Test, Qualitätssicherung, Dokumentation
- AP5: Verfolgung von Anforderungen aus aktuell laufenden FuE-Projekten
- AP6: Berichte zum Projektfortschritt

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP2: Ausarbeitung und Evaluierung von folgenden Konzepten:

- Lösung von Multiphysikproblemen bei heterogenen Modellgebieten (Kopplung unterschiedlicher Modelle),
- Generische Umsetzung von Differentialoperatoren
- Algorithmen zum Lösen von Systemen von Differentialgleichungen,
- Einheitliche Speicherung von Daten (als skalare, vektorielle und tensorielle Datenfelder), die sich auf Rechengitterelemente (Zelle, Schnittfläche, Kante, Knoten) beziehen,
- Standardisierte Berücksichtigung von Dimensionen (Länge, Masse, Zeit) von verwendeten physikalischen Größen,
- Registry-Konzept für zentralisierte Verwaltung von beliebigen Datenfeld-Objekten: In-/Output, Speicherung von Zwischenergebnissen,

- Evaluierung der Möglichkeiten für Datenvisualisierung
- Evaluierung einiger Rechengittergeneratoren: Open-source Rechengittergeneratoren blockMesh und snappyHexMesh decken die meisten wichtigsten Anforderungen ab. Der große Nachteil ist, dass diese Tools keine grafische Benutzeroberfläche zur Verfügung stellen. Ein- und Ausgabeformate sind jedoch mit einigen gängigen Visualisierungstools (wie z. B. ParaView) kompatibel. Hierzu ist noch keine Entscheidung getroffen.
- Evaluierung der Open-source Bibliothek OpenFOAM für Vektor- und Matrizenoperationen sowie Solver für einige typische CFD-Probleme.

AP4: Bei der Entwicklung von NaTREND sollen von Beginn an Vergleiche mit den Ergebnissen anderer Rechenprogramme durchgeführt werden. Dazu ist es erforderlich, frühzeitig geeignete Testfälle zu definieren. Als geeignetes Vergleichsprogramm wurde der Code PFLOTRAN identifiziert, der von Sandia National Labs (USA) für Modellrechnungen zur Schadstoffausbreitung aus Endlagern eingesetzt wird. In Zusammenarbeit mit Sandia wurden zunächst zwei einfache Testmodelle definiert, die mit beiden Programmsystemen zu berechnen sind. Hierzu wurde auf deutscher Seite vorerst das vorhandene Nahfeldmodul LOPOS eingesetzt. Detaillierte Vergleiche der Rechenergebnisse stehen noch aus. Das Programmwerkzeug RepoSUN wurde für die Auswertung von probabilistischen Rechenläufen im Hinblick auf Sensitivitäts- und Ungewissheitsanalyse entwickelt. Im Rahmen der Projekte WiGru7 und WiGru8 sind derartige Analysen geplant, wobei insbesondere auch die Methode SobolHDMR zum Einsatz kommen soll. Diese steht jedoch nur als C#-Code zur Verfügung. Die programmtechnische Verknüpfung mit dem RepoTREND-Instrumentarium ist im Projekt RepoTREND+ durchzuführen. Mit der Umsetzung wurde begonnen. Nach der Evaluierung der Konzepte zum sogenannten Single-Source-Publishing (Einzelquellenausgabe) wurde das Tool Documenta ausgewählt. Die Benutzerhilfe zur grafischen Benutzeroberfläche XENIA wurde bereitgestellt und an XENIA angebunden. Die zurzeit zum automatisierten Testen eingesetzte Bibliothek CppUnit wird seit 2008 nicht mehr weiter unterstützt/entwickelt und soll aus diesem Grund mittelfristig abgelöst werden. Aktuell erfolgt eine Evaluierung von geeigneten Testtools, die CppUnit ersetzen könnten. Die XENIA-Datenbank wurde auf einen zentralen Server migriert.

AP5: Anforderungen im Kontext des Projekts CHRISTA II (FKZ 02E11617B) wurden diskutiert und aufgenommen.

AP6: Der vorliegende Bericht wurde erstellt.

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

Schwerpunkt im nächsten Halbjahr ist das AP2. Weiterhin sollen für das Nahfeldmodul NaTREND relevante vorhandene Modelle und Konzepte identifiziert und evaluiert sowie eigene Konzepte erstellt werden.

Die Arbeiten zur Bereitstellung eines Rechengittergenerators werden fortgeführt.

Die Arbeiten zur Anbindung des Codes SobolHDMR werden fortgeführt.

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

Tatiana Reiche: Design Pattern Enabling the Flexible Integration of Effects into a Basis Flow Model, 25.-29. July, 2017, Guilin (China).

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11476A</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 30.06.2019		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 1.023.480,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Schneider	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Mit d<sup>3</sup>f und r<sup>3</sup>t wurden Werkzeuge zur Modellierung der dichteabhängigen Grundwasserströmung und des Radionuklidtransportes durch poröse Medien (Vorhaben GRUPRO bzw. TRAPRO) mit expliziter Berücksichtigung von Wärmetransport, Klüften und Kluftsystemen sowie freier Grundwasserflächen (E-DuR) entwickelt. Durch die Umstellung auf die neue, C++-basierte Plattform UG4 erfuhren die Codes eine deutliche Beschleunigung und wurden zu einem einheitlichen Werkzeug „d<sup>3</sup>f++“ integriert (A-DuR, H-DuR). Der Code d<sup>3</sup>f++ wurde bzw. wird in den Vorhaben WEIMAR, QUADER und SANTOS angewendet.

Das Vorhaben hat eine Anwendung des Grundwasserströmungs- und Transportcodes d<sup>3</sup>f++ auf endlagerrelevante Aufgabenstellungen, Vergleichsrechnungen mit anderen Codes und damit einen Nachweis seiner Leistungsfähigkeit sowie die Erhöhung des Vertrauens in die Modellierungsergebnisse zum Ziel. Dazu gehören eine Weiterentwicklung der Lösungsverfahren insbesondere für regionale Modelle mit freier Grundwasserfläche, eine weitere Beschleunigung und eine breitere Anwendbarkeit. Letzteres soll neben Verbesserungen in Benutzeroberfläche und Präprozessor durch die Einführung eines Speicherterms geschehen, dessen Implementierung in d<sup>3</sup>f++ eine genauere Modellierung kurzfristiger Prozesse ermöglicht.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Anwendungs- und Vergleichsrechnungen
- AP2: Erweiterung des Anwendungsbereichs d<sup>3</sup>f++
- AP4: Projektleitung und Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1.1: Äspö Task 9:

Die augenscheinlich diffusive Tracerausbreitung mit zwei örtlich verschiedenen Diffusionskoeffizienten ist immer noch nicht befriedigend geklärt. Mit Hilfe von Modellrechnungen auf der Grundlage von Äspö-spezifischen Parametern wird untersucht, ob und in welcher Menge

gelöste Gase auf dem Weg zum Bohrloch infolge sinkenden hydraulischen Druckes freigesetzt werden. Daten zur Menge der gelösten Gase wurde in zwei Quellen gefunden. Danach findet eine Entgasung entweder gar nicht oder nur in so geringer Menge statt, dass rechnerisch nur ein Bereich von wenigen Millimetern um das Bohrloch herum betroffen wäre. Der Bericht über die Ergebnisse des Skin-Workshops in Prag 2016, der in Zusammenarbeit mit Fracture Systems Ltd erstellt wird, hat Draft-Status erreicht.

#### AP1.2: Site Descriptive Model (SDM) für Äspö

Die Sichtung der sehr umfangreichen und tiefgehenden Literatur von SKB wurde fortgesetzt und die Daten ausgewertet. Durch begleitende Rechnungen wurden zum Beispiel Fragen zur Ausbildung von tiefen Konvektionszellen sowie zur Wahl des Modellgebietes und der Randbedingungen beantwortet. Zwischenergebnisse wurden auf dem topical workshop bei SKB und beim Meeting der Task Force on Groundwater Flow vorgestellt und diskutiert.

#### AP1.3: Modell der WIPP-Site

Die Arbeiten an den Modellrechnungen mit freier Grundwasseroberfläche konnten durch die Nutzung der RasterLayerProjector-Methode beschleunigt werden. Die Ergebnisse wurden am 7.9.2017 im Rahmen des Deutsch-Amerikanischen Workshops in Middelburg vorgestellt.

#### AP1.4: Strömung und Transport im Kristallin für einen potentiellen Endlagerstandort in Tschechien

Umfangreiches Datenmaterial wurde von SURAO übernommen und mit dem Aufbau des Regionalmodells begonnen.

AP4: Am 1.12.2017 fand beim G-CSC in Frankfurt das dritte Projekt-Statusgespräch statt. Dabei stellten die GRS-Mitarbeiter den Stand Anwendungsrechnungen und die G-CSC-Mitarbeiter die bis dahin erfolgten Entwicklungsarbeiten vor, die zeitliche Planung der weiteren Arbeiten wurde aktualisiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1.1: Task 9: Erarbeitung einer neuen Herangehensweise an die Modellrechnungen zu Task 9 und Umsetzung.

AP1.2: Abschluss der Arbeiten am 2D-Vertikalmodell. Erstellung des 3D-Modells.

AP1.3: WIPP-Site: Die Rechnungen werden fortgeführt.

AP1.4: Das Regionalmodell wird fertiggestellt.

AP2.1: Die zunächst mit COMSOL durchgeführten Rechnungen zur Druckentlastung bilden die Grundlage für eine Überprüfung der Implementierung des Speicherterms in  $d^3f^{++}$ .

AP4: Das nächste Projektstatusgespräch wird im Mai 2018 stattfinden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main, Theodor-W.-Adorno-Platz 1, 60323 Frankfurt am Main		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11476B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 30.06.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 595.088,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Wittum	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziele des Projekts sind eine Anwendung des Grundwasserströmungs- und Transportcodes  $d^3f++$  auf endlagerrelevante Aufgabenstellungen, Vergleichsrechnungen mit anderen Codes und damit einen Nachweis seiner Leistungsfähigkeit sowie die Erhöhung des Vertrauens in die Modellierungsergebnisse. Dazu gehört eine Weiterentwicklung von  $d^3f++$  hinsichtlich einer verbesserten Robustheit der Lösungsverfahren insbesondere für regionale Modelle mit dünnen Schichten und freier Grundwasser-oberfläche, einer weiteren Beschleunigung der Rechnungen und einer breiteren Anwendbarkeit. Letzteres soll neben Verbesserungen in der Benutzeroberfläche und der Modellerstellung durch die Einführung eines Speicherterms geschehen, der eine genauere Modellierung kurzfristiger Prozesse ermöglicht. Hierzu sollen im Projekt Anwendungs- und Vergleichsrechnungen: 1.1 Äspö Task 9, 1.2 „Äspö site descriptive model“, 1.3 Modell der WIPP-Site (AP1), die Erweiterung des Anwendungsbereichs von  $d^3f++$ : 2.1 Erweiterung der Strömungsgleichung in  $d^3f++$  um einen Speicherterm, 2.2 Weiterentwicklung des Präprozessors ProMesh (AP2) und die Weiterentwicklung der Lösungsverfahren: 3.1 Übertragung und Implementierung des LIMEX-Verfahrens, 3.2 Robuste Glättungsverfahren für den geometrischen Mehrgitterlöser, 3.3 Verbesserung der Grobgitterkorrektur, 3.4 Anpassung der FAMG-Verfahren an die thermohaline Grundwasserströmung und parallele Skalierbarkeit, 3.5 Parallele adaptive Verfahren und angepasste Gitterstrukturen, 3.6 Stabile Modellierung freier Grundwasser-oberflächen (AP3) eingebracht werden.

Die Ergebnisse werden zusammen mit den Projektpartnern verwertet. Das Simulationssystem UG ist weltweit über 390-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. Das Verbundprojekt ist ein Folgevorhaben der drei BMBF-Projekte vom 01.10.2006-31.03.2011 (FKZ 02E10326), vom 01.10.2008-30.09.2012 (FKZ 02E10568) und vom 01.03.2012-31.10.2015 (FKZ 02E11062).

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

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

- AP1: Anwendungs- und Vergleichsrechnungen
- AP2: Erweiterung des Anwendungsbereichs von  $d^3f++$
- AP3: Weiterentwicklung der Lösungsverfahren

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Bei der Bewegung der freien Oberfläche im WIPP-Modell treten Probleme im Teilgebiet auf, in welchem die Konstellation der geologischen Schichten sehr kompliziert ist. Diese Probleme wurden genauer betrachtet. Insbesondere wurde das Gitter in diesem Bereich optimiert. Außerdem wurden für die weitere Untersuchung die Routinen für die Ausgabe der Courant-Zahl der Oberfläche implementiert.

AP2: An der Skriptsteuerung des Transportteils von  $d^3f^{++}$  wurden einige Verbesserungen vorgenommen. Es wurde an der Realisierung eines neuen Speicherterms für den Strömungsteil in  $d^3f^{++}$  gearbeitet. Dieser soll eine druckabhängige Porosität ermöglichen bzw. einen Speicherkoeffizienten implementieren.

Zudem wurden zur Überprüfung und Sicherstellung von guten Elementqualitäten neue Werkzeuge zu ProMesh hinzugefügt. Histogramme zur Einteilung von Seitenverhältnissen von Elementen können nun erstellt werden. Zusätzlich werden Elemente entsprechend ihrer Qualitäten gruppiert und visualisiert. Des Weiteren wurde ein Mechanismus zur genauen Protokollierung und darauf aufbauend zur automatischen Wiederholung von Benutzern ausgeführten Meshing-Operationen implementiert. Benutzer können so komplexe Meshing-Algorithmen im Benutzerinterface definieren, anschließend parametrisieren und schließlich automatisch auf unterschiedlichen Eingabedaten ausführen. Rasterbasierte Werkzeuge für die Zuweisung von Teilgebieten, zur Spezifikation von Durchlässigkeiten oder für das Setzen von Salzkonzentrationen wurden zur Software hinzugefügt. Die Implementation ist so allgemein, dass Rasterdaten unterschiedlicher Dimension geladen und auf unterschiedliche Teile des Rechengebiets angewandt werden können.

AP3: Für die Diskretisierung der Randbedingungen an der freien Oberfläche sollen die auf Flat-Top-Funktionen basierten, erweiterten Finite-Volumen-(X-FV-)Verfahren verwendet werden. In dieser Phase des Projekts wurden diese Methoden weiter untersucht. Insbesondere wurden die Stabilität und die Konvergenzordnung nachgewiesen. Die Anpassung der Implementierung dieser Verfahren für  $d^3f^{++}$  wurde fortgesetzt.

Zudem wurde die parallele Infrastruktur für verteilte Matrizen erweitert und Algorithmen zum Sammeln verteilter Matrixzeilen sowie zugehöriger Unbekannter auf einzelne Prozesse implementiert. Es werden aktuell verschiedene Tests durchgeführt, mit denen Effekte auf die Effizienz, den Rechenaufwand sowie die Robustheit von Glättern und Lösern bei unterschiedlichen Verteilungen überprüft werden soll. Weitere Untersuchungen fanden im Bereich der stromlinienabhängigen Partitionierung von Gittern statt. Ein Prototyp eines geeigneten Graphpartitionierers wurde hierzu entwickelt. Gegenwärtig wird die Funktionalität dahingehend erweitert, dass allgemeinere Graphgewichte basierend auf Matrixkopplungen betrachtet werden können. Ziel ist es, dominante Kopplungen der Steifigkeitsmatrix sowie temporärer Matrizen in Glättern (z. B. ILU Zerlegung) bei der Verteilung besonders zu berücksichtigen, um so die Robustheit der parallelen Löser weiter zu erhöhen.

Für das LIMEX Verfahren wurden Tests durchgeführt. Ein Manuskript ist in Vorbereitung.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Arbeiten werden entsprechend der im Antrag angegebenen Vorgehensweise fortgesetzt.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

S. Reiter, A. Vogel, G. Wittum: Large Scale Simulations of Continuum Models using Parallel Geometric Multigrid Methods; In: K. Binder et al. (eds.), NIC Symposium 2018, NIC Series (accepted)

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11486A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.12.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 224.999,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Wolf	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Wesentlichen soll eine Vorgehensweise entwickelt werden, die eine nachvollziehbare Abwägung zwischen den Anforderungen an die Sicherheit während der Betriebsphase und der Langzeitsicherheit erlaubt. Für die deutschen Endlagerkonzepte in Ton- und Salzgestein werden auf der Basis von FEP die Abhängigkeiten zwischen Betriebs- und Nachverschlussphase dokumentiert. Darauf basierend sollen Methoden und Ansätze entwickelt werden, die eine nachvollziehbare Bewertung der Abhängigkeiten von Betriebs- und Nachbetriebsphase erlauben. Des Weiteren werden im Rahmen der Arbeiten die Grundzüge für ein Sicherheitskonzept in der Betriebsphase erstellt und geprüft, ob es Harmonisierungsbedarf zwischen den Sicherheitskonzepten der Betriebs- und Nachverschlussphase gibt. Mit diesem Vorhaben werden neuartige konzeptionelle Ansätze und methodische Voraussetzungen geschaffen, die es erlauben, einen konsistenten und in sich geschlossenen Sicherheitsnachweis zu führen. Die gemeinsame Bearbeitung des Vorhabens durch die DBE TECHNOLOGY und die GRS, insbesondere deren Arbeiten auf dem Gebiet der Betriebs- und Langzeitsicherheit und Mitarbeit in entsprechenden internationalen Gremien bilden die Grundlage für eine erfolgreiche Durchführung des Vorhabens.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst die folgenden Arbeitspakete:

- AP1: Grundlagen (rechtlicher Rahmen, internationale Empfehlungen, Endlagerkonzepte)
- AP2: Grundzüge eines Sicherheitskonzepts für die Betriebsphase
- AP3: Zusammenstellung eines Kataloges mit FEP beim Bau und Betrieb eines Endlagers
- AP4: Bewertung der Betriebsphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf die Langzeitsicherheit
- AP5: Bewertung der Nachverschlussphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf den sicheren Betrieb eines Endlagers
- AP6: Methoden und Ansätze
- AP7: Dokumentation

GRS ist federführend für die Arbeitspakete 1, 4, 6 und 7.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP2: Es wurden keine Arbeiten zu AP2 im zweiten Halbjahr 2017 durchgeführt.
- AP3: Die FEP-Liste für die Betriebsphase wurde auf den Treffen am 14.8., 18.9. und 26.10. mit DBE Technology weiterentwickelt und auf der Grundlage der Ergebnisse überarbeitet. Die FEP-Liste umfasst Ende des Jahres 2017 mehr als 140 FEP.
- AP4: Die FEP-Liste für die Betriebsphase wurde vollständig hinsichtlich ihrer Relevanz für die Langzeitsicherheit der deutschen Endlagerkonzepte in Salz- und Tongestein bewertet.
- AP5: Eine Bewertung der FEP für die Nachverschlussphase von Endlagern in Ton- und Salzgestein hinsichtlich ihrer Bedeutung für die Betriebsphase wurde vollständig durchgeführt.
- AP7: Bereits fertige Ergebnisse wurden in den Abschlussbericht integriert.

Die Arbeiten in AP 6 (Synthese) wurden noch nicht begonnen.

Die Arbeiten zu AP1 sind abgeschlossen.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die Arbeiten sind abgeschlossen und dokumentiert. Es wird über die GRS (Köln) ein weiterer Austausch mit dem Vorhaben GEOSAF geben.
- AP2: Das Sicherheits- und Nachweiskonzept wird detaillierter ausgeführt.
- AP3+4: Die Arbeiten an der FEP-Liste für die Betriebsphase und die Bewertung der FEP sind abgeschlossen.
- AP5: Bewertung der FEP für die Nachverschlussphase von Endlagern in Ton- und Salzgestein hinsichtlich ihrer Bedeutung für die Betriebsphase ist abgeschlossen.
- AP6: Die Arbeiten in diesem AP (Synthese aus den AP2 bis AP5, Vorschläge zum methodischen Vorgehen) beginnen in der ersten Hälfte des Jahres 2018.
- AP7: Erstellung des Abschlussberichtes.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Die Ergebnisse aus dem Vorhaben wurden am 5.9. in Middleburg (NL) auf dem deutsch-amerikanischen Workshop zur Endlagerung in Salzgestein vorgestellt und in den Proceedings veröffentlicht.

Der Beitrag zu den Ergebnissen aus BASEL für die WM 2018 (Phoenix) wurde angenommen; Vortrag am 20.3.2018 in der Session Operational Safety and Post-Closure Safety: Wolf, J., Bertrams, N., Bollingerfehr, W., Buhmann, D., Fahrenholz, C., Filbert, W., Lommerzheim, A., Noseck, U., Prignitz, S.: Investigation of their Interactions by a FEP Analysis – WM 2018 paper #18040.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11486B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2016 bis 31.12.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 200.389,80 EUR	<b>Projektleiter:</b> Filbert	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das wesentliche Ziel des Vorhabens ist es, eine Vorgehensweise zu entwickeln, die eine nachvollziehbare Abwägung zwischen den Anforderungen an die Sicherheit während der Betriebsphase eines Endlagers für ausgediente Brennelemente und wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und der Langzeitsicherheit erlaubt. Für die deutschen Endlagerkonzepte in Ton- und Salzgestein werden auf der Basis von FEP die Abhängigkeiten zwischen Betriebs- und Nachverschlussphase dokumentiert. Darauf basierend sollen Methoden und Ansätze entwickelt werden, die eine nachvollziehbare Bewertung der Abhängigkeiten von Betriebs- und Nachbetriebsphase erlauben. Des Weiteren werden im Rahmen der Arbeiten die Grundzüge für ein Sicherheitskonzept in der Betriebsphase erstellt und geprüft, ob es Harmonisierungsbedarf zwischen den Sicherheitskonzepten der Betriebs- und Nachverschlussphase gibt. Mit diesem Vorhaben werden neuartige konzeptionelle Ansätze und methodische Voraussetzungen geschaffen, die es erlauben, einen konsistenten und in sich geschlossenen Sicherheitsnachweis zu führen. Die gemeinsame Bearbeitung des Vorhabens durch die DBE TECHNOLOGY und die GRS, insbesondere deren Arbeiten auf dem Gebiet der Betriebs- und Langzeitsicherheit und Mitarbeit in entsprechenden internationalen Gremien bilden die Grundlage für eine erfolgreiche Durchführung des Vorhabens.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm umfasst die folgenden Arbeitspakete:

- AP1: Grundlagen (rechtlicher Rahmen, internationale Empfehlungen, Endlagerkonzepte)
- AP2: Grundzüge eines Sicherheitskonzepts für die Betriebsphase
- AP3: Zusammenstellung eines Kataloges mit FEP beim Bau und Betrieb eines Endlagers
- AP4: Bewertung der Betriebsphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf die Langzeitsicherheit
- AP5: Bewertung der Nachverschlussphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf den sicheren Betrieb eines Endlagers
- AP6: Methoden und Ansätze
- AP7: Dokumentation

DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend für die Arbeitspakete 2, 3 und 5.

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

- AP3: Der FEP-Katalog für Bau und Betrieb eines Endlagers wurde aktualisiert und für die Wirtsgesteine Salz und Ton abgeschlossen.
- AP4: Mit der Bewertung der Betriebsphase hinsichtlich ihrer Auswirkungen auf die Langzeitsicherheit wurde begonnen.
- AP5: Der FEP-Katalog für die Nachverschlussphase wurde erstellt und die Bewertung der Nachverschlussphase hinsichtlich ihrer Auswirkungen auf den sicheren Betrieb eines Endlagers wurde begonnen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP1: Im 1. Halbjahr 2018 erfolgt der Abschluss der zusammenfassenden Darstellung des Regelwerks, der Empfehlungen zum Safety Case und der Endlagerkonzepte.
- AP2: Sicherheits- und Nachweiskonzept für die Betriebsphase werden abschließend dargestellt. Maßnahmen für den sicheren Betrieb des Endlagers werden identifiziert.
- AP3: Die Beschreibung des FEP-Katalogs zum Bau und Betrieb eines Endlagers und der Methodik zur Ableitung von EVI wird abgeschlossen. Die FEP für das Wirtsgestein Kristallin werden aufgenommen.
- AP4: Die Zuarbeit zur Bewertung der Betriebsphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf die Langzeitsicherheit wird abgeschlossen.
- AP5: Die Bewertung der Nachverschlussphase hinsichtlich ihrer Auswirkung auf den sicheren Betrieb eines Endlagers wird abgeschlossen.
- AP6: Die Arbeiten zur Entwicklung der Methoden und Ansätze für eine nachvollziehbare Bewertung der Abhängigkeiten von Betriebsphase und Nachbetriebsphase werden aufgenommen.
- AP7: Die Berichtserstellung zum Gesamtvorhaben BASEL wird fortgeführt.

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

Ein gemeinsamer Beitrag zur Waste Management Conference 2018 wurde mit GRS abgestimmt, zum Vortrag eingereicht und angenommen.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11496A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2016 bis 30.04.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 786.134,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Muñoz	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel dieses Vorhabens ist das wesentlich verbesserte Verständnis der metallischen Korrosion der Abfallbehälter in salzhaltigen, geochemischen Milieus und der Rückhaltung von Actiniden durch die Korrosionsprodukte unter den im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle im Ton- und im Salzgestein herrschenden Temperatur- und Druckbedingungen. Die Anwendung elektrochemischer Hochdruck/Hochtemperatur-Messmethoden mit samt moderner Spektroskopie- und Mikroskopie-Techniken soll dem Abbau von Ungewissheiten und Konservativitäten bei der Erstellung einer Langzeitprognose für die Freisetzung von Actiniden nach einem Ausfall von Endlagerbehältern dienen. Das Vorhaben steht in enger Verbindung zu dem Vorhaben KORPHA 02E11314, das die Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhaltiger Korrosionsphasen zum Ziel hat. Beide Vorhaben leisten damit einen Beitrag zur sicherheitsanalytischen Bewertung des Langzeitverhaltens von Ton- und Salzformationen als Endlagerwirtsgesteine.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Im Einzelnen werden folgende Teilziele verfolgt:

AP1: Aufbau einer elektrochemischen Messzelle zur Untersuchung der Korrosionskinetik

AP2: Elektrochemische Untersuchungen

AP3: Chemische und morphologische Charakterisierung

AP4: Koordination des Verbundvorhabens

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Elektrochemische Untersuchungen (AP2):

Die Anfälligkeit von Stahl AISI 309S wurde durch potentiodynamische Polarisationskurven unter unterschiedlichen Temperatur- und Druckbedingungen untersucht. Die Experimente wurden in dem dafür aufgebauten elektrochemischen Reaktor mit der geochemisch repräsentativen Q3-Lösung durchgeführt. Erste Versuche haben gezeigt, dass der austenitische Stahl für einen lokalisierten Angriff bei einem genügend anodischen Potential in dem gesamten Temperaturbereich von 30 °C bis 90 °C anfällig ist. Der nach dem Zusammenbruch der Passivität durchgeführte Rücklauf-Potentialscan zeigt eine breite Stromschleife, die auf eine lokalisierte Metallauflösung (sogenannte Pitting-Korrosion) hindeutet.

Das Potential, bei dem die Passivität zusammenbricht (Pitting-Potential) verschiebt sich mit der Temperatur in einer fast linearen Beziehung zu niedrigeren (negativeren) Potentialen. Daraus ist zu schließen, dass der Stahl bei Temperaturen höher als 100 °C stark korrodieren könnte. Erste Experimente unter einem Druck von 50 bar haben gezeigt, dass die Passivität der Oberfläche gestärkt wird und die Korrosion deutlich vermindert wird.

Chemische und morphologische Charakterisierung (AP3):

Die Morphologie und die chemische Zusammensetzung der Oberfläche von Stahlproben wurden nach den elektrochemischen Experimenten mittels REM-EDX und XPS untersucht. Die Analysen wurden am KIT durchgeführt und zusammen ausgewertet. Die REM-Mikroskopie lässt einen lokalisierten Korrosionsprozess, wie bereits von den elektrochemischen Versuchen angedeutet, bestätigen. Die anfangs rundförmigen Korrosionslöcher verbreiten sich senkrecht abwärts mit der Bildung tiefer Streifen in senkrecht positioniert Proben. Die XPS-Untersuchungen zeigen, dass die Hauptkomponenten des Stahls, Fe, Ni und Cr sich an der Oberfläche in der Form von Oxid/Hydroxiden befinden. Dabei spielt die Hydrolyse von Cr(III) bei dem Pit-Wachstum eine essentielle Rolle.

Koordination des Verbundvorhabens

Informationsaustausch über die Oberflächenanalyse und Abstimmung der weiteren Zusammenarbeit.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Systematische Polarisationsexperimente bei verschiedenen Temperaturen (25 °C bis 120 °C) und Drücken (2 bar bis 100 bar) für Stahl AISI 309S in Q2-Lösungen und für C-Stahl in Q3- und Q2-Lösungen.

Untersuchung des Einflusses der Temperatur und Druck auf die Passivität von AISI 309S und C-Stahl in Q3-Lösung mittels Impedanz-Spektroskopie und XPS-Analyse.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Corrosion of Steel in High-level Radioactive Waste Rock Repositories: Kinetics and Thermodynamics. A.G. Muñoz, D. Schild, NACE 2018, April 2018, Phoenix, Arizona.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11496B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2016 bis 30.04.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 475.748,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Finck	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die chemische und mechanische Stabilität von Metallbehältern mit radioaktiven Abfällen stellt im Rahmen der Langzeitsicherheitsanalyse einen wichtigen Aspekt dar. Für eine robuste Modellierung der Behälterkorrosion unter endlagerrelevanten Bedingungen ist ein detailliertes Verständnis der Teilprozesse des korrodierenden Materials erforderlich. Information zur Metallkorrosion für Bedingungen eines Endlagers in Steinsalz stehen nur sehr begrenzt aus der Literatur zur Verfügung. Ziel des Vorhabens ist es das Verständnis der Metallkorrosion der Abfallbehälter im salzhaltigen Milieu unter den im Nahfeld eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle herrschende T- und P- Bedingungen wesentlich zu verbessern. Mit Hilfe elektrochemischer Methoden sollen Teilreaktionen erschlossen werden, und mit Hilfe spektroskopischer und mikroskopischer Methoden die Struktur und die Zusammensetzung der Korrosionsprodukte sowie deren Oberflächen-Morphologie charakterisiert werden. Ein weiterer Schwerpunkt des Vorhabens ist es die Rückhaltung von Radionukliden an synthetischen, gut charakterisierten Referenz- Eisenkorrosionsprodukte mittels spektroskopischer und chemischer Methoden zu untersuchen. Ziel dieser Arbeiten ist es Unsicherheiten bezüglich der Wechselwirkung dieser Sekundärphasen mit Radionukliden und der langfristigen Prognostizierbarkeit der Auswirkungen auf die Radionuklidmobilität abzubauen. Eine Zusammenarbeit läuft mit der GRS Braunschweig.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP0: Literaturstudie
- AP1: Elektrochemische Untersuchungen
- AP2 Identifizierung von Eisenkorrosionsphasen und Sorption von Actiniden
  - AP2.2: Langzeitkorrosionsexperimente und Sorption von Actiniden
  - AP2.3: Quantenchemischen Rechnungen
- AP3: Dokumentation und Publikation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1 + AP2:

Die Tests zur Dichtigkeit des experimentellen Aufbaus für die Langzeitkorrosionsexperimente wurden abgeschlossen, und die Experimente zur Korrosion der Werkstoffe (CrNi-Stahl und C-Stahl) unter anaeroben Bedingungen bei 90 °C in salinaren Lösungen für unterschiedliche Kontaktzeiten begonnen. Nach einer Kontaktzeit von 3 Monaten wurden die Experimente mit beiden Werkstoffen jeweils in gesättigter NaCl oder MgCl<sub>2</sub> Lösung beendet, die Reaktoren gekühlt und unter Schutzgas geöffnet. Alle Proben transfers und Analysen wurden unter Schutzgas durchgeführt. Die REM Ergebnisse zeigen Lochfraßkorrosion der CrNi-Stahlprobe in NaCl Lösung, mit einer Neubildung von Fe- Cr- und Ni-haltigen (Hydr)oxid-Phasen unter den beobachteten leicht reduzierenden Bedingungen ( $E_h \sim -90$  mV/SHE); die Korrosionsrate liegt bei ca. 10  $\mu\text{m/a}$ . Dagegen wurde in der MgCl<sub>2</sub>-Lösung keine signifikante Korrosion des CrNi-Stahls festgestellt und es wurden auch keine reduzierenden Bedingungen gemessen. Die C-Stahlprobe korrodierte in beiden Lösungen unter Bildung von reduzierenden Bedingungen. Die REM-Daten deuten auf Korrosionsangriffe um die Kohlenstoff-Einschlüsse und eine Abtragung von Kohlenstoff an der Oberfläche hin. In NaCl-Lösung enthält die flüssige Phase C-haltige Fe-Oxid- oder -Hydroxid-Partikeln. In der MgCl<sub>2</sub>-Lösung wurde die Probe stärker als in der NaCl-Lösung korrodiert, mit einer Neubildung von oktaedrischen Partikeln, die die Oberfläche komplett zudecken; die Korrosionsrate liegt bei ca. 30  $\mu\text{m/a}$ . Zusätzliche XPS-Untersuchungen zur Charakterisierung der Sekundärphasen wurden begonnen und sind noch nicht abgeschlossen.

Experimente zur Sorption von Eu-152 an Magnetit in NaCl-Lösungen zeigen eine Zunahme der Rückhaltung mit dem pH-Wert, mit einer nahezu quantitativen Sorption bereits bei  $\sim$  pH 6. Die Rückhaltung nimmt mit zunehmender Ionenstärke leicht ab.

Mit Hilfe quantenchemischer Rechnungen wurde die Struktur von Magnetit bestimmt. Aufgrund der Präsenz von Fe(II) war das von der theoretischen Seite eine große Herausforderung. Sowohl die Struktur, als auch die elektrischen und magnetischen Eigenschaften von Magnetit werden korrekt beschrieben und sind in sehr guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten aus der Literatur.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1 + AP2:

Neue Korrosionsversuche sollen angesetzt werden. Experimente mit einer Kontaktzeit von 6 Monaten sollen beendet und analysiert werden. Bei Experimenten zu Rückhaltung an Magnetit sind spektroskopische Untersuchungen geplant sowie ein Wechsel am Hintergrundelektrolyten. Geplant ist auch, bei den Adsorptionsversuchen eine weitere Korrosionsphase zu benutzen.

Als nächster Schritt bei den Quantenchemischen Rechnungen planen wir die Untersuchung des Einbaus von Actinidionen in Magnetit.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11516</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Entwicklung eines technischen Konzeptes für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle und ausgediente Brennelemente in Kristallingestein in Deutschland (KONEKD)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Felder 3.1 + 3.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.08.2016 bis 30.09.2017	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 30.09.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 279.025,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Bertrams	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben hat zum Ziel, ein technisches Konzept für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle und ausgediente Brennelemente für Kristallin als Wirtsgestein in Deutschland zu entwickeln.

Zunächst soll der Stand von Wissenschaft und Technik zur Herstellung von Schächten, Rampen, Strecken und Einlagerungsbohrungen im Kristallin zusammengestellt und hinsichtlich eventuell noch notwendigem FuE-Bedarf bewertet werden.

Auf Basis generischer geologischer Daten soll ein technisches Endlagerkonzept in modellhafter Struktur und Aufbau entwickelt werden.

Weiterhin sollen die erforderlichen Zeitdauern und Kosten für Planung, Herstellung und Betrieb eines solchen Endlagers im Kristallin abgeschätzt werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Ermittlung der Methoden und Verfahren zur Herstellung von Tageszugängen, Großbohrlöchern und Strecken im Kristallin

AP2: Konzeptionelle Planung eines Endlagers anhand vorher ermittelter Daten und Abfallmengen

AP3: Abschätzen des Aufwandes für die Planung, Genehmigung und Realisierung eines Endlagers im Kristallin

AP4: Abschlussbericht

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

Das Vorhaben wurde im Berichtszeitraum abgeschlossen. Der Abschlussbericht wurde dem Projektträger zur Verfügung gestellt.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Keine.

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

N. Bertrams, P. Herold, M. Herold, J. Krone, A. Lommerzheim, S. Prignitz, E. Simo Kuate: Entwicklung eines technischen Konzeptes für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle und ausgediente Brennelemente in Kristallingestein in Deutschland, Abschlussbericht, DBE TECHNOLOGY GmbH, Peine, September 2017

N. Bertrams: Repository Concepts and Emplacement Technology; 3rd Sino-German Workshop on Radioactive Waste Disposal; 16.-19. May 2017, Dunhuang, China

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11526A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in Tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Felder 3.1 + 3.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2016 bis 28.02.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 58.938,34 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Kudla	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben CREATIEF soll die Chancen und Risiken der Option Endlagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe in Tiefen Bohrlöchern (3000 m bis 5000 m) in technischer und sicherheitstechnischer Hinsicht vertieft untersuchen. Dabei sollen insbesondere die bisher getroffenen Annahmen und Randbedingungen in aktuellen Studien und Forschungsvorhaben im Ausland und Inland analysiert und bewertet werden. Mögliche Defizite sollen identifiziert werden. Dabei soll vor allem untersucht werden, in wieweit die aktuellen Studien im Sinne einer soliden technisch-wissenschaftlichen Prüfung zur Bewertung der technischen und insbesondere sicherheitstechnischen Machbarkeit belastbar sind. Für identifizierte mögliche Schwachstellen bei den Annahmen und Randbedingungen sowie im technischen Konzept sollen - soweit möglich - Verbesserungen und Lösungsansätze entwickelt werden. Dazu soll eine SWOT-Analyse angefertigt werden.

Das Vorhaben CREATIEF hat Bezug zum FuE-Bereich 3: Endlagerkonzepte und Endlagertechnik und zum FuE-Bereich 4: Sicherheitsnachweis.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Analyse der in der nationalen und internationalen Literatur getroffenen Annahmen und Randbedingungen
- AP2: Analyse und Bewertung der Eckpunkte bei der "Tiefen Bohrlochlagerung"
- AP3: Gesamtbewertung von Chancen und Risiken
- AP4: Dokumentation und Abschlussbericht

Die TU Bergakademie Freiberg ist federführend für AP1. Bei AP2 bis AP4 ist DBE TECHNOLOGY federführend.

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

- AP1: Bearbeitung der Analyse der in der nationalen und internationalen Literatur getroffenen Annahmen und Randbedingungen. Bewertungen der Information hinsichtlich der rechtlichen Rahmenbedingungen in Deutschland.
- AP2: Bearbeitung einiger Eckpunkte des Arbeitsprogrammes wie: Bohrtechnik bis 5000 Meter Tiefe für die Einlagerungsbohrungen, Einlagerungs- und Rückholungstechnik, Verfüllen und Verschließen von Einlagerungsbohrlöchern, Endlagermonitoring.
- AP3: Gesamtbewertung der Option Tiefe Bohrlöcher mittels Ausweisung von Chancen und Risiken.
- AP4: Schreiben des Abschlussberichtes.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- AP1: Abschluss der Analyse der in der nationalen und internationalen Literatur getroffenen Annahmen und Randbedingungen. Bewertungen der Information hinsichtlich der rechtlichen Rahmenbedingungen in Deutschland.
- AP2: Bearbeitung eines Eckpunktes des Arbeitsprogrammes: Havariebewältigung.
- AP3: Keine.
- AP4: Fertigstellung des Abschlussberichtes.

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

Vorträge auf Tagungen:

8th U.S./German Workshop on Salt Repository Research, Design, and Operation am 7. September 2017 in Middelburg (Niederlande) „Current research on deep borehole disposal of spent nuclear fuel and high-level radioactive waste - considerations within a German research project“

International Symposium on Deep Geologic Disposal am 19. September 2017 in Kiew (Ukraine): „Deep borehole disposal (3000 - 5000 m) of spent nuclear fuel and radioactive waste – considerations within a research project in Germany“

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11526B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in Tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Felder 3.1 + 3.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.12.2016 bis 28.02.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 115.084,31 EUR	<b>Projektleiter:</b> Bollingerfehr	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben CREATIEF soll die Chancen und Risiken der Option Endlagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe in Tiefen Bohrlöchern (3000 m bis 5000 m) in technischer und sicherheitstechnischer Hinsicht vertieft untersuchen. Dabei sollen insbesondere die bisher getroffenen Annahmen und Randbedingungen in aktuellen Studien und Forschungsvorhaben im Ausland und Inland analysiert und bewertet werden. Mögliche Defizite sollen identifiziert werden. Dabei soll vor allem untersucht werden, in wieweit die aktuellen Studien im Sinne einer soliden technisch-wissenschaftlichen Prüfung zur Bewertung der technischen und insbesondere sicherheitstechnischen Machbarkeit belastbar sind. Für identifizierte mögliche Schwachstellen bei den Annahmen und Randbedingungen sowie im technischen Konzept sollen - soweit möglich - Verbesserungen und Lösungsansätze entwickelt werden. Dazu soll eine SWOT-Analyse angefertigt werden.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Analyse der in der nationalen und internationalen Literatur getroffenen Annahmen und Randbedingungen
- AP2: Analyse und Bewertung der Eckpunkte der Option "Tiefe Bohrlochlagerung"
- AP3: Gesamtbewertung von Chancen und Risiken
- AP4: Dokumentation und Abschlussbericht

Die TU Bergakademie Freiberg ist federführend für AP1. Die DBE TECHNOLOGY GmbH ist federführend zuständig für AP2, 3 und 4.

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

Die Bearbeitung der DBE TECHNOLOGY GmbH konzentrierte sich im Berichtszeitraum im AP2 auf abschließende Arbeiten zur Dimensionierung eines adäquaten Endlagergebindes, Einlagerungs- und Rückholtechnik sowie auf Aspekte der Betriebssicherheit. Ausgehend vom heutigen Stand der Technik in der Bohrindustrie wurde ein Bohrlochdurchmesser von 17,5" betrachtet, was zu einem Behälter führt, der nur die ausgedienten Brennelemente aufnehmen kann, nicht jedoch die bereits verglasten und sonstigen Abfälle aus der Wiederaufarbeitung. Abschätzungen zur daraus resultierenden Anzahl von Behältern und Bohrlöchern wurden durchgeführt. Darüber hinaus wurden Abstimmungen mit der TU BAF zur Herstellung von Tiefbohrungen, deren Ausrüstung mit Casings und Linern und zum qualitätsgesicherten Verschluss von befüllten Bohrlöchern vorgenommen. Die Überlegungen zu einem Sicherheits- und Nachweiskonzeptes wurden fortgeführt.

Im AP3 wurden mit der TU BAF eine Gesamtbewertung der Option Tiefe Bohrlöcher mittels Ausweisung von Chancen und Risiken für alle im AP2 betrachteten Aspekte vorgenommen und dokumentiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

DBE TECHNOLOGY GmbH wird im kommenden Berichtszeitraum die Arbeiten zur Analyse und Bewertung der Eckpunkte bei der "Tiefen Bohrlochlagerung" (AP2) abschließen und dokumentieren. Gemeinsam mit der TU BAF wird der Abschlussbericht erstellt, abgestimmt und veröffentlicht.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11527</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Anforderungen und Konzepte für Behälter zur Endlagerung von Wärme entwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein (KoBra), Teilprojekt A			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 30.11.2019		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.06.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 513.184,92 EUR		<b>Projektleiter:</b> Bollingerfehr	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben KoBra hat zum Ziel, unter Berücksichtigung des geltenden gesetzlichen und untergesetzlichen Regelwerkes die Anforderungen an Endlagerbehälter für die Gewährleistung eines sicheren über- und untertägigen Betriebes eines HAW-Endlagers in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein sowie eines sicheren Einschlusses der radioaktiven Abfälle und ausgedienten Brennelemente herzuleiten, Umsetzungsmöglichkeiten anhand von generischen Behälterkonzepten darzustellen sowie die Auswirkungen entsprechender Designentscheidungen auf die Gestaltung der Endlagersysteme abzuschätzen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Aufarbeitung des nationalen und internationalen Standes zu bereits existierenden Anforderungen und Konzepten für Endlagerbehälter und Zusammenstellung sicherheitsrelevanter Behältereigenschaften
- AP2: Ermittlung der behälterrelevanten Randbedingungen und Beanspruchungsgrößen für Endlagerbehälter in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein in Deutschland
- AP3: Herleitung und Zusammenstellung der Anforderungen an Endlagerbehälter für ein HAW-Endlager in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein
- AP4: Erarbeitung von Vorschlägen für mögliche Behälterkonzepte in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein
- AP5: Dokumentation und Abschlussbericht

Die Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM) ist federführend zuständig für AP1 und AP4, die DBE TECHNOLOGY GmbH für AP2 und AP3; AP5 wird gemeinsam von beiden Partnern bearbeitet.

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

Die Bearbeitung seitens DBE TECHNOLOGY konzentrierte sich im Berichtszeitraum zum einen auf AP2 "Ermittlung der behälterrelevanten Randbedingungen und Beanspruchungsgrößen für Endlagerbehälter in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein in Deutschland". Dazu wurden bisherige generische Endlagerkonzeptplannungen herangezogen, ausgewertet und repräsentative Konzepte für das Vorhaben ausgewählt und beschrieben,

Zum anderen wurde im AP3 "Herleitung und Zusammenstellung der Anforderungen an Endlagerbehälter für ein HAW-Endlager in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein" damit begonnen, systematisch Anforderungen an Endlagerbehälter für ein HAW-Endlager in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein herzuleiten und zusammenzustellen. Dabei wurde ein sogenannter Top-Down-Ansatz gewählt, bei dem, ausgehend von geltenden regulatorischen Vorgaben, zunächst generische (allgemeine bzw. abstrakte) Anforderungen abgeleitet und zusammengestellt werden, die dann für die verschiedenen Wirtsgesteine und Einlagerungskonzepte den jeweiligen Sicherheitskonzepten folgend und unter Berücksichtigung spezifischer regulatorischer Vorgaben schrittweise konkretisiert sowie spezifiziert und, wenn möglich, quantifiziert werden.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Im kommenden Berichtszeitraum wird der Arbeitsschwerpunkt für DBE TECHNOLOGY GmbH darin bestehen, die Arbeiten zum AP2 abzuschließen, zu dokumentieren und den Meilensteinbericht dazu mit dem Partner BAM abzustimmen. Weiterhin werden die Arbeiten zur Herleitung der Anforderungen aus dem Regelwerk, aus der Geologie des Wirtsgesteines und der Auslegung des Endlagerbergwerkes sowie aus dem Endlagerbetrieb weitergeführt, mit dem Partner BAM diskutiert und abgestimmt.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), 12200 Berlin		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11537</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Anforderungen und Konzepte für Behälter zur Endlagerung von Wärme entwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein (KoBra), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 30.11.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.06.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 188.990,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Völzke	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben KoBra hat zum Ziel, unter Berücksichtigung des geltenden gesetzlichen und untergesetzlichen Regelwerkes die Anforderungen an Endlagerbehälter für die Gewährleistung eines sicheren über- und untertägigen Betriebes eines HAW-Endlagers in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein sowie eines sicheren Einschlusses der radioaktiven Abfälle und ausgedienten Brennelemente herzuleiten, Umsetzungsmöglichkeiten anhand von generischen Behälterkonzepten darzustellen sowie die Auswirkungen entsprechender Designentscheidungen auf die Gestaltung der Endlagersysteme abzuschätzen.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Aufarbeitung des nationalen und internationalen Standes zu bereits existierenden Anforderungen und Konzepten für Endlagerbehälter und Zusammenstellung sicherheitsrelevanter Behältereigenschaften
- AP2: Ermittlung der behälterrelevanten Randbedingungen und Beanspruchungsgrößen für Endlagerbehälter in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein in Deutschland
- AP3: Herleitung und Zusammenstellung der Anforderungen an Endlagerbehälter für ein HAW-Endlager in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein
- AP4: Erarbeitung von Vorschlägen für mögliche Behälterkonzepte in den drei potenziellen Wirtsgesteinen Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein
- AP5: Dokumentation und Abschlussbericht

Die Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM) ist federführend zuständig für AP1 und AP4, die DBE TECHNOLOGY GmbH für AP2 und AP3; AP5 wird gemeinsam von beiden Partnern bearbeitet.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Nationaler und internationaler Stand zu Behälterkonzepten und -anforderungen

Im Rahmen einer umfangreichen Literaturrecherche wurden die nationalen Endlagerprogramme von 36 verschiedenen Staaten hinsichtlich der Forschung, Konzipierung und Herstellung von Endlagerbehältern für hochradioaktive wärmeentwickelnde Abfälle gesichtet. In dieser Recherche gesichtete Dokumente, insbesondere zu Materialauswahl und -verhalten, Fertigung, Korrosion und sicherheitsrelevanten Randbedingungen, wurden nach ihrer Relevanz für die einschlussichere Auslegung eines Endlagerbehälters in ein mehrstufiges Kategoriensystem eingeordnet.

AP5: Dokumentation und Abschlussbericht

In mehreren Treffen mit dem Kooperationspartner DBE Tec in Berlin und Peine wurden die gemeinsamen Schnittstellen präzisiert, die geplanten Arbeitsschritte diskutiert und der Fortschritt des Vorhabens dokumentiert. In Zusammenarbeit mit dem Kooperationspartner DBE Tec wurde eine Literaturdatenbank angelegt, in der die für die Erreichung der Vorhabenziele relevanten Dokumente bibliographisch erfasst werden. In der Literaturdatenbank sind die erfassten Dokumente u. a. nach Land, Wirtsgestein, beabsichtigtem Inventar, beschriebenen Anforderungen und Nachweismethoden kategorisiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1: Die in verschiedene Kategorien eingeordneten Dokumente mit direktem Bezug zu Anforderungen, Konzepten und Entwicklungen für Endlagerbehälter sollen in die gemeinsame Literaturdatenbank gepflegt werden. Die ermittelten Behälterkonzepte sollen wirtsgesteinspezifisch zusammengetragen werden.

AP3: Auf der Grundlage der in AP1 und AP2 gewonnenen Informationen sollen die Anforderungen an Endlagerbehälter für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle entsprechend den regulatorischen Sicherheitsanforderungen für alle drei potenziellen Wirtsgesteine zusammengestellt werden.

AP5: Der Vorhabenfortschritt wird im Rahmen weiterer Treffen mit dem Kooperationspartner DBE Tec sowie auch mit anderen interessierten Parteien wie z. B. dem BMUB, dem BMWi und dem PTKA dokumentiert. Zu jedem der 5 Arbeitspakete – zeitnah beginnend mit AP1 – soll ein Zwischenbericht verfertigt werden sowie ein Abschlussbericht für das Gesamtvorhaben.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11547A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Konzepte und Maßnahmen zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle (SOTEC-radio), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2017 bis 30.04.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 448.984,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Kallenbach-Herbert	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel ist die Erfassung, Beschreibung und Bewertung der Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle unter Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen Technik und Sozialem. Dazu wird ein differenziertes, systematisiertes Verständnis sozio-technischer Zusammenhänge und Herausforderungen entwickelt und fortgeschrieben. Im Ergebnis werden wissenschaftliche Konzepte für die Analyse sowie Handlungsempfehlungen für die Politik zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen in Governance- und Management-Strukturen entwickelt. Die Arbeitspakete 1 und 5 werden gemeinsam von ITAS, Öko-Institut und FFU bearbeitet. Alle Arbeitspakete haben Querverbindungen mit interdisziplinären Schnittstellen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Spezifizierung der sozio-technischen Herausforderungen (zusammen mit ITAS und FFU)
- AP3: Reversibilität in Entscheidungsprozessen
- AP3.1: Bestehende Konzepte für und Erfahrungen mit reversiblen Prozessen
- AP3.2: Partizipative Verfahren im Kontext reversibler Entscheidungsprozesse
- AP3.3: Entwicklung von Handlungsempfehlungen
- AP5: Robuste Governance-Strukturen, Kohärenz und Institutionalisierung von Langzeitprozessen (zusammen mit ITAS und FFU)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Literaturanalyse zur Spezifizierung der (international) diskutierten Konzepte zu den sozio-technischen Herausforderungen wurde vorerst abgeschlossen. Es wurden 17 Quellen auf der Grundlage eines gemeinsamen Analyserasters detailliert ausgewertet und dokumentiert. Ein auf dieser Grundlage verfasster Fachartikel für die bei der ISI-gelistete Zeitschrift GAIA soll im Februar 2018 eingereicht werden. Ein weiteres Teilziel des AP1 besteht darin, unterschiedliche Perspektiven zu sozio-technischen Herausforderungen im deutschen Endlagerkontext zu erfassen. Insgesamt werden dazu arbeitsteilig von Öko-Institut, ITAS und FFU ca. 15 Leitfaden-Interviews durchgeführt und ausgewertet. Im Berichtszeitraum wurden das Inter-

viewkonzept vereinbart, die Interviewpartner festgelegt und etwa die Hälfte der insgesamt vorgesehenen Interviews durchgeführt.

Für den gegen Ende des AP1 vorgesehenen Workshop wurde die Grundkonzeption erarbeitet. Er dient der weiteren Diskussion der Ergebnisse der Literaturanalyse und der Interviews im Hinblick auf ein verbessertes Verständnis der soziotechnischen Herausforderungen. Eingeladen wurden mit der Endlagerthematik vertraute Personen aus Wissenschaft, Politik, Behörden und interessierter Öffentlichkeit.

- AP3.1: Basierend auf einer ersten Literaturlauswertung wurden Konzepte und Erfahrungen mit reversiblen Prozessen gesichtet. Der Schwerpunkt der Betrachtungen lag auf reversiblen Prozessen im Bereich der Endlagerung in verschiedenen europäischen Ländern sowie Publikationen der OECD/NEA und IAEA. Außerdem wurden Parallelen zu den Reflexions-Prinzipien in Managementsystemen, insbesondere dem Sicherheitsmanagement, untersucht. Basierend auf den Arbeiten wurde der Vortrag „The Self-reflecting Process – a New Challenge (?)“ (Kallenbach-Herbert) für die ENTRIA-Abschlusskonferenz, Braunschweig, 26. – 28. September 2017 erarbeitet und präsentiert.

Am 07.11.2017 fand in Berlin das Kick-off Meeting mit dem Auftraggeber sowie Vertretern der im Rahmen der Frühkoordinierung beteiligten Behörden statt. Schwerpunkte der Besprechung waren der Überblick über das Gesamtprojekt und den aktuellen Stand sowie eine vertiefte Diskussion der bis dahin durchgeführten Arbeiten und vorliegenden Erkenntnisse zum AP1. Zu den AP2 – 4 wurden erste Überlegungen präsentiert.

Außerdem wurden insgesamt vier Projektgespräche der Verbundpartner durchgeführt (drei Telefonkonferenzen sowie ein Treffen am 27.11.2017 in Berlin). Schwerpunkte der Diskussion und Abstimmung waren die oben genannten Themen des AP1.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Abschluss und Auswertung der Interviews;  
Durchführung des nationalen Workshops zum AP1 am 27.02.2018;  
Bericht zum AP1 „Auswertung des Forschungsstandes“.
- AP3.1: Vertiefung der Betrachtungen einschlägiger Konzepte und Erfahrungen mit reversiblen Prozessen aus verschiedenen Branchen und Ländern;
- Veröffentlichung: Öko-Institut, ITAS, FFU: „Begründung der Vorgehensweise zur Analyse sozio-technischer Wechselwirkungen“ (Arbeitstitel); in: Brunnengräber, Di Nucci (Eds.). *Governing Nuclear Waste: Conflicts, Participation and Acceptability*. Vol. III, to appear in Springer VS (2018);  
Abschluss des Artikels für GAIA, Brunnengräber et al.: „Das Sozio-Technische beim Umgang mit radioaktiven Abfällen - Annäherungen an eine komplexe Beziehung“ (Einreichung 02/2018)

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Akinsara-Minhans, Isidoro Losada, Kallenbach-Herbert, Kuppler: „Sociotechnical challenges in disposal of radioactive waste“ - Abstract für 17th Annual STS Conference "Critical Issues in Science, Technology and Society Studies", 7.-8. Mai 2018, Graz

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11547B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Konzepte und Maßnahmen zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle (SOTEC-radio), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2017 bis 30.04.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 399.013,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Kuppler	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel ist die Erfassung, Beschreibung und Bewertung der Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle unter Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen Technik und Sozialem. Dazu wird ein differenziertes, systematisiertes Verständnis der jeweiligen Zusammenhänge und Herausforderungen entwickelt und fortgeschrieben. Im Ergebnis werden wissenschaftliche Konzepte für die Analyse sowie Handlungsempfehlungen für die Politik zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen in Governance- und Management-Strukturen entwickelt. Die Arbeitspakete 1 und 5 werden gemeinsam von ITAS, Öko-Institut und FFU bearbeitet. Alle Arbeitspakete haben Querverbindungen mit interdisziplinären Schnittstellen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Spezifizierung der sozio-technischen Herausforderungen (zusammen mit FFU und Öko-Institut)
- AP4: Planungs- und Langzeitprozesse
- AP4.1: Konzepte für und Erfahrungen mit Langzeit-Monitoring und Governance
- AP4.2: Management und Langzeitplanung als Sicherheitskultur
- AP4.3: Entwicklung von (Handlungs-) Empfehlungen
- AP5: Robuste Governance-Strukturen, Kohärenz und Institutionalisierung von Langzeitprozessen (zusammen mit FFU und Öko-Institut)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Die Literaturanalyse zur Spezifizierung der (international) diskutierten Konzepte zu den sozio-technischen Herausforderungen wurde vorerst abgeschlossen. Es wurden 17 Quellen auf der Grundlage eines gemeinsamen Analyserasters detailliert ausgewertet und dokumentiert. Auf Grundlage dieser Auswertung wurde im Berichtszeitraum ein Fachartikel verfasst, welcher im Feb 2018 bei der ISI-gelisteten Zeitschrift GAIA eingereicht wird.  
Ein weiteres Teilziel des AP1 besteht darin, unterschiedliche Perspektiven zu sozio-technischen Herausforderungen im deutschen Endlagerkontext zu erfassen. Insge-

samt werden arbeitsteilig von Öko-Institut, ITAS und FFU ca. 15 Leitfaden-Interviews durchgeführt und ausgewertet. Im Berichtszeitraum wurden das Interviewkonzept vereinbart, die Interviewpartner festgelegt und etwa die Hälfte der insgesamt vorgesehenen Interviews durchgeführt (davon eins am ITAS).

Für den gegen Ende des AP1 vorgesehenen Workshop wurde die Grundkonzeption erarbeitet. Er dient der weiteren Diskussion der Ergebnisse der Literaturanalyse und der Interviews im Hinblick auf ein verbessertes Verständnis der soziotechnischen Herausforderungen. Eingeladen wurden mit der Endlagerthematik vertraute Personen aus Wissenschaft, Politik, Behörden und interessierter Öffentlichkeit.

- AP4.1: Ein erstes internes Konzeptionspapier zur Thematik „Long-term Governance“ wurde verfasst und darauf basierend Auswahlkriterien für die weiteren Fälle erarbeitet, anhand derer bestehende Erfahrungen mit „Long-term Governance“ analysiert werden sollen. Ausgewählt wurden Staudämme, Verkehrsüberwachung und Climate Engineering. Zum Thema Staudämme wurden im Rahmen eines Kolloquiumsvortrags erste Kontakte aufgebaut (Vortrag Kuppler: „Governance von Stauräumen. Ansätze zum Umgang mit Zielkonflikten in gesellschaftlichen Transformationsprozessen“. Kolloquium „CHARM – Stauraum-management“, Freiburg, 12.10.2017).

Am 07.11.2017 fand in Berlin das Kick-off Meeting mit dem Auftraggeber sowie Vertretern der im Rahmen der Frühkoordinierung beteiligten Behörden statt. Schwerpunkte der Besprechung waren der Überblick über das Gesamtprojekt und den aktuellen Stand sowie eine vertiefte Diskussion der bis dahin durchgeführten Arbeiten und vorliegenden Erkenntnisse zum AP1 (Vortrag Hocke: „Nach dem Dualismus von Technik und Gesellschaft“). Zu den AP2 bis 4 wurden erste Überlegungen präsentiert.

Außerdem wurden insgesamt vier Projektgespräche der Verbundpartner durchgeführt (drei Telefonkonferenzen sowie ein Treffen am 27.11.2017 in Berlin). Schwerpunkte der Diskussion und Abstimmung waren die oben genannten Themen des AP1.

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

- AP1: Abschluss und Auswertung der Interviews;  
Durchführung des nationalen Workshops zum AP1 am 27.02.2018;  
Bericht zum AP1 „Auswertung des Forschungsstandes“.
- AP4: Ausarbeitung der Literaturübersicht zu Langzeit-Monitoring und Governance in ausgewählten Themenfeldern;  
Feinjustierung des empirischen und analytischen Vorgehens.
- Veröffentlichungen: Öko-Institut, ITAS, FFU: „Begründung der Vorgehensweise zur Analyse sozio-technischer Wechselwirkungen“ (Arbeitstitel); in: Brunnengräber, Di Nucci (Eds.). *Governing Nuclear Waste: Conflicts, Participation and Acceptability*. Vol. III, to appear in Springer VS (2018);  
Abschluss des Artikels für GAIA, Brunnengräber et al.: „Das Sozio-Technische beim Umgang mit radioaktiven Abfällen – Annäherungen an eine komplexe Beziehung“ (Einreichung 02/2018).

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Freie Universität Berlin, Kaiserwerther Str. 16-18, 14195 Berlin	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11547C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Konzepte und Maßnahmen zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle (SOTEC-radio), Teilprojekt C	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 5: Wissensmanagement und sozio-technische Fragestellungen, Feld 5.2	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.04.2017 bis 30.04.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 383.625,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Brunnengräber

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Ziel ist die Erfassung, Beschreibung und Bewertung der Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle unter Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen Technik und Sozialem. Dazu wird ein differenziertes, systematisiertes Verständnis der jeweiligen Zusammenhänge und Herausforderungen entwickelt und fortgeschrieben. Im Ergebnis werden wissenschaftliche Konzepte für die Analyse sowie Handlungsempfehlungen für die Politik zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen in Governance- und Management-Strukturen entwickelt. Die Arbeitspakete 1 und 5 werden gemeinsam von ITAS, Öko-Institut und FFU bearbeitet. Alle Arbeitspakete haben Querverbindungen mit interdisziplinären Schnittstellen.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Spezifizierung der sozio-technischen Herausforderungen (zusammen mit ITAS und Öko-Institut)
- AP2: Regulierung und Interdependenzen
  - AP2.1: Interdependenzen zwischen Regulierung und Pfadabhängigkeiten
  - AP2.2: Formelle und informelle Beziehungen bei der Regulierung
  - AP2.3: Struktur und Wirksamkeit von Institutionen
- AP5: Robuste Governance-Strukturen, Kohärenz und Institutionalisierung von Langzeitprozessen (zusammen mit ITAS und Öko-Institut)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1: Für die Zielerreichung des Arbeitspaketes 1, den Stand der Forschung und der diskutierten Konzepte zu den sozio-technischen Herausforderungen der Entsorgung wurden am FFU fünf Publikationen mit Hilfe des gemeinsam erarbeiteten Literatur-Analyserasters gesichtet und ausgewertet. Insgesamt wurden 17 Quellen ausgewertet. Die Ergebnisse flossen in die Publikation „Das Sozio-Technische beim Umgang mit radioaktiven Abfällen – Annäherungen an eine komplexe Beziehung“, die bei der Zeitschrift GAIA im Februar 2018 eingereicht werden soll.

Ergänzend zur Literatursauswertung werden als zweite Säule für die „Spezifizierung der sozio-technischen Herausforderungen“ arbeitsteilig von FFU, Öko-Institut und ITAS insgesamt ca. 15 Interviews durchgeführt und ausgewertet. Im Berichtszeitraum wurden das Interviewkonzept vereinbart, die Interviewpartner festgelegt sowie angefragt. Von Seiten des FFU wurde ein Interview durchgeführt, transkribiert und ein Exzerpt erstellt.

Am 07.11.2017 fand im Öko-Institut in Berlin das Kick-off-Meeting mit dem Auftraggeber sowie mit VertreterInnen der im Rahmen der Frühkoordinierung beteiligten Behörden statt. Schwerpunkte der Besprechung waren der Überblick über das Gesamtprojekt und den aktuellen Stand sowie eine vertiefte Diskussion der bis dahin durchgeführten Arbeiten und vorliegenden Erkenntnisse zum AP1. Zu den AP2 – 4 wurden erste Überlegungen präsentiert. Für die Außenkommunikation und -repräsentation wurde in Absprache mit dem Projektträger ein Verbundflyer erstellt. Des Weiteren wurden vier Projektgespräche der Verbundpartner durchgeführt (drei Telefonkonferenzen sowie ein Treffen am 27.11.2017 in Berlin). Schwerpunkte der Diskussion und Abstimmung waren: Durchführung und Erkenntnisse aus der Literaturlauswertung, Erarbeitung des GAIA Artikels, Vorbereitung des Kick-off-Meetings, Konzeptionierung der Interviews und Terminvereinbarung mit den Interviewpartnern, Konzeption und Vorbereitung des 1. Projektworkshops im Februar 2018.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Durchführung und Auswertung weiterer Interviews; Vor- und Nachbereitung des nationalen Workshops zum AP1; Entwurf eines Konzeptpapiers: „Der socio-technical Divide. Zur unterschiedlichen Interpretation von zentralen Begriffen des Endlagerdiskurses“; Teilnahme an der „17th Annual STS Conference in Graz“/ Session: „Public engagement with new and emerging technologies“ am 7./8. Mai 2018; Bericht zum AP1 „Auswertung des Forschungsstandes“
- AP2.1: Arbeitspapier zum Thema Regulierung und Pfadabhängigkeiten. Vorbereitung des Beitrags „The wicked problem of long term radioactive waste management. Ten characteristics of a complex technical and societal challenge“ und (gemeinsam mit P. Hocke) „The Multi-Level Problem of Nuclear Waste Disposal. On the investigation of the impact of technological and infrastructure conflicts on the decision-making system of the Germany“ (zur Veröffentlichung in: Brunnengräber / Di Nucci 2018)
- AP2.1: Arbeitspapier über die Erfahrungen und übertragbaren Erkenntnisse (social analogues) bezüglich der soziotechnischen Herausforderungen von anderen Großprojekten (Fracking, Windenergie, und ggf. weiteren Vorhaben)  
 Öko-Institut, ITAS, FFU: Verfassen eines Arbeitspapiers „Begründung der Vorgehensweise zur Analyse sozio-technischer Wechselwirkungen“ (Arbeitstitel)

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Brunnengräber, Achim; Akinsara-Minhans, Anne; Hocke, Peter; Isidoro Losada, Ana María, Kaltenbach-Herbert, Beate; Kuppler, Sophie; (2018): Das Soziotechnische beim Umgang mit radioaktiven Abfällen. Annäherungen an eine komplexe Beziehung (zur Einreichung bei GAIA).

Themann, Dörte; Brunnengräber, Achim (2018): The Nuclear Legacy in the Anthropocene. A plea for greater attention to be paid to the relationship between nature, technology and society, in: Hickmann, Thomas; Partzsch, Lena; Pattberg, Philipp; Wieland, Sabine (Ed.) (2018): The Anthropocene Debate and Political Science, Routledge Environmental Research Series (under review)

Themann, Dörte; Brunnengräber, Achim (2017): Sozialökologische Herausforderungen im Zeitalter des Anthropozäns? Das Beispiel der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle, in: Müller, Monika C. M. (Hrsg) (2017): Endlagersuche. Wie steht es um die Vorbereitung der Entsorgung radioaktiver Abfälle Deutschland? Reihe Loccum Protokolle Band 27/16, Rehburg-Loccum 2017, S. 11-28.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestr. 6, 09599 Freiberg		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11557</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Gefügestabilisierter Salzgrusversatz - Phase 2 (GESAV II)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Felder 3.2 + 3.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2017 bis 31.03.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 919.894,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Mischo	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im vorangegangenen Forschungsprojekt GESAV I wurde eine Rezeptur für einen gefügestabilisierten Salzgrusversatz entwickelt, mit dem nach dem Einbau ein praktisch 100 %-iger Verfüllungsgrad erreicht werden kann. Aufgrund der Gefügestabilisierung wird eine ausreichend hohe Stützwirkung des Versatzes erreicht, sodass nachfolgende Auflockerungen (Rissbildungen) im umliegenden Gebirge ausgeschlossen werden können. Die Anfangspermeabilität des Versatzmaterials liegt bei  $< 10^{-11} \text{ m}^2$ . Die Parameter Verformungswiderstand und Permeabilität verbessern sich mit zunehmender Gebirgskonvergenz. Die Rezeptur des entwickelten Versatzmaterials wurde unter der Patentnummer DE 10 2015 005 288 patentiert.

Das FuE-Projekt GESAV II verfolgt das Ziel, eine optimale Einbautechnologie für die patentierte Rezeptur zu entwickeln. Zum Einbringen von Salzgrusversatz im Endlagerbergbau kommen mechanischer (Schleuder-) und pneumatischer (Blas-) Versatz infrage. Mit beiden Verfahren wird nach dem Stand der Technik je ein Referenzversatzkörper in der Grube Sondershausen der GSES mbH erstellt. Aufbauend auf den Ergebnissen von In-situ-Messungen an den Versatzkörpern und Laboruntersuchungen von entnommenen Probekörpern werden die Verfahren optimiert. Wesentliche Optimierungsparameter sind die Einbaudichte und die Reduzierung technologiebedingter Einflüsse auf das. Mit optimierten Versatzverfahren wird jeweils ein weiterer Versatzkörper erstellt. Aus der vergleichenden Untersuchung der Versatzkörper wird eine Vorzugsvariante zum Einbauverfahren benannt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP7: Pilotversuche zum Einbau
- AP8: Labor- und messtechnische Überwachung der Versatzkörper
- AP9: Nachuntersuchungen des Versatzkörpers
- AP10: Abschlussbericht zum Gesamtvorhaben

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP7: Die Auffahrung und infrastrukturelle Anbindung der Versuchsorte wurde durch die GSES mbH durchgeführt. Komponenten des Salzbinders wurden beschafft, Salzgrusfraktionen durch die GSES mbH bereitgestellt.

Mischkonzept für das Versuchsmaterial wurde im Labor geprüft und in situ angewendet. Die Versuchsorte wurden in Zusammenarbeit mit dem Institut für Gebirgsmechanik GmbH mit Messtechnik ausgestattet.

Zur Vorbereitung des Blasversatzversuchs wurde ein Maschinentyp mit GESAV-Material beim Hersteller getestet. Der Blasversatzversuch wurde durchgeführt, dabei wurde ein Versatzkörper erstellt, welcher seitdem messtechnisch (Setzung, Erddruck, Feuchtigkeit, Temperatur) überwacht wird.

Am Versuchsstand zur Optimierung der Blasversatztechnologie im Versatzlabor der TU Bergakademie Freiberg wurden Probekörper gefertigt.

AP8: Kontinuierliche messtechnische Überwachung des ersten Versatzkörpers ist erfolgt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP7: Durchführung des Schleuderversatzversuche 5. KW 2018 mit entsprechender Probenahme und Versatzkörperüberwachung (AP8).

Weiterentwicklung des Laborblasversatzversuchsstands basierend auf den Blasversatz-Versuchserfahrungen. Ausdehnung des untersuchten Verfahrens auf das Anmischen des Versatzmaterials.

AP8: Labortechnische Prüfung der Proben des Blasversatzversuches im Versatzlabor TU Bergakademie Freiberg.

Entnahme erster Proben aus dem Versatzkörper im II. Quartal 2018 für Untersuchungen bei IfG GmbH.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Becker, S.; Mischo, H.; Pötzsch, S.: „Entwicklung und labortechnische Prüfung eines gefügestabilisierten Salzgrusversatzmaterials“ in Beiträge zum 3. Internationalen Freiburger Fachkolloquium Baustoffe und Versatz. Freiberg, 05. - 06. Oktober 2017. Technische Universität Bergakademie Freiberg.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolf-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11567A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1 + 4.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2017 bis 31.07.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 517.360,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Lux	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Bei dem Forschungsvorhaben „BenVaSim“ handelt es sich um ein internationales Simulatoren-Benchmarking-Projekt, dessen Ziel es ist, die numerisch korrekte und geotechnisch grundsätzlich aussagekräftige Funktionsweise unterschiedlicher TH<sup>2</sup>M-Simulationsprogramme zu analysieren. Zu diesem Zweck ist die Simulation von Modellbeispielen unterschiedlichen Komplexitätsgrads mit diesen Simulatoren angedacht. Das übergeordnete Ziel ist dabei die nationale Verfügbarkeit von mehreren qualitätsgesicherten Simulatoren für die Durchführung von fluiddynamischen Analysen zum Verhalten von untertägigen Endlagersystemen im Tonstein- und Salinargebirge als Grundlage für die Erarbeitung von Langzeitsicherheitsanalysen zu Endlagerkonzepten. Das Vorhaben soll in Zusammenarbeit mit der BGR, dem schweizerischen ENSI, der GRS mit ihren Bereichen „Endlagersicherheitsforschung“ (→ BMWi-FKZ: 02E11567B, Verbundprojekt mit TUC) und „Strahlen- und Umweltschutz“ (→ BMUB-FKZ: 3616E03230) sowie dem US-amerikanischen LBNL stattfinden und baut vom Standpunkt des Zuwendungsempfängers TUC aus auf dem BMWi-Forschungsvorhaben mit dem FKZ 02E11041 auf, in dessen Rahmen der FTK-Simulator entwickelt worden ist, der vonseiten der TUC Gegenstand des geplanten Benchmarkings sein wird. Weiterentwicklungen des FTK-Simulators sind ebenfalls im Rahmen dieses Forschungsvorhabens vorgesehen, um eine für die Zielstellung des Benchmarkings erforderliche Vergleichbarkeit der mit den Simulatoren zu generierenden Ergebnisse mit Blick auf relevante, aber bis dato noch nicht vom FTK-Simulator unterstützte Prozesse für Endlagermodelle zu gewährleisten. Vorbereitende Maßnahmen für das Benchmarking sind im Rahmen eines Vorprojekts mit dem BMWi-FKZ 02E11506 erfolgt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1.1: Organisation und Durchführung von Fachtreffen, grundsätzliche Koordination
- AP1.2: Abstimmung der Berechnungsmodelle, Variationen und Parameter
- AP1.3: Weiterentwicklung des FTK-Simulators inkl. Durchführung von Testsimulationen
- AP1.4: Aufbau der Berechnungsmodelle für die Modellbeispiele aus AP1.2
- AP1.5: Durchführung der FTK-Simulationen und Auswertung der Ergebnisse
- AP1.6: Gegenüberstellung der FTK-Simulationsergebnisse mit den Ergebnissen der Partner
- AP1.7: Vorstellung und Diskussion der Arbeiten im nationalen & internationalen Rahmen
- AP1.8: Dokumentation der Arbeiten, Generalisierung der Befunde, Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Nach der Durchführung des Kick-off-Treffens im vorangehenden Berichtszeitraum sind im aktuellen Berichtszeitraum vom Zuwendungsempfänger TUC sowohl die numerischen Simulationen zu den dort abgestimmten und im Nachgang modifizierten Berechnungsvariationen (a-d) zu Modell 1.1 wie auch die Arbeiten an den MS-Excel-Tabellenkalkulationsvorlagen zur Ergebnisauswertung und -gegenüberstellung fortgeführt worden. Erste Ergebnisse und Simulator spezifische Vorkommnisse zu den Simulationen zu Modell 1.1 konnten von den Projektpartnern auf einem internen Fachtreffen vorgestellt werden. Auch zu Modell 1.4 sind bereits erste Absprachen der Partner im Rahmen einer Telefonkonferenz und erste Berechnungen der TUC erfolgt. Organisatorische und betreuende Aufgaben sind während des gesamten Zeitraumes und insbesondere vor dem Fachtreffen und vor der Telefonkonferenz wahrgenommen worden.

Die Simulationen der TUC zu Modell 1.1 haben zumeist zu präzisen bzw. plausiblen Kurvenverläufen für die Auswertungsgrößen geführt, wie Vergleiche mit analytischen Lösungen und mit ähnlichen Simulationsergebnissen aus einem vorangehenden Vorhaben zeigen (AP1.5). Mitunter auch erhaltene weniger befriedigende Ergebnisse konnten zumindest zum Teil erklärt und behoben werden. Die Resultate sind auf dem internen Fachtreffen im September 2017 vorgestellt und diskutiert worden. Erste Berechnungsergebnisse zwischen Projektpartnern konnten schließlich im Nachgang mithilfe der erstellten Excel-Datei gegenübergestellt werden (AP1.6).

Zum Modell 1.4 über H<sup>2</sup>M-gekoppelte Prozesse sind von der TUC vorab vorbereitete Vorschläge für Berechnungsvariationen von den Projektpartnern auf einer Telefonkonferenz diskutiert und vorfestgelegt worden (AP1.2). Das Datenblatt zu diesem Modell ist entsprechend den Vorfestlegungen angepasst worden. Simulationen der auf diese Weise definierten Variationen (a-b) und (d) sind von der TUC ebenfalls durchgeführt worden; ein Vergleich mit einer semianalytischen stationären Lösung ist dabei sehr positiv ausgefallen.

Organisatorisch-administrative Aufgaben betrafen im Wesentlichen die Mitorganisation des Fachtreffens im September 2017 zusammen mit dem Gastgeber als Hauptorganisator, die Erstellung von Sitzungsprotokollen zu Fachtreffen und Telefonkonferenz inkl. deren Abgleich mit den Kooperationspartnern sowie die Korrespondenz mit den Partnern im Rahmen von aufkommenden Fragestellungen und weiteren Planungen (AP1.1). Am FTK-Simulator sind im aktuellen Berichtszeitraum zunächst noch geringfügige Adaptionen erfolgt (AP1.3).

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Auf dem Fachtreffen haben sich die Projektpartner für eine verstärkte Bearbeitung von Modellen der Stufe 1 ausgesprochen, bevor zu Stufe 2 übergegangen wird. Mit Fokus auf diejenigen Berechnungsmodelle der Stufe 1, die von den Partnern als für eine Verifizierung ihrer Simulatoren interessanter eingeordnet worden sind, sind weitere Variationen gemäß bisheriger Präsentationen und Absprachen auszuformulieren, zusammen mit Excel-Vorlagen an die Partner zu verteilen und schließlich selbst zu simulieren (AP1.1, AP1.2, AP1.4 und AP1.5). Neben der für Stufe 2 erforderlichen Weiterentwicklung des FTK-Simulators hinsichtlich der Simulation anisotroper thermischer und hydraulischer Strömungsprozesse ist zu überlegen, ob und wie die über die Variationen 1.1(c-d) identifizierten Mankos bei der FTK-Simulation eines sich aufsättigenden Materials unter Zweiphasenfluss bzw. eines Materials mit kompressiblem Korngerüst (Biot-Koeffizient  $\alpha < 1$ ) behoben werden können (AP1.3).

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11567B</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim), Teilprojekt B			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.05.2017 bis 30.04.2020		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 529.075,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Czaikowski	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben (BenVaSim) hat zum Ziel qualitätsgesicherte, d. h. in ihrer Funktionalität verifizierter und in ihrer Aussagekraft validierter Simulationswerkzeuge für eine zuverlässige Prognose des Endlagersystemverhaltens insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse im Ton- wie auch im Salinargestein bereitzustellen. Die dabei erzielte Verbesserung der Prognosezuverlässigkeit soll dazu beitragen, das Vertrauen in die Aussagen zum Endlagerverhalten zu stärken.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Organisation und Koordination

AP2: Vorstellung der beteiligten Simulatoren

Dieses Arbeitspaket zielt auf die Zusammenstellung von simulierbaren Prozesse und Phänomene der eingesetzten Simulatoren und der bisher gewonnenen Erfahrungen zum Zweck der Gegenüberstellung von modelltheoretischen Möglichkeiten. Die GRS wird sich hier mit ihren langjährigen Erfahrungen im Umgang mit dem Simulator CODE\_BRIGHT beteiligen.

AP3: Ausarbeitung von generischen Modellen und Festlegung von Parametersätzen

Mit Blick auf die Vergleichbarkeit der Simulationsergebnisse zielt dieses Arbeitspaket auf die Ausarbeitung von gemeinsamen Modellen und die Einigung auf gängige physikalische Beziehungen.

AP4: Durchführung und Auswertung von Modellberechnungen

Dieses Arbeitspaket zielt auf die Durchführung von Modellrechnungen mit den in AP3 festgelegten Stoffmodellen und Materialkennwerten.

AP5: Gegenüberstellung und Diskussion der Ergebnisse

Dieses Arbeitspaket zielt auf die Erarbeitung von für den Ergebnisvergleich heranzuziehenden Auswertungsgrößen, die die räumliche und zeitliche Entwicklung an ausgewählten Modellpositionen darstellen.

AP6: Dokumentation, Vorstellung und Diskussion der Ergebnisse im internationalen Rahmen

Die eigenen Untersuchungsergebnisse werden in einem GRS Bericht dokumentiert. Die daraus entstandenen neuen Erkenntnisse werden in internationalen Fachzeitschriften mit Peer-review veröffentlicht und auf nationalen und internationalen Fachtagungen vorgestellt.

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

Seit Vorhabenbeginn im Mai 2017 haben neben dem Kick-off Meeting in Clausthal auch schon ein Projektgespräch in Brugg im September sowie eine Telefonkonferenz im November stattgefunden, bei dem die Partner erste Ergebnisse vorgestellt und diskutiert haben. Aus Sicht der GRS führt die zunächst vom Konsortialführer gewählte sehr stark abstrahierte Berücksichtigung gekoppelter Prozesse zu Schwierigkeiten bei der Anwendung von Code\_Bright, so dass hier ein deutlicher Mehraufwand erkennbar ist.

Code\_Bright ist ein vollständig THM-gekoppelter Code auf poromechanischer Basis. Das hat zur Folge, dass bei Ansatz der hydro-mechanischen Kopplung einzelne Parameter wie beispielsweise die Saugspannung, die zur Berechnung des Sättigungsgrades wichtig ist, nicht einfach aus Gründen der Vergleichbarkeit mit einer vorgegebenen analytischen Lösung außer Acht gelassen werden können.

Trotzdem erscheint die einfache abstrahierte Betrachtung gekoppelter Prozesse aus Vergleichsgründen mit anderen eingesetzten Codes gerade durch den Vergleich mit der analytischen Lösung zielführend.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Ausarbeitung von generischen Modellen und Festlegung von Parametersätzen
- Durchführung und Auswertung von Modellberechnungen
- Gegenüberstellung und Diskussion der Ergebnisse
- Dokumentation

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11577A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Felder 3.1 + 3.2	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 31.05.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.06.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 793.425 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Müller

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Grundlage des Projektes SUSE ist die 2001 zwischen dem früheren russischen Ministerium für Atomenergie Minatom (jetzt Rosatom) und dem BMWi getroffene Vereinbarung für eine deutsch-russische Kooperation zur internationalen Forschungs- und Entwicklungsarbeit hinsichtlich der Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Kristallingesteinen. In den vergangenen 15 Jahren wurden gemeinsame Forschungs- und Entwicklungsarbeiten, die sich auf die Ergebnisse von Erkundungsarbeiten auf mehreren Kristallinstandorten im Nishnekansker Gebiet (nahe Krasnojarsk) stützen und sich seit 2006 auf Untersuchungen des Standortes Yeniseysky konzentrieren, durchgeführt. Im Vorhaben SUSE werden die sicherheitsanalytischen Untersuchungen zu Endlagersystemen in Kristallingesteinen am Standort Yeniseysky weitergeführt. Die Untersuchungen umfassen die Erarbeitung von Verschlusskonzepten, der Charakterisierung der Klüftung kristalliner Gesteine sowie die Durchführung hydrogeologischer Strömungs- und Transportberechnungen. In Abstimmung mit den russischen Kollegen werden zudem Laborexperimente zu den mechanischen Eigenschaften an geklüfteten, wieder mineralisierten Wirtsgesteinen sowie zum Radionuklid-Rückhaltevermögen an kristallinen Kernproben aus dem Untersuchungsgebiet durchgeführt. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wird das geologische Standortmodell für das Untersuchungsgebiet Yeniseysky aktualisiert und hinsichtlich des Kluft- und Störungszonennetzwerkes präzisiert.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems
- AP2: Gesteinseignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin
- AP3: Charakterisierung eines Kluft- und Störungszonennetzwerkes am Beispiel des Standortes Yeniseysky
- AP4: Erhebung zusätzlicher Daten an Probenmaterial aus dem Gebiet Yeniseysky
- AP5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle
- AP6: Bewertung und Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Unter Annahme realistischer Randbedingungen (v. a. Gasdruck- und Wärmeentwicklung) wird mit Hilfe numerischer Modellierungen der Einfluss geklüfteter Gebirgsbereiche auf die Funktionsweise und Wirksamkeit des bisher konzipierten Verschlusssystems untersucht. Im Berichtszeitraum wurde ein erstes Modell mit TOUGH2 aufgebaut und es wurden orientierende Testrechnungen durchgeführt. Ziel erster Berechnungen ist es, den Druckaufbau in den Dichtelementen auf Basis der abgeschätzten Gasproduktionsraten und einer Wärmeentwicklung zu untersuchen.
- AP3: Die Charakterisierung von Kluftsystemen und die Ermittlung standortbezogener Kluftparameter ist ein Schwerpunkt des Arbeitspaketes, da solche Parameter die Grundlage für ein detaillierteres dreidimensionales strukturgeologisch-hydrogeologisches Modell des Gesteinskomplexes darstellen. Sogenannte diskrete Rissnetzwerke (discrete fracture network, DFN) stellen das Mittel der Wahl dar, wenn es um eine möglichst realitätsnahe Abbildung des Trennflächengefüges in einem Gesteinskörper geht. Bei diesen Ansätzen werden die geometrischen Eigenschaften der Diskontinuitäten mittels charakteristischer Verteilungsfunktionen beschrieben und mittels statistisch-stochastischer Verfahren automatisiert generiert. Im Rahmen des Projektes SUSE liegen entsprechende standortbezogene Parameter zu Diskontinuitäten bisher nur ansatzweise vor. Daher wurden zunächst die methodischen Grundlagen zur Generierung entsprechender Modelle im Berichtszeitraum gesichtet und erarbeitet. Es wurden erste DFN-Modelle unter Nutzung des in 3DEC implementierten DFN-Generators erstellt.
- AP5: Ziel ist es, eine plausible modelltechnische Abbildung des Strömungsfeldes und der Radionuklidenausbreitung zu erhalten. Zu diesem Zweck sollen Modellierungen im kleinräumigen Bohrlochmaßstab und großräumigen Endlagermaßstab durchgeführt werden. Die Modellierungen im kleinräumigen Maßstab, bei denen die DBETEC beteiligt ist, bestehen aus der Berechnung von hydraulischen Pumpversuchen, die im Gebiet Yeniseysky durchgeführt wurden und den russischen Kollegen vorliegen. Mit den russischen Partnern hat man sich zunächst auf die Durchführung von Benchmark-Modellrechnungen geeinigt. DBETEC strebt an, die Versuche mit Hilfe der Berechnungscodes 3DEC und TOUGH2 durchzuführen. Bei den vereinbarten Benchmark-Berechnungen handelt es sich um Pumpversuche unter instationären Strömungsverhältnissen, die mit Hilfe des Theis-Verfahrens analytisch nachgerechnet werden können. Die ersten Benchmark-Modellierungen konnten mit TOUGH2 bereits erfolgreich nachgerechnet werden.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Die TOUGH2-Modellierungen zur Abschätzung des Druckaufbaus in/an den Dichtelementen werden weitergeführt und ausgewertet. Ein nächster Schritt ist die Implementierung von Klüften in das bestehende Modell, um den Einfluss solcher abschätzen zu können.
- AP3: Im weiteren Projektfortgang soll überprüft werden, welche Anforderungen die DFN-Modelle für eine Nutzung in einem Process-Level-Code erfüllen müssen.
- AP5: Weiterführung der Benchmark-Modellierungen mit TOUGH2 und 3DEC.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11577B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.06.2017 bis 31.05.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.06.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 668.900,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Flügge

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Vorhaben SUSE werden die sicherheitsanalytischen Untersuchungen zu Endlagersystemen in Kristallingesteinen am Standort Jenessieskij weitergeführt. Die Untersuchungen umfassen die Erarbeitung von Verschlusskonzepten, der Charakterisierung der Klüftung kristalliner Gesteine sowie die Durchführung hydrogeologischer Strömungs- und Transportberechnungen. In Abstimmung mit den russischen Kollegen werden zudem Laborexperimente zu den mechanischen Eigenschaften an geklüfteten, wieder mineralisierten Wirtsgesteinen sowie zum Radionuklid-Rückhaltevermögen an kristallinen Kernproben (Gneiss, Dolerit, Kluftminerale) aus dem Untersuchungsgebiet Yeniseysky in Russland durchgeführt. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wird das geologische Standortmodell für das Untersuchungsgebiet Yeniseysky aktualisiert und hinsichtlich des Kluft- und Störungszonnennetzwerkes präzisiert. Auf dieser Grundlage werden mit den Programmen d<sup>3f++</sup> und RepoTREND Strömungs- bzw. Transportmodelle aufgebaut und Berechnungen durchgeführt.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Bei der Durchführung des Vorhabens werden folgende Arbeitspakete bearbeitet:

- AP1: Bemessung des geotechnischen Verschlussystems
- AP2: Gesteineignungsklassifikationen als Positionierungskriterien für Dichtelemente, Bohrlöcher und Auffahrungen im Kristallin
- AP3: Charakterisierung eines Kluft- und Störungszonnennetzwerkes am Beispiel des Standortes Yeniseysky
- AP4: Erhebung zusätzlicher Daten an Probenmaterial aus dem Gebiet Yeniseysky
- AP5: Regionale 3D-Strömungs- und Transportmodelle
- AP6: Bewertung und Dokumentation

Die GRS ist federführend in den AP4 und AP5.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Am 16.11.2017 fand ein Projektgespräch bei der DBE Technology mit Beteiligung der BGR und der GRS in Peine statt.

- AP1: Es wurden Abschätzungen zu den erwarteten Gasproduktionsraten und der absoluten Menge erzeugter Gase im Endlager durchgeführt. Bei den im Endlagerkonzept vorgesehenen Abfallmengen dominieren die schwachaktiven Abfälle bei weitem die Gasproduktion und liegen in der erzeugten Gasmenge einen Faktor 50 über der durch die hochaktiven

Abfälle erzeugten Gasmenge. Diese Rechnungen können durch die hohe Ungewissheit in den Daten, insbesondere zu der Abfallzusammensetzung, nur als grobe Orientierung angesehen werden.

AP4: Im Berichtszeitraum konzentrierten sich die Projektarbeiten in AP4 auf die Übersicht der einschlägigen Literatur und die Entwicklung der Versuchsmethodik. Daraus ergab sich die methodische Festlegung, dass die Verteilungskoeffizienten des kristallinen Probenmaterials nicht als  $K_d$  pro Probenmasse, sondern als  $K_a$  pro BET-Oberfläche normiert werden. Diese Maßnahme reduziert bzw. eliminiert die Anfälligkeit der Sorptionsexperimente zu Artefakten der Probenvorbereitung und Versuchsdurchführung und ermöglicht eine Übertragbarkeit der Messergebnisse auf ähnliche Kristallingesteine aus anderen Formationen. Für die Übertragbarkeit der  $K_d$ -Werte aus Laboruntersuchungen auf das unverritzte Kristallingestein soll ausschließlich Probenmaterial mit einer Korngröße von  $\geq 1$  mm verwendet werden. Die derzeitige Versuchsplanung sieht folgende Versuche vor: Cs(I), Sr(II), Eu(III) und Se(IV); Konzentration  $10^{-7}$  M, anoxische Bedingungen,  $10$  °C und  $90$  °C (Glovebox), pH-Bereich 3 – 10, dreifache Wiederholung der Sorptionsbatches für Steigungsabschnitte der Sorptionskanten.

Die Bestimmung des Quelldrucks und der Permeabilität des Bentonits aus Chakassien wurde fortgesetzt. Experimente bei einer Dichte von 1,6 wurden abgeschlossen.

AP5: Als erster Schritt wurden mit den russischen Partnern Benchmark-Modellrechnungen festgelegt, die eine Überprüfung der Leistungsfähigkeit der eingesetzten Programme ermöglichen sollen, welche im Folgenden zur Berechnung von hydraulischen Pumpversuchen eingesetzt werden. Die dafür notwendige Verwendung des spezifischen Speicherkoeffizienten wird derzeit in  $d^3f++$  implementiert. Arbeiten in AP5 konzentrierten sich auf die Erstellung eines großräumigen Matrixmodells, das von der russischen Seite im Juli 2017 an die deutsche Seite übergeben worden ist. Die Funktionalität von  $d^3f++$  musste zunächst zum Einlesen von Rasterdaten für die Permeabilität und den  $K_d$ -Wert erweitert werden. Erste Testrechnungen zur Grundwasserströmung konnten die erwartete Strömungsrichtung gut reproduzieren.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP4: Die Sorptionsexperimente werden abschließend vorbereitet und begonnen, sobald das Probenmaterial zur Verfügung steht.

AP5: Nach Implementierung des Speicherkoeffizienten in  $d^3f++$  werden die Benchmark-Rechnungen weitergeführt. Hinsichtlich des Matrixmodells werden im nächsten Schritt Transportrechnungen durchgeführt und mit den Ergebnissen der russischen Partner verglichen. Dies wird quantitativ durch einen Vergleich der Transportzeit eines inerten Tracers und eines sorbierenden Stoffes vom östlichen zum westlichen Modellrand unter Variation der Durchlässigkeit des Gneises und der höher durchlässigen Störungszonen erreicht. Neben der Durchlässigkeit wird dabei auch die Rückhaltung der Radionuklide variiert.

In AP1, AP3, und AP6 sind seitens der GRS im Jahr 2018 keine Arbeiten geplant.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstraße 12, 76131 Karlsruhe	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11587A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Vorprojekt (SANDWICH-VP), Teilprojekt A	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2017 bis 30.06.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtförderbetrag des Vorhabens:</b> 989.049,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Emmerich

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Neben dem Wirtsgestein kommt geotechnischen Barrieren wie Schacht- oder Streckenverschlüssen in Endlagern eine besondere Bedeutung zu.

Ein vielversprechendes Konzept ist das von KIT entwickelte Sandwich-System, bei dem das hydraulische Dichtelement aus Wechsellagen aus Bentonit zur Abdichtung und hydraulisch leitenden Potentialausgleichsschichten (Äquipotenzialsegmente – ES) besteht. Experimente im Technikummaßstab zum Nachweis der Funktion sind erfolgreich durchgeführt worden. Der nächste Schritt ist ein großmaßstäbliches Experiment unter Einbeziehung des Wirtsgesteins, bei dem unter Demonstration der Einbautechnik zu prüfen ist, ob die erwarteten Vorzüge des Sandwich-Systems zum Tragen kommen und die Dichtfunktion erreicht wird.

Das Sandwich-Vorprojekt ist ein Verbundprojekt von KIT und GRS mit Beteiligung internationaler Partner BGR, Swisstopo, ENRESA, NAGRA sowie enger Kooperation mit dem ENSI. Das Ziel des Sandwich-Vorprojekts besteht in der Planung eines großmaßstäblichen In-situ-Experiments.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Definition der Erfordernisse an das Verschlussystem
- AP2: Festlegung der Ziele des Experiments
- AP3: Festlegung und Vorbereitung eines Versuchsortes
- AP4: Materialauswahl für Dichtsegmente (DS) und Äquipotenzialsegmente (ES)
- AP5: Auslegungsvarianten von Verschluss und Instrumentierung
- AP6: Auslegungsrechnungen für die Planung von Verschluss und Instrumentierung
- AP7: Festlegung der Bautechniken
- AP8: Festlegung der Instrumentierung
- AP9: Festlegung der Projektorganisation sowie Zeit- und Kostenplanung
- AP10: Berichterstattung
- AP11: Koordination

Die APs werden bis auf nachfolgend genannte APs gemeinsam federführend mit GRS bearbeitet. Das KIT ist federführend bei AP4 und AP11. Die GRS ist federführend für AP3 und AP6.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Zusammenstellung von Ergebnissen von (inter-)nationalen In-situ-Großversuchen zu Schacht- und Streckenverschlüssen und Bewertung bzgl. Relevanz der Ergebnisse für das geplante In-situ-Experiment
- AP2: Die übergeordneten Ziele des geplanten In-situ-Experimentes sind unverändert gültig
- AP4: Mineralogisch/chemische Charakterisierung der Proben des HTV-4; Untersuchung des Einflusses des Salzgehalts auf die Messung der Kationenaustauschkapazität der DS Proben mittel Cu-Trien  
 Test neuer ES Materialien in der Harfenapparatur, langsames Steigverhalten sowie geringere mechanische Stabilität im Vergleich zum Benchmark  
 Start zweier MiniSandwich-Versuche mit Modelporenwasser für Opalinuston (Pearson water), Quelldruckentwicklung widerspiegelt die Unterschiede in der Vorsättigung (Einbauwassergehalt) Alternative Bentonite zum Calcigel ausgewählt und Bestimmung Rohstoffparameter, Bentonit D3 erreicht bei vergleichbarer Einbaudichte und vergleichbarem Einbauwassergehalt aufgrund eines höheren Smectitgehalts einen höheren Quelldruck
- AP5: Zur Festlegung der Dimension der Versuchsnische und Position des Großbohrloches wurde die Option eines zweiten Bohrlochs für einen 2. Versuch in Betracht gezogen  
 Es wurde eine Dimensionsanalyse durchgeführt und eine mögliche Geometrie für einen Schachtverschluss im In-situ-Experiment mit 5 ES und 4 DS sowie einer Gesamthöhe von ca. 9 m inkl. Druckkammer(n) und statischem Widerlager erarbeitet
- AP8: Planung der Instrumentierung mit TDR Kabelsensoren (TAUPE) zum Monitoring der Feuchteausbreitung im In-situ-Experiment begonnen
- AP11: Kick-Off Meeting im Juli 2017 und 1. Projektmeeting im November 2017 zu den geplanten Arbeiten und dem Fortschritt im Projekt

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Fertigstellung der Übersichten zu internationalen Großversuchen
- AP4: Auswertung und Interpretation der mineralogisch/chemischen Daten aus dem HTV-4, Aufbereitung Proben HTV-5 und Start mineralogisch/chemischer Analyse  
 Fortgesetzter Test von alternativen ES Materialien in der Harfenapparatur  
 Kompaktierung alternativer Bentonit, Einbau HTV-6, Versuchsstart mit Pearson Water  
 Ausbau und mineralogisch/chemische Analyse MiniSandwich-Versuche Calcigel/Pearson Water  
 Start neue MiniSandwich-Versuche alternativer Bentonit/Pearson Water
- AP5: Festlegung der Dimension der Versuchsnische und des Bohrlochs in Abstimmung mit der Bohrfirma und Swisstopo  
 Festlegung der Bohrlochposition in der Nische unter Berücksichtigung eines optionalen 2. Bohrlochs  
 Festlegung der Sicherungsmaßnahmen und des Ausbaus der Nische und des Bohrlochs hinsichtlich Arbeitsschutz und zur Vermeidung von Ventilation (Porendruckabsenkung) in Abstimmung mit Swisstopo
- AP8: Fortsetzung der Planung der Instrumentierung mit TDR Kabelsensoren unter Einbeziehung der Verteilung aller Sensoren und der Dimensionierung des Sandwich-Verschlusses im In-situ-Experiment

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln	<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11587B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Vorprojekt (SANDWICH-VP), Teilprojekt B	
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3	
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2017 bis 30.06.2019	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 710.450,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Wieczorek

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Neben dem Wirtsgestein kommt geotechnischen Barrieren wie Schacht- oder Streckenverschlüssen in Endlagern eine besondere Bedeutung zu.

Ein vielversprechendes Konzept ist das von KIT entwickelte Sandwich-System, bei dem das hydraulische Dichtelement aus Wechsellagen aus Bentonit zur Abdichtung und hydraulisch leitenden Potentialausgleichsschichten (Äquipotenzialsegmente – ES) besteht. Experimente im Technikumsmaßstab zum Nachweis der Funktion sind erfolgreich durchgeführt worden. Der nächste Schritt ist ein großmaßstäbliches Experiment unter Einbeziehung des Wirtsgesteins, bei dem unter Demonstration der Einbautechnik zu prüfen ist, ob die erwarteten Vorzüge des Sandwich-Systems zum Tragen kommen und die Dichtfunktion erreicht wird.

Das Sandwich-Vorprojekt ist ein Verbundprojekt von KIT und GRS mit Beteiligung internationaler Partner BGR, Swisstopo, ENRESA, NAGRA sowie enger Kooperation mit dem ENSI. Das Ziel des Sandwich-Vorprojekts besteht in der Planung eines solchen großmaßstäblichen In-situ-Experiments im Felslabor Mont Terri.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Definition der Erfordernisse an das Verschlussystem
- AP2: Festlegung der Ziele des Experiments
- AP3: Festlegung und Vorbereitung eines Versuchsortes
- AP4: Materialauswahl für Dichtsegmente (DS) und Äquipotenzialsegmente (ES)
- AP5: Auslegungsvarianten von Verschluss und Instrumentierung
- AP6: Auslegungsrechnungen für die Planung von Verschluss und Instrumentierung
- AP7: Festlegung der Bautechniken
- AP8: Festlegung der Instrumentierung
- AP9: Festlegung der Projektorganisation sowie Zeit- und Kostenplanung
- AP10: Berichterstattung
- AP11: Koordination

Die APs werden bis auf nachfolgend genannte APs gemeinsam federführend mit KIT bearbeitet. Das KIT ist federführend bei AP4 und AP11, die GRS bei AP3 und AP6.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Zusammenstellung von Ergebnissen von In-situ-Versuchen in Mont Terri. Außerdem wird eine Ergebniszusammenstellung zum Verhalten von Bentonit des EU-Projekts BEACON verfügbar gemacht.
- AP2: Die übergeordneten Ziele des geplanten In-situ-Experiments sind unverändert gültig. Detaillierte Ziele werden noch festgelegt.
- AP3: Als Versuchsort wurde eine Nische in der geplanten Erweiterung des Felslabors festgelegt. Die Planung umfasst ein Großbohrloch von bis zu 15 m Tiefe zur Aufnahme des Sandwich-Dichtsystems. Ein zweites Bohrloch für ergänzende Messungen wird in Betracht gezogen.
- AP6: Ein vorläufiges dreidimensionales Modell der Versuchsgeometrie mit homogen-isotropem Gebirge wurde erarbeitet. Erste hydraulische Auslegungsrechnungen zeigen einen teilent-sättigten Bereich um das offene Bohrloch von maximal etwa 0.5 m Ausdehnung, abhängig von der Bewetterung. Ein Abschluss der Versuchsnische von der Laborbewetterung wird daher diskutiert.
- AP8: Die Instrumentierungsplanung für das Versuchsbohrloch und das umgebende Gebirge hat begonnen. Ein erster Entwurf des Instrumentierungsplans wird im Februar diskutiert.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Fertigstellung der Datensammlung zu bestehenden Versuchen
- Festlegung der Dimension der Versuchsnische und des Bohrlochs in Abstimmung mit der Bohrfirma und Swisstopo
- Festlegung der Sicherungsmaßnahmen und des Ausbaus der Nische und des Bohrlochs hinsichtlich Arbeitsschutz und zur Vermeidung von Ventilation (Porendruckabsenkung) in Abstimmung mit Swisstopo
- Vorläufige Festlegung der Versuchsführung zur Definition eines Referenzfalls für die Simulation
- Erweiterung des Simulationsmodells um geologische Features
- HM-Simulation des Referenzfalls und von Varianten
- Entwicklung des Instrumentierungsplans

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Technische Universität Clausthal, Adolf-Römer-Str. 2a, 38678 Clausthal-Zellerfeld		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11597</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase II: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel (STROEFUN-II)		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.07.2017 bis 30.06.2018	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 49.978,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Prof. Dr. Langefeld	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des bereits erfolgten Forschungsprojektes „Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches“ (FKZ: 02E11253) wurde ein Konzept für den gegenständlichen Nachweis der strömungstechnischen Dichtheit von Verschlussbauwerken aus kohäsiven Materialien entwickelt. Dies erfolgte in Kombination mit der Auswahl und rheologischen Charakterisierung von geeigneten Injektionsmaterialien für die Vergütung von getesteten Bauwerksbereichen im Rahmen der gegenständlichen Nachweisführung.

Folgende, noch nicht geklärte Punkte sollen in dieser Projektphase behandelt werden:

- Zeitpunkt der Ausbildung einer Zone erhöhten Permeabilität in Kontaktbereich nach Einbringung des Baustoffes  
Nach Errichtung des Streckenverschlussbauwerkes kommt es zeitabhängig zu einer Schädigung des Kontaktbereiches (KB) Dichtbaustoff/Gebirge und Ausbildung eines Bereichs erhöhter Permeabilität infolge der Schwindprozesse bzw. der Zwangsspannungen aufgrund der unterschiedlichen Materialeigenschaften der hydraulisch abbindenden Baustoffe. Zur wirksamen Nachvergütung des Kontaktbereiches muss die Injektionsmaßnahme nach der Ausbildung einer Zone erhöhter Permeabilität stattfinden, wodurch dem Zeitpunkt dieser Ausbildung eine entscheidende Bedeutung im Vergütungskonzept zukommt
- Porengrößenverteilung sowie Porositäts-/Permeabilitätsbeziehungen im Kontaktbereich  
Der Zusammenhang zwischen der strömungswirksamen (effektiven) Porosität, der Porengrößenverteilung und der Permeabilität wird als essentielle Grundlage für die Beurteilung der Strömungsbedingungen im Kontaktbereich und die Auswahl des Injektionsmittels im Rahmen des Vergütungskonzepts angesehen.
- zusätzliche, ausgewählte rheologische Eigenschaften der Injektionsmittel  
Im bisherigen Vorhaben wurde die dynamische Viskosität der Injektionsmittel bei einer einzelnen Scherrate gemessen. Eine Beurteilung des Einflusses der Scherspannung und der Zeit sowie Schlussfolgerungen für das resultierende rheologische Verhalten (u. a. struktur-viskoses Verhalten, Thixotropie) und der daraus resultierenden Folgen für das Injektionsverhalten sowie Kenntnisse zu verarbeitungsrelevanten Parametern (u. a. Topfzeit, Trichterauslaufzeit etc.) liegen noch nicht vor.

- Partikelgrößenverteilung in den partikelgestützten Injektionsmitteln

In Phase I wurde die Korngrößenverteilung der partikelgestützten Injektionsmittel im trockenen Zustand betrachtet. In Suspension kann es jedoch durch die Hydratation und Agglomeration zur Bildung von größeren Partikeln kommen, wodurch das Injektionsverhalten der Suspensionen beeinflusst wird. Entsprechende Parameter sind von Bedeutung für die Auswahl des Injektionsmittels und –regimes.

- Einfluss der Anrührtechnik/Upscaling

Der Einfluss der im Labor verwendeten Anrührtechnik (Scherraten, Energieeintrag beim Anrühren) auf die Rheologie und Partikelgrößenverteilung und die Folgen für das Upscaling auf die verwendete Technologie beim Untertage Einsatz.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Vertiefung Kenntnisstand des Kontaktbereiches

AP2: Vertiefung Kenntnisstand der Rheologie und des Qualitätsmanagements von Injektionsmittel und Dichtbaustoff

AP3: Berichtslegung-Dokumentation, Interpretation, Schlussfolgerung

## 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Während des Berichtszeitraums wurden die Begrifflichkeiten Kontaktbereich, Kontaktfuge, Porosität, Risse, mittels Literaturrecherche zur Verwendung in diesem Projekt, erörtert.

Auch wurde auf eine Permeabilitäts-Porositätsbeziehung von verschiedenen Gesteinen eingegangen, mit der Erkenntnis, dass eine Verallgemeinerung nicht möglich ist. Die Permeabilitäts-Porositätsbeziehungen sind von den unterschiedlichen Gesteinen und Materialien abhängig. Letztlich lassen sich diese Beziehungen nur durch einen großen Probenumfang für eine Lithologie bzw. ein Material ableiten, da diese Permeabilitäts-Porositäts-beziehungen keinerlei Aussagen darüber liefern, welche geometrischen Eigenschaften der Porenraum im Betrachtungsvolumen aufweist.

Auch wurde die Permeabilität in Abhängigkeit von der Rissbreite mittels mehreren Literaturquellen recherchiert, jedoch sind nicht nur die Randbedingungen unterschiedlich, sondern auch die Datensätze mit unterschiedlichen Regressionen betrachtet worden.

Für eine Erfassung des Porenraums und der Risse wurden verschiedene Verfahren vorgestellt. So wurde die Woodsmetallporosimetrie mit der der Hg-Porosemetrie verglichen mit dem Resultat, dass bei der Hg-Porosemetrie ein größerer Anteil an Poren als kleiner angenommen wird als bei der Woodsmetallporosimetrie.

Ein ausreichend genaues Abbild der Probe, in Form eines 3D-Modells kann mittels einer Computertomographie (CT) erzeugt werden, wobei es zu kleinen Variationen (0,9-24,0 µm) kommen kann. Eine weitere Möglichkeit zur Erfassung des Porenvolumens gelingt mittels Kernspintomographie (Nuclear Magnetic Resonance). Zur besseren Detektierbarkeit werden bei dieser Methode Proben mit Wasser oder einem gut detektierbaren Gas gesättigt. Das Verfahren basiert darauf, dass Atomkerne in einem statischen Magnetfeld ein Magnetfeld mit entgegengesetzter Polarisierung erzeugen, liegt eine diffuse Magnetisierung im Porenraum vor, so ist dieses Verfahren fehleranfällig.

## 4. Geplante Weiterarbeiten

Die Fertigstellung der noch ausstehenden Tätigkeiten wird bis zu dem 30.06.2018 erfolgen.

## 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11607A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2017 bis 30.09.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 656.550,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Bischofer	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Primäres Ziel des Verbundvorhabens VESPA II ist, das Verständnis der Lösungseigenschaften und der Rückhaltung von mobilen Spalt- und Aktivierungsprodukten besonders unter reduzierenden Bedingungen entscheidend zu verbessern.

Ziel des GRS-Teilprojekts VESPA II ist, ein polythermes thermodynamisches Modell zur Beschreibung der Aktivitäten von gelösten Selenspezies unter reduzierenden Bedingungen zu entwickeln.

Darüber hinaus wird die chemische Reaktion von oxidierten Selenspezies bei Fe-Korrosion untersucht, die Lösungseigenschaften von Selenit und Iodid bei Temperaturen über 25 °C werden ermittelt bzw. prognostiziert sowie geochemische Referenzszenarien für potentielle Endlagerstandorte in deutschen Tonstein- und Steinsalzformationen entwickelt.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- Speziation und Thermodynamik von Spaltprodukten in salinaren Lösungen
- Untersuchung der Rückhaltung von oxidierten Selenspezies beim Kontakt mit Fe(II)-haltigen Korrosionsprodukten
- Geochemische Systemzustände im Nahfeld
- Vergleichende Modellierung der Ausbreitung und Rückhaltung von langlebigen Spalt- und Aktivierungsprodukten
- Projektmanagement und Projektcontrolling

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

Für die Untersuchung der Lösungseigenschaften von Spaltelement-Verbindungen sind kalorimetrische Messungen vorgesehen. Das hierfür notwendige Titrationskalorimeter wurde beschafft und im Labor der GRS installiert. Einige Modifikationen wurden vorgenommen, um zu verhindern, dass untersuchte Metallsalzlösungen in Kontakt mit korrodierbaren Metallteilen kommen.

Inzwischen wurden erste Messungen der Verdünnungsenthalpie von Cäsiumchlorid-Lösungen bei 25 °C durchgeführt. Weitere Messungen sind bei höheren Temperaturen vorgesehen. Untersucht werden sollen auch Magnesiumiodid und Kaliumselenit. Beide Verbindungen wurden in Form konzentrierter Lösungen synthetisiert.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Messung der Verdünnungsenthalpie von Magnesiumiodid- und Kaliumselenitlösungen bei 25 °C und höheren Temperaturen.

Ansetzen der Batchversuche zur Rückhaltung von Selenit und Selenat durch Fe-II-Korrosionsphasen sowie die Vorbereitung der Versuche mit metallischem Eisen.

Beginn der isopiestic Messungen für ternäre Lösungen mit Cäsiumchlorid bei Temperaturen > 25 °C.

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

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e. V., Bautzner Landstr. 400, 01328 Dresden		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11607B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2017 bis 31.08.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 515.767,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Müller	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Primäres Ziel des Verbundprojektes VESPA mit der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Braunschweig, dem Karlsruhe Institut für Technologie und dem Forschungszentrum Jülich ist es, Konservativitäten in den Annahmen, die z. Z. für die Radionuklide  $^{14}\text{C}$ ,  $^{79}\text{Se}$ ,  $^{129}\text{I}$  und  $^{99}\text{Tc}$  in Langzeitsicherheitsnachweisen angenommen werden, abzubauen. Ziel des Teilvorhabens des HZDR ist die Identifikation von Rückhalteprozessen für das Spaltprodukt  $^{99}\text{Tc}$  und im geringeren Umfang für  $^{79}\text{Se}$ . Dabei werden auch konkurrierende Reaktionen erfasst sowie der Einfluss des Redoxzustandes untersucht. Neben Batchversuchen sind spektroskopische Speziesnachweise ein wichtiger Bestandteil der Untersuchungen. Thermodynamische Daten werden ermittelt und im Fall hinreichender Qualifizierung in die Referenzdatenbasis THEREDA implementiert. Sorptionsparameter werden in die mineralspezifische Sorptionsdatenbank RES<sup>3</sup>T eingebunden. Ein weiteres Ziel stellt die Untersuchung und Charakterisierung der relevanten niederen Oxidationsstufen des  $^{99}\text{Tc}$  dar.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

AP1: Sorptionsprozesse

AP1.1: Sorption von Selen (0 und -II) an verschiedenen Eisen-Korrosionsphasen und Mineraloxiden

AP1.2: Sorption und Einbau von Tc an verschiedenen Eisen-Korrosionsphasen

AP1.3: Auswirkung der Variabilität von Eisen-Korrosionsphasen auf den Rückhalt von Selen und Technetium

AP2: Tc-Chemie inklusive niedriger Oxidationsstufen

AP3: Datentransfer zur Langzeitsicherheitsanalyse

AP4: Erstellung Abschlussbericht

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

AP1:

- Umfangreiche Literaturrecherche zu Tc-Retentionsprozessen ist dokumentiert
- Bereitstellung des notwendigen instrumentellen Versuchsaufbaus für Tc-Retentionsuntersuchungen in N<sub>2</sub>-Inertgasbox
- Erste Voruntersuchungen und positive Befunde zur Reduktion von Tc(VII) zu Tc(IV) an nanopartikulärem Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in Anwesenheit von Fe(II)
- Vorbereitung der Publikation von früheren Daten zur Se(IV) Sorption an nanopartikulärem Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

AP2:

- Umfangreiche Literaturrecherche zur Tc-Chemie der niederen Oxidationsstufen ist dokumentiert

### 4. Geplante Weiterarbeiten

AP1:

- Vertiefende Untersuchungen zur Reduktion von Tc(VII) zu Tc(IV) an nanopartikulärem Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in Anwesenheit von Fe<sup>2+</sup> und S<sup>2-</sup>: Einfluss des pH, der Ionenstärke, der Reaktionszeit
- Synthese von Pyrit und weiteren Mineraloxidphasen
- Voruntersuchungen zur Reduktion von Tc(VII) zu Tc(IV) an Pyrit in Abhängigkeit des pH, der Ionenstärke, der Reaktionszeit

AP2:

- Bereitstellung des notwendigen instrumentellen Versuchsaufbaus
- Voruntersuchungen zur Synthese von Tc(I)-Komplexen

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Sondervermögen Großforschung beim Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, 76344 Eggenstein-Leopoldshafen		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11607C</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt C		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2017 bis 31.08.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 504.649,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Altmaier	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Primäres Ziel des Verbundvorhabens VESPA II ist, das Verständnis der Lösungseigenschaften und der Rückhaltung von mobilen Spalt- und Aktivierungsprodukten mit Fokus auf reduzierende Bedingungen entscheidend zu verbessern. Dabei sollen insbesondere zuverlässigere chemische Eingangsdaten für langzeitanalytische Modellrechnungen für generische Endlagerbedingungen unterschiedlicher Wirtsgesteinsformationen zur Verfügung gestellt werden. Dies umfasst unter anderem das Stoffinventar und den Quellterm für  $^{129}\text{I}$  sowie Löslichkeitsgrenzen und Sorptionskoeffizienten für Selen-, Iod- und Technetiumspezies.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Die Arbeiten von KIT-INE im Rahmen von VESPA II gliedern sich in folgende Arbeitspakete:

- AP1: Chemische Thermodynamik von Technetium(IV).
- AP2: Rückhaltung von Radionukliden durch Sekundärphasen im Nahfeld: Rückhaltung von Selen(IV) durch Calcit.
- AP3: Rückhaltung von Radionukliden durch Sekundärphasen im Nahfeld: Rückhaltung von Iod durch Fe-Sekundärphasen.
- AP4: Freisetzung von  $^{129}\text{I}$  aus der Abfallmatrix.
- AP5: Einbindung von Daten und Erkenntnissen in langzeitsicherheitsanalytische Modellrechnungen (erfolgt gemeinsam im Projektverbund).
- AP6: Dokumentation.

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Im Berichtszeitraum wurden von KIT-INE in VESPA II die folgenden Arbeiten durchgeführt:

- AP1: (i) Literaturrecherche zu Tc-Nitrat- und Tc(IV)-Sulfat-Systemen. (ii) Löslichkeitsexperimente mit Tc(IV) bei Anwesenheit von Nitrat in unterschiedlichen chemischen Redoxsystemen. Bewertung von kinetischen Effekten und Festphasencharakterisierung. (iii) Planung der Tc(IV)-Löslichkeitsexperimente in verdünnten bis konzentrierten NaCl-Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> Lösungen. (iv) Es konnte kein geeignete/r Bewerber/in auf die Doktorandenstelle gefunden werden.
- AP2: Langzeitexperimente zur Aragonit-Calcit Rekristallisation in Gegenwart von Se(IV) wurden angesetzt und werden regelmäßig beprobt.
- AP3: Die Arbeiten zur Rückhaltung von Iod durch Fe-Sekundärphasen werden im Wesentlichen im Rahmen einer Doktorarbeit durchgeführt. Die Doktorandenstelle wurde ausgeschrieben und ein geeigneter Kandidat gefunden.
- AP4: (i) Bestellung und Lieferung von Autoklav- und Verbrauchsmaterialien für Inventarbestimmung und Auslaugexperimente. (ii) Probenvorbereitung für Inventarbestimmung und für ein Auslaugexperiment zur Bestimmung der instantan freigesetzten Menge (IRF) von <sup>129</sup>I. (iii) KORIGEN-Rechnungen zu <sup>129</sup>I Inventar in bestrahltem Kernbrennstoff.
- AP5 und AP6: Es wurden keine Arbeiten im Berichtszeitraum durchgeführt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im kommenden Berichtszeitraum sollen von KIT-INE in VESPA II folgende Arbeiten durchgeführt werden.

- AP1: (i) Durchführung von Tc(IV)-Löslichkeitsexperimenten in verdünnten bis konzentrierten NaCl-Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> Lösungen. (ii) Durchführung entsprechender Experimente im MgCl<sub>2</sub>-System. Das CaCl<sub>2</sub>-System wird anhand ausgewählter Stichproben analysiert. (iii) In beiden o. g. Experimentserien werden detaillierte Analysen der wässrigen und festen Tc(IV)-Speziation durchgeführt. (iv) Manuskript zu "Impact of nitrate on the redox chemistry of Tc". (v) Weitere Arbeiten werden im Rahmen der geplanten Doktorarbeit durchgeführt. Die Stelle soll im Januar 2018 von KIT ausgeschrieben werden.
- AP2: Vorbereitung/Auswertung der Synchrotronexperimente. Monitoring der Rekristallisationsexperimente.
- AP3: Der Start der Doktorarbeit zum Iod-Einbau ist geplant zum 1. April 2018. (i) Literaturstudie zur Rückhaltung von I an/in Fe-Sekundärphasen. (ii) Beginn der Synthese und Charakterisierung von Fe-Sekundärphasen.
- AP4: (i) Aufschluss von bestrahltem Kernbrennstoff zur experimentellen <sup>129</sup>I Inventarbestimmung und Vergleich mit KORIGEN-Rechnungen. (ii) Start des Auslaugexperimentes mit bestrahltem Kernbrennstoff unter endlagerrelevanten Bedingungen zur Bestimmung der <sup>129</sup>I Freisetzung (IRF).
- AP5 und AP6: Es sind keine Arbeiten im kommenden Berichtszeitraum geplant.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 E 11607D</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt D		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b>  01.09.2017 bis 31.08.2020	<b>Berichtszeitraum:</b>  01.09.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b>  265.296,00 EUR	<b>Projektleiter:</b>  Dr. Brandt	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

VESPA II baut auf den Erkenntnissen aus dem Vorläuferprojekt VESPA auf, indem offene Fragen zur Rückhaltung von Radionukliden, der chemischen Thermodynamik von Spalt- und Aktivierungsprodukten, und der Einbindung von Daten und Erkenntnissen in die Langzeitsicherheitsanalyse bearbeitet werden. Dabei sollen insbesondere zuverlässigere chemische Eingangsdaten für langzeitanalytische Modellrechnungen für generische Endlagerbedingungen unterschiedlicher Wirtsgesteinsformationen zur Verfügung gestellt werden. Dies umfasst das Stoffinventar und den Quellterm für  $^{129}\text{I}$  sowie Löslichkeitsgrenzen und Sorptionskoeffizienten für Selen-, Iod- und Technetiumspezies.

Innerhalb des Beitrags des IEK-6 zu VESPA II wird die Retention von Iodid an lamellaren Doppelhydroxid-Verbindungen (LDHs) im Detail untersucht. Das langlebige Isotop  $^{129}\text{I}$  spielt in vielen Analysen zur Langzeitsicherheit von tiefen geologischen Endlagern für hochradioaktive Abfälle eine große Rolle. Im Rahmen des vorgeschlagenen Projekts sollen unterschiedliche Rückhaltemechanismen von Iodid an LDH quantitativ bewertet werden und Daten für Modellrechnungen ermittelt werden. Zusätzlich werden Daten zum Stoffinventar von  $^{129}\text{I}$  in abgebrannten Brennelementen und damit der maximal aus dem Abfall freisetzbaren  $^{129}\text{I}$ -Stoffmenge ermittelt.

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Das Untersuchungsprogramm gliedert sich in 6 Arbeitspakete (AP), die nachfolgend kurz zusammengefasst sind:

AP1:  $^{129}\text{I}$ -Iod-Inventar in bestrahltem Kernbrennstoff: Dieses AP beinhaltet eine Auswertung von Literaturdaten, die dann zur Abschätzung der  $^{129}\text{I}$ -Inventare auch generische Abbrandrechnungen für repräsentative Brennelemente aus Leichtwasserreaktoren (DWR/SWR) und deren Bestrahlungshistorie verwendet werden.

AP2 - AP4 sind experimentelle APs, in denen unterschiedliche Rückhaltemechanismen (Anionenaustausch, Einbau durch Ko-präzipitation und Rückhaltung in kalzinierten LDH-Phasen) von Iodid an LDH untersucht werden sollen. Neben strukturellen Untersuchungen steht die Quantifizierung von thermodynamischen Eigenschaften der untersuchten Phasen im Vordergrund.

AP5: In diesem AP werden die Daten aus den experimentellen APs so aufbereitet, dass sie für Modellrechnungen an die Projektpartner übergeben werden können und letztlich auch der breiten Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt werden.

AP6: Ergebnisdokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Das Projekt wurde pünktlich zum 01.09.2017 gestartet. Die Literaturstudie zum  $^{129}\text{I}$ -Inventar und zur Iod-Geochemie in natürlichen Gewässern wurde plangemäß durchgeführt und in Berichtform zusammengefasst. Der Informationsaustausch mit KIT-INE zur Iod-Freisetzung wird im späteren Projektverlauf stattfinden, wenn die neuen Daten von KIT-INE vorliegen.
- AP2: In Vorbereitung der Experimente zur Rückhaltung von  $^{129}\text{I}$ iodid (Spurenbereich) durch Anionenaustausch wurden erste LDH der Mischkristallreihe von (Mg,Ni)Al-LDH mit Chlorid als Zwischenschichtanion mittels Kopräzipitation synthetisiert, basierend auf den Erfahrungen in VESPA. Die experimentellen Details von AP2 bis AP4 wurden festgelegt und bei dem Projekttreffen in Braunschweig auch die Zusammenarbeit mit KIT-INE (EXAFS-Messungen) und HZDR (Bereitstellung/Herstellung von LDH-Proben) besprochen.
- AP3: Zum Einbau von Iodid durch Kopräzipitation wurden erste LDH-Proben hergestellt.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

Im 1. Halbjahr 2018 werden wie geplant Experimente zur Rückhaltung von  $^{129}\text{I}$ iodid durch Anionenaustausch (AP2) und der Einbau von Iodid (AP3) durchgeführt. Zusätzlich werden die Experimente zur Rückhaltung von Iodid durch kalzinierte LDH-Phasen vorbereitet, indem entsprechende LDH-Proben synthetisiert und charakterisiert werden.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> DBE Technology GmbH, Eschenstr. 55, 31224 Peine		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11617A</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRIS-TA II), Teilprojekt A		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Felder 3.1 + 3.2		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.09.2017 bis 31.08.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.09.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 698.375,69 EUR	<b>Projektleiter:</b> Jobmann	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens wird ein Sicherheits- und Nachweiskonzept für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle in Kristallingestein in Deutschland entwickelt. Ein erstes Teilziel ist es, dafür plausible standortunabhängige generische geologische Modelle für unterschiedliche ewG-Typen zu entwickeln. Die darauf basierende weitere Konzeptentwicklung erfordert Kenntnisse sowohl über das Gesteinsverhalten als auch über physikalisch-chemische Prozesse, die innerhalb und außerhalb eines geplanten Endlagers während der zukünftigen Entwicklung ablaufen werden. Ein zweites Teilziel ist daher, einen generischen FEP-Katalog für Endlager in Kristallingesteinen zu entwickeln, auf dessen Basis später eine Szenarienentwicklung durchgeführt werden kann. Kernelemente eines Nachweiskonzeptes sind die Nachweise zur Barrierenintegrität und die radiologische Analyse. Die Teilziele in dem Zusammenhang sind die Konzeption und beispielhafte Durchführung von Integritätsanalysen sowohl für die geologische als auch die geotechnischen Barrieren sowie die Berechnung radiologischer Sicherheitsindikatoren für die zu betrachtenden ewG-Typen. Zum Nachweis der Integrität werden die in den Sicherheitsanforderungen qualitativ definierten Integritätskriterien soweit quantifiziert, dass ein rechnerischer Nachweis anhand konkreter Zahlenwerte erfolgen kann.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Sicherheits- und Nachweiskonzept im Kristallingestein
- AP2: Geologie deutscher Kristallinkomplexe, Modelle und Datenbasis
- AP3: Erstellung eines generischen FEP-Kataloges für Endlager im Kristallin
- AP4: Konzeption und beispielhafte Durchführung von Integritätsanalysen
- AP5: Berechnung radiologischer Sicherheitsindikatoren
- AP6: Dokumentation

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

Erste Arbeiten in dem Projekt befassten sich mit der Entwicklung eines generischen FEP-Kataloges für ein Endlager in einer Kristallinformation in Deutschland. Im Rahmen des Vorhabens ist es geplant, eine Zusammenarbeit mit Tschechischen Kollegen zu organisieren. Die dortigen Institutionen SURAO und UJV sind ebenfalls an der Entwicklung eines FEP-Kataloges für Kristallin als Wirtsgestein in Tschechien interessiert. Die Kristallinkomplexe beider Länder haben eine vergleichbare Entwicklungsgeschichte durchlaufen, so dass bezüglich der geologischen Situation des Wirtsgesteins von gleichen Voraussetzungen ausgegangen werden kann. Am 21./22.11.2017 fand zu diesem Thema ein erster FEP-Workshop in Berlin statt. Auf diesem Workshop wurde von beiden Seiten dargelegt, welche Rolle der Erarbeitung eines FEP-Kataloges im Zusammenhang mit dem Sicherheits- und Nachweiskonzept bzw. dem Safety Case zukommt. Es wurde erörtert, in welchen Bereichen eine gemeinsame Arbeit sinnvoll und für beide Seiten effektiv sein kann. Beide Seiten wollen zunächst eine Liste zu betrachtenden FEP erstellen und austauschen. Auf einem weiteren Treffen im Mai 2018 sollen die Inhalte der in den FEP zu beschreibenden Prozesse und Komponenten erläutert und diskutiert werden.

Im Rahmen des Arbeitspaketes 4 wurde damit begonnen, die in den Sicherheitsanforderungen qualitativ definierten Integritätskriterien zu quantifizieren, um einen rechnerischen Nachweis zu ermöglichen. Dazu wurden erste Literaturinformationen gesichtet, die Hinweise auf eine temperaturbedingte Veränderung klüftiger Granitgesteine beschreiben. Eine Auswertung kann zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht erfolgen.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

Quantifizierung der Integritätskriterien. Im FuE-Vorhaben KONEGD wurden drei Einlagerungskonzepte entwickelt, die in unterschiedlicher Weise die Schutzwirkung des Wirtsgesteins Kristallin berücksichtigen. In einem der Konzepte (multipler ewG) wird dem Kristallin eine Einschlusswirksamkeit zugeordnet. Es wird anhand einer Literaturstudie recherchiert und bewertet, ob, und wenn ja, in welcher Form die Einschlusswirksamkeit des Kristallin durch die Wärmeeinbringung beeinträchtigt wird. Abschließend soll das Temperatur-Kriterium quantifiziert werden.

Konkretisierung des geotechnischen Barrierensystems aufbauend auf den im FuE-Vorhaben KONEGD entwickelten Grundlagen. Entwicklung zugeordneter Barrierenkonzepte für die drei zu betrachtenden Einlagerungsvarianten. Quantifizierung des Advektions-Kriteriums für das entwickelte geotechnische Barrierensystem.

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

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11617B</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRIS-TA II), Teilprojekt B		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 4: Sicherheitsnachweis, Feld: 4.1		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2017 bis 30.09.2020	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.10.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 352.150,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Wolf	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Im Rahmen des Vorhabens wird ein Sicherheits- und Nachweiskonzept für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle in Kristallingestein in Deutschland entwickelt. Ein erstes Teilziel ist es, dafür plausible standortunabhängige generische geologische Modelle für unterschiedliche ewG-Typen zu entwickeln. Die darauf basierende weitere Konzeptentwicklung erfordert Kenntnisse sowohl über das Gesteinsverhalten als auch über physikalisch-chemische Prozesse, die innerhalb und außerhalb eines geplanten Endlagers während der zukünftigen Entwicklung ablaufen werden. Ein zweites Teilziel ist daher, einen generischen FEP-Katalog für Endlager in Kristallingesteinen zu entwickeln, auf dessen Basis später eine Szenarientwicklung durchgeführt werden kann. Kernelemente eines Nachweiskonzeptes sind die Nachweise zur Barrierenintegrität und die radiologische Analyse. Die Teilziele in dem Zusammenhang sind die Konzeption und beispielhafte Durchführung von Integritätsanalysen sowohl für die geologische als auch die geotechnischen Barrieren sowie die Berechnung radiologischer Sicherheitsindikatoren für die zu betrachtenden ewG-Typen. Zum Nachweis der Integrität werden die in den Sicherheitsanforderungen qualitativ definierten Integritätskriterien soweit quantifiziert, dass ein rechnerischer Nachweis anhand konkreter Zahlenwerte erfolgen kann.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

- AP1: Sicherheits- und Nachweiskonzept im Kristallingestein
- AP2: Geologie deutscher Kristallinkomplexe, Modelle und Datenbasis
- AP3: Erstellung eines generischen FEP-Kataloges für Endlager im Kristallin
- AP4: Konzeption und beispielhafte Durchführung von Integritätsanalysen
- AP5: Berechnung radiologischer Sicherheitsindikatoren
- AP6: Dokumentation

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- AP1: Es wurden noch keine neuen Arbeiten durchgeführt. Die Ergebnisse der Machbarkeitsuntersuchung aus CHRISTA wurden auf einer Infoveranstaltung zu Kristallingesteinen am 23.11.17 in Berlin vorgestellt.
- AP3: Am 21.11. und 22.11.2017 fand ein erster FEP-Workshop mit DBE Technology, BGR, UJV (CZ) und SURAO (CZ) in Berlin statt. Auf diesem Workshop wurde sowohl von tschechischer als auch von deutscher Seite dargelegt, welche Rolle der Erarbeitung eines FEP-Kataloges im Zusammenhang mit dem Sicherheits- und Nachweiskonzept bzw. dem Safety Case zukommt. Es wurde erörtert, in welchen Bereichen eine gemeinsame Arbeit sinnvoll und für beide Seiten effektiv sein kann. Nachlese der Veranstaltung und Planung der Arbeiten von deutscher Seite auf dem Projektgespräch am 13.12.17 in Peine.
- AP5: Erarbeitung eines Konzeptes zur Nachweisführung am Rande des ewG (RGI-Konzept) für die ewG-Konfigurationen Typ „überdeckender ewG“ und Typ „multipler ewG“.

### 4. Geplante Weiterarbeiten

- AP1: Erarbeitung der Grundlagen eines Sicherheits- und Nachweiskonzept im Kristallingestein.
- AP3: Erarbeitung einer Liste der zu betrachtenden FEP (inkl. der zugrunde zulegenden FEP-Struktur) für Kristallingesteine und Diskussion der Listen auf einem weiteren Treffen mit SURAO und UJV im Mai 2018. Zunächst erfolgt die Erstellung einer Liste für die ewG-Konfigurationen Typ „multipler ewG“, in einem zweiten Schritt für den Typ „überdeckender ewG“.
- AP5: Weiterführung der Arbeiten zur Nachweisführung am Rande des ewG (RGI-Konzept) für die ewG-Konfigurationen Typ „überdeckender ewG“ und Typ „multipler ewG“. Berechnung von Sicherheitsindikatoren für beide Konfigurationen.

### 5. Berichte, Veröffentlichungen

Keine.

<b>Auftragnehmer:</b> GRS, Schwertnergasse 1, 50667 Köln		<b>Förderkennzeichen:</b> <b>02 E 11627</b>	
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)			
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 3: Endlagerkonzepte + Endlagertechnik, Feld 3.3			
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.11.2017 bis 31.10.2020		<b>Berichtszeitraum:</b> 01.11.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 926.745,00 EUR		<b>Projektleiter:</b> Dr. Zhang	

## 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Das Vorhaben zur Untersuchung der Eignung Arteigener Versatz/Verschlussmaterialien für HAW-Endlager im Tongestein hat das Ziel, geotechnische Eigenschaften von Ausbruchmaterial aus dem Opalinuston (ähnlich dem in einem deutschen Endlager zu erwartenden Wirtsgestein – Standortmodell SÜD) und Gemisch mit Bentonitzusatz experimentell zu bestimmen und die Eignung als Versatz- und Verschlussmaterialien zu analysieren. Dadurch soll ein verbessertes Verständnis für das Materialverhalten erreicht und eine Grundlage für eine belastbare Prognose der Langzeitprozesse im Versatz- und Verschlussystem mit Blick auf die langfristige Abdichtung eines Endlagers in einer Tonsteinformation geschaffen werden. Damit leistet das Projekt einen Beitrag zur Absicherung der Grundlagen für die Langzeitsicherheitsanalyse von HAW-Endlagern in Deutschland.

## 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Laboruntersuchungen werden am Ausbruchmaterial aus Auffahrung einer neuen Strecke in der sandigen Fazies des Opalinustons im Untertagelabor Mont-Terri und Gemisch mit Bentonitzusatz in drei Arbeitspaketen durchgeführt:

- AP1: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften wie z. B. Kompaktion und Permeabilität des Ausbruchmaterials zur langfristigen Abdichtung der Endlagerhöhlräume;
- AP2: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des kompaktierten Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung für den Verschluss der Strecken und Schächte und
- AP3: Ermittlung der geotechnischen Eigenschaften des Gemisches aus dem Ausbruchtonstein mit Bentonitzusatz zur Prüfung der Eignung als HAW-Buffermaterial bei hohen Temperaturen in Form von hochverdichteten Formsteinen für Auflager von Abfallbehältern und in Form von Granulat zur Verfüllung des Resthohlraums.

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

- Vorbereitung auf die Probennahme bei der Auffahrung einer neuen Strecke durch die sandigen Facies der OPA-Tonformation im Untertagelabor Mont-Terri Anfang 2018
- Vorbereitung auf die Prüfanlagen mit notwendigen Messinstrumentationen
- Beitrag zur IAEA-Expert Mission (CPR9049) zur Unterstützung des chinesischen Endlagerforschungsprogrammes – Siting of Clay Formation as the Host Rocks for High-Level Radioactive Waste Disposal Repository – an der East China University of Technology, 27-30 Nov. 2017, Nanchang, China.

### **4. Geplante Weiterarbeiten**

- Probennahme im Untertagelabor Mont-Terri Anfang 2018
- Materialaufbereitung und Charakterisierung für Laborversuche
- Bestimmung von Wasseraufnahme bei unterschiedlichen Luftfeuchtigkeiten

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

Keine.



## **2.2 Vorhaben Bereich 6**

<b>Zuwendungsempfänger:</b> Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich		<b>Förderkennzeichen:</b>  <b>02 W 6263</b>
<b>Vorhabensbezeichnung:</b> Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden		
<b>Zuordnung zum FuE-Förderkonzept: Forschung zur Entsorgung radioaktiver Abfälle</b> Bereich 6: Kernmaterialüberwachung		
<b>Laufzeit des Vorhabens:</b> 01.10.2013 bis 30.09.2017	<b>Berichtszeitraum:</b> 01.07.2017 bis 31.12.2017	
<b>Gesamtkosten des Vorhabens:</b> 950.632,00 EUR	<b>Projektleiter:</b> Dr. Niemeyer	

### 1. Vorhabensziele/Bezug zu anderen Vorhaben

Die Aufgabe des Vorhabens besteht darin, die Bundesregierung (vertreten durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie, BMWi) in Fragen der internationalen Kernmaterialüberwachung zu beraten und bei der Weiterentwicklung der Kontrollen zu unterstützen. Im Einzelnen zielte das Vorhaben ab auf Lösungsvorschläge zur weiteren Implementierung des Zusatzprotokolls, Einführung der sog. integrierten Sicherungsmaßnahmen (Integrated Safeguards), Weiterentwicklung des sog. Staatskontrollansatzes (State-level Approach), Entwicklung von anlagen- und brennstoffkreislaufspezifischen Kontrollmethoden sowie Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden unter dem Aspekt der Proliferationsresistenz. Die Arbeiten dienen der Bereitstellung von Arbeitspapieren, Techniken und Veröffentlichungen und der Entwicklung von Auswertemethoden mit dem Ziel der Übernahme der Ergebnisse durch BMWi, Euratom-Kontrollbehörde und Internationale Atomenergie-Organisation (IAEO).

### 2. Untersuchungsprogramm/Arbeitspakete

Programmpunkte und Arbeitspakete sind:

- Weiterentwicklung von Safeguardstechnologien (Digitale Überwachungssysteme und Datenfernübertragung, analytische Messmethoden, Satellitenfernerkundung und Geoinformationstechnologien)
- Neuentwicklung von Safeguardstechnologien (Technologische Zukunftsforschung, Simultane Lokalisierung und Kartenerstellung, geophysikalische Messverfahren, Lasertechniken)
- Safeguards-by-Design
- Safeguards für Nuklearanlagen (Entsorgung abgebrannter Brennelemente, Zentrifugenanreicherungsanlagen)
- Weiterentwicklung des staatspezifischen Kontrollansatzes
- Kooperation mit der DGAP zur technisch-politischen Schnittstelle der internationalen Safeguards
- Pflege des nationalen Safeguards-Internet-Portals
- Entwicklung eines Qualitätsmanagements für das EURATOM-Safeguardssystem
- Weiterentwicklung von Safeguards-Überlegungen im Rahmen von „3S“ (Sicherheit, Sicherung, Safeguards)
- Mitarbeit in der European Safeguards R&D Association (ESARDA)
- Weitere Aktivitäten (INMM, SAGSI)

### 3. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

- Weiterentwicklung von Safeguardstechnologien:
  - a) Einschluss und Überwachung: Anforderungen in der Entsorgung von Brennelementen im Rahmen der integrierten Sicherungsmaßnahmen;
  - b) Datenfernübertragung (DFÜ): Unterstützung bei der Durchführung eines DFÜ-Feldtests in zwei Leistungsreaktoren;
  - c) Safeguardsanalytik: Promotionsprojekt zur Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Qualifizierung Jülichs für das Netzwerk der IAEO-Analyselaboratorien (NWAL);

- d) Satellitenfernerkundung: Projekt zum Einsatz von Fernerkundung seitens der IAEO;
- e) Geoinformationstechnologien: Entwicklung eines webbasierten Systems zur Übermittlung digitaler Anlagenpläne;
- f) Inspektionsplanung und -bewertung: Projekt zur Verbesserung der Kernmaterialüberwachung unter Einbezug neuer Methoden aus Statistik und Spieltheorie.
- Safeguards für Nuklearanlagen:
  - a) Geologische Endlagerung: Grundlagenermittlung zur Fortschreibung der Safeguardskonzepte und Auswirkungen der Rückholungs- und Bergungsoption auf Safeguardsmaßnahmen in verschiedenen Wirtsgesteinen; Mitarbeit in der Expertengruppe ASTOR; Konzeptstudie 3S (Safety-Security-Safeguards) bezgl. Entsorgung;
  - b) Zusatzprotokoll und Implementierung von Integrated Safeguards (IS): Unterstützung und Beratung von Betreibern, Unterstützung des BMWi bei Anfragen von IAEO und Euratom;
  - c) IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Auskünfte zu Anfragen des BMWi.
- Unterstützung des staatspezifischen Kontrollkonzeptes (SLC): Akquisitionspfadanalyse (APA)
- Kooperation mit der DGAP: Expertensitzung bei der DGAP am 23.05.2017 zum Thema „International Security and the Future of Nuclear Weapons“
- Pflege des nationalen Safeguards-Internetportals „safeguards.de“
- ESARDA: Präsidentschaft, Leitung Steering Committee, Leitung Executive Board, Leitung Reflection Group, Mitarbeit in vier AGs.
- Weitere Aktivitäten:
  - a) SMÜ/AKÜ-Safeguardskreis und VGB-Arbeitskreis: Mitarbeit;
  - b) INMM: Mitarbeit International Safeguards Division; JNMM Associated Editors;
  - c) SAGSI: Mitarbeit.

#### 4. Geplante Weiterarbeiten

- Einschluss und Überwachung: Anforderungen in der Entsorgung von Brennelementen.
- Datenfernübertragung: Unterstützung bei der Implementierung der DFÜ in Reaktoren.
- Safeguardsanalytik: Abschluss des Promotionsprojekts zur Synthese von Kalibrierstandards und Referenzmaterialien; Fortsetzung der NWAL-Qualifizierung Jülichs.
- Satellitenfernerkundung: Machbarkeitsstudie bezgl. satellitengestützter Videodaten.
- Geoinformationstechnologien: Weiterentwicklung zur Übermittlung GIS-fähiger Anlagenpläne.
- Inspektionsplanung und -bewertung: Wissenschaftliche Beiträge, Training bei der IAEO.
- Safeguards-Konzepte: Weiterentwicklung von SLC, APA, Safeguards-by-design (SBD) und 3S.
- Endlagerung: Fortsetzung der Grundlagenermittlung zur Fortschreibung der Safeguardskonzepte.
- Unterstützung des BMWi bei Umsetzung des Zusatzprotokolls und Bewertung von IS und SLC.
- IAEO-Inspektionsberichte: Erfassung, Aufbereitung und Auswertung; Beratung des BMWi.
- Safeguards-Webportal: Betreuung des Webportals „safeguards.de“.
- Fortführung laufender Arbeiten in den ESARDA- bzw. INMM-Gremien und –Arbeitsgruppen.
- Mitarbeit in den nationalen Gremien AKÜ/WKK und VGB-Arbeitskreis, SAGSI-Mitarbeit.

#### 5. Berichte, Veröffentlichungen

- Aymanns, K., Niemeyer, I., Reznicek, A., Jussofie, A.: Sealing Systems in German Spent Fuel Storage Facilities. ESARDA Bulletin 55, 2017 (in print)
- Krieger, T., Burr, T., Norman, C.: Consequences of non-zero item variability on the IAEA's inspection sampling plans. Proc. INMM Annual Meeting 2017
- Bonner, E., Burr, T., Krieger, T.; Martin, K., Norman, C.: Comprehensive Uncertainty Quantification in Nuclear Safeguards. Science and Technology of Nuclear Installations 2017, ID 2679243 (doi: 10.1155/2017/2679243)
- Rutkowski, J., Warner, T., Niemeyer, I.: A Semi-automated Change Detection Model for Nuclear Fuel Cycle Related Activities Using Large Remote Sensing Time Series Datasets and Geographic Information Systems. Proc. INMM Annual Meeting 2017



## **Information zu Publikationen sowie zu Aus- und Weiterbildung**

In den Halbjahresberichten werden in kurzgefasster Form die Ergebnisse der laufenden Forschungsvorhaben dargestellt. Vorhabenrelevante Publikationen werden, soweit es der Platz zulässt, zwar aufgelistet, es ist aber nicht immer möglich alle Veröffentlichungen (schriftlich oder mündlich) aufzunehmen. Ferner waren bisher Informationen zu Aus- und Weiterbildungsmaßnahmen nicht explizit aufgenommen worden.

Es wurde daher vereinbart, zukünftig die Gesamtzahl der Publikationen zu nennen und Informationen zu Ausbildungsaspekten zu geben. Zahlen wurden von den Vorhabennehmern zur Verfügung gestellt und das Jahr 2015 als Referenz ausgewählt.

Diese zusammenfassende Darstellung wird im jährlichen Rhythmus erfolgen, d. h. sie wird jeweils im zweiten Halbjahresbericht erscheinen. Damit soll - zusätzlich zur Kurzdarstellung der Vorhabenergebnisse - dokumentiert werden, dass und wie die Ergebnisse verbreitet, bekanntgemacht und publiziert werden. Basierend auf den Rückmeldungen wurde die folgende Zusammenstellung vorgenommen.

### **Publikationen**

Im Jahr 2017 wurden rund 260 Veröffentlichungen in begutachteten Journalen, in Form von Schlussberichten, Doktor-, Master-, Bachelor- und Studienarbeiten gemacht. Davon sind ca. 45 % Universitäten, ca. 24 % Einrichtungen der Helmholtz Gemeinschaft und ca. 31 % sonstigen Forschungseinrichtungen und Firmen zuzuordnen.

Im Jahr 2017 wurden auf Konferenzen, bei Workshops und sonstigen Veranstaltungen mehr als 220 Vorträge gehalten und Ergebnisse präsentiert. Davon entfielen ca. 46 % auf Universitäten, ca. 20 % auf Einrichtungen der Helmholtz-Gemeinschaft und ca. 34 % auf Forschungseinrichtungen und Firmen.

### **Aus- und Weiterbildung**

Ein strategisches Forschungsziel der BMWi-Förderung ist die Bereitstellung von Expertise und Wissen, der wissenschaftlich-technischen Kompetenz und als wichtiges Element dabei die Unterstützung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses.

Die Aus- und Weiterbildung von Post-Docs, Doktoranden, Masterstudenten erfolgt nahezu ausschließlich durch Universitäten und Einrichtungen der Helmholtz Gemeinschaft. Gleichwohl erfolgt in einzelnen Fällen die Ausbildung von Studenten im Rahmen einer wissenschaftlichen Kooperation zwischen Universitäten und Firmen.

Im Jahr 2017 waren 80 Nachwuchswissenschaftler in FuE-Vorhaben eingebunden.



### 3 Verzeichnis der Forschungsstellen

<b>Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR), Stilleweg 2, 30655 Hannover</b>		
02 E 11395	Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA)	78
<b>Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM), 12200 Berlin</b>		
02 E 11537	Verbundprojekt: Anforderungen und Konzepte für Behälter zur Endlagerung von Wärme entwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein (KoBra), Teilprojekt A	142
1501509	Langzeitverhalten von Metall- und Elastomerdichtungen sowie Polyethylen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (LaMEP)	18
<b>DBE TECHNOLOGY GmbH, Eschenstraße 55, 31224 Peine</b>		
02 E 11193B	Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen	44
02 E 11294	Entwicklung technischer Konzepte zur Rückholung von Endlagerbehältern mit wärmeentwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen aus Endlagern in Salz- und Tongesteinsformationen (ERNESTA)	50
02 E 11385	Entwicklung von Monitoring-Konzepten in Anlehnung an Sicherheits- und Nachweiskonzepte sowie Ableitung von Entscheidungsgrößen und Reaktionsoptionen (MONTANARA)	76
02 E 11405A	Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschiechten in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt A	80
02 E 11486B	Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt B	128
02 E 11516	Entwicklung eines technischen Konzeptes für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle und ausgediente Brennelemente in Kristallingestein in Deutschland (KONEKD)	134
02 E 11526B	Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in Tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt B	138
02 E 11527	Verbundprojekt: Anforderungen und Konzepte für Behälter zur Endlagerung von Wärme entwickelnden radioaktiven Abfällen und ausgedienten Brennelementen in Steinsalz, Tonstein und Kristallingestein (KoBra), Teilprojekt A	140

02 E 11577A Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlager-  
systemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt A 156

02 E 11617A Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskon-  
zeptes für ein Endlager für Wärme entwickelnde radioaktive Abfälle  
im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt A 174

**Dr. Andreas Hampel, Grünberger Str. 56, 55129 Mainz**

02 E 11446A Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgs-  
mechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz  
(WEIMOS), Teilprojekt A 106

**Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Domstr. 11, 17489 Greifswald**

02 E 11344C Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrie-  
ren; Teilproject C 68

**Forschungszentrum Jülich GmbH, Wilhelm-Johnen-Straße, 52428 Jülich**

02 E 11607D Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungspro-  
dukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und  
Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt D 172

02 W 6263 Neu- und Weiterentwicklung von Safeguardstechniken und -methoden 182

**Freie Universität Berlin, Kaiserwerther Str. 16-18, 14195 Berlin**

02 E 11547C Verbundprojekt: Konzepte und Maßnahmen zum Umgang mit sozio-  
technischen Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Ab-  
fälle (SOTEC-radio), Teilprojekt C 148

**Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Schwertnergasse 1, 50667 Köln**

02 E 11072A Verbundprojekt WEIMAR: Weiterentwicklung des Smart-K<sub>d</sub>-  
Konzepts für Langzeitsicherheitsanalysen – Teilprojekt GRS 38

02 E 11102 Wissenschaftliche Grundlagen zum Nachweis der Langzeitsicherheit  
von Endlagern 40

02 E 11243 Langzeitsicherer Schachtverschluss im Salinar – Ergänzende laborati-  
ve und modelltheoretische Untersuchungen zum HM-gekoppelten Re-  
kompaktionsverhalten der EDZ(LASA-EDZ) 46

02 E 11284 Bentonitaufsättigung in geotechnischen Barrieren im Endlager-  
Nahfeld (BIGBEN) 48

02 E 11304 Tonforschung im Untertagelabor Mont-Terri 52

02 E 11314 Ermittlung der Stabilitätsbandbreiten redoxdeterminierender eisenhal-  
tiger Korrosionsphasen (KORPHA) 54

02 E 11324 Entwicklung eines chemisch-hydraulischen Modells für die Prognose  
des Langzeitverhaltens von Salzbeton in Salzformationen (LAVA-2) 56

02 E 11334A Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experi-  
menteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger  
salinärer Lösungen; Teilprojekt A 58

<b>02 E 11344A</b>	Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt A	64
<b>02 E 11365</b>	Lösungsverhalten von Spalt- und Aktivierungsprodukten im Nahfeld eines Endlagers (LÖVE)	74
<b>02 E 11405B</b>	Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt B	82
<b>02 E 11456B</b>	Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- e <sup>2</sup> ), Teilprojekt B	118
<b>02 E 11466</b>	Entwicklung von Rechenmodulen für die integrierte Modellierung von Transportprozessen im einschlusswirksamen Gebirgsbereich (RepoTREND+)	120
<b>02 E 11476A</b>	Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt A	122
<b>02 E 11486A</b>	Verbundprojekt: Bewertung der Abhängigkeiten zwischen dem sicheren Bau und Betrieb eines Endlagers für wärmeentwickelnde Abfälle und der Langzeitsicherheit (BASEL), Teilprojekt A	126
<b>02 E 11496A</b>	Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt A	130
<b>02 E 11567B</b>	Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH <sup>2</sup> M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim), Teilprojekt B	154
<b>02 E 11577B</b>	Verbundprojekt: Sicherheitsanalytische Untersuchungen zu Endlagersystemen im Kristallin (SUSE), Teilprojekt B	158
<b>02 E 11587B</b>	Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Vorprojekt (SANDWICH-VP), Teilprojekt B	162
<b>02 E 11607A</b>	Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt A	166
<b>02 E 11617B</b>	Verbundprojekt: Entwicklung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes für ein Endlager für wärme entwickelnde radioaktive Abfälle im Kristallingestein in Deutschland (CHRISTA II), Teilprojekt B	176
<b>02 E 11627</b>	Arteigene Versatz- und Verschlussmaterialien für die Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in Tonformationen (AVET)	178
<b>RS1552</b>	Langzeitverhalten zwischengelagerter Brennelemente bei deutlich längerer Zwischenlagerung	30
<b>RS1553A</b>	Verbundvorhaben: Methodik zur zuverlässigkeitsorientierten Nachrechnung und Bewertung bestehender Bauwerke mit verlängerter Nutzungsdauer – Teilprojekt: Methodik zur probabilistischen Bewertung („ProbBau“)	32

**Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., Bautzner Landstraße 400 (B6), 01328 Dresden**

- 02 E 11334B Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt B 📖 60
- 02 E 11344B Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren; Teilprojekt B 📖 66
- 02 E 11415B Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt B 📖 88
- 02 E 11607B Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt B 📖 168

**Hochschule Zittau/Görlitz, Theodor-Körner-Allee 16, 02763 Zittau**

- 1501518B Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Akustische Messverfahren 📖 24

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

- 02 E 11405C Verbundprojekt: Konzeptentwicklung für ein generisches Endlager für wärmeentwickelnde Abfälle in flach lagernden Salzschieben in Deutschland sowie Entwicklung und Überprüfung eines Sicherheits- und Nachweiskonzeptes (KOSINA), Teilprojekt C 📖 84
- 02 E 11446B Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt B 📖 108

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

- 02 E 11415A Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt A 📖 86

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

- 02 E 11476B Verbundprojekt: Grundwasserströmung und Stofftransport in komplexen realen Systemen (GRUSS), Teilprojekt B 📖 124

**Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe**

- 02 E 11355 Eine experimentelle Analyse der Verhandlungen um ein Endlager für radioaktive Abfälle (Expander) 📖 72
- 02 E 11587A Verbundprojekt: Vertikales hydraulisches Dichtsystem nach dem Sandwich-Prinzip - Vorprojekt (SANDWICH-VP), Teilprojekt A 📖 160

<b>Leibniz Universität Hannover, Welfengarten 1, 30167 Hannover</b>
---

- |             |   |       |
|-------------|---|-------|
| 02 E 11446C | Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt C  | 📖 110 |
| 1501560     | Modellierung und Untersuchung der Degradation von Hüllrohrmaterialien aus Zr-Legierungen durch Hydridbildungs- und Hydridverteilungsprozesse im Hinblick auf die Langzeitzwischenlagerung (KEK) | 📖 34  |

<b>Öko-Institut. Institut für angewandte Ökologie e. V., Merzhauser Str. 173, 79100 Freiburg</b>
--

- |             |  |       |
|-------------|--|-------|
| 02 E 11547A | Verbundprojekt: Konzepte und Maßnahmen zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle (SOTEC-radio), Teilprojekt A | 📖 144 |
|-------------|--|-------|

<b>Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Seminarstr. 2, 69117 Heidelberg</b>
---

- |             |  |       |
|-------------|--|-------|
| 02 E 11415H | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt H | 📖 100 |
|-------------|--|-------|

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

- |             |  |       |
|-------------|--|-------|
| 02 E 11334C | Verbundprojekt EDUKEM: Entwicklung und Durchführung experimenteller Methoden zur verbesserten Modellierbarkeit uranhaltiger salinärer Lösungen; Teilprojekt C                                | 📖 62  |
| 02 E 11415C | Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt C   | 📖 90  |
| 02 E 11547B | Verbundprojekt: Konzepte und Maßnahmen zum Umgang mit sozio-technischen Herausforderungen bei der Entsorgung radioaktiver Abfälle (SOTEC-radio), Teilprojekt B                               | 📖 146 |
| 02 E 11456A | Verbundprojekt: Integrität der Bentonitbarriere zur Rückhaltung von Radionukliden in kristallinen Wirtsgesteinen - Experimente und Modellierung (KOLLORADO- e <sup>2</sup> ), Teilprojekt A  | 📖 116 |
| 02 E 11496B | Verbundprojekt: Korrosions- und Sorptionsprozesse an Stahloberflächen bei hohen Temperaturen und Drücken im anaeroben salinaren Milieu (KORSO), Teilprojekt B                                | 📖 132 |
| 02 E 11607C | Verbundprojekt: Verhalten langlebiger Spalt- und Aktivierungsprodukte im Nahfeld von Endlagern unterschiedlicher Wirtsgesteine und Möglichkeiten ihrer Rückhaltung (VESPA II), Teilprojekt C | 📖 170 |

<b>Technische Universität Bergakademie Freiberg, Akademiestraße 6, 09599 Freiberg</b>
---

- |             |  |       |
|-------------|--|-------|
| 02 E 11193A | Schachtverschlüsse für Endlager für hochradioaktive Abfälle (ELSA – Phase II): Konzeptentwicklung für Schachtverschlüsse und Test von Funktionselementen von Schachtverschlüssen             | 📖 42  |
| 02 E 11435  | MgO-Spritzbeton: Verhalten bei Angriff von MgCl <sub>2</sub> -Lösung (MgO-SEAL)  | 📖 104 |
| 02 E 11526A | Verbundprojekt: Untersuchungen zu Chancen und Risiken der Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle und ausgedienter Brennelemente in Tiefen Bohrlöchern (CREATIEF), Teilprojekt A | 📖 136 |

02 E 11557 Gefügestabilisierter Salzgrusversatz - Phase 2 (GESAV II) 📖 150

**Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig, Pockelsstr. 14, 38106 Braunschweig**

02 E 11446D Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt D 📖 112

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

02 E 11425 Langzeitsicheres Abdichtungselement aus Salzschnittblöcken – Bautechnische Realisierung Technikumsprüfstand mit Durchführung und Auswertung erster Versuche (Salzschnittblöcke) 📖 102

02 E 11446E Verbundprojekt: Weiterentwicklung und Qualifizierung der gebirgsmechanischen Modellierung für die HAW-Endlagerung im Steinsalz (WEIMOS), Teilprojekt E 📖 114

02 E 11567A Verbundprojekt: Internationales Benchmarking zur Verifizierung und Validierung von TH<sup>2</sup>M-Simulatoren insbesondere im Hinblick auf fluiddynamische Prozesse in Endlagersystemen (BenVaSim), Teilprojekt A 📖 152

02 E 11597 Strömungstechnischer Funktionsnachweis für Verschlussbauwerke und flüssigkeitsgestützte Abdichtung des Kontaktbereiches - Phase II: Vertiefung Kenntnisstand Kontaktbereich & Injektionsmittel (STROEFUN-II) 📖 164

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

02 E 11415G Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt G 📖 98

1501510 Struktur-Eigenschafts-Funktionsbeziehungen von Elastomerdichtungswerkstoffen als sicherheitsrelevante Komponenten von Transport- und Lagerbehältern für radioaktive Stoffe (StrukElast) 📖 20

1501518A Verbundvorhaben: Grundlegende F&E-Arbeiten zu Methoden der Zustandsüberwachung von Transport und Lagerbehältern für abgebrannte Brennelemente und wärmeentwickelnde hochradioaktive Abfälle bei verlängerter Zwischenlagerung – Teilvorhaben: Analysen zu strahlungs-basierten und thermographischen Messverfahren 📖 22

**Technische Universität Kaiserslautern, Gottlieb-Daimler-Straße, 67663 Kaiserslautern**

1501538A Verbundvorhaben: Weiterentwicklung der Analysemethoden zur Simulation der Schädigung und der induzierten Erschütterungen in Stahlbetonstrukturen infolge stoßartiger Belastungen (SimSEB) - Teilvorhaben: Verhalten von Stahlbetonstrukturen bei Stoßbelastungen unter Berücksichtigung der Boden-Bauwerk-Wechselwirkung 📖 26

1501543B Verbundvorhaben: Methodik zur zuverlässigkeitsorientierten Nachrechnung und Bewertung bestehender kerntechnischer Bauwerke mit verlängerter Nutzungsdauer — Teilvorhaben: Besondere Berücksichtigung der werkstoffspezifischen Besonderheiten großer Stahlbetonquerschnitte sowie der zugehörigen Bestandsaufnahme 📖 28

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

- 02 E 11344D Verbundprojekt UMB: Umwandlungsmechanismen in Bentonitbarrieren, Teilprojekt D  70
- 02 E 11415E Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt E  94

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

- 02 E 11415D Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt D  92

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

- 02 E 11415F Verbundprojekt: Geochemische Radionuklidrückhaltung an Zementalterationsphasen (GRaZ), Teilprojekt F  96